



Agilent OpenLAB クロマト データシステム (CDS) EZChrom エディション

ユーザーガイド



注意

© Agilent Technologies, Inc. 2010

米国著作権法および国際著作 権法に定められているとおり、 Agilent Technologies,Inc.の事 前の合意および書面による許 諾なしに、このマニュアルの 全部または一部をいかなる形 態(電子データや検索用データ または他国語への翻訳など)あ るいはいかなる手段をもって も複製することはできません。

マニュアル番号

M8201-96011

版

第2版、2011年7月

Printed in USA

Agilent Technologies, Inc. 5301 Stevens Creek Boulevard Santa Clara, CA 95051

保証

このマニュアルに記載されて いる内容は、「現時点」の状 況を前提としており、以後の 改訂版では事前の通知なしに 変更されることがあります。 また、適用法が許容する最大 限の範囲において、Agilentは このマニュアルおよびこのマ ニュアルに記載されているす べての情報に関し、商品性や 特定用途への適合性について の黙示保障など、明示または 黙示を問わず、一切の保証は いたしません。Agilent は、こ のマニュアルまたはこのマニ ュアルに記載されている情報 の提供、使用または行使に関 連して生じた過失、あるいは 付随的損害または間接的損害 に対し、責任を負わないもの とします。このマニュアルに 記載されている要素に関して 保証条件付きの書面による合 意が Agilent とお客様との間に 別途にあり、その内容がここ に記載されている条件と矛盾 する場合、別途に合意された 保証条件が優先されるものと します。

安全上の注意

注意

注意は、取り扱い上、危険が あることを示します。正しく 実行または遵守しないと、こ の製品が破損したり、重要な データを損失したりするす能 性のある操作手順や操作法な どに意の部記でいったん作業を やめ、記載されている条件を 完全に理解し、すべてを満た すまでは、先に進まないでく ださい。

警告

警告は、取り扱い上、危険が あることを示します。正しく 実行または遵守しないと、怪 我または死亡につながる可能 性のある操作手順や操作など に注意を促すマークです。警 告の部分でいったん作業をや め、記載されている条件を完 くに理解してすべて満たすま では、先に進まないでくださ い。

目次

1-	はじめに	. 22
掑	操作の基礎	. 23
	ヘルプファイルへのアクセス	. 24
	システムの構成	. 24
	機器ウィンドウについて	. 26
	ナビゲーションペインボタンについて	. 28
	オンラインシグナルの表示	. 30
	表示オプションの変更	. 32
	機器ウィザード	. 34
	機器のウィンドウをロック、またはアンロックするには	. 36
	ファイルのオープンと保存	. 37
	メソッドファイルを開く	. 38
	シーケンスファイルを開く	. 39
	結果セットを開く	.40
	データファイルを開く	.41
	最近使ったファイルを開く	.44
	メソッドの保存	.44
	マスターメソッドの保存	.46
	シーケンスの保存	.46

結果セットの保存47
データファイルの保存47
テンプレートを開く49
クロマトグラムウィンドウについて49
データを並べて表示または重ねて表示51
クロマトグラムのスクロール51
トレースの追加
軸の設定
注釈57
クロマトグラムデザインの変更58
ズーム(拡大)62
重ねて表示したトレースの消去
クリップボードへコピー63
トレースの印刷64
トレースの保存64
トレースの削除64
X 軸および Y 軸の範囲の設定65
クロマトグラムの操作について66
トレースの移動67
オフセット表示
2 つのトレースのアライン 70

クロ	コマトグラムのストレッチ7	'1
FL	/ースのノーマライズ	'3
スノ	ムージング	'5
微分	計算	'6
2 🕤	つのトレースの追加	78
2 🗇	つのクロマトグラムの減算	'8
2 🕤	つのトレースの乗算	<i>'</i> 9
クロ	ュマトグラムまたはトレースの除算7	<i>'</i> 9
チュー	-トリアル	30
チニ	ュートリアルの概要	30
メン	/ッドの作成	31
サン	ィプルの実行	32
クロ	ュマトグラムを見ながらインテグレーションパラメータを設定する	33
++	ィリブレーションのメソッドを準備	36
メン	ノッドのキャリブレート	9 0
サン	ィプルシーケンスの作成	€1
シー	-ケンスの実行	€4
多点	気検量線の確認S	€4
積分	}パラメータの変更	96
機器に	こついて	98
機暑	Bの設定	98

	アナログ検出器のコンフィグレーション	100
	一般に使用する Y 軸ラベルおよび対応する乗数	101
	外部イベントのコンフィグレーション	101
	オプションの分析ソフトウェアを有効にする	102
	フラクションコレクタコンフィグレーション	103
メ	ソッドについて	104
	メソッドウィザードによるメソッドの作成	105
	機器の設定	106
	機器の設定を開く	107
	機器の設定をインポート	108
	検出器 1	109
	トリガー	110
	外部イベント	111
	ベースラインチェック	112
	補助トレース	116
	フラクションコレクタ	116
	新規プロジェクトの選択	117
	メソッドレポートの表示	117
	メソッドのプロパティ	118
	メソッドプロパティの説明	118
	メソッドのプロパティのオプション	119

メソッドのプロパティのキャリブレーション120
メソッドプロパティ監査証跡のログ121
メソッドプロパティ監査証跡123
データプロパティ125
データファイル構造について125
データファイル概説の表示127
データファイルの説明127
データファイルの電子署名を表示128
データファイルの監査証跡ログ128
データファイルの監査証跡129
詳細メソッドオプション130
詳細メソッドオプションについて130
メソッドの一部としてデータをエクスポートするには131
エクスポートデータは以下の規則に従ってファイルに保存されます。 133
Microsoft Excel にデータをエクスポートするには135
データエクスポートに使用されるファイル拡張子137
グラフィックのエクスポート141
カスタムパラメータ142
カラム/パフォーマンス パラメータ145
ユーザープログラムとベースラインファイルの選択148
詳細メソッドレポート149

	サンプルプレップ	150
	ラボモニターソフトウェアの起動	152
	システムスータビリティ	152
	システムスータビリティについて	152
	システムスータビリティの設定	154
	システムスータビリティの計算	157
	システムスータビリティテストの実行とレポートの印刷	158
イ	ンテグレーションについて	160
;	積分について	160
	インテグレーションテーブルについて	161
	インテグレーションイベントテーブル	162
	マニュアルインテグレーションテーブル	164
	ベースラインコードの説明	167
	グラフィカルプログラミング	169
	ピーク幅	173
	スレッショルド	174
	肩ピーク処理	175
	インテグレーションオフ	177
	谷渡り処理	179
	ベースライン水平処理	181
:	後方ベースライン水平処理	183

	最下点ベースライン水平処理	185
	タンジェントスキム	187
	フロントタンジェントスキム	189
	最小面積	191
	ネガティブピーク	193
	簡易グルーピング	195
	ピークの再割り当て	197
	マニュアルベースライン	199
	マニュアルピーク	202
	ピークの垂直分割	204
	強制ピーク開始点/終了点変更	206
	ベースライン移動	208
	ベースラインリセット	210
	谷渡りベースラインリセット	211
	タンジェントスキム	214
	フロントタンジェントスキム	216
	RT ウィンドウの調整	218
	サンプリング間隔	220
シ	/ーケンスについて	222
	シーケンスウィザードを用いたシーケンスの作成	223
	シーケンスウィザード - メソッド	224

シーケンスウィザード - 未知試料 225
シーケンスウィザード - オートサンプラ
シーケンスウィザード - キャリブレーション
シーケンスウィザード - レポート
再解析シーケンスの作成
シーケンスの編集
シーケンスプロパティ
シーケンスプロパティオプション237
シーケンスプロパティの監査証跡238
シーケンスプロパティ監査証跡のログ239
シーケンススプレッドシートについて240
シーケンススプレッドシートコンテキストメニュー
下ヘコピー
新しいシーケンスを挿入 245
シーケンススプレッドシート列のカスタマイズ
シーケンススプレッドシート列
試料分析タイプの設定 251
QC チェックの設定
濃度オーバーライド
シーケンスカスタムパラメータ
シーケンスランのアクションの設定259

データ取り込みとコントロールについて
シングルランによるデータ取込 264
シーケンスランによるデータ取込271
オーバーラップ前処理モードについて 276
ブラケット(挟み込み)キャリブレーション
シーケンスの再解析
ランキューについて
キューに測定を追加
結果に測定を追加
実行中の測定へのユーザーのアクセス 286
実行中の測定を中止
分析時間の延長
ランキューに項目を追加または削除288
データを取り込むための解析解除293
フラクションコレクタコンフィグレーション294
結果シーケンスについて 294
結果レビューモードの表示295
結果シーケンスに署名を追加296
署名の取り消し
結果セットプロパティ 298
シーケンスレポートについて

	シーケンスサマリーレポートの生成	301
	シーケンスレポートの表示	303
	シーケンスレポート印刷	304
	シーケンスレポートテンプレートの編集	305
	シーケンス目次レポートの編集及び印刷	306
+	キャリブレーションについて	308
	キャリブレーションの理論	309
	シングルレベルおよびマルチレベルキャリブレーション	311
	検量線作成のステップ	311
	キャリブレーションの実行	313
	シングルピーク設定	316
	ピーク定義	319
	ピークテーブルについて	323
	ピークテーブルのプロパティの変更	338
	保存されたデータファイルを用いたシングルレベルキャリブレーション	339
	ピーク ID の番号付け直し	342
	検量線のレビュー	343
	濃度計算	350
	キャリブレーションの平均計算	351
	繰り返し測定値を自動的に平均化	351
	シングルランまたはシーケンスの一部としてのキャリブレーション平均計算	354

	繰り返し測定と平均を使ったキャリブレーションについて	355
	グループとグループキャリブレーション	359
	グループとグループキャリブレーションについて	359
	グループの定義	361
	グループテーブルについて	364
	グループテーブルのプロパティの変更	. 371
	キャリブレートされていないグループ範囲	. 372
	グループキャリブレーション (キャリブレーションされている範囲)	374
	グループ範囲設定	379
	キャリブレーションされたピークの分類 (同定ピーク)	380
	同定ピークグループの設定	. 382
	グループ範囲の調整	. 383
	グループ物質量のレポート	. 384
	グループキャリブレーションの例	385
L	パートについて	. 390
	レポートテンプレートについて	. 390
	標準レポート	. 392
	標準レポートを開く	. 392
	メソッドレポートを開く	. 392
	レポートエディタの使用	. 393
	ベーシックレポートエディタ機能	. 395

印刷プレビューの使用
ショートカット
ヘッダーとフッターの作成401
線とボックスの追加
フィールドの追加
クロマトグラムの追加 404
レポートのインポート 405
レポートの隣にグラフを配置406
オブジェクトの追加
キャリブレーション曲線の追加 409
レポートの印刷
レポートテーブルの挿入 411
レポートテーブルの追加
レポートテーブルパラメータの変更414
レポートテーブルの外観を編集 415
設定した時間でレポートデータを表示 415
レポートテーブルの削除
レポートテーブルの種類 416
キャリブレーション情報の挿入 417
キャリブレーションレポートの挿入418
電子署名の挿入

フィルタメソッドレポートの挿入	420
汎用レポートの挿入	420
機器アクティビティログの挿入	421
機器コンフィグレーションレポートの挿入	421
メソッドの監査証跡レポートの挿入	422
メソッドレポートの挿入	423
実行レポートの挿入	423
分析レポート情報の修正	425
シーケンスキャリブレーションレポートの挿入	426
シーケンスチェック標準レポートの挿入	427
シーケンスデュプリケートレポートの挿入	428
シーケンス添加回収レポートの追加	431
シーケンステーブル (カスタマイズ)の挿入	433
シーケンステーブル(すべて)	434
システムスータビリティレポートの挿入	434
フラクションレポートの挿入	435
詳細レポート作成	436
詳細レポート作成について	436
詳細レポートテンプレートの作成	438
詳細レポートのセルスタイルの設定	438
詳細レポートヘッダー/フッターの定義	439

詳細レポートにチャートを追加 442
詳細レポートのセルにフィルカラーを追加
詳細レポートグリッドプロパティの変更 444
テーブルウィザードを用いたテーブルの追加
関数ウィザードを用いた関数の追加447
関数ウィザード - 関数の選択
関数ウィザード - ダイナミックデータ
関数ウィザード - データの方向451
関数ウィザード - タイプ 452
関数ウィザード - ID
詳細レポート監査証跡
詳細レポート監査証跡ログの表示455
レポートをテンプレートとして保存456
インテリジェントレポート457
インテリジェントレポートの作成457
インテリジェントレポートのオープン 457
インテリジェントレポートの保存458
標準レポートテンプレート459
標準レポートテンプレートを開く459
面積 % レポート
コンフィグコンテンツレポート

	ベースラインチェック4	61
	内部標準レポート4	62
	絶対検量線レポート4	62
	ノーマライズ レポート	63
	エラー状態フラグ4	64
参	照	66
	PENelson データファイルの変換4	66
	CDF ファイルのオープン4	67
	CIO/DIO イベントの設定4	68
	ユーザープログラム 4	68
	GPIB 機器の停止 4	70
	ASCII ファイルのフォーマット4	70
	ASCII シーケンスファイルのフォーマットについて	70
	ASCII シーケンスヘッダー4	71
	ASCII シーケンスレコード4	72
	ASCII アクションレコード	75
	ASCII シーケンスファイルの例4	77
	ASCII デュアルタワーシーケンスファイルの例	80
	機能リファレンス4	85
	Data.SystemWideParamByName4	86
	Data.AcquisitionDate	87

2.6 デジタル論理関数 559
2.7 財務関数 559
2.8 日付/時刻関数 561
2.9 その他の関数 562
2.10 組み込みツール
3.1 数学関数 563
4. スプレッドシート組み込み関数の使用 575
4.3 計算済みセルの参照
 スプレッドシートエラーメッセージ
カスタムパラメータ公式
6- シグマ ノイズテスト
6-シグマ S/N599
面積/アマウント レスポンスファクターの設定600
ASTM LOD (検出限界) 計算603
ASTM LOQ (定量限界)604
ASTM ノイズ計算 605
ASTM S/N 比605
ベースラインチェック計算方法607
検量線の計算 610
検量線
キャリブレーションされていないピークの濃度測定614

ヨーロッパ薬局方のシグナル/ノイズ	617
内部標準物質量	620
日本薬局方 (JP) 15 版の計算法	622
ピークの中心	630
ピーク谷比	630
カラム性能計算	630
相対リテンションタイム	635
Savitsky-Golay スムージング	637
スケール	638
シグナルの変換	639
USP (米国薬局方) のシグナル/ノイズ	641
重み付けとスケール	642
重み付け (LSQ 重み付け)	643

はじめに

EZChrom システムをデータ管理やさまざまな機器からのデータの取り込みにご利用く ださい。機器を適切に接続してコントロールパネルで構成した場合、データの取り込み と制御で、次のようなステップを実行する必要があります。

データシステムユーザー

- データ取得およびコントロールメソッドを作成して保存します。一つのメソッドには取得、機器コントロールパラメータ、キャリブレーション情報、インテグレーション タイムイベント、およびレポートオプションを含む数個のセクションが含まれています。メソッドにはエクスポート指示やカスタムパラメータ、または分析の後に起動するユーザープログラムなどの特別な項目が含まれていることもあります。
- キャリブレーション用標準試料と未知試料の詳細が含まれているシーケンスを 作成して保存します。
- メソッドキャリブレーション用のシーケンスを実行し、結果を生成します。

注記 コントロールパネルで割り当てられた特権/ロールにより、ユーザはこれらのタ スクを実行できないことがあります。

関連項目

操作の基礎

チュートリアル

機器について

メソッドについて

インテグレーションについて

シーケンスについて

<u>キャリブレーションについて</u>

レポートについて

<u>参照</u>

操作の基礎

この項では、操作の基礎について説明します。

関連項目

<u>ヘルプファイルへのアクセス</u>

<u>システムの構成</u>

機器ウィンドウについて

ファイルを開き、保存

クロマトグラムウィンドウについて

データ取り込みとコントロールについて

ヘルプファイルへのアクセス

ヘルプファイルにはオプションとメインの2種類があります。

オプションのソフトウェアのヘルプトピックは、各オプション用のヘルプファイルにあ ります。このヘルプファイルにアクセスする場合は、そのオプション用のダイアログま たはウィンドウを使用します。オプションのプログラムのヘルプファイルにアクセスし た場合、表示される目次およびキーワードは、そのプログラムのヘルプファイルのもの です。

他のすべてのトピックはメインのヘルプファイルにあります。メインのヘルプファイル トピックにアクセスするには、最初に任意のヘルプファイルを閉じてください。

ヘルプファイルにアクセスする方法:

ヘルプ > 目次を選択するか、またはツールバーからヘルプ **2** アイコンを選択します。

システムの構成

企業では、データシステムクライアントとサーバ、および機器構成をネットワーク上で連動させています。これは最も単純なものでは、Agilent機器コントローラを備えた
 2つの研究室をネットワークで結んだものです。あるいは複雑なものでは、それぞれ多様な機器を備えた複数のロケーションや、多くの建物そして何百もの研究室を有する大きな製薬会社のような場合もあります。このようにエンタープライズは、建物、研究室および機器が複雑に組み合わされて構成される場合もあります。



EZChrom Elite は、単独のスタンドアロンデータシステムとして、またはネットワ ークに接続された複数のスタンドアロンデータシステムとして、またはネットワークに 接続されたクライアント/サーバシステムとしてインストールできます。

Agilent 機器コントローラ (AICs) は、実データの取得と機器管理を生成する機種で す。すべての機器が物理的に AIC に据え付けられています。

クライアントワークステーション は、システムのユーザがシステムのメソッドとシー ケンスを開発してデータ取得ランとシーケンスを AIC に送信するなどのすべての操作 を実行する場所です。クライアントは直接ネットワーク接続か、または遠隔地からイン ターネット使用によって、サーバもしくは AIC にアクセスできます。

クライアント/サーバシステムはネットワーク上で構成されたサーバとクライアントから構成され、ドメインコントローラとして Windows コンピュータを使用します。

クライアントワークステーションから測定やシーケンスを開始する場合、機器が接続さ れた取り込みコントローラに、その測定またはシーケンスを実際に送信します。一旦、 測定またはシーケンスを送信すると、サーバまたは AIC が取り込みや制御機能の制御 を引き継ぎます。ランキューアイテムがサーバに送信されると、すべてのメソッドとシ ーケンスが取り込みコントローラにコピーされます。ネットワークがダウンした場合で も、取り込みコントローラはハードディスクに保存したファイルを用いて測定を続けま す。

関連項目

操作の基礎

機器ウィンドウについて

機器ウィンドウでは、機器を使って以下のようなことを実行できます。

- <u>メソッド</u>
- シーケンス
- <u>キャリブレーション</u>
- レポート
- 積分

ツールバーを右クリックするかグラフィカルイベントボタンをクリックしてどの ボタンを表示させるかを選択して、アプリケーションウィンドウの外観をカスタ マイズすることができます。<u>表示設定を変更</u>参照してください。



関連項目

<u>クロマトグラムウィンドウ</u>

<u>ナビゲーションボタン</u>

グラフィカルイベントボタン

オンラインシグナルの表示

表示オプションの変更

機器ウィザード

機器のウィンドウをロック、またはアンロックするには

ナビゲーションペインボタンについて

機器ウィンドウのナビゲーションペインボタンは、クリックするだけでメソッド、シー ケンス、レポート、コントロール、オプション表示へアクセスできます。ナビゲーショ ンウィンドウの下部にあるナビゲーションボタンはコマンドツリーをオープンして、機 器ウィンドウのメニューバーから利用可能なコマンドへのアクセス権を付与します。

ナビゲーションボタン	表示
メソッド	メソッド、サンプルプレップ、データ、およびタイル表示 (選択統合したタイルかまたはキャリブレーション/ピーク テーブル情報を使用して現在のデータを表示)
シーケンス	プロパティの編集
レポート	標準レポート、詳細レポート、インテリジェントレポー ト、面積%、コンフィグコンテンツレポート、カレントベ ースラインチェック、外部標準、内部標準、標準化、プロ パティ

28

コントロール 機器条件、ランキュー、機器ステータス

データ表示(<u>データ/マニュアルの統合修正</u>参照)、データ /マニュアルの統合修正、タイル表示/サンプルエントリの 表示

データ取込中にサンプルエントリービューを使用して、機器ウィンドウを設定して最も一般的な機能を表示します。
 このビューを選択すると、機器ウィンドウは機器の状態、
 現在のデータ、および実行キューを含むタイルビューを表示します。この一つのビューを有効にして、現在の測定を
 モニタしたり、機器パラメータを確認して修正したり、測定やシーケンスを追加したりします。

ナビゲーションペインを表示するには**表示 > ナビゲーションウィンドウ**を選択しま す。

ナビゲーションウィンドウを閉じるには、 ナビゲーションウィンドウの上部にある **×** ボタンを選択します。

ナビゲーションペインを常駐させるには、ナビゲーションペインの上部にあるピンボタ ンをクリックします。

ナビゲーションウィンドウを"隠す"するには、**ナビゲーション**タブからピンボタンを選 択します。 ナビゲーションペインに表示されるバーをカスタマイズするには、ナビゲーションウィ ンドウの右下隅にある小さな矢印を選択して、**その他のボタンを表示する**を選択します。 **その他のボタンを表示する**。ボタンを追加または削除。

関連項目

オンラインシグナルの表示

オンラインシグナルの表示

[オンラインシグナル]画面では、現在のオンラインシグナルをモニターすることができ ます。また、(機器がサポートしてる場合)機器のパラメータ曲線もモニターすることが できます。このビューではこのデータが得られていない場合、保存および任意の実行に 関連付けられません。

注:オンライン信号を表示するには、機器がコントロール>モニタ機能を使用して監視 してください。すべての機器がオンライン表示信号をサポートしている訳ではありませ ん。

オンラインシグナルを表示するには。

- 1. ナビゲーションペインで[表示]をクリックし、[データ表示]/【オンラインシグ ナル】をクリックします。
- [オンラインシグナル]画面で[変更]ボタンをクリックし、[シグナルブロットの編集]ダイアログボックスを開きます。このダイアログボックスでシグナルの選択と、X軸とY軸の範囲の定義をします。
- 3. 表示するシグナルを選択すると、この画面で以下の機能を実行できます。
- [バランス] ボタンをクリックし、検出器のバランスを設定できます。このボ タンは、検出器がこの機能をサポートしている場合にのみ有効です。

- 「校正】ボタンをクリックし、シグナルの吸光度レンジを調整できます。
- **水平矢印をクリックして X** 軸範囲を調整できます。
- **垂直矢印**をクリックし、Y 軸範囲を調整できます。

注:水平および垂直方向の矢印は信号が拡大されていない場合にのみアクティブになり ます。

個々のシグナルのY軸を示すために、シグナルを選択するか、あるいはヘッダーのシ グナルの説明を選択してください。Y軸の色はシグナルと同じ色です。

信号をトレースしてウインドウの下部に吸光度を表示するために、太い十字カーソルを 使ってください。

ウィンドウの拡大。

オンラインシグナルを拡大するには、マウスをクリックしたまま拡大範囲をドラッグし ます。ダブルクリックすると縮小します。拡大すると、水平矢印と垂直矢印は無効にな ります。X 軸範囲あるいはY 軸範囲を変更すると、あるいは**[校正]**を選択すると、自 動的に縮小します。

オンラインシグナルプロットの編集

このダイアログボックスは、**【オンラインシグナル】**画面に表示されているシグナルの 範囲を選択し修正するために使われます。 このダイアログボックスを開くには、【オン ラインシグナル】画面で**【変更】**をクリックします。この機器に表示できるシグナルは**【利 用可能シグナル】**リストに表示されます。

表示するシグナルを選択するには、[利用可能シグナル]リストのシグナルをハイライト し、**[追加]**ボタンをクリックします。 表示しているシグナルを削除するには、[選択したシグナル]リストのシグナルをハイラ イトし、[削除]ボタンをクリックします。

シグナルのオフセットと範囲を変更するには、シグナルを選択し、表示された範囲のパ ラメータに値を入力してください。その値は[オンラインシグナル]画面にシグナルを表 示するために使われます。

- [予想できる範囲]を選択し、Y 軸範囲の絶対値を入力します。
- 【シグナルプロット】ウインドウの[校正]ボタンが選ばれるときに使われるオフセットを提供するのに[浮動レンジ]を選んでください。現在の最大値は、オフセットで提供されるスクリーンの割合で示されます。また、オフセットで複数の信号を示すために、この機能を使用することができます。信号ごとに異なるオフセットを設定し、[校正]を選んでください。
- Y 軸範囲は、シグナルのY 軸の長さの絶対値で定義されます。それをサポート するシグナルのために、最新のデータポイントが常に見えるように、【自動Y 軸調整】を自動的にY 軸を調節するのに選ぶこともできます。
- セットポイント(パラメータ)シグナルのために、Y軸の開始点とオフセットを 直接提供することができます。オフセットと Y 軸調整は、可能でありません。

関連項目

ナビゲーションペインの表示

<u>ナビゲーションペインボタンについて</u>

表示オプションの変更

表示メニューを使って、機器ウィンドウの表示オプションを設定します。これらのオプ ションは、各ユーザーが機器ごとに設定できます。

機器ウィンドウの表示を変更する手順は以下のとおりです。

ツールバーオプション

- 1. ツールバーの表示 > 表示オプションを選択します。
- 2. 表示オプションダイアログボックスで、全般タブを選択します。以下のオ プションが表示されます。

リストに表示されたウィンドウの各エリアについ て、ツールバーおよびヒントを有効/無効にすること ができます。カーソル位置のツールバーボタンの説 明を画面上に表示したい場合は、ツールバーエリア をクリックし、**[ツールバーを表示する]**と**[ヒン ト]** チェックボックスを選択して有効にします。

ステータスバーを有効にするには、このチェックボ ックスを選択します。ステータスバーが有効の場 合、動作情報が機器アプリケーションウィンドウの 下部に表示されます。

クロマトグラフ情報を表示する際のリテンションタ 時間の単位 イムの単位を選択します。秒または分から選択でき ます。

グラフィカルプログラミングツールチップを表示 チ **ツールチップオプション** *ェックボックスと***トレースオペレーティングツール チップを表示** チェックボックスの一方または両方を 選択して、そのエリアの選択を有効にします。

ファイル > 最近使ったファイル下に表示される最 最近使ったファイル 近使用したファイルの最大数を設定します。

ノーマライズをデフォルトにする チェックボックス を選択して、1 つまたは複数のクロマトグラムをデ フォルトで最初のクロマトグラムに合わせてノーマ ライズします。これにより、選択されたピークの頂 点の高さが、最初のトレースで選択されたピークの 頂点の高さと一致するように調整が行われます。こ のオプションが選択されていない場合、デフォルト は [トレース 1] になります。

トレーススタック

機器ウィザード

このウィザードは、機器ウィンドウの基本機能を案内するためのものです。

機器ウィザードを表示するには。

機器ウィンドウから機器ウィザードを開くには2つの方法があります。

• **機器ウィザード**アイコンを選択します。



• **ヘルプ > 機器ウィザード**を選択します。

ディスク上のメソッドの変更

次のオプションは機器ウィンドウダイアログボックスに表示されています。

変担さいことのたた	このボタンは メソッドウィザード
	を起動します。メソッドウィザード
<u>利死アノットの1F成</u>	では、メソッドを作成することがで
	きます。

このボタンは **メソッドウィザード 現在のメソッドの変更** では、メソッドを修正することがで きます。

> このボタンは **メソッドウィザード** を起動します。メソッドウィザード では、メソッドを修正することがで きます。

このボタンは シーケンスウィザー ド を起動します。シーケンスウィ ジーケンスの作成 ザードでは、データ取り込みシーケ ンスやデータ再処理シーケンスを作 成することができます。

インテリジェントレポートゥイ このボタンは **レポートウィザード**

 ザード
 を起動します。レポートウィザード

 では、メソッドを作成することがで

 きます。

このボタンは、保存されたメソッド **シングルラン** 定するための[シングルラン]ダイア ログを開きます。

このボタンは、保存されたシーケン マを使ってデータ取込を開始するた めのシーケンスランダイアログを開 きます。

	このボックスをオンにすると、機器
機器起動時に表示	アプリケーションを起動するたびに
	機器ウィザードが表示されます。

機器のウィンドウをロック、またはアンロックするには

このコマンドは、複数ユーザーがいる研究所では便利で、一時的にコンピュータを離れ ている間、現在の作業状態に固定できます。このコマンドを選択する場合には、ウィン ドウ と ヘルプメニューを除くすべてのメニュー項目は"ロック"されます。ロックが解 除されるまで、ロックされたコマンドにアクセスすることはできません。
インテグレーションツールバーをロックするには、 ウィンドウ > ロックを選択します。

インテグレーションツールバーを解除するには、 ウィンドウ > ロックを選択しま す。 ログインダイアログボックスで、コントロールパネルで設定されたユーザー名 と パスワード を入力してください。

ファイルのオープンと保存

ファイルのオープンと保存は操作の基礎の一部です。

ファイルを開くにはファイル >開く を選択して メソッド、シーケンス、結果セット、 または データを選択します。

ファイルを保存するにはファイル > 保存 または 名前を付けて保存> メソッド、シー ケンス、または 32 ビットのデータを選択します。 メソッドは個別に保存するかまた はマスターメソッドとして保存することができます。

テンプレートを使用して新しいファイルを作成するには ファイル > 新規作成を選択します。

テンプレートとしてファイルを保存するには ファイル > 名前を付けて保存> メソッ ド,シーケンス、またはデータ 32 ビットを選択してディレクトリ内のテンプレート フォルダに移動します。

関連項目

メソッドファイルを開く

シーケンスファイルを開く

結果セットを開く

<u>データファイルを開く</u>

<u>最近使ったファイルを開く</u>

<u>テンプレートを開く</u>

<u>メソッドの保存</u>

<u>マスターメソッドの保存</u>

<u>シーケンスの保存</u>

結果セットの保存

データファイルの保存

メソッドファイルを開く

メソッドのファイルを開くとき、ファイルを開くことができるダイアログボックスが表示され、検索のパラメータを指定します。

ダイアログの外観はアドバンストファイルセキュリティを実行している場合は異なりま す。その場合、現在のプロジェクトのフォルダとエンタープライズの共通フォルダに保 存できるファイル数は制限されます。

メソッドファイルを開くには。

1. ファイル > 開く > メソッドを選択します。

- メソッドファイルを開く ダイアログボックスを開くとプロジェクトファイル 内のメソッドフォルダに表示され、ファイルの種類は .met に設定されます。 ファイルが見つからない場合、検索条件とファイル名フィールドを使用して、 ファイルを探します。
- 3. ファイルを検索するには説明文中のテキスト,分析者と作成日または変更日フ ィールドを完成して検索開始を選択してください。

注:検索機能を使用する場合には、Windows 登録されている拡張子は表示しない機能がオフになっていることを確認してください。この機能をオフにするにはマイコンピュータ> ツール > フォルダオプション > 表示を選択してください。 登録されている拡張子は表示しないを解除してください。

4. データを開こうとするメソッドを選択して開くを選択してください。

シーケンスファイルを開く

シーケンスファイルを開くとファイルを開けるダイアログボックスが表示されますので、 そこで検索のパラメータを指定します。

ダイアログの外観はアドバンストファイルセキュリティを実行している場合は異なりま す。その場合、現在のプロジェクトのフォルダとエンタープライズの共通フォルダに保 存できるファイル数は制限されます。

シーケンスファイルを開くには。

- 1. ファイル > 開く > シーケンスを選択します。
- 2. シーケンスファイルのオープン ダイアログボックスを開くとプロジェクトフ ァイル内の結果のフォルダに表示され、ファイルの種類は.seq に設定され

ます。ファイルが見つからない場合、検索条件とファイル名フィールドを使用 し、ファイルを探します。

3. ファイルを検索するには説明文中のテキスト,分析者と作成日または変更日フ ィールドを完成して検索開始を選択してください。

注:検索機能を使用する場合には、Windows 登録されている拡張子は表示しない機能がオフになっていることを確認してください。この機能をオフにするにはマイコンピュータ> ツール > フォルダオプション > 表示を選択してください。 登録されている拡張子は表示しないを解除してください。

4. データを開こうとするシーケンスを選択して開くを選択してください。

関連項目

シーケンスの編集

シーケンスの保存

結果セットを開く

シーケンスを実行した後 結果シーケンスダイアログボックスで結果を表示することが できます。

結果セットのファイルを開くには。

- 1. ファイル > 開く > 結果セットを選択します。
- 2. 結果ファイルを開く ダイアログボックスを開くとプロジェクトファイル内の 結果のフォルダに表示され、ファイルの種類は.rst に設定されます。ファイ

ルが見つからない場合、検索条件とファイル名フィールドを使用し、ファイルを探します。

- 3. データを開こうとするメソッドを選択して開くを選択してください。
- データファイルのクロマトグラムと結果シーケンスダイアログボックスが開き ます。結果シーケンスダイアログボックスの黄色でハイライトした部分は、結 果の評価モードであることを示しています。
 - 結果シーケンス ダイアログボックス内の列は シーケンススプレッドシートの列幅の下に記載されています。
 - 結果シーケンスダイアログボックス内で右クリックし、コンテキストメニューを開きます。これらのオプションはシーケンススプレッドシートコンテキストメニュー下に記載されています。

関連項目

シーケンススプレッドシートについて

<u>シーケンススプレッドシート列</u>

シーケンススプレッドシート列のカスタマイズ

シーケンススプレッドシートコンテキストメニュー.

データファイルを開く

データファイルを開くダイアログボックスでは、ファイルを開くだけでなくファイル内 容を閲覧したりファイルを検索したりすることが可能です。

ダイアログの外観はアドバンストファイルセキュリティを実行している場合は異なりま す。その場合、現在のプロジェクトのフォルダとエンタープライズの共通フォルダに保 存できるファイル数は制限されます。

データファイルを開くには。

- 1. ファイル > 開く > データを選択します。
- データファイルを開く ダイアログボックスは.dat にプロジェクトファイル、 ファイルの種類 内の結果フォルダに表示されます。ファイルが見つからない 場合は、検索条件とファイル名フィールドを使用し、ファイルを探します。
- 3. プレビューボタンを選択してクロマトグラムのプレビューを表示します。
- ファイルを検索するには、サンプル ID, 分析者と作成日または更新日フィー ルドを完成して検索開始を選択してください。

注:検索機能を使用する場合には、Windows 登録されている拡張子は表示しない機能がオフになっていることを確認してください。 この機能をオフにするにはマイコンピュータ> ツール > フォルダオプション > 表示を選択してください。登録されている拡張子は表示しないを解除してください。

5. オプションボックスを使うと、データファイルを開くときに追加情報を設定で き、時間を節約することができます。メソッドまたは結果を選択できます。

メソッドを選択したい場合には、次のオプションから選択してください:

- 現在 現在を選択すると、データファイルを開いた時に現在のメソ ッドは変更されません。ほかの項目を選択すると、データファイルを 開いたとき、選択したメソッドに置き換えられます。
- 結果から データファイルの最新の結果を作成するために使用され
 たメソッドに置き換えます。
- オリジナル/分析 データファイルを取り込むために使用されたメソッドに置き換えられます。このメソッドは、現在使用中のメソッドに 代わります。

結果を選択したい場合には、データファイルが選択した結果と一緒に開かれます。解析結果とともにデータファイルを開くと、クロマトグラムが画面に表示されたときに、インテグレーションの状態とベースラインも自動的に表示されます。

- 最新 が選択される場合には、データファイルがクロマトグラムを解 析した前回の結果で開かれます。
- 全ての解析結果を保存するオプションが有効な場合、コントロール パネルの全分析結果のリストをファイルとともに開くことができます。
- 該当する場合、【サンブルブレッブ付きで開く】を選択します。このボックス を選択すると、データファイルを開いたとき、データ取込時に使用したサンプ ルブレップファイルも一緒に開かれます。サンプルプレップを参照してください。
- 5. データを開こうとするファイルを選択して開くを選択してください。

Open Data	File						? 🛛
Look in: 📔	Sample VB 001.rslt			•	🗢 🗈 💣	· I	Det-1:1 💌
🖬 SV Data 0	01						Open
SV Data U	02		٨	5000	١		Cancel
					0.5 Min	1.0	Help
File name:	SV Data 003				T		
Files of type:	SSI (*.dat)				-		
Find files that	match these criteria:						
Sample ID:	•	Created a	any time	•	Find Now		
Analyst:	•	Modified:	any time	-	New Search		
Options							
Method:	Current	-					
Results:	Most Recent						
Search results							/

最近使ったファイルを開く

最近開いたファイルを開くには ファイル > 最近使用したファイル を選択してリスト からファイルを選択します。

記載された最近使用したファイルの数を変更するには、<u>表示オプションの変更</u>を参照してください。

メソッドの保存

データ取込用メソッドの作成を終了したら、データ取込を行う前にファイルをハードデ ィスクに保存してください。 ダイアログの外観はアドバンストファイルセキュリティを実行している場合は異なりま す。その場合、現在のプロジェクトのフォルダとエンタープライズの共通フォルダに保 存できるファイル数は制限されます。

重要

名前を付けて保存> メソッド コマンドは選択されたメソッドにのみ影響を与えます。 シーケンスを再実行している場合、メソッドに影響はありません。マスターメソッドを 更新するにはマスタメソッドの更新を参照してください。

現在のファイル名と同じ名前のメソッドを保存するには。

ファイル > 保存> メソッドを選択します。

新しいファイル名と同じ名前のメソッドを保存するには。

- 1. ファイル > 名前を付けて保存> メソッドを選択します。
- メソッドに名前を付けて保存 ダイアログボックスを開くとプロジェクトファ イル内のメソッドフォルダが表示され、ファイルの種類は.met に設定され ます。テンプレートとして保存するには、保存ドロップダウンメニューにテ ンプレートフォルダを選択します。
- 3. ファイル名フィールドに、ファイル名を入力するか、またはドロップダウンリ ストからそれを選択します。
- 4. 説明フィールドに必要に応じてメソッドの説明を確認または変更してください。
- 5. 保存 を選択します。

マスターメソッドの保存

シーケンスを再実行している場合にメソッドに変更を加えるには。

ツールバーのマスターからメソッドに変更内容を保存するには、 ファイル > マスター の更新 > メソッドを選択します。

名前を付けて保存> メソッド コマンドは選択されたメソッドにのみ影響を与えます。 シーケンスを再実行している場合、メソッドに影響はありません。通常のメソッドとし て保存するにはメソッドを保存を参照してください。

シーケンスの保存

シーケンスを作成あるいは編集したらデータ取込や解析に使用する前に、ディスクに保 存する必要があります。

ダイアログボックスの外観は、アドバンストファイルセキュリティを実行している場合 は異なります。その場合、現在のプロジェクトのフォルダとエンタープライズの共通フ オルダに保存できるファイル数は制限されます。

現在のファイル名と同じ名前のシーケンスを保存するには。

1. ファイル > 保存>シーケンスを選択します。

新しいファイル名と同じ名前のシーケンスを保存するには。

- 1. ファイル > 名前を付けて保存 > シーケンスを選択します。
- シーケンスに名前を付けて保存 ダイアログボックスを開くとプロジェクトフ アイル内のデータのフォルダが表示され、ファイルの種類は.met に設定さ れます。テンプレートとして保存するには、保存ドロップダウンメニューにテ ンプレートフォルダを選択します。
- **3. ファイル名**フィールドに、ファイル名を入力するか、またはドロップダウンリ ストからそれを選択します。
- 4. 説明フィールドに必要に応じてメソッドの説明を確認または変更してください。
- 5. 保存 を選択します。

関連項目

<u>シーケンスファイルを開く</u>

<u>シーケンスの編集</u>

結果セットの保存

結果セットを保存するには、ファイル > 保存 >結果セットを選択してください。

関連項目

結果シーケンスについて

データファイルの保存

EZChrom では、AIA や CDF、PE などの多種多様なサードパーティー製フォーマット で開くことができます。これらのファイルを開く際、名前を付けて **32** ビットオプショ ンで保存を使用できます。これでユーザーは下記<u>データファイル構造について</u>一覧のネ イティブの EZChrom フォーマットと構造でファイルを保存できます。

このコマンドはデータファイルと現在のメソッドを 1 つのファイルとして保存します。 このコマンドは、データファイルが 32 ビット Elite データフォーマットではない時に のみ有効です。GLP(Good Laboratory Practices)に遵守するため、既存のデータファ イルが Public ディレクトリにある場合を除き、[名前を付けて 32 ビットで保存]コマ ンドを実行することはできません。Public ディレクトリとは、パスに[public]という言 葉が含まれるディレクトリのことです。その他のすべてのデータファイルは、上書きで きないように保護されています。

ダイアログの外観はアドバンストファイルセキュリティを実行している場合は異なりま す。その場合、現在のプロジェクトのフォルダとエンタープライズの共通フォルダに保 存できるファイル数は制限されます。

データファイルを保存するには。

- 1. ツールバーで ファイル > 名前を付けて保存 > 32 ビットのデータを選択し てください。
- データに名前を付けて保存 ダイアログボックスを開くとプロジェクトファイ ル内のデータのフォルダが表示され、ファイルの種類は.met に設定されま す。別のフォルダにデータを保存したい場合は、保存先ドロップダウンメニュ ーから選択できます。
- **3. ファイル名**フィールドに、ファイル名を入力するか、またはドロップダウンリ ストからそれを選択します。

- 4. 必要に応じて、説明フィールドにデータの説明を確認または変更してください。
- 5. データの圧縮ボックスを選択すると圧縮形式でファイルを保存できます。一度圧縮形式で保存すると、ファイルを開くたびに自動的に"解凍"されます。しかし、ファイルは圧縮形式で保存されたら、名前を付けて保存コマンドを実行してもう一度解凍形式で保存します。
- 6. 保存 を選択します。

テンプレートを開く

メソッド、シーケンス、サンプル処理またはテンプレートを使用するレポートを 開いて作成するには。

- 1. ファイル > 新規を選択します。
- 新規ファイルテンプレート ダイアログボックスから、新しいメソッド、シー ケンス、サンプルプレップ、またはレポートのベースにしたいテンプレートを 選択してください。
- 3. **OK** をクリックします。

クロマトグラムウィンドウについて

データがある場合はクロマトグラムウィンドウに表示されます。

クロマトグラムウィンドウの特殊コマンドを選択するには、クロマトグラムウィンドウ の中でマウスの右ボタンをクリックします。これらのコマンドを使って、グラフやクロ マトグラムをウィンドウに追加したり、表示、注釈および軸の設定を変更したり、 ク ロマトグラムの数学的な処理を行ったり、ウィンドウ内にあるトレースのプロパティを 表示または変更したりすることができます。

関連項目

データを並べて表示または重ねて表示

クロマトグラムのスクロール

トレースの追加

軸の設定

ピーク情報

クロマトグラムデザインの変更

ズーム(拡大)

オーバーレイの消去

<u>操作</u>

クリップボードヘコピー

<u>トレースの印刷</u>

トレースの保存

トレースの削除

グラフィカルプログラミング

X 軸および Y 軸の範囲の設定

積分について

データを並べて表示または重ねて表示

複数のチャンネルメソッドのデータを表示する場合、[表示]/[データを並べて表示]コ マンドを選択すると、各チャンネルを別々のウィンドウに表示することができます。あ るいは、[表示]/[データを重ねて表示]コマンドを選択すると1つのウィンドウに全チ ャンネルを重ねて表示することもできます。すべてのチャンネルを1つのウィンドウ に重ね表示しても、クロマトグラムの拡大、各チャンネルの表示形式を変更することが できます。

タイルモードでは、ウィンドウ>重ねて表示、ウィンドウ>上下に並べて表示、またはウィンドウ>左右に並べて表示コマンドの使用でウィンドウが画面上に並べて表示されますどのように手配することができます

クロマトグラムのスクロール

拡大したクロマトグラムをそのまま左右にスクロールすることができます。CTRL SHIFT キーを押したままマウスをクリックすると、カーソルが[手]の形に変わるので、 そのまま左または右方向にドラッグします。

範囲外の内容を表示するために、X 軸またはY 軸をスクロールさせることもできます。 この場合は、Ctrl+Shift キーを押したまま、カーソルをグラフの領域外で目的とする 軸の近くに持っていきます。マウスをクリックするとカーソルが、Y 軸付近では上下方 向の矢印に変わり、X 軸付近では右左方向の矢印に変わります。このモードでマウスを 動かすと、グラフが上下方向または右左方向へスクロールできます。 元の表示に戻すには、クロマトグラムウィンドウでマウスの右ボタンをクリックし、次 に**[元の倍率に戻す]**コマンドをクリックします。

トレースの追加

1つのクロマトグラムウィンドウに複数のクロマトグラムを表示することができます。 この機能は、例えば、過去のデータと現在のデータを比較したり、オーブンやポンプの プロファイルを重ねて表示したりする場合に便利です。

新しいトレースを追加するには。

- クロマトグラムウィンドウを選択して トレースの追加を選択します。以下の 中から選択してください。
 - 現在のデータから 現在のクロマトグラフィデータからトレースを選択 することができます。
 - その他のデータファイルから 保存されているデータファイルを選択し、
 その中からトレースを選択することができます。このオプションが選択されていない場合、データファイルを開くダイアログボックスでデータファイルを選択します。
 - 現在のメソッドから 現在のメソッドからトレースを選択できます。(利用できる場合)例えば、HP5890機器メソッドからオーブン温度プログラムを読み込むことができます。
- データグラフのプロパティ ダイアログボックスで、トレース設定 タブを選択 します。スプレッドシートの各行には、クロマトグラムウィンドウに現在表示 されているトレースがそれぞれ示されます。ハイライトされたトレースの詳細 が、ダイアログボックス下部のトレースプロパティボックスに表示されるので、 確認したり変更したりできます。以下のフィールドを入力してください。

クロマトグラムウィンドウにトレースを表示する場合に、このボ ックスをクリックします。画面からトレースを消去する(ただ し、ウィンドウは開いたままにしておく)には、このボックスの 選択を解除します。これは、表示ウィンドウからトレースを一時 的に削除する場合に便利な方法です。

表示

凡例

トレースの凡例を表示する場合に、このボックスをクリックしま す。ウィンドウの右上部に凡例が表示され、トレース名を表示し ます。クロマトグラムウィンドウにトレースの凡例を表示させな い場合は、このボックスの選択を解除します。凡例の表示形式 (色など)の設定は、グラフ項目の <u>デザインタブ</u>で行います。 注:<u>[軸の設定]</u>ダイアログで凡例表示をオンにしていない場合、 このボックスの設定は無効です。

トレースを取り出したいデータが入っているファイルの名前を入
 データソース
 力します。このフィールド横の[ファイル ボタンをクリックし
 て、上記リストからデータソースを選択します。

トレース 表示するトレースを選択します。ボタンをクリックすると、選択 可能なトレースが表示されます。 スケールオプションを以下の中から選択します。

- トレースX ウィンドウ内の他のトレースにスケールを合わせます。
- **スケール** ユーザー定義 Y 軸の最大値と最小値を入力することができます。
 - ノーマライズトレースをノーマライズしてグラフに適合させます。
- → ユーザー定義スケールを選択した場合、Y軸の最小値を入力します。
- **Y 最大** ユーザー定義スケール を選択した場合、**Y** 軸の最大値を入力しま す。
- 単位 表示単位を入力します。
- **X オフセット** X 軸のオフセット値を入力します。
- **× 比**ル 必要に応じて、トレース全体に適用する乗数を入力します。
- **Y オフセット** Y 軸のオフセット値を入力します。
- Y比 必要に応じて、トレース全体に適用する乗数を入力します。

- **注釈** このボタンをクリックすると、[トレースの注釈プロパティ]ダイ アログが表示されます。
- **詳細の非表示** このボタンをクリックすると、現在のトレースの詳細が非表示と なり、スプレッドシートのみ表示されます。
- **スケールリセ** このボタンをクリックすると、スケール値が元の値にリセットさ **ット** れます。
 - 3. **OK** をクリックします。

2つのクロマトグラム上で数学操作を実行するには、<u>クロマトグラムの操作について</u>を 参照してください。

軸の設定

軸の設定タブを使って、クロマトグラムの軸の表示形式を設定することができます。この設定は、アクティブトレースに適用されます。

軸の表示形式を設定するには。

- クロマトグラムウィンドウで、右クリックし、軸の設定,またはプロパティ> 軸の設定を選択してください。
- 2. 選択可能なフィールドは以下の通りです。
 - グラフタイトル グラフにタイトルを付けたいときはここに入力します。
 このタイトルはグラフの上部に表示されます。
 - 軸 ドロップダウンリストを使用して目的の軸を選択します: 左Y軸、 右Y軸、またはX軸。次に、軸の範囲を選択します。

Y軸を選択した場合は、[トレースする範囲]を選択してウィンドウのトレ ースの1つから範囲を取り込むことができます。 あるいは、[トレースす る範囲をマニュアル設定]ボックスを選択し、任意のY軸範囲を設定する こともできます。[なし]を選択すると、Y軸値は表示されません。

X軸については、【オートスクール】も選択できます。 この場合、X軸は 最も長いトレースに設定されます。あるいは、【範囲指定】ボタンをクリ ックし、次に、そのトレースのX軸に対する最小および最大値を入力し て、X軸の範囲を設定することもできます。現在のトレースからX軸範 囲を取得するには、、【現在の軸範囲】ボタンをクリックします。

• 余白 - グラフの上部および下部のトレースマージンの値を%で入力します。

- 一般オプション グラフの注釈の表示をオン/オフするには、そのチェッ クボックスを選択します。凡例表示ボックスを選択すると、トレースの凡 例の表示を[トレースオプション]のスプレッドシートからオン/オフする ことができます。
- 向き 該当するボタンをクリックしてグラフの向き(縦向きまたは横向き)
 を選択します。

注釈

クロマトグラムのピーク情報を変更するには:

- 1. クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし。注釈を選択します。
- 2. トレースを選択します。
- ドロップダウンボックスで ピーク、グループ、フラクション、または SEC を選択します。 SEC のオプションがインストールされている場合、SEC を選 択してクロマトグラム上の特定の SEC の機能に注釈を付けます。
- 選択可能な注釈でピーク情報として表示したい項目をクリックします。ハイラ イトされた項目は、緑色の矢印キー(右向き)をクリックして表示するピーク 情報に加えることができます。これは、表示したい項目をダブルクリックする ことでも実行できます。
- 注釈によっては、小数点以下の表示桁数を指定することもできます。ハイライトされた項目の値について少数点桁数ボックスに入力します。
- チェックボックスをクリックしてベースライン、USP 幅、またはリテンションタイムウィンドウ、未同定ピーク名、グループ範囲、および FRC 実行をト

レースに表示させます。 **SEC** オプションがインストールされている場合は、 その他の **SEC** 注釈機能にアクセスできます。**FRC** 実測値を利用できるように するには、フラクションコレクタがインストールされている必要があります。

注:注釈での[リファレンスピークの許容幅]は、ピークテーブルで設定された許容幅を 表示します。このウィンドウは、相対リテンションタイムに対して調整されません。

 ピーク情報の変更内容を全チャンネルに適用する場合は、すべてに適用ボタン をクリックします。オープンクロマトグラムに変更を適用したい場合には、
 OKを選択してください。ピーク情報はメソッドの一部としては保存されず、
 機器アプリケーションの機能とみなされます。メソッドを閉じ、再度開くと、
 現在の設定が適用されます。

クロマトグラムデザインの変更

デザインタブのプロパティボックスからトレース(線の種類、色など)の外観を変更す ることができます。デザインタブダイアログを表示するには、このタブをクリックしま す。

クロマトグラムまたはトレースのデザインを変更するには。

- クロマトグラムウィンドウで右クリックし、プロパティコマンドを選択します。
- 2. プロパティ タブをクリックします。選択可能なフィールドは以下の通りです。
 - デザイン 以前にトレースの表示形式をディスクに保存したことがある
 場合、このボックスからそれを選択することができます。保存 ボタンを

使うと、ディスクにある既存のデザインに名前を付けて保存することがで きます。 **削除**ボタンは、デザインを削除し、はじめからやり直す場合に 使用します。

- アイテム このドロップダウンリストでは、クロマトグラムウィンドウのどの部分のデザインを変更したいかを選択します。グラフそのもの(背景および凡例を含む)と使用可能なトレースが選択できます。
- サブアイテム 修正したいサブアイテムを選択します。選択できるサブ アイテムは、選択したアイテムによって異なります。例えば、[アイテム] フィールドで[グラフ]を選択すると、グラフの背景、軸およびラベルを含 むサブアイテムのデザインを設定できます。また、クロマトグラムデータ チャンネルを選択すると、ベースライン、ピークの開始点/終了点やピー ク情報などのサブアイテムのデザインを設定できます。テキストを選択す ると、フォントに関するコマンドにもアクセスできます。

サブアイテムを選択すると、そのアイテムに関連するフィールドにアクセス できます。例えば、サブアイテムとして ベースライン を選択した場合、色 や線の種類が選択できます。サブアイテムとして **注釈**を選択した場合は、 フォントや色が選択できます。

新しいトレースを追加せずに任意のトレースのデザインを変更するには、ク ロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、次に**デザイン**コマンドを 選択します。このコマンドを選択すると、[デザイン]タブをクリックした場 合と同じダイアログが表示されます。

デザインタブで使用できるサブアイテムは以下の通りです。

項目	サブアイテム	
グラフ	背景	グラフの背景色を選択します。デフォルトは黒 です。
グラフ	タイトル	グラフのタイトルの色とフォントを選択しま す。グラフのタイトルをウィンドウに表示する ためには、軸の設定タブでグラフタイトルを定 義する必要があります。
グラフ	左Y軸	グラフの左 Y 軸の色を選択します。
グラフ	左Y軸大目盛	左 Y 軸の大きい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	左Y軸小目盛	左Y軸の小さい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	左 Y 軸オン / オ フ	左 Y 軸をオン/オフします。
グラフ	右Y軸	右Y軸の表示色を選択します。
グラフ	右Y軸大目盛	右Y軸の大きい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	右Y軸小目盛	右 Y 軸の小さい目盛りの表示色を選択します。

グラフ	右 Y 軸オン/オ フ	右Y軸をオン/オフします。
グラフ	X 軸	X 軸の表示色を選択します。
グラフ	X軸大目盛	X 軸の大きい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	X軸小目盛	X 軸の小さい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	X 軸オン/オフ	X 軸をオン/オフします。
グラフ	凡例	グラフの凡例の表示色やフォントを選択しま す。凡例は、ウィンドウに現在表示されている トレースの種類を示します。凡例の表示は[軸 の設定]タブでオン/オフします。
グラフ	グリッド	グリッド線の表示色を選択します。この線の表 示は軸の設定タブからオン / オフします。
データ	トレース	選択したトレースの表示色や線の種類を選択し ます。
データ	注釈	トレースの注釈の表示色やフォントを選択しま す。トレースの注釈は注釈タブで選択します。

61

データ	ベースライン	ベースラインの表示色や線の種類を選択しま す。
データ	ピーク開始点	ピークの開始点の表示色や線の種類を選択しま す。
データ	ピーク終了点	ピークの終了点の表示色や線の種類を選択しま す。
データ	USP ピーク幅	USP ピーク幅を計算する場合、その表示色や線 の種類を選択します。
データ	RT 許容幅	指定されたピークの予想リテンションタイムウ ィンドウの、表示色や線の種類を選択します。
データ	RT 許容幅(未同 定)	同定されなかったピークの予想リテンションタ イムウィンドウの表示色を選択します。

ズーム(拡大)

クロマトグラムの詳細を確認したり、クロマトグラムの一部を拡大することができます。 この操作を行うには拡大したい部分をマウスの右ボタンを押したままドラッグして囲み ます。マウスボタンを離します。前のレベルのズームに戻すには、クロマトグラム上で ダブルクリックします。何度もズームを行った後でクロマトグラム全体を表示したい場 合には、クロマトグラムウィンドウ上でマウスの右ボタンをクリックし、**[元の倍率**に **戻す]** コマンドをクリックします。Ctrl + Z またはクロマトグラムウィンドウで Shift キーを押しながらダブルクリックしてクロマトグラムのフル unzoom を実行すること ができます。拡大したクロマトグラムをスクロールできます。<u>クロマトグラムをスクロ</u> ールを参照してください。

クロマトグラムの上部には【時間】と【信号強度】が表示されます。これらの値はカー ソルを移動すると変わり、カーソル位置のトレースの時間とレスポンスを示します。複 数のトレースがある場合は、クロマトグラムのトレースをマウスでクリックすることに より、別のトレースに表示を変更することができます。各トレースが別の色で表示され ている場合、【時間】と【レスポンス】の色は表示されたトレースの色に対応します。

重ねて表示したトレースの消去

重ね表示したトレースをすべてクリアすることができます。右クリックし、ポップアッ プメニューから **オーバーレイの消去**コマンドを選択すると、重ね表示したすべてトレ ースが現在のクロマトグラムウィンドウからクリアされます。

クリップボードヘコピー

クリップボードヘコピーコマンドは、現在のクロマトグラムウィンドウをメタファイル としてクリップボードヘコピーします。コピーしたメタファイルは、Microsoft Word や、クリップボードをサポートしているその他のアプリケーションに貼り付けできます。 Microsoft Word に貼り付けるときは、[編集]/[形式を選択して貼り付け]/[図]コマン ドを使用してください。

現在のクロマトグラムウィンドウをメタファイルとしてクリップボードへコピー します。

クロマトグラムウィンドウから、マウスの右クリックを行うと、【ユーティリティ>ク リップボードにコピー】を選択します。

トレースの印刷

このコマンドは現在のクロマトグラムウィンドウの表示をプリンタへ送信します。

- クロマトグラムウィンドウで右クリックし、ユーティリティを選択します。
- 2. **ユーティリティ** メニューから、の印刷を選択します。

トレースの保存

データファイルとしてトレースを保存するには、このユーティリティを使用します。

- クロマトグラムウィンドウで右クリックし、ユーティリティを選択します。
- 2. ユーティリティ メニューから、トレースの保存を選択します。
- 3. 保存したいトレースをクリックしてください。
- **4.** 名前を付けて保存ダイアログが表示され、ファイルの保存先やファイルの種類 が確認できます。

トレースの削除

クロマトグラムウィンドウに複数のトレースがあり、いずれかを削除するにはウィンド ウ内で右クリックして **プロパティ** コマンドを選択します。現在、表示されているトレ ースを示すスプレッドシートが表示されます。 完全にクロマトグラムウィンドウからトレースを削除するには、**#**数をクリックして 行を選択してキーボード上の**削除**キーを押します。

トレースをウィンドウから一時的に削除する場合は、**表示**フィールドのチェックボック スの選択をクリアします。**OK** ボタンをクリックすると、クロマトグラムウィンドウに 戻ります。

X 軸および Y 軸の範囲の設定

X 軸、Y 軸、あるいは両方の絶対的な範囲を設定するには[クロマトグラムのプロパティ]タブを使います。

X 軸および Y 軸の範囲を設定するには。

- 1. クロマトグラムウィンドウを選択しプロパティを選択します。
- Y 軸範囲は[トレースの設定]タブで各クロマトグラムについて設定します。す べてのクロマトグラムについて絶対的な電圧範囲を設定するには、[スケー ル] フィールドの [ユーザー定義] オプションを使います。次に、各クロマト グラムについて [Y 最小] (Y 軸最小値)と [Y 最大](Y 軸最大値)を入力します。 クロマトグラムをすべて同じ電圧スケールで表示する場合は、全クロマトグラ ムについて同じ値を入力します。
- 軸の設定 タブをクリックしてトレースの絶対範囲を設定してください。X-軸 を選択してX軸の範囲を設定してください。オートスケールをくりっくして 最長のクロマトグラム(デフォルトの選択)の範囲に自動的にX軸の範囲を 設定してまたはこの範囲を使用をくりっくして分の絶対範囲を入力します。
 【現在の範囲】ボタンは、現在のクロマトグラムウィンドウからX軸の範囲を 取り込みます。これにより、ズーム機能を使って好みの大きさに設定したクロ マトグラムの範囲を自動的に入力することができますので、便利です。

65

- 絶対的な範囲を設定すると、その設定を変更またはリセットするまで、クロマ トグラムは常にその設定で表示されます。
- すべてのクロマトグラムのスケールをデフォルト値にリセットするには、[ト レースの設定]タブで[スケールリセット]ボタンをクリックします。

クロマトグラムの操作

クロマトグラムの操作について

クロマトグラムウィンドウから使用できるクロマトグラムの比較および数学的な操作に は多くの種類があります。これらは、クロマトグラムでマウスを右クリックし、オペレ ーション コマンドを選択して実行できます。

オペレーション	アクション
<u>トレースの移動</u>	クロマトグラムウィンドウのトレースを「つかんで」移動させ ます。
<u>オフセット表示</u>	トレースのオフセットを変更します。
<u>アライン</u>	2 番目のクロマトグラムでクリックしたピーク (または点) が 最初のクロマトグラムでクリックしたピーク (または点) に合 うように、2 番目のクロマトグラムをアライン (位置合わせ) します。
ストレッチ	クロマトグラムを別のクロマトグラムに合わせて 2 点間で縮 めたり引き延ばしたりします。

1 つまたは複数のクロマトグラムを最初のクロマトグラムの高 さに合わせてノーマライズ(正規化)します。この場合、選択 されたピークの頂点の高さが、最初のトレースで選択されたピ ークの頂点の高さと一致するように調整が行われます。

<u>スムージング</u> 選択されたトレースに対して 9 点の Savitsky-Golay スムー ジングを行います。

一次微分 選択したトレースに対して一次微分した結果を表示します。

<u>二次微分</u> 選択したトレースに対して二次微分した結果を表示します。

加算 2 つのトレースを加算して結果を表示します。

- 減算 **2** つのトレースを減算して結果を表示します。
- <u>乗算</u> **2** つのトレースを乗算して結果を表示します。
- 除算トレースを別のトレースで除算して結果を表示します。

トレースの移動

マウスでトレースを「つかんで」移動させることができます。

- トレースを移動させる手順は以下の通りです。マウスを右クリックし、オペレーション/トレース移動コマンドをクリックします。
- マウスを左クリックし、クロマトグラムを新しい場所へドラッグすることでトレースを移動することができます。マウスのボタンを離すと、クロマトグラムはその時のカーソル位置に置かれます。
- トレースを移動し続けることができます。トレースの移動が終了したら、再度 マウスを右クリックし、オペレーション/トレースの移動 コマンドを選択して トレース移動動作を終了します。

オフセット表示

以下の手順でトレースのX軸およびY軸オフセットをすばやく変更することができます。

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし【オペレーション】/【オフ セット表示】コマンドをクリックします。
- 追加トレースのX軸オフセット値とY軸オフセット値を入力し、次にOKボ タンをクリックします。入力されたオフセットで、クロマトグラムが再描画さ れます。



オフセット設定変更前のクロマトグラム



オフセット設定変更後のクロマトグラム

これらのオフセットを削除するには。

 クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、[プロパティ]コマンド をクリックしてトレーススプレッドシートを表示させます。

- 2. トレースの設定 タブをクリックし、X 軸および Y 軸オフセットフィールドが 現れるまで右にスクロールし、その設定を削除または変更します。
- 設定をすべて元の値に戻すには スケールリセット ボタンをクリックします。 あるいは、再度 スタック コマンドを使って、X、Yの両方のオフセットパラ メータに[0]を入力することでも対応できます。

2 つのトレースのアライン

クロマトグラムを別のクロマトグラムにアライン(位置合わせ)するには。

- マウスを右クリックしてオペレーション/アラインを選択します。 合わせる 基準となる最初のクロマトグラムの点をクリックし、次に、そこに合わせたい 2番目のクロマトグラムのピーク(または点)をクリックします。2番目にクリ ックしたピーク(または点)が最初にクリックした点に合うように2番目のクロ マトグラムが調整されます。
- アラインを取り消すには、マウスを右クリック/プロパティコマンドを使って、 トレーススプレッドシートを表示させます。トレースの設定 タブをクリック し、X 軸および Y 軸オフセットフィールドが現れるまで右にスクロールし、 その設定を削除または変更します。設定をすべて元の値に戻すには スケール リセット ボタンをクリックします。



アライン(位置合わせ)する前のクロマトグラム



最初のピーク同士をアライン(位置合わせ)した結果

クロマトグラムのストレッチ

ストレッチ機能では、クロマトグラムを別のクロマトグラムに合わせて2点間で縮め たり、引き延ばしたりすることができます。

ストレッチするには。

- 1. クロマトグラムウィンドウで右クリックし、[オペレーション]/[ストレッチ] コマンドをクリックします。
- 引き延ばす(または縮める)基準となる最初のクロマトグラムの2点(または2 ピーク)を選択します。
- 2番目のクロマトグラム上の2点を選択します。これらの2点間のクロマト グラムが、元のクロマトグラムで指定された2点に合わせて引き延ばされる かまたは縮められます。

設定を取り消すには。

 クロマトグラムウィンドウで右クリックし、[プロパティ]コマンドをクリッ クします。[トレースの設定]タブ をクリックし、X 軸および Y 軸オフセッ トフィールドが現れるまで右にスクロールし、その設定を削除または変更しま す。設定をすべて元の値に戻すには スケールリセット ボタンをクリックしま す。



引き延ばし前のクロマトグラム


下のクロマトグラムを上のクロマトグラムに合わせて引き延ばした結果

トレースのノーマライズ

この機能を使って、1 つまたは複数のクロマトグラムを最初のクロマトグラムの高さに 合わせてノーマライズ (正規化) することができます。この場合、選択されたピークの 頂点の高さが、最初のトレースで選択されたピークの頂点の高さと一致するように調整 が行われます。このコマンドを選択すると、最初のトレースでピークの始点と頂点を選 択するよう指示されます。次の指示は、ノーマライズする2回目のトレースでピーク の始点と頂点をクリックすることです。

ノーマライズを取り消すには、マウスを右クリックし、プロパティ コマンドを使って トレーススプレッドシートを表示させます。トレースの設定 タブをクリックし、X 軸 および Y 軸オフセットフィールドが現れるまで右にスクロールし、その設定を削除ま たは変更します。設定をすべて元の値に戻すには スケールリセット ボタンをクリック します。



ノーマライズ実行前のクロマトグラム



ノーマライズ実行後のクロマトグラム

ユーザーごとに各機器のデフォルトトレースを【ノーマライズ】に設定できます。詳細 については、「<u>表示オプションの変更</u>」をクリックします。 スムージング

選択したデータファイルに対して 9 点の Savitsky-Golay スムージングを行う 手順は以下の通りです。

- クロマトグラムウィンドウで右クリックし、【オペレーション】/【スムーズ】を クリックしてください。【トレースをクリックしてください】という指示がウ ィンドウに表示されます。
- 2. 平滑化するクロマトグラムをクリックします。その結果で得られたトレースが ウィンドウ内に表示されます。



平滑化前のクロマトグラム



平滑化されたトレースは元のトレースとともに表示されます。

微分計算

クロマトグラムを一次微分または二次微分する手順は以下の通りです。

- マウスを右クリックレ、[オペレーション]/[一次微分]または[二次微分] クリ ックします。トレースをクリックしてくださいという指示がウィンドウに表示 されます。
- 2. 計算を行いたいクロマトグラムをクリックします。その結果で得られたトレー スがウィンドウ内に表示されます。





1 - 次微分トレースが元のトレースとともに表示される位置



2 二次微分トレースが元のトレースとともに表示される位置

2 つのトレースの追加

2 つのトレースをたし算するには。

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックして[オペレーション]/ [加 算]をクリックします。
- 2. マウスでクロマトグラムをクリックして最初のトレースを選択します。
- 次に【2番目のトレースをクリックしてください】という指示が表示されますので、最初のトレースに加えるマウスでクリックして選択します。その結果で得られたトレースがウィンドウ内に表示されます。なお、この演算は、両トレースのサンプリング周波数が同じでなければならない点に注意が必要です。

2 つのクロマトグラムの減算

2 つのトレースのひき算を行うには。

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、【オペレーション】/【減 算】をクリックします。
- 【最初のトレースをクリックしてください】という指示がウィンドウに表示されます。マウスでクロマトグラムをクリックして最初のファイルを選択します。
- マウスでクリックして最初のトレースから差し引かれるトレースを選択します。
 その結果で得られたトレースがウィンドウ内に表示されます。

注:この演算は、両トレースのサンプリング周波数が同じでなければならない点に注意 が必要です。

2 つのトレースの乗算

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、[オペレーション]/[乗 算]をクリックします。
- 2. 【最初のトレースをクリックしてください】という指示がウィンドウに表示されます。かけ算する最初のトレースをマウスでクリックします。
- [2番目のトレースをクリックしてください]という指示が表示されます。最初のトレースとかけ算するトレースをマウスでクリックします。その結果で得られたトレースがウィンドウ内に表示されます。かけ算した結果のトレースの単位は、「最初のトレースの単位]と[2番目のトレースの単位]の積となります。

クロマトグラムまたはトレースの除算

2 つのトレースでわり算するには。

 クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリック、【オペレーション】/【除算】 をクリックします。

- 2. 【最初のトレースをクリックしてください】という指示がウィンドウに表示さ れます。マウスでクロマトグラムをクリックして最初のファイルを選択します。
- 3. 【2番目のトレースをクリックしてください】という指示が表示されます。マ ウスでクリックして最初のトレースで割るトレースを選択します。その結果で 得られたトレースがウィンドウ内に表示されます。この結果は以下の計算式で 行われます。

$$p = \left(\frac{y_1}{y_1^2 + y_2^2}\right) \div y_{malt}$$

ここで、

- p = 時間tにおける結果のトレースに対して計算された点
- y1 = 時間tにおける最初のトレースの点

y2 = 時間tにおける2番目のトレースの点

ymult = トレースを µV から表示単位へ変換するトレースの y 乗数

チュートリアル

チュートリアルの概要

このステップを使用してメソッドを設定し、データファイルを取り込んだ後、積分用に メソッドを最適化し、キャリブレーションを設定します。発表した順序ですべての手順 を実行します。

関連項目

<u>メソッドの作成</u>

サンプルの実行

クロマトグラムを見ながらインテグレーションパラメータを設定する

キャリブレーションのメソッドを準備

メソッドのキャリブレート

サンプルシーケンスの作成

<u>シーケンスの実行</u>

多点検量線の確認

積分パラメータの変更

メソッドの作成

チュートリアルの最初のステップは、メソッドを作成することです。メソッドには、デ ータの取得に必要な情報が含まれています。メソッドウィザードを用いてメソッドを作 成します。

メソッドウィザードによるメソッドの作成

- 1. 機器ウィザード アイコン 能表表 と します。
- 2. 機器ウィザードダイアログボックスから新規メソッドの作成を選択します。

- 機器の設定ダイアログボックスの各タブは、機器に設定したモジュールの一つ にそれぞれ対応しています。タブは機器の種類とその設定モジュールによって 異なります。各タブを選択し、そのモジュールにパラメータを設定してくださ い。F1キーをクリックすると、各タブを表示した時にモジュールに対する特 定のヘルプトピックをそれぞれ確認できます。機器の設定を参照してください。
- 5. 機器条件の情報を完了したら ファイル > 保存 > メソッドを選択してください。
- メソッドに名前を付けて保存 ダイアログボックスを開くとプロジェクトファ イル内のメソッドフォルダが表示され、ファイルの種類は.met に設定され ます。ファイル名フィールドに Test.met を入力してください。
- 説明フィールドに必要に応じてメソッドの説明を確認または変更してください。
- 8. 保存 を選択します。
- 9. ダイアログボックスを終了します。
- 10. 次に サンプルを実行します。

サンプルの実行

ここでは、前のステップで<u>作成</u>メソッドを用いて、初めてのデータ取り込みを行いま す。

実行を開始するには、ツールバーでコントロール>シングルランを選択します。

- 2. シングルランダイアログボックスで、サンプル ID フィールドに移動し、テ ストを入力します。
- 3. メソッドフィールドから、フルパス名を含む起動したいメソッドの名前を入力 します。ファイルを開く ボタンをクリックしてリストから Test.met を選択 します。
- データファイルフィールドから、データを保存する名前として Test.dat と 入力します。このフィールドには、固有のファイル名を入力する必要がありま す。そのため、以前にこのチュートリアルを行ったことがある場合は、まずデ ィスクからこのファイルを削除するか、解析前に別のディレクトリに移動する 必要があります。
- 5. 結果パスフィールドに、フルパス名を含む結果を保存する場所を入力します。 フォルダの参照 ボタンを選択して結果. rslt フォルダを選択します。
- 6. 結果名フィールドにテストを入力します。これは結果ファイルの名前です。
- 7. スタートを選択します。クロマトグラムウィンドウで、取り込んでいるデータ を確認します。
- 8. 次に、クロマトグラムを見ながらインテグレーションパラメータを設定します。

クロマトグラムを見ながらインテグレーションパラメータを設定する

EZChrom では、最もシンプルなクロマトグラフに適したデフォルト積分パラメータを 使用します。ただし、特定のピークは特別な統合処理が必要な場合があります。そのよ うな特殊な積分処理は、**積分タイムイベント**としてメソッドに入力されます。これら のイベントは測定開始時に配置してすべてのピークに適用するか、一部のピークだけが 影響を受けるようにクロマトグラムの特定の場所に挿入することもできます。

メソッドへの統合をオフにする時限イベントを追加するには。

- この時点では、最後に取り込んだクロマトグラムが、クロマトグラムウィンド ウに表示されるはずです。そうでない場合は、ファイル> 開く> データを 選択し、結果.rst ファイルを選択します。
- 2. ツールバーから分析 ボタン → を選択します。これはクロマトグラムを統合 し、ベースラインが表示されます。
- 3. 下のツールバーで、**インテグレーションオフ** ボタンを選択します。
- インテグレーションオフメッセージウィンドウにの指示に従ってください(イ <u>ンテグレーションメッセージウィンドウを表示するには</u>を参照してください)。 メッセージウィンドウ指示に従って、積分をオフにするクロマトグラムの部分 の前を一度クリックします。(1 つ以上のピークのあるクロマトグラムの部分 を選択します。)次に、積分を再開するクロマトグラムの点を再びクリックし ます。
- 5. インテグレーションオフ ダイアログボックスの次のフィールドを入力します。
 - マウスをクリックする場合には、開始時間と終了時間をポイントで指摘 します。クロマトグラムのこの2点間では、積分はオフになります。
 - このイベントに数値は不要のため、**値**は0に設定します。
 - (すべてのデータ)メソッドにイベントを追加しこれを選択してメソ ッドにイベントを追加します。これはこのメソッドを使用して分析す べてのクロマトグラムで使用されます。

- このデータファイルのみにイベントを追加を選択してこれだけのデータ ファイルにイベントを追加します。これはクロマトグラムにのみ適用 されます。
- テーブルに追加を選択すると、再積分せずに積分タイムイベントテー ブルにイベントを追加するだけです。
- 解析実行 を選択してメソッドにイベントを追加し、クロマトグラムを再積分 します。クロマトグラムは、新しい積分イベントを用いて再描画されます。3 つのピークに対して積分をオフにしたため、選択した部分はベースラインが描 かれないことに注意してください。
- トップのツールバーでインテグレーションイベントボタンを選択して 積分
 タイムイベント テーブルを開きます。. インテグレーションオフタイムイベントがテーブルに追加されています。
- メソッドからイベントを削除するには、解析オフの行番号を選択してキーボード上のキー 削除を選択します。また、次の編集 > 切り取り コマンドを使用してイベントを削除でき、編集 > 貼り付け コマンドを使用してイベントを再挿入します。
- テーブルかにイベントを実際に削除せずに、削除した効果を仮に表示するには イベントの隣のチェックボックスをクリックして選択を解除します。イベント を再選択するには、もう1度チェックボックスをクリックします。
- 10. インテグレーションイベントテーブルでの作業が終了したら、それを閉じてク ロマトグラムに戻ります。
- 11. 次へ, キャリブレーションのメソッドを準備。

キャリブレーションのメソッドを準備

ピーク定量 (標準試料の測定結果から算出する) を行う場合、キャリブレーションのた めにメソッドを準備する必要があります。マルチレベルキャリブレーションの設定方法 の詳細は、このマニュアルの<u>メソッド</u>の項に記載されています。しかし、このチュート リアルでは、シングルレベルのキャリブレーションを設定します。

どのタイプのキャリブレーションの設定にも、次のステップが含まれます。

- キャリブレーションされたピークの同定とメソッドへの標準試料量の入力
- 標準試料の測定
- 検量線の確認

キャリブレーションピークのデータを入力する最も簡単な方法は、まず実際に標準試料 を実際に測定し、その後、保存されているデータファイルを用いてキャリブレーション ピークを視覚的に定義することです。 <u>予備サンプルを実行</u>に示されている手順を使用 して標準的なサンプルを実行し、または提供されるデータファイルのいずれかを選択し ます。

- 1. ファイル > 開く > データ を選択し、標準的なサンプル結果ファイルを選択 します。クロマトグラムが表示されます。
- トップツールバーで分析ボタン→を選択すると、クロマトグラムを統合してベースラインが表示されます。
- 3. 下のツールバーで、シングルピーク設定 ボタン を選択します。
- 4. シングルピーク定義 ダイアログボックスに、最初に検出したピークのリテン ションタイムが表示されます。ピークテーブルにこのピークを追加するには、

以下のフィールドを完了します。このピークをピークテーブルに追加しない場 合、**次へ**ボタンを選択します。クロマトグラム内の特定のピークに移動する には、マウスを使用してピークを選択してください。

ピーク名 このフィールドに化合物名を入力します。

濃度レベル 1 が表示されます。この濃度レベルに対す るこの化合物の量を入力します。(注:この化合物に複数 のレベルを設定する場合は、濃度レベル 2 とそのレベ ルに対する量を入力します。必要な数のキャリブレーシ ョンレベルの設定を完了するまで、各レベルの濃度を入 力します。

単位 結果の表示に使用する単位を入力します。

内部標準法でキャリブレーションを実行する場合は、この化合物の内部標準試料ピークの ID 番号を入力します。これはピークテーブルからのピーク ID 番号です。これがわからない場合には、後でピークテーブルに追加することもできます。

このピークに使用されるリテンションタイムリファレン スピーク ID 番号を入力します。これはピークテーブル からのピーク ID 番号です。この番号が解らない場合 は、あとでピークテーブルに追加しても構いません。リ ファレンスピークは、リテンションタイムのずれのよう

87

なクロマトグラフィー条件の変化が生じた場合に、キャ リブレーションされたピークを探し出すために使用され ます。

このピークに対するリテンションタイムウィンドウの設
 リテンションタイムウィ
 定方法を選択します。許容幅は、予想リテンションタイ
 ンドウ
 ムからわずかにずれている場合に、ピークを同定するために使用します。

ピークの予想リテンションタイムに対する割合(%)に
 基づいてリテンションタイムウィンドウを計算する場合
 に選択します。許容幅の計算に使用する%値を入力します。

ピークの絶対許容幅を入力する場合に選択します。リテ 絶対 ンションタイムウィンドウに使用する値を分単位で入力 します。

次へ ます。 これを選択してクロマトグラム内の次のピークに移動し

戻る これを選択してクロマトグラム内の前のピークに移動し ます。

5. 完了を選択します。

- 6. トップツールバーで、**ピーク/グループテーブル** ボタン を選択します。
- 7. ピーク/グループテーブル ダイアログボックスで、同定 ピーク タブを選択 します。 定義した各ピークが、リテンションタイムやその他の入力パラメー タとともにピークテーブルスプレッドシート中に行として表示されます。

Peak / Group Tables Detector A							
Named Peaks Groups							
· · · # · · ·	Name Street	A A AID A A A	Ret. Time	• Window •	Ref. ID #	ISTD. ID #	Unit
··· 1 ··`	Acetone	1	5.729	0.114	0	0	ppm
2.0	Carbon Tetrachloride	2	6.568	0.131	0	0	ppm
	Bromoethane	3	8.273	0.165	0	0	ppm
· · · · 4 · · ·	1,3-TCE	4	8.54	0.171	0	0	ppm
· · · 5 · ·							
1.1							<u></u>
▲ -						• • • • • • • • • • • • • • •	🕨

- スプレッドシート内の情報を編集することができます。各列はレベルを含むキャリブレーションのパラメータを表しており、キャリブレーションの各レベルでの各化合物の校正量が含まれています。なお、指定のキャリブレーションに必要なパラメータだけを表示するようピークテーブルをカスタマイズすることができます。ピークテーブルのカスタマイズの方法および各列の詳細については、このマニュアルのキャリブレーションの項を参照してください。
- ファイル > 保存> メソッドを選択します。(メソッドを別の名前で保存する 場合は、ファイル >名前を付けて保存> メソッド コマンドを選択します。)
 メソッドの保存を選択します。
- 10. ピークテーブルを閉じます。
- 11. 次に <u>メソッドをキャリブレーションします</u>。

メソッドのキャリブレート

<u>キャリブレーションのメソッドを準備</u>した場合には、メソッドを調整する準備が整い ました。

- メニューバーから 解析 > 解析/シングルレベルキャリブレーションを選択してください。解析/シングルレベルキャリブレーション ダイアログボックスから、校正用のファイル情報を指定します。
- 2. サンプル ID フィールドに テストを入力します。
- メソッドフィールドから、フルパス名を含むキャリブレーションしたいメソッドの名前を入力します。ファイルを開くボタンをクリックしてリストから Test.met を選択します。
- データファイルフィールドからフルパス名を含むこのメソッドの調整に使用す るデータファイル名を入力します。ファイルを開くボタンをクリックしてリ ストから Test.dat を選択します。
- 5. 結果パス フィールドに、フルパス名を含む結果を保存する場所を入力します。 フォルダの参照 ボタンを選択して結果. rslt フォルダを選択します。
- 6. 結果名 フィールドに テストを入力します。これは結果ファイルの名前です。
- 7. 定量結果の補正 については、[1] のままとします。.これらの値の使用法については、「メソッド開発」 を参照してください。
- キャリブレーション チェックボックスをクリックした後、キャリブレーションレベル に [1] を入力します。
 このメソッドは現在、キャリブレーションを行っていないため、キャリブレーションまたは繰返しに関するボックスを選択する必要はありません。ただし、

メソッドの内容が不確かな場合は、開始する前に 検量線をすべて削除 ボック スをクリックします。

9. 開始を選択します。

分析が終了すると、クロマトグラムは積分され、キャリブレーション化合物と して同定されたピークの面積がメソッドに入力されます。この面積を用いて検 量線が作成されます。この時点で、メソッドはシングルレベルに対してキャリ ブレーションが行われるため、このメソッドを使って未知試料のキャリブレー ション化合物を含む試料の測定と解析に使用できます。

10. 次は サンプルシーケンスの作成です。

サンプルシーケンスの作成

サンプルの注入にオートサンプラを使用する場合、注入する試料およびそれらを取り込 み、分析する方法を定義する必要があります。この場合には、サンプルシーケンスを使 用します。サンプルシーケンスを使用して、キャリブレーション試料と未知試料の両方 を取り込むことができます。また、保存したデータファイルを自動的に再解析すること もできます。シーケンスの作成と使用の詳細は、シーケンスの項に記載されています。 ここでは、キャリブレーション試料と、未知試料 2、3 点を取り込むための単純なシー ケンスを作成し、使用します。

新しいシーケンスを再作成する方法:

- 1. 機器ウィザード ボタン 😻 を選択します。
- 2. 機器ウィザードダイアログボックスからシーケンスの作成を選択します。

- 3. メソッドフィールドからフルパス名を含む取得に使用するメソッドを入力しま す。 ファイルを開く ボタンをクリックしてリストから Test.met を選択し ます。
- **4.** データファイルの種類のボタンを選択します。これによりシーケンスウィザー ドが起動し、データ取込に必要な情報の入力が促されます。
- 5. アマウントのデフォルト値を決めます。[次へ]を選択します。
- サンプル ID フィールド から青の右矢印を選択して行番号とメソッド名を選択します。これにより、各試料はシーケンス行番号と現在のメソッド名で識別されます。
- 7. データファイル では、青色の右矢印をクリックし、サンプル ID を選択します。これにより、上で選択したサンプル ID でデータファイルに名前が付けられます。数字による識別番号を使うと、各測定のデータファイルは各々固有の名前が付けられます。これにより、既存のデータファイル名を用いてデータを取り込む場合に発生するエラーを防止することができます。
- 8. 未知試料の数フィールドから 3 を入力します。そのほかのフィールドは、デ フォルト値のままとします。
- 9. 次へをクリックします。
- **10.** このダイアログでは、 **キャリブレーション ID** と **キャリブレーションファイ** ル名が、自動的に前のダイアログと同じ設定になります。
- 11. キャリブレーションレベルの数 を 1 に設定します。 レベルごとに を 1 に残 します。

- **12.** そのほかのボックスはすべてチェックマークを外したままにして、次へ をク リックします。
- 13. サマリーレポートに未知試料分析を含める と サマリーレポートにキャリブレ ーション分析を含めるチェックボックスを選択します。その他のボックスは選 択しないでください。
- 14. 完了 をクリックします。
- 15. 先に指定したファイル名とメソッド名が示されたシーケンススプレッドシート が表示されます。 この時点で、キャリブレーション試料 1 点、未知試料 3 点を測定するための シーケンスが設定されます。なお、サンプル ID およびデータファイル名は、 重複しないように自動的に番号が付けられています。最初の測定としてキャリ ブレーション標準試料を測定するために、その測定をキャリブレーション測定 に指定する必要があります。これは、シーケンスウィザードによって自動的に 行われます。未知試料の測定レベルは常に 0 です。[分析タイプ] フィールド の情報は、複数の指定がある場合、省略した形で表示されます。選択できる分 析タイプを表示するには、このフィールド横の矢印をクリックします。これら の実行の種類ごとの詳細については、<u>サンプルランの種類を設定</u> と <u>シーケン</u> <u>スについて</u>を参照してください。このチュートリアルで作成したメソッドはシ ングルレベルキャリブレーションであるため、キャリブレーション標準試料の 測定が 1 回だけ必要です。
- 16. XML ファイルを保存するには、ファイル > 名前を付けて保存 > シーケンス を選択します。シーケンス フォルダに移動し、ファイル名 の下にテスト入力 してください。 デフォルトでは、シーケンスファイルは .seq 拡張子で保存 されます。保存 を選択します。

17. 次に、サンプルを実行します。

シーケンスの実行

<u>サンプルシーケンスを作成</u>したら、シーケンスを開始することができます。

- ツールバーで、シーケンスを実行ボタン
 を選択し、またはシーケンスス プレッドシートで右クリックしてシーケンスを実行を選択します。シーケンス を実行 ダイアログボックスで、シーケンスのファイル情報を指定します。
- シーケンス名 フィールドから、フルパス名を含む実行したいシーケンスファ イルの名前を入力します。ファイルを開く ボタンをクリックしてリストから Test.seq を選択します。
- 3. 結果パス フィールドに、フルパス名を含む結果を保存する場所を入力します。 ファイルを開く ボタンを選択して結果. rslt フォルダを選択します。
- 4. 結果名 フィールドに テストを入力します。これは結果ファイルの名前です。
- 5. オートサンプラは、標準試料1点に続き、未知試料3点を注入します。
- スタートを選択します。
 シーケンスが完了すると、1つのスタンダードと3つの未知試料用のデータファイルが保存されます。
- 7. 次に多点検量線の確認を実行します。

多点検量線の確認

メソッドのキャリブレーションが完了したら、検量線および関連データを **検量線**機能 を使って検量線およびそのデータを確認することができます。ここでは、EZChrom の multilevel calibration.met ファイルを使用して、キャリブレーションされた多点 検量線を見てみます。レビュー校正を使用する詳細については<u>較正曲線をレビュー</u>を参 照してください。

- 1. ファイル > 開く > メソッドを選択します。
- ディスクから multilevel calibration.met ファイルを選択します。これは、 \ datasystem \メソッドのフォルダに配置されます。(datasystem =イン ストールプログラムのフォルダに移動します。)
- キャリブレーションレビュー ボタン を選択するか、またはメソッド>キ ャリブレーションレビューコマンド

を選択します。

キャリブレーションされたピークは、ウィンドウ右上のピークリストに表示さ れます。表示された検量線は、ハイライトされたピークの検量線です。別のピ ーク名をハイライトすると、そのピークの検量線を表示することができます。 画面上部には、現在の検量線を作成するために使用された面積を含むすべての キャリブレーション情報を表示するスプレッドシートが表示されます。

4. 検量線の近似方法のデフォルト設定は、[折れ線]です。別の近似方法の検量線 を重ねて表示するには、検量線ボックスでマウスを右クリックします。 検量 線の表示 を選択し、次に 直線を選択します。新しい直線の検量線が、折れ線 近似曲線に重ね書き表示されます。右側のボックスには、表示されたそれぞれ の検量線の式と決定係数(r²)の計算結果が示されます。ただし、折れ線近似曲 線の場合は、定義上、データに完全に適合するため、決定係数は計算されませ ん。

- 5. ウィンドウを閉じるには、 レビュー校正 の右上隅にある X ボックスをクリ ックします。
- 6. 次に積分パラメータの変更をクリックします。

積分パラメータの変更

コンピュータ化されたデータシステムを使用することのもう1つの重要な点は、イン テグレーションイベントを使ってインテグレーションをカスタマイズできるということ です。チュートリアルのこの一部では、メソッドにインテグレーションタイムイベント を入力する方法に精通してこれらのイベントのいくつかの効果を表示します。各インテ グレーションイベントの詳細については、[インテグレーション]の項に示します。

- 1. ファイル > 開く > データを選択し、Test.rst ファイルを選択します。
- 分析 ボタンを選択し、 クロマトグラムを分析し、ベースラインが表示されます。 カーソルの垂直線はマウスに従って移動します。 カーソル位置に対応するリテンションタイムは、 クロマトグラムウィンドウの上部に表示されます。
- 谷渡り処理イベントを追加して、4つの大きなピークを解析します。統合ツー ルバーで、谷渡り処理ボタン を選択します。次に、最初の大きなピー クの前でマウスを選択し、最後のピークの直後でもう1度クリックします。
- 4. 谷渡り処理ダイアログボックスで、今分析 ボタンを選択してクロマトグラム を表示します。イベント処理内のピークが[谷渡り処理]イベントでインテグレ ーションされ、それに応じてベースラインが調整されていることを確認して ください。

- 5. コマンドリボンからインテグレーションテーブル ぶ ボタンを選択します。 テーブルに 谷渡り処理イベントが追加されている事を確認してください。
- 6. 谷渡り処理イベントの番号をマウスでクリックし、次にメニューバーから編集 /削除を選択してこのイベントを削除します。イベント右のチェックボックス の選択を解除し、クロマトグラムを再解析すると、このイベントをテーブルに 残したまま、谷渡り処理イベント無しと同じ状態でインテグレーションを試す ことができます。
- 7. テーブル右上隅の X ボックスをクリックして テーブルを閉じます。

以上で、チュートリアルは終了です。マルチキャリブレーションの作成法、カスタムレ ポートの作成法およびサンプルシーケンスの作成および使用法については、後項で詳し く説明します。ソフトウェアで動作としては、オンラインヘルプを使用してください。

機器について

コントロールパネルの機器ペインを使用してシステムに接続された機器を設定および制 御することができます。 機器ペインの詳細については、コントロールパネルのヘルプ を参照してください。

関連項目

機器の設定

アナログ検出器のコンフィグレーション

外部イベントのコンフィグレーション

<u>コンフィグレーションオプション</u>

フラクションコレクタコンフィグレーション

機器の設定

コンフィグレーションは、機器にインストールされる検出器、インジェクタ、またはそ の他のコンポーネントについてソフトウェアに伝達するプロセスです。データ取込を行 う前に、各々の機器のコンフィグレーションを行う必要があります。

機器のコンフィグレーションを行う前に、コントロールパネルで機器リストに機器を追 加する必要があります。

インストールされているデバイスを自動的に検出、コンフィグレーションする方 法:

1. [コントロールパネル] ナビゲーションペインから、 [機器] を選択します。

2. 機器を選択します。

- 3. [アクション] ツールバーで [機器コンフィグレーション] を選択します。
- 4. ダイアログボックスで、[自動コンフィグ]を選択します。
- 5. [自動コンフィグレーション] ダイアログボックスで、 [検出器数] および [ポンプ数] を入力します。
- 6. 必要に応じて、 [オートサンプラ] を選択します。
- 7. **[OK]** を選択します。

デバイスを手動でコンフィグレーションする方法:

- 1. [コントロールパネル]ナビゲーションペインから、[機器]を選択します。
- 2. 機器を選択します。
- 3. [アクション] ツールバーで [機器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で、[設定可能なモジュール]からモジュールを選択し、矢印 を使用して、[使用するモジュール] に移動します。
- 【使用するモジュール】をダブルクリックして、そのモジュールに関するダイアロ グボックスを開きます。必要に応じて、アナログ検出器のコンフィグレーション、 <u>外部イベントのコンフィグレーション</u>、またはフラクションコレクタコンフィグレ ーションを参照してください。
- 6. [オプション] を選択します。
- [コンフィグレーションオプション] ダイアログボックスで、以下の [全般] オプ ションから選択します:システムスータビリティ、SEC、PDA、およびベースライ ンチェック。
- 8. **[OK]** を選択します。

アナログ検出器のコンフィグレーション

- 1. [コントロールパネル] ナビゲーションペインから、 [機器] を選択します。
- 2. 機器を選択します。
- 3. 「アクション]ツールバーで「機器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で、[設定可能なモジュール]から検出器を選択し、矢印を使用して、[使用するモジュール]に移動します。
- 5. [使用するモジュール] で、アナログをダブルクリックします。
- 6. [検出器の構成] ダイアログボックスで以下のフィールドを入力します。
- 検出器の詳細な名前を入力します。たとえば FID や TCD と

 します。

検出器の種類 ドロップダウンリストから検出器のタイプを選択します。

ドロップダウンリストから使用する A/D ボードまたはデバ取り込みソース イスのタイプを選択します。その後、隣のボタンをクリックして設定します。

クロマトグラムのY軸に表示される単位を入力します。たとえば、測定結果の検出単位に応じてマイクロボルトまたは
 Y軸の単位
 AUと入力します。アナログシグナルがマイクロボルトで取り込まれ、保存されます。このシグナルを異なる単位で表示する場合は、正しい補正係数を使用する必要があります。以

下の表を参照してください。

クロマトグラムは一般にボルトで表示されます。別の単位をY軸の補正係数 表示したい場合は、適用させる変換ファクタを入力します。以下の表を参照してください。

一般に使用する Y 軸ラベルおよび対応する乗数

- Y 軸ラベルY 軸の補正係数
- ボルト **0.000001**
- ミリボルト 0.001
- マイクロボルト 1

外部イベントのコンフィグレーション

イベントは、機器トリガ、バルブ、およびその他のユーザー定義の外部イベントに含ま れます。

機器に対してイベントを追加する方法:

- 1. イベントが確実にデータシステムに適切に接続されるようにしてください。
- 2. [コントロールパネル] ナビゲーションペインから、 [機器] を選択します。
- 3. 機器を選択します。

- 4. [アクション] ツールバーで [機器コンフィグレーション] を選択します。
- 5. ダイアログボックスで、 [設定可能なモジュール] から [イベントコンフィグレー ション] を選択し、矢印を使用して [使用するモジュール] に移動します。
- 6. [使用するモジュール] で、 [イベントコンフィグレーション] をダブルクリック します。
- 7. [外部イベントの設定] ダイアログボックスで以下のフィールドを入力します。

[トリガ] または [レディ] ラインを設定するには、 [トリ ガ] または [レディ] を選択します。

名前 値またはその他の外部イベントを設定するには、イベント名 を入力します。

ソース ドロップダウンボタンを選択して、イベントのソース(イベ ントの発信元ハードウェア)を選択します。

 (設定)
 フィールドのボタンを選択してダイアログボックス

 を開きます。このイベントの操作情報を入力します。

注:複数の機器に同じイベントを割り当てることができます。機器間の競合が発生しな いようにイベントを割り当てるようにしてください。

8. [外部イベント] タブは 機器設定の EZChrom では現在利用できません。

オプションの分析ソフトウェアを有効にする

機器に対してオプションのソフトウェアまたは機能を選択して有効にする方法:

- 1. [コントロールパネル] ナビゲーションペインから、[機器] を選択します。
- 2. 機器を選択します。
- 3. [アクション] ツールバーで [機器コンフィグレーション] を選択します。
- 4. ダイアログボックスで、 [オプション] を選択します。
- 5. [コンフィグレーションオプション] ダイアログボックスで、次のような利用可能 な分析オプションから選択します:システムスータビリティ、SEC、PDA、および ベースラインチェック。
- 6. **[OK]** を選択します。

フラクションコレクタコンフィグレーション

- 1. [コントロールパネル] ナビゲーションペインから、 [機器] を選択します。
- 2. 機器を選択します。
- 3. 「アクション] ツールバーで「機器コンフィグレーション] を選択します。
- 4. ダイアログボックスで、[自動コンフィグレーション]を選択します。
- 5. [設定可能なモジュール] で FRC を選択します。
- 詳細については、 [フラクションコレクタ (FRC) コンフィグレーション] ダイ アログボックスで、 [ヘルプ] を選択するか、セクションの [F1] を押します。

関連項目

<u>フラクションコレクタコンフィグレーション</u>

メソッドについて

一つのメソッドにはサンプルがいかにして処理されるかの情報が含まれています。メソ ッドには、データ取込条件(分析時間、サンプリング間隔など)、インテグレーション、 キャリブレーション、ピーク情報、レポート、さらにはデータエクスポートやユーザー プログラムなどのオプション機能を実行するための命令が含まれます。

各メソッドは、1つのクロマトグラフから複数の独立したチャンネルのデータを取り込 むことができます。各チャンネルはそれ自体完全に独立したパラメータを持つことがで きます。

メソッドウィザードと機器の設定情報を使用してメソッドを作成・保存します。また、 新規プロジェクトの選択やメソッドレポートの表示、メソッドおよびデータのプロパテ ィの編集も可能です。

詳細メソッドオプションを使うと結果のカスタマイズの他、外部データシステムやネッ トワークのリンクを実行することができます。

お使いの機器が前処理やラボモニタ、システムスータビリティソフトウェアがサポート している場合、関連するテーマを参照してください。

お使いの機器にインテグレーションを追加するには<u>インテグレーションについて</u>を参照 してください。

関連項目

メソッドウィザードによるメソッドの作成

機器の設定

メソッドファイルのオープン

<u>メソッドの保存</u>

マスターメソッドの保存

新規プロジェクトの選択

<u>メソッドレポートの表示</u>

<u>メソッドのプロパティ</u>

<u>データプロパティ</u>

詳細メソッドオプション

<u>サンプルプレップ</u>

ラボモニターソフトウェアの起動

システムスータビリティについて

メソッドウィザードによるメソッドの作成

データを収集してコンピュータのハードディスクに保存するには、測定時間やサンプリ ング間隔など、データ取込に関する情報を含むメソッドを作成する必要があります。新 規メソッドの作成または既存メソッドの編集を行うには、メソッドウィザードを使用し ます。

新しいメソッドの作成は、機器が接続されているか否かに関わらず可能です。ただし、 実際のデータ取込を開始するには、機器エリアからのみ実行できます。



- 2. 機器ウィザードダイアログボックスから以下の内容を選択します。
 - システムのデフォルトメソッドを使用して新しいメソッドを作成する場合
 は、新規メソッドの作成する を選択します。
 - 現在のメソッドの変更を行う場合は、現在のメソッドの変更を選択します。
 - ディスクに保存されているファイルを開き、このメソッドの変更を行う場合は、ディスク上のメソッドの変更を選択します。
- 機器の設定ダイアログボックスの各タブは、機器に設定したモジュールの一つ にそれぞれ対応しています。タブは機器の種類とその設定モジュールによって 異なります。各タブを選択し、そのモジュールにパラメータを設定してくださ い。F1キーをクリックすると、各タブを表示した時にモジュールに対する特 定のヘルプトピックをそれぞれ確認できます。機器の設定を参照してください。
- 5. 機器の設定の情報を完了したらメソッドを保存してください。

機器の設定

メソッドの機器の設定に関する部分は、機器制御パラメータと解析パラメータ。この情報は[機器の設定]ダイアログに入力されます。[機器の設定]ボタンをクリックするか、 メニューから[メソッド]/[機器の設定]コマンドを選択します。この機器に対して構成 されたデータ取込の種類に応じて、データ取込パラメータを表示するダイアログが表示 されます。汎用システムをお使いの場合、データ取込のためのパラメータが表示されま す。機器コントロールオプションのうちの1つがインストールされており、それらの 構成された機器のうちの1つを使っているならば、機器の設定は選ばれた機器の制御 に特有のパラメータを含みます。 機器の設定ダイアログボックスの各タブは、機器に設定したモジュールの一つにそれぞ れ対応しています。タブは機器の種類とその設定モジュールによって異なります。各タ ブを選択し、そのモジュールにパラメータを設定してください。**F1**キーを選択すると、 各タブを表示した時にモジュールに対する特定のヘルプトピックをそれぞれ確認できま す。わずか一部ですが共通モジュールを以下に記載します。

関連項目

機器の設定を開く

機器の設定をインポート

検出器1

トリガー

外部イベント

ベースラインチェック

補助トレース

フラクションコレクタ

機器の設定を開く

3つの方法で機器の設定ダイアログボックスを開くことができます。

 ツールバーのメソッドウィザードボタンをクリックして ()、新 規メソッドの作成を選択します。

- ナビゲーションペインで メソッド > 機器の設定を選択します。
- ツールバーから機器の設定 ボタン ジンを選択します。

関連項目

機器の設定をインポート

<u>検出器 1</u>

トリガー

外部イベント

<u>ベースラインチェック</u>

機器の設定をインポート

このコマンドで、保存しているメソッドの機器パラメータを開ことができます。

機器の設定をインポートするには

- 7. メソッド > 機器の設定をインポートを選択します。
- 8. メソッドファイルを開く ダイアログボックスから、機器条件パラメータをインポートしたいメソッドを選択します。
- 9. 開くを選択します。
検出器1

メソッドに使用する検出器を構成する方法:

- 1. 機器の設定を開く
- 2. 機器の設定ダイアログボックスで、検出器タブを選択します。トリガーが設定 されていない場合、このタブは表示されません。
- 3. 機器上で設定されている各検出器チャンネルに対して、以下のデータ取込情報 を定義してください。

このチャンネルでデータを収集するには、このボックスをチ データ取込 エックします。このボックスをチェックしないと、このチャ ンネルのデータ取込は行われません。

システムがデータをサンプリングする間隔です。ユーザー は、サンプリング間隔の指定方法を選択することができま す。サンプリング間隔を選択すると、 そのサンプリング間隔 でも十分なデータが得られる最も狭いピーク幅を示すプロン プトが表示されます。**測定するクロマトグラフィー分析にと** って最適なサンプリング間隔を決めるためには、グラフィカ ルプログラミングの[サンプリング間隔]コマンドの使用をお すすめします。

これを選択すると、サンプリング間隔の単位に Hz(1 秒間の サンプリング回数)が設定されます。普通のクロマトグラフィ ーの用途ではこれを選択します。下向きの矢印をクリックす ると、ご使用のシステムで使用可能な周波数のリストが表示 されます。

これを選択すると、2 つのデータポイント間の秒(またはミリ 秒)数を選択する必要があります。値を入力してから、その値 の単位として、ミリ秒(ms)と秒(s)のどちらにするか選択し ます。

分析日時 データ取込する時間です。

遅れ時間 過定が開始(トリガー)してから、このチャンネルのデータ取 込が開始するまでの時間です。

トリガー

間隔

トリガーはデータ取込をどのように開始するかを決定します。

メソッドに使用するトリガーの種類を選択する方法:

- 1. 機器の設定を開く
- 2. 機器の設定ダイアログボックスで、トリガータブを選択します。トリガーが設 定されていない場合、このタブは表示されません。
- トリガータイプを選択して、使用する機器としてインストールしたリモート 起動の種類を選択します。各機器のトリガーは、機器の構成で設定されます。
- なし スタート(開始)をクリックするとすぐにデータ取込を開始しま

す。シーケンスによるデータ取込の場合は、各測定の間で一時停 止しません。

オペレーターが ENTER キーを押さないと測定を開始しません。マニュアル シーケンスによるデータ取込では、確認のための各測定間に一時 停止します。

データ取込を外部トリガー(オートサンプラやマニュアルインジ
 外部 エクタのスタート信号)で開始します。トリガーのタイプは機器
 を構成する時に設定します。

外部イベント

ー度機器の外部イベントを設定すると、メソッドのイベントをプログラムできます。こ のタブを選択するとスプレッドシートが表示されますので、そこでイベントを選択して 測定中に作動させる日時と方法を指定することができます。

外部イベントを設定する方法:

- **1.** 機器の設定を開く
- 2. 機器の設定ダイアログボックスで、外部イベントタブを選択します。このタブ は、使用する機器に外部イベントを設定しない限り表示されません。
- イベントをプログラムするには、イベントフィールドをクリックし、ドロッ プダウンリストから目的のイベントをプログラムとして選択します。

- そのイベントを開始する時間、そのイベントを希望の状態に維持させておく時間の長さ(継続時間)、その間のイベント状態(閉じる、または開く)を入力します。
- 5. 測定に対して最大 25 までのイベントを設定することができます。

イベントの状態を表示・編集する方法:

- 1. コントロール/機器ステータス。このオプションは、使用する機器に外部イベ ントを設定しない限り表示されません。
- 2. 機器の設定ダイアログボックスで、外部イベントタブを選択します。
- 3. 設定した各イベントには、現在の ステータスとともにラインに表示されます。 このステータスを変更するには、変更の列に表示されるフィールドをクリッ クします。
- 適用を選択します。あるイベントについて、変更フィールドで無視を選択した場合は、適用ボタンを押してもそのイベントは変更されません。

ベースラインチェック

ベースラインチェック を使用して、このメソッドを用いてデータを取得する間にベー スラインにパラメータを設定します。

データ取込にベースラインチェックパラメータの設定されたメソッドを用いると、下記 のいずれかの場合にベースラインチェックが実行されます。

- シングルラン ダイアログで ベースラインチェック が選択された場合
- 実行するシーケンスの行の分析タイプにベースラインチェックが含まれる場合

ベースラインチェックがデータ取込の一部として実行された場合、まずメソッドの初期 条件が機器に送られます。この初期条件はデータ取込前のベースラインチェックに用い られます。いずれかのチャンネルでベースラインチェックデータが閾値を満足していな い場合、データ取込は中止されます。

ベースラインテストに失敗した場合、現在のランは中止され、ベースラインチェックデ ータと結果のみが保存されます。ベースラインチェック中に(ユーザー操作またはエラ ーによって)ランが中止された場合、データは保存されません。

ベースラインチェックを設定するには。

- **1.** 機器の設定を開く
- 機器の設定ダイアログボックスで、ベースラインチェックタブを選択します。
 このタブが機器設定オプションでベースラインチェックに表示されるようにしてください。
- 3. 選択可能なフィールドは以下の通りです。

ベースラインを計算する最小時間を入力しま す。

ベースラインチェック終了時間 ベースラインチェックを行う最大時間を入力し(不適合時) ます。この時間内に閾値に達しない場合テスト

は失敗となります。

ノイズ計算法 ノイズの計算方法を選択します。

この一覧表はどのチャンネルにベースラインテ ストが実行されるかを指定します。スプレッド シートの行数は、機器構成に基づくデータ取込 チャンネル数に加えて、PDA オプション ウィ ンドウ(PDA が設定済みの場合)で定義された PDA マルチクロマトグラムチャンネル数と等し くなります。

接続されている検出器名、または PDA マルチクチャンネルロマトグラムの定義を表示します。この値は編集できません。

ベースラインのノイズテストを行うかどうかを 指定します。チェックマークを外すとスレッシ ョルドの編集フィールドが無効になり、付ける と有効になります。

ベースラインのノイズに対するスレッショルド を設定します。ノイズ値がスレッショルドを超 えた場合、ベースラインチェックは失敗とみな されます。 ベースラインのドリフトテストを行うかどうか を指定します。チェックマークを外すとスレッ ショルドの編集フィールドが無効になり、付け ると有効になります。

スレッショルド(ドリフト/hr) ベースラインのドリフトに対するスレッショル ドを設定します。ドリフト値がスレッショルド を超えた場合、ベースラインチェックは失敗と みなされます。

オンデマンドベースラインチェックを実行するには。

コントロール > ベースラインチェックを選択します。ダイアログはベースラインチェ ックを行うためのパラメータを設定した場所に表示されます。

ベースラインチェック機能のステータスをチェックするには。

表示> ベースラインチェックステータスを選択します。最新のベースラインチェック の結果を確認できるステータスボックスが表示されます。このボックスではステータス 情報の表示のみ行います。

補助トレース

補助トレースタブは、タブは、通常のデータ取得中、機器ステータスパラメータのトレ ース取得に使用されます。多くの機器が、ポンプ流量やオーブン温度などのステータス パラメータについての連続してモニターデータを送信する機能を備えています。この機 能が有効なシステム構成であると補助トレースタブが表示され、測定中にどのステータ スパラメータをモニターするか指定することができます。 Agilent 1100 シリーズの カラムコンパートメント、示差屈折率検出器、アイソクラティック ポンプ、バイナリ ポンプ、クォータナリ ポンプの補助トレースでは、変更の内容がメソッドの履歴に記 録されます。

機器の補助トレースを収集し表示するには、メソッド/機器条件コマンドをクリッ クし、補助トレースタブをクリックします。

- **1.** 機器の設定を開く
- 2. 機器の設定ダイアログボックスで、補助トレースタブを選択します。
- 3. このリストへの登録項目は、設定した機器構成によって変わります。

このダイアログにリストアップされているパラメータのステータス情報をログとして残 すには、該当する行のボックスをクリックし、パラメータに必要な単位を選択します。 これにより、データ取込時に、ステータス情報も同時に取込まれます。収集された結果 は、そのデータファイルを見る際に追加のデータチャンネルとして提供されます。

フラクションコレクタ

メソッドにフラクションコレクタを設定する方法:

機器の設定を開く

- 2. [機器の設定] ダイアログボックスでは、 [フラクションコレクタ] タブを選択し ます。フラクションコレクタが設定されていない場合は、このタブは表示されませ ん。
- 3. 詳細については、**[フラクションコレクタ]** タブの任意のセクションで**[F1**] を 選択してください。

新規プロジェクトの選択

コントロールパネルでプロジェクトを選択するまでは、機器を起動することはできません。ダイアログには、現在の機器で使用できるプロジェクトが表示されます。 EZChromでプロジェクトを変更できます。

プロジェクトを変更する手順は以下の通りです。

- 1. ファイルメニューからプロジェクトの選択 をクリックします。
- 2. 現在の機器で使用できるプロジェクトが一覧表示されます。使用したいプロジェクトを選択してプロジェクトの選択をクリックします。

メソッドレポートの表示

カスタムレポートを見るには、メニューバーからレポートメニューの表示/メソッドレ ポートコマンドをクリックします。このコマンドは、カスタムレポートを編集していな いときでも使用できます。これにより、現在のメソッドのカスタムレポートは、見る目 的だけのためにウィンドウ内に表示されます。このウィンドウからレポートを編集する ことはできません。<u>レポートについて</u>と標準レポートを参照してください。

メソッドのプロパティ

データを収集するためのメソッドを使用する前に、データ測定後の自動解析(必要な場合)の選択肢が有効になっていることを確認します。メソッドメニューからプロパティ コマンドを選択することにより、確認できます。

関連項目

説明

オプション

キャリブレーション

監査証跡ログ

監査証跡

メソッドプロパティの説明

メソッドの説明を入力する方法:

- 1. メソッド メニューからプロパティコマンドをクリックします。
- 2. メソッドプロパティ ダイアログボックスから、説明を選択します。
- このダイアログボックスに、メソッドのテキスト情報を入力します。ご希望であればどんな情報でも入力できます。このメモはファイルを開くダイアログから見ることができるため、多くのメソッドを次々にチェックして、必要なものを素早く見つける時に役立ちます。

関連項目

<u>オプション</u>

<u>キャリブレーション</u>

監査証跡

監査証跡ログ

メソッドのプロパティのオプション

メソッドに解析オプションを設定する方法:

- 1. メソッド メニューから プロパティコマンドをクリックします。
- 2. メソッドプロパティ ダイアログボックスから、オプションを選択します。
- 3. 以下の中から選択してください。
 - 分析中に解析する このボックスを選択すると、ボックス内に指定した 間隔で、測定中にクロマトグラムの解析が自動的に行われます。
 - 分析終了後に解析する このボックスを選択すると、データ取込が1回 行われるたびに、クロマトグラムの解析が自動的に行われます。これがデ フォルト設定になっています。このボックスを選択しない場合、解析ボタ ンをクリックして手動でクロマトグラムを解析するか、測定終了後にシー ケンス再解析の一部として試料の解析を行わなければなりません。

 データファイルの圧縮を有効にする - このボックスを選択すると、その データシステムを使用して収集したデータファイルは、保存される前に自 動的に圧縮されます。(圧縮されたデータファイルは小さくなりますが、 呼び出すのに時間がかかります。一度圧縮機能を使ってファイルを保存す ると、それを解凍するには、圧縮機能を無効にしてから別名のファイルと して保存し直す必要があります。

関連項目

説明

<u>キャリブレーション</u>

監査証跡

監査証跡ログ

データを取り込むための解析解除

メソッドのプロパティのキャリブレーション

メソッドにキャリブレーションのデフォルト値を設定する方法:

- 1. メソッド メニューから プロパティコマンドをクリックします。
- 2. メソッドプロパティ ダイアログボックスから、キャリブレーションを選択し ます。
- 3. 以下の中から選択してください。
 - 自動的に同じレベルの連続した繰り返し測定値を平均する このボック スをチェックすると、キャリブレーションは(単一のキャリブレーション

レベルを連続注入)を繰り返し、常に平均化します。このボックスのチェ ックを外すと、キャリブレーション時に平均化の指定をしない限り、キャ リブレーションの繰り返し測定値は平均化されません。<u>繰り返し測定値を</u> 自動的に平均化を参照してください。

- 移動平均の繰り返し測定値の値 移動平均を求めたい場合、平均した繰り返しの回数をここに入力します。
- レスポンスファクターの設定 レスポンスファクターを計算/表示する方法としてレスポンス/アマウントあるいはアマウント/レスポンスを選択します。

関連項目

説明

オプション

監査証跡

監査証跡ログ

メソッドプロパティ監査証跡のログ

このオプションを使用して監査証跡情報のエクスポート、印刷及び検索を行います。

- 1. メソッド メニューから、プロパティコマンドをクリックします。
- 2. メソッドプロパティ ダイアログボックスから、監査証跡ログを選択します。

- 3. 次の情報を入力します。
 - ユーザー
 - ロケーション
 - 説明
 - 理由
 - 開始日/時間
 - 終了日/時間
- 4. 以下の中から選択してください。
 - **エクスポート** これを選択して、監査証跡ログをエクスポートします。
 - 印刷 これを選択して、監査証跡ログを印刷します。
 - 検索 これを選択して、監査証跡ログを検索します。

関連項目

説明

オプション

<u>キャリブレーション</u>

監査証跡

メソッドプロパティ監査証跡

監査証跡タブを選択します。 **監査証跡を使用する** チェックボックスは重要です。これ がチェックされると、以後のメソッドに対して行われる変更がメソッドに記録されるこ とになるからです。

メソッド監査証跡を有効にする方法:

- 1. メソッド メニューから プロパティコマンドをクリックします。
- 2. メソッドプロパティ ダイアログボックスから、監査証跡を選択します。
- 監査証跡を有効にするボックスをチェックします。監査証跡を使用するボック スを一度チェックすると、チェックを解除することはできません。そのファイ ルを新しいファイル名で保存しない限り、そのメソッドに対しての履歴が有効 のままとなります。
- 警告ダイアログボックスで、はいを選択します。 監査証跡を使用するを選択 すると半永久的にこのメソッドがチェックされていることになります。
- 5. メソッドプロパティ ダイアログボックスで次のオプションから選択します。
 - 変更するたびに理由を入力する-このオプションを選択するとメソッドを 変更するたびにその理由を入力するよう求められます。
 - メソッド保存時に理由を入力する このオプションを選択すると、メソ ッドの保存時に変更の理由をそれぞれ入力するよう求められます。
 - 理由を入力しない このオプションを選択すると、変更は記録されます が変更理由の入力は要求されません。

履歴に理由を入力するオプションを選択すると、 メソッド/シーケンス/データ/システ ムを変更または保存する時に、変更した理由の入力を求めるダイアログが表示されます。 変更するたびに理由を入力するオプションを選択した場合、値を変更するたびにダイア ログが表示されます。変更内容は、変更場所/内容ボックスに表示されます。 理由ボ ックスで変更の理由を選択あるいは入力して、OKボタンをクリックします。

保存時に理由を入力するオプションを選択した場合、メソッド/シーケンス/データを保存するときにダイアログが表示されます。 ここですべての変更の理由を入力しなけれ ばなりません。変更内容を見るには、戻る ボタンや次へ ボタンを使用します。変更項 目の番号はウィンドウ右下のアイテム欄に、変更の総数はトータル欄に表示されます。 もし、すべての変更に対して1つの理由を入力したい場合には、理由を入力してから すべてに適用 ボタンをクリックします。すべての変更に対して理由を入力したら OK ボタンをクリックします。

関連項目

<u>説明</u>

<u>オプション</u>

<u>キャリブレーション</u>

監査証跡ログ

データプロパティ

データはメソッドを実行するたびに取得されます。データ > プロパティ を選択して概 説や説明、電子署名、監査証跡ログ及びデータファイルの監査証跡を編集・表示しま す。

関連項目

データファイル構造について

データファイル概説の表示

データファイルの説明

データファイルの電子署名を表示

データファイルの監査証跡ログ

データファイルの監査証跡

データファイル構造について

データ取込を行ったり、名前を付けて保存/32 ビットのデータ コマンドを使ってデー タファイルを保存したりすると、データファイルが指定のドライブに作成されます。 名前を付けて 32 ビットで保存コマンドは他の形式のファイルとして保存されます。 EZChrom では、AIA や CDF、PE などの多種多様なサードパーティー製フォーマット で開くことができます。これらのファイルを開く際、名前を付けて 32 ビットで保存を 使用できます。これで、ユーザーは下記一覧のネイティブの EZChrom フォーマット と構造でファイルを保存できます。このファイルには以下の情報が含まれます。 ファイル情報ヘッダ。データ取込の日時などの情報が含まれます。

データ取込と処理に使用されるメソッドパラメータを入力します(データが必要な時 にのみ保存される「オリジナル」メソッド)。特定のクロマトグラフ上でデータの複数 のチャンネルを同時に取得できるので、メソッドセクションには複数チャンネル用の完 全なパラメータが含まれることがあります。

実行用の未加工データポイントが保存されます。複数のクロマトグラムが単一のデー タファイルに存在していることがあり、実行用に取得した検出器チャンネルをそれぞれ 表します。未加工データポイントはバイナリー形式で保存されます。

結果。オリジナルの解析結果はファイルに保存され、あとでファイルを開くときに呼び出すことができます。さらに、最新の解析結果およびメソッドもデータファイルに保存され、分析を行うたびに更新されます。結果のサンプル ID もマニュアルインテグレーションテーブルも同様に保存されます。

ファイル記述。ファイルのメモを入力しておくと、このテキスト情報はデータファイルに保存されます。ファイルのメモは、[データファイルのプロパティ]または[データファイルを開く]のダイアログで確認することができます。

機器の設定。

測定に使用した機器の構成条件が保存されます。

データファイルの履歴。データファイルの履歴は、いつでもデータファイルに保存され、 データの解析記録をたどることができます。

データファイルは、指定したファイル名と拡張子でデータ取込開始時に保存されます。 ファイル名の長さは、パスを含めて 255 文字以内です。

データファイルチェックサム。 拡張セキュリティが有効な場合、データファイルを閉 じるたびにすべてのファイルのチェックサムが計算されます。ファイルが開かれるとま ず、そのチェックサムが確認されます。チェックサムが不合格の場合、ファイルは開か れず、機器アクティビティログにエラーメッセージが表示されます。チェックサム機能 はエンタープライズ全体に働きます。この機能は、メインメニューのエンタープライズ オプション ダイアログで有効にでき、拡張セキュリティと表示されている。

データファイル概説の表示

- 1. データ メニューから、 プロパティコマンドをクリックします。
- 2. データファイルプロパティ ダイアログボックスから、全般を選択します。
- 3. 以下の情報が表示されます。
 - サンプル ID
 - 分析日時
 - 解析日時
 - 分析に使用したコンピュータ名
 - バイアル
 - 注入量

データファイルの説明

データファイルの説明を入力する手順は以下の通りです。

1. データ メニューから、プロパティコマンドをクリックします。

- 2. データファイルプロパティ ダイアログボックスから、説明を選択します。
- このダイアログボックスに、データファイルのテキスト情報を入力します。この説明はファイルを開くダイアログから確認できるため、ディスク内のデータファイル確認の際に便利です。現在のデータファイルのメモを変更したい場合は、このボックスから入力や編集することができます。

データファイルの説明は、データ取込の時点でシーケンスに入力するか、あるいはシン グルランの時にダイアログから入力することができます。

データファイルの電子署名を表示

データファイルの電子署名を表示する方法:

- 1. データファイルを開きます。
- 2. データ メニューから、プロパティコマンドをクリックします。
- 3. データファイルプロパティ ダイアログボックスから、署名を選択します。

関連項目

結果シーケンスに署名を追加

データファイルの監査証跡ログ

- 1. データ メニューから、プロパティコマンドをクリックします。
- 2. データファイルプロパティ ダイアログボックスから、監査証跡ログを選択し ます。
- 3. 次の情報を入力します。

- ユーザー
- ロケーション
- 説明
- 理由
- 開始日/時間
- 終了日/時間
- 4. 以下の中から選択してください。
 - **エクスポート -** これを選択して、監査証跡ログをエクスポートします。
 - 印刷 これを選択して、監査証跡ログを印刷します。
 - **検索** これを選択して、監査証跡ログを検索します。

データファイルの監査証跡

データファイルは、常に履歴と関連付けられています。**監査証跡**を選択して、変更が 行われるたびにシステムが理由を入力するよう通知させるか否かを指定します。

- 1. データ メニューから、プロパティコマンドをクリックします。
- 2. データファイルプロパティ ダイアログボックスから、監査証跡を選択します。
- 3. 以下の中から選択してください。

- 理由を入力する このオプションを選択すると、前処理ファイルを変更 するたびにその理由を入力するよう求められます。
- 理由を入力しない-このオプションを選択すると、変更は記録されますが 変更理由の入力は要求されません。

詳細メソッドオプション

詳細メソッドオプションについて

結果をカスタマイズしたり、外部データシステムまたはネットワークと接続することに より、単純なデータ取込や解析を超えたデータシステム詳細メソッドオプション機能を 使用できます。

メソッドオプション ダイアログボックスを開くには、**メソッド > 詳細**を選択します。 以下のオプションタブの1つを選択し、メソッドの詳細オプションを設定してください。

データエクスポートを有効にし、パラメータを設定できまデータエクスポート

Excel ヘデータをエクスポートも参照してください。

<u>グラフィックエクス</u> クロマトグラムとトレースをエクスポートするための設定 ポート ができます。

<u>カスタムパラメータ</u> カスタムパラメータが設定できます。

カラム / パフォーマ システムの性能を自動的に計算するための設定ができま

ンス

<u>ファイル</u> こついて設定できます。

メソッドの一部としてデータをエクスポートするには

す。

データがメソッドで分析される時、分析データを自動的にエクスポートできます。デー タをエクスポートするには、メソッドでエクスポート関数を有効にする必要があります。 詳細レポートをエクスポートするために、エクスポートを実行するコンピュータにプリ ンタを設定しなければなりません。

メソッドの一部としてデータをエクスポートする方法:

- 1. メソッド メニューから、詳細 > データエクスポートを選択します。
- エクスポートを有効ボックスをクリックしてオンにします。このオプションが 有効になっていると、データエクスポートはデータが解析されるたびに実行さ れます。データエクスポートは、データ解析が測定後に自動で行われるか手動 で行われるかに関係なく、メソッドの開発中はこのオプションを無効にしてお くことをおすすめします。
- エクスポートしたい情報のタイプを次のオプションを含むドロップダウンリス トから選択します。

- ピーク
- グループ
- 標準レポート
- クロマトグラム
- 5. 選択したエクスポートタイプのそれぞれについて、パラメータを選択することができます。エクスポートしたいパラメータをダブルクリックするか、あるいはクリックしてハイライトさせてから緑色(上)の矢印ボタンをクリックして、右側の[選択された項目]のリストに移動して選択します。選択された項目から削除したい項目については、それをハイライトさせてから赤色(下)の矢印ボタンをクリックします。カスタムパラメータを定義してある場合、[選択できる項目]のリストに項目が表示されます。
- クロマトグラムのエクスポートを選択すると、次はそれを AIA (*.CDF) フ ァイルフォーマットまたは ASCII フォーマットのどちらでエクスポートする か選択します。AIA を選択すると、Analytical Instrument Association(AIA)の指定した標準フォーマットで*.CDF ファイル (Chromatography Data File)を作成します。AIA レベル 2 のファイルエク スポートをサポートしています。これには、生クロマトグラムと解析結果が含 まれます。これはまた、ANDI(Analytical Data Exchange)ファイルフォー マットとも呼ばれます。これにより、得られた結果を他のクロマトグラフィー データシステムで利用できるようになります。
- フィールドの区切り ドロップダウンボックスから、タブ、スペース、または コンマを選択します。例えば、ファイルを Microsoft Excel スプレッドシー トにインポートしたい場合は、タブを選択します。

- エクスポートファイルのパス フィールドで、エクスポートファイルを保存したいディレクトリにパス名を選択します。ディレクトリの名前が分からない場合は、フィールド横のオープンファイル ボタンをクリックしてパスのリストから選択します。
- データベースエクスポートに ODBC フォーマットを使用したい場合は、
 ODBC を使用を選択します。ODBC(Open Database Connectivity)は、デ
 ータをデータベースと他のプログラムとの間で共有するための業界標準の方法です。
 - ODBC データソース名 フィールドでエクスポートファイルの移動先フォ ルダ名を入力するか、またはオープン ボタンを選択してフォルダを参照 します。新規データソースを作成するには、新規作成 ボタンを選択しま す。
 - データをエクスポートするテーブル名を入力します。

エクスポートデータは以下の規則に従ってファイルに保存されます。

ピークまたはグループのエクスポートファイル

選択された各パラメータのそれぞれについて、各同定ピークに対する値とともに、ファ イルおよびメソッド名情報を含むファイルが作成されます。メソッドを使用してデータ を収集または解析を行う度に、新たに計算された値を含む行がファイルに付加されます。 各ファイルは、選択した値のタイプを示す拡張子の付いたメソッド名で保存されます。 例えば、5回測定の面積 データに対して作成されたエクスポートファイルの一例を以 下に示します。

Report	Channel	#Records							
Area	A	5							
Date	Time	Sample Id	File	Method	User	Peak1	Peak2	Peak3	
5/9/92	20:48:53	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	63088	52014	49749	
5/9/92	20:49:09	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	170789	142665	136661	
5/9/92	20:49:21	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	298854	251660	241049	
5/9/92	20:49:34	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	461695	394081	376339	
5/9/92	20:51:56	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	780025	668245	635081	

注 データをシーケンスの一部としてエクスポートし、他のアプリケーションでエクス ポートファイルを見ながらデータ取込を行う場合は、そのファイルを使用する前にコ ピーして別名を付けて保存しておいてください。そうしないと、ソフトウェアがそのフ ァイルを新しい測定データで更新するときに、ファイル共有違反となります。

標準レポートのエクスポートファイル

標準レポートオプションを選択すると、解析を実行する度にファイルが作成されます。 ファイルは選択したレポート内の情報を含みます。

ピークおよびグループエクスポートと異なり、標準レポートのエクスポートファイルに は、後で行った測定データが付け加えられません。このメソッドをデータ取込または解 析を行う度に、新しいファイルが作成されます。新しいファイル名は、データファイル 名に基づいて付けられ、選択されたエクスポートデータのタイプに基づいて、以下のよ うな拡張子が付けられます。

外部標準レポートのエクスポートファイルの一例を次の表に示します。

Report	Channel	#Peaks	Date	Time	Sample Id	File	Method	User	
ESTD	A	4	5/9/92	20:48:53	STDS	C:\system'	c:\system\	cathi	
Pkno	Name	Ret. Time	Conc	Area	Height				
1	Peak1	5.729	10.022	63088	7791				
2	Peak2	6.577	5	51884	5631				
3	Peak3	8.293	15.091	48187	4226				
4	Peak4	8.559	10.166	79647	7675				-
Totals			40.279	242806	25323	,			

関連項目

詳細メソッドオプションについて

Microsoft Excel にデータをエクスポートするには

データシステムは<u>ユーザープログラム</u> **ExcelExport.dll** を提供しています。 これを 使えばユーザーが所有している **Excel** のワークシートを開き、そのワークシート内で ユーザーのマクロを実行することができます。このマクロは、データシステムからエク スポートされたファイルを開き、その内容について操作するために書くことができます。 このプログラムを使ってセットアップするためには、以下の手順に従ってください。

1. メソッド メニューから、詳細 > データ エクスポートを選択します。

- 2. エクスポートを有効化を選択します。
- エクスポートしたいパラメータを指定するには左ボックス内にリストアップされている対象の各パラメータをダブルクリックします。選択されたパラメータは右側のボックス内に表示されます。
- **4. フィールドの区切り**をタブに、エクスポート先のパス 正しいパスに設定しま す。
- 5. 詳細メソッドオプション ボックスから ファイル タブを選択します。
- 解析後 ボックスをクリックしてから ExcelExport.dll プログラムを選択し ます。(これは EZChrom Elite クライアント/サーバーのプログラムフォルダ 内にあります。
- 7. 追加パラメータ フィールドで以下の項目を指定します(指定した順番で)。
 - エクスポートされるデータのパス
 - パラメータ名-追加パラメータを指定する際に繰り返し使用されることが あります。
 - Excel マクロファイル
 - Excel マクロ名

すべてのパラメータはクォーテーションマークで囲み、スペースまたはコ ンマあるいはその両方で区切らなければなりません。例えば c:\datasystem\export ディレクトリから[面積]および[面積%]を出力し、 c:\excel\xlstart\personal .xls スプレッドシートから[FormatData]マ クロを実行する場合、以下の通りに入力します。 "c:\datasystem\export","Area","AreaPerc","c:\excel\xlstart\perso nal.xls","FormatData"

注: パラメータ名はエクスポートタブに表示されている名前と同一ではあ りません。 使用される名前は、エクスポートされるパラメータファイル の拡張子に用いられる名前と同じでなければなりません。例えば、「面 積%」は「AreaPerc」となります。これらファイル拡張子のリストにつ いては、下記の一覧データエクスポートに使用されるファイル拡張子を参 照してください。

- 8. データは Excel 内で以下のような構成になっています。
 - 各パラメータは別の Excel ワークブックにあります。
 - パラメータの各チャンネルはワークブックの別のシートにあります。

データエクスポートに使用されるファイル拡張子

ソフトウェアは、エクスポートされたデータの保存に使用されるファイルに自動的に名 前を付けます。各データのエクスポートオプションは以下のような特定のファイル名の 付け方に従います。

ピークおよびグループのパラメータエクスポートファイル

ファイル名=[メソッド名]-[チャンネル名]-[省略パラメータ名]

例:

メソッド名 - multi level.met

データファイル名 - calib std 3.dat

チャンネル - TCD

カスタムエクスポートオプション カスタムエクスポートファイル名

(メソッドファイル名に拡張子を付けて使用します)

Retention Time multi level-tcd.apex

面積 multi level-tcd.area

面積% multi level-tcd.areaperc

高さ multi level-tcd.height

高さ% multi level-tcd.heightperc

ESTD multi level-tcd.estdconc

ISTD multi level-tcd.istdconc

NORM multi level-tcd.normconc

ピーク幅 multi level-tcd.width

相対リテンションタイム multi level-tcd.relativert

理論段数 multi level-tcd.TPlates

理論段高さ(m) multi level-tcd.TPlatesPerMeter

キャパシティファクター multi level-tcd.capacity

分離度 multi level-tcd.resolution

シンメトリー係数 multi level-tcd.asymmetry

カスタムパラメータ multi level-tcd.custom parameter1..x

注:グループのエクスポートファイルの場合は、上記のファイル名の付け方に従います が、 各ファイルが "G" という文字で始まる点のみが異なります。上の例では、NORM に対するグループエクスポートファイルは Gmulti level-tcd.normconc となります。

標準レポートのエクスポートファイル

ファイル名=[データファイル名][データファイル拡張子]-[チャンネル名].[データタイプ]

例:

メソッド名 - multi level.met

データファイル名 - calib std 3.dat

チャンネル - TCD

標準エクスポート選択肢 標準エクスポートファイル名

(ファイル名の後に拡張子を付けて使用します)

面積% calib std 3 dat-tcd.are

ESTD calib std 3 dat-tcd.ESD

ISTD calib std 3 dat-tcd.ISD

NORM calib std 3 dat-tcd.NOM

パフォーマンス calib std 3 dat-tcd.PER

キャリブレーション calib std 3 dat-tcd.CAL

FRC レポート calib std 3 dat-tcd.FRC

サンプル情報レポート calib std 3 dat-tcd.SPL

クロマトグラムエクスポート

AIA calib std 3 dat-tcd.CDF

ASCII calib std 3.dat.ASC

エクスポートしたクロマトグラムファイルのフォーマットの例を以下に示します。ファ イルの最後にある番号は、クロマトグラムからの個々のデータポイントであり、最初が チャンネル1で、その他からのチャンネルが順に続きます。

Sample ID: Tutor.001						
Vial Number : -1000						
Data File: C:\System\Cl	hrom\Tutor.	dat				
Method: C:\System\Me	thods\Tutor	.met				
UserName: J.W.						
Acquisition Date and Time: Dec. 19, 1991 10:19:43						
Sampling Rate :	0.559		1	1	1 Hz	
Total Data Points :	2648		0	0	0 Pts.	
X Axis Title :	Minutes	Minutes	Minutes	Minutes		
Y Axis Title :	Volts	Volts	Volts	Volts		
X Axis Multiplier :	0.016667		0	0	0	
Y Axis Multiplier :	0.000001		0	0	0	
103						
108						
124						
115						
110						
82						

データシステムにインポートする ASCII データファイルのフォーマットは、上記の例 に従わなければなりません。もし、複数チャンネルからのデータがある場合は、それら が、データ列に付け加えられます。この例ではチャンネル B のデータポイントは、 2649 から始まります。

グラフィックのエクスポート

メソッドの**グラフィックエクスポート**機能は、そのメソッドを使って解析するたびに、 グラフィックを Windows メタファイル(.WMF)フォーマットでエクスポートします。

グラフィックエクスポート機能を有効にする手順は以下の通りです。

- 1. メソッド メニューから、詳細 > グラフィックエクスポートを選択します。
- スプレッドシートで、エクスポートボタンをクリックし、エクスポートする ファイル名を入力します。
- エクスポートされるグラフィックが表示されます。 グラフィックを変更する には、ウィンドウ上で右クリックします。 すべての標準グラフィックパラメ ータが有効になります。
- **4. エクスポートファイルのパス**を選択します。エクスポートしたグラフィックフ ァイルは + "_" + + "wmf" となります。

関連項目

詳細メソッドオプションについて

カスタムパラメータ

カスタムパラメータは、次のいずれかの方法で定義されたユーザー定義の値です。

- Windows 実行プログラムまたは VB スクリプトによる計算結果
- シーケンスに定義されたパラメータ

カスタムパラメータは、カスタムレポート内に報告したり、またエクスポートしたり、 クロマトグラムのピーク情報にしたり(ピークごとのカスタムパラメータに限ります) することもできます。

メソッドのカスタムパラメータを設定するには。

- 1. メソッド メニューから、詳細 > カスタムパラメータを選択します。
- カスタムパラメータを定義するには、結果報告のために使用したいタイトルを パラメータ名フィールドに入力します。
- 次に、カーソルを タイプ フィールドに移動してクリックします。すると、シ ステム全体 か ピークごと を選択できます。
 - システム全体パラメータは、クロマトグラム全体に対して一度だけ計算 されるものです。システム全体パラメータはカスタムレポートに表示する ことができ、レポートの一番下に印刷されます。例えば、BTU 計算は全 体パラメータの一例です。この場合プログラムは、各ピークにその BTU 含有量を掛け、算出された BTU 値を合計して全混合物中の BTU 含有量 とします。
 - ピークごとパラメータは、クロマトグラム中の各ピークごとに1回ずつ 計算されるものです。ピークごとパラメータは、ピーク番号または濃度が 表示するのと同じようにカスタムレポートの列に表示することができます。

ピークごとパラメータは、クロマトグラム上にピーク情報として付加する こともできます。このパラメータの一例として、HETP (理論段高さ) が あります。HETP を算出するためにカスタムパラメータプログラムは、カ ラムの長さ (cm 単位) を取得し、システムによって既に算出されている、 成分に対する理論段数 (N) で割ります。

注:カスタムパラメータがシーケンステーブルのパラメータとして設定され た場合、タイプ (システム全体/ピークごと) は、シーケンスカスタムパラメ ータダイアログを再度オープンするまで更新されません。

- パラメータ計算によってどのタイプのパラメータを返すかを選択するには、戻り値ドロップダウンメニューから数値または文字列を選択します。
- 5. ソース フィールドをクリックします。パラメータソース ダイアログボックス で次のオプションから選択します。

• RelArea Perc

- スクリプトプロセッサ これを選択して 追加パラメータフィールドをダ ブルクリックすると、カスタムパラメータスクリプトが開かれます。
- シーケンステーブルパラメータ シーケンスの一部をカスタムパラメー タを定義したい場合、このオプションを選択します。
- カスタムパラメータアプリケーションに必要な場合は、追加パラメータフィールドを使用します。
- カスタムパラメータをメソッドに定義すると、ソフトウェアはクロマトグラム 解析のたびに指定されたカスタムパラメータプログラムの実行を試みます。

注:シーケンススプレッドシートにシーケンスカスタムパラメータを入力するに は、メソッドカスタムパラメータのソースがシーケンステーブルからになってお り、そのメソッドが保存されていなければなりません。

使用可能なカスタムパラメータ

<u>6-シグマ ノ</u> イズテスト	<u>ベースライン</u> <u>チェック計算</u> <u>方法</u>	<u>ヨーロッパ薬</u> 局方のシグナ ル / ノイズ	<u>ノイズテスト</u> <u>(rms ノイ</u> <u>ズ)</u>	<u>Savitsky-</u> <u>Golay スム</u> <u>ージング</u>
<u>6-シグマ</u> <u>S/N</u>	<u>キャリブレー</u> ション重量	絶対検量線	<u>修正%レポー</u> <u>トの計算式</u>	スケール
<u>面積 % レポ</u> <u>ートの計算式</u>	<u>キャリブレー</u> ションの平均 <u>計算</u>	<u>絶対検量線レ</u> <u>ポートの計算</u> <u>式</u>	<u>ピークの中心</u>	<u>シグナルの</u> 変換
<u>面積/濃度レ</u> <u>スポンスファ</u> クターの設定	<u>検量線の計算</u>	<u>内部標準物質</u> <u>量</u>	<u>ピーク谷比</u>	<u>USP(米国</u> <u>薬局方)の</u> <u>計算方法</u>
<u>面積/高さ法</u> <u>の計算方法</u>	<u>検量線</u>	<u>内部標準レポ</u> <u>ートの計算式</u>	<u>カラム性能計</u> <u>算</u>	<u>USP (米国</u> <u>薬局方) の</u> <u>シグナル/</u> <u>ノイズ</u>
<u>ASTM LOD</u> <u>(検出限界)</u> <u>計算</u>	<u>キャパシティ</u> ファクタ (k')	<u>内部標準法</u> <u>vs 絶対検量</u> <u>線法とノーマ</u> <u>ライズ</u>	<u>理論段数/m</u>	<u>重み付けとス</u> <u>ケール</u>
<u>ASTM LOQ</u> (定量限界)	三次曲線近似	内部標準	折れ線近似	<u>重み付け</u> <u>(LSQ</u> 重み付
<u>け)</u>

<u>ASTM ノイ</u> <u>ズ計算</u>	<u>DAB(ドイツ</u> 薬局方)の計 算方法	<u>日本薬局方</u> (JP)計算法	二次曲線近似
<mark>ASTM S/N</mark> 比	<u>キャリブレー</u> <u>ションされて</u> いないピーク <u>の濃度測定</u>	直線検量線	<u>相対リテンシ</u> <u>ョンタイム</u> (選択性)
自動平均計算	<u>ドリフトテス</u> <u>ト</u>	<u>行列演算</u>	<u>内部標準物質</u> <u>の濃度を「ゼ</u> <u>ロ」としてレ ポート作成</u>
<u>平均 RF</u>	<u>EMG(指数修</u> <u>正ガウス分</u> <u>布)計算法</u>	<u>修正最小二乗</u> <u>法計算</u>	<u>レスポンスフ</u> <u>ァクターの設</u> <u>定</u>

関連項目

詳細メソッドオプションについて

カスタムパラメータ公式

カラム/パフォーマンス パラメータ

カラム性能タブでは、理論段数、キャパシティーファクター、分離能、シンメトリー係 数などのシステム性能パラメータの自動計算を設定することができます。 列性能計算 を設定するには、

1. メソッド メニューから、詳細 > カラム/パフォーンマンスを選択します。

- 2. このチャンネルのカラム性能値を計算する ボックスをクリックします。そして、この計算に必要な情報をフィールドに入力します。
- カラム性能タブへの入力が完了すると、システムは、各解析後、性能パラメー タの計算を行います。これらのパラメータは、エクスポート、クロマトグラム 上に表示、およびカスタムレポートに印刷することができます。

非保持時間(分)	このカラムに関する保持されないピークの溶出 時間を入力します。
カラム長	メートルまたはセンチメートル単位でカラムの 長さを入力します。
粒子径 (um)	使用するカラムの粒子径をミクロン単位で入力 します (適用可能な場合) 。
カラムシリアル番号	カラムのシリアル番号を入力します(適用可能 な場合)。この情報はデータとともに保存さ れ、レポート作成時に利用可能です。
カラム使用開始日時	カラムを機器に設置した日時を入力します(必要に応じて)。この情報はデータとともに保存され、レポート作成時に利用可能です。
カラム説明	カラムの説明を入力します(必要に応じて)。この情報はデータとともに保存され、レポート作

メソッドについて

成時に利用可能です。

1つまたはそれ以上の計算メソッドを選択しま

す。USP (United States Pharmacopeia)、 EMG (Exponential Modified Gaussian)、 DAB (Geman phamacopeia)/BP (British Phamacopeia)/EP (European Phamacopeia)/ASTM、AOH、および JP (Japanese Phamacopeia)といった計算方法 が選択できます。

パラメータを計算する

このチャンネルのパフォーマンス

関連項目

詳細メソッドオプションについて

ユーザープログラムとベースラインファイルの選択

メソッドと連携するプログラムファイルを指定する方法:

1. メソッド メニューから、詳細 > ファイルを選択します。

2. 以下のフィールドを入力してください。

この項では、実行するユーザープログラムを設計しま す。

- 各 分析前
- クロマトグラムの 解析前
- **クロマトグラムの**解析後

ユーザープログラム

エクスポート後

ユーザプログラム名を入力するか、またはドロップダウ ンリストから選択します。ユーザープログラムの書き方 については、このマニュアルの付録 <u>ユーザープログラム</u> で詳しく説明します。(注:(ファイルには UNC パス名が 含まれていることに注意してください。

各測定後に、保存されているベースラインの引き算をデ ータシステムに自動的に行わせたい場合は、ベースライ ンファイル ボックスを選択します。ベースラインファイ ル名を指定してから、ベースラインファイルを差し引き たいチャンネルをチェックします。引き算が行われた後 で、クロマトグラムが解析されます。(注:(ファイルには

ベースラインファイル

UNC パス名が含まれていることに注意してください。

関連項目

詳細メソッドオプションについて

ユーザープログラム

詳細メソッドレポート

メソッドがデータの解析に使用される際に印刷および/またはエクスポートに用いられ るレポートを複数種類指定するには、メソッド > 詳細 > 詳細レポートを選択します。 選択可能なフィールドは以下の通りです。

ÉN RÚ	このメソッドでデータ解析するときに指定したレポートを
Hand	印刷したい場合に選択します。

このメソッドでデータ解析するときに指定したレポートを エクスポート エクスポートしたい場合に選択します。これは、タブによ

り範囲設定したエクスポートのみとなります。

- レポートテンプレートレポートを作成する時に使用するレポートテンプレートフ名アイル名を入力または選択します。
- **エクスポートパス** アイルのパスを入力または選択します。

リストに表示されているタイプの中からファイルの名前を

エクスポート名 選択します。エクスポートファイル名は、選択された識別 子を使用して作成されます。

関連項目

詳細メソッドオプションについて

サンプルプレップ

オートサンプラのサンプルプレップ(注入プログラム)は連番付けされた行で構成され ており、それぞれは注入が順番に行う動作を定めています。

お使いのオートサンプラがサンプルプレッププログラムをサポートしている場合、サン プルプレップメニューがメニューバーに表示されています。このメニューからオート サンプラ前処理プログラムを作成/編集することができ、前処理プログラムのプロパテ ィ(例えば前処理プログラム用のメモや履歴など)の設定が可能です。

既存のサンプルプレップ ファイルを開く方法:

- 機器ウィンドウメニューバーからファイル > 開く > サンプルプレップをク リックします。ダイアログが表示されますので、現在の機器のために開く前処 理ファイルを選択してください。
- 2. 開くファイルを選択します。あるいは、下部にある、ファイル検索条件を設定 するボックスを利用して条件に合うファイルを選択します。

サンプルプレップ ファイルの監査証跡を有効にする方法:

- 1. サンプルプレップ メニューからプロパティ > 監査証跡をクリックします。
- 監査証跡機能を有効にするには 監査証跡を 使用するボックスを選択します。 操作を続けて行くと警告メッセージが表示され、一度有効にした監査証跡は無 効にすることができない旨を通知されます。
 - 変更のたびに理由を入力する このオプションを選択すると、前処理ファイルを変更するたびにその理由を入力するよう求められます。
 - メソッド保存時に理由を入力する このオプションを選択すると、サン プルプレップファイルの保存時に変更の理由をそれぞれ入力するよう求め られます。
 - 理由を入力しない-このオプションを選択すると、変更は記録されますが 変更理由の入力は要求されません。

サンプルプレップ ファイルの説明を入力する方法:

- 1. サンプルプレップ メニューからプロパティ>説明をクリックします。
- サンプルプレップファイルの説明を入力します。メモはファイルに保存され、ファイルを開くあるいは検索する際に見ることができます。

サンプルプレップのテンプレートを開く方法:

- 1. メニューから ファイル > 新規作成を選択します。
- 2. 新規ファイルテンプレートダイアログボックスから、サンプルプレップタ ブを選択します。
- 3. 開きたいファイルを選択します。
- 4. **OK** をクリックします。

ラボモニターソフトウェアの起動

サポートした機器のラボ モニター ソフトウェアを起動するには、コントロール メニュ ーの **ラボ モニター ソフトウェアの起動**をクリックします。これは **7890GC** の実行時 にのみ表示されます。

システムスータビリティ

システムスータビリティについて

EZChrom クライアント/サーバーのシステムスータビリティ試験は、クロマトグラフ システムが特定な分析に適用するかどうかを決定するために医薬産業より考案されまし た。現在は試験室でよく使用され、分析結果の質を重要視しています。システムスータ ビリティテスト方法確認に関連して使用されることが多く、実験室品質と結果の再現性 に関する完全な画像を提供します。 EZChrom クライアント/サーバーのシステムスータビリティ試験は、分析しようとす る測定物質を含むサンプルの混合物を分析します。また、クロマトグラフィー、及び測 定物質を分離するカラムの能力を記述する様々なパラメータについて研究していま す。

EZChrom クライアント/サーバーのシステムスータビリティ試験は、ライセンスオプ ションであり、EZChrom クライアント/サーバークロマトグラフィーデータシステム の機能を拡張して、 効率、キャパシティ、分離度および再現性などの実験的変数のシ ステム適合性の計算を自動化することができます。パッケージには以下を含む計算メソ ッドの4つの選択肢が含まれています。

- USP(米国薬局方)
- EMG (指数修正ガウス分布)
- DAB (ドイツ薬局方) DAB の計算式は、BP(英国薬局方)、EP(ヨーロッパ薬 局方)および ASTM とも呼ばれます。
- AOH (面積/高さ)
- JP (日本薬局方)

関連項目

システムスータビリティの設定

システムスータビリティ計算方法の選択

システムスータビリティ試験の実行

シーケンスウィザード - レポート

システムスータビリティの設定

システムスータビリティ設定を使用して、興味のあるピークに必要な受け入れの範囲を 入力します。このコマンドはデータシステムが <u>システムスータビリティの計算</u>を作成 する前に実行されなければなりません。

システムスータビリティ計算を設定する方法:

- システムスータビリティを有効にするには、コントロールパネルの機器から機器の設定>オプション>システムスータビリティを選択します。機器を起動します。
- 2. EZChrom のメソッド メニューから、システムスータビリティを選択しま す。
- **3. 成分名** リスト内で、計算に使用したい最初のピークをハイライトして選択します。
- 4. 右側のスプレッドシートで、パラメータ 項目内の最初のフィールドをクリッ クします。有効なパラメータをリストしたドロップダウンメニューが表示され ます(下記<u>テーブル</u>を参照)。リストからパラメータを選択します。どのピー クについてもシステムスータビリティ試験を行いたくない場合は、パラメータ フィールドを空白のままにします。同様に、試験基準のいずれか(例え ば、%RSD)を行いたくなければ、それを空白のままにします。パラメータの 中には、計算方法を選択できるものもあります。これらのパラメータにより、 計算方法が括弧内のパラメータの後に表示されるようになります。(例えば、 理論段高さ/m(JP)は日本薬局方による計算方法を使って計算される理論段高

さ/m を示します。この計算の詳細については<u>カスタムパラメータ公式</u>を参照 してください。

- 5. 選択したパラメータのそれぞれについて、最小値(Min)、最大値(Max)およ び最大許容%相対標準偏差(%RSD)を入力します。
- 6. クロマトグラム全体をテストするには、テストとラベル付けされた列のスプレッドシート下部をクリックしてください。ドロップダウンリストからノイズ計算の1つを選択します。テストの開始と終了の時間を入力して閾値を許容可能限度として設定します。クロマトグラムの開始から終了時間までの部分について RMS ノイズ値が計算され、値(しきい値)と比較されて試験結果が合格か不合格を判定します。ただし、ノイズテストのために入力する時間は、クロマトグラムのピークが溶出しないクロマトグラムのベースライン部分を設定してください。
- 7. ドリフトテストを実行するには、テストとラベル付けされた列のスプレッドシート下部をクリックしてください。ドリフト(ドリフト/分)をドロップダウンリストから選択します。このボックスを選択した場合は、テストの開始時間および 終了時間 および許容限度を決定するための値(単位 uV)を入力します。
- システムスータビリティ設定を完了したらボックスを閉じ、システムスータビ リティ計算を設定します。

スータビリティパラメータ

 システムスータビリティ試験の
 これは混合物中で、ある特定の成分を他の成分か

 分解能
 ら分離するカラムの能力を示します。分離度

 (Rs)が 1.5 よりも大きければ、2 つのピークは分

離したものと見なされます。

同一試料を複数回注入することによりクロマトグ ラフが再現性のある結果を出しているかどうかを 判定できます。一般に意味のある結果を得るため に十分なデータを得るためには、通常、5回また は6回の再現性試料が必要となります。再現性 は、ピーク面積、高さまたは濃度のようなパラメ ータの%相対標準偏差(%RSD)の検討により判 定されます。

シンメトリー係数を定量的に示す値は重要で、微 量成分を扱う場合は特に重要です。また、シンメ シンメトリー係数(ピーク対称 トリー係数は、カラムの寿命期間中に変化するこ とがあるので、このデータを継続的にチェックす ることが重要です。

理論段数を計算することは、カラムの効率を知る システムスータビリティ試験の 上で重要です。クロマトグラフ分析者の多くは、 理論段数 カラムの交換時期を示す指標として理論段数をモ ニタしています。

システムスータビリティ試験の ノイズとドリフト

微量成分の分析で特に重要なのは使用しているク ロマトグラフのノイズとドリフトであり、検出お よび定量限界を示すことです。ピークごとスペク トル計算には6シグマとASTM 信号対雑音の

システムスータビリティ試験の 再現性

性、テーリングファクタ)

計算があります。クロマトグラムの指定した項で 実行されるノイズテストとドリフトテストには、 rms ノイズ、ドリフト、ASTM ノイズショート (スケールなし)、ASTM ノイズショート (スケー ルあり)、ASTM ノイズロング (スケールあり)、 および <u>6 シグマノイズ</u>があります。

システムスータビリティの計算

システムスータビリティ試験の計算を行うためには、使用しているクロマトグラフィー カラムに関する情報が必要です。このコマンドは <u>システムスータビリティの設定</u>の後 に実行してください。

計算メソッドを選択する方法:

- 1. メソッド メニューから、詳細 > カラム/パフォーマンスを選択します。
- 2. カラム情報の値を入力します。これは性能オプションの計算に必要です。
- 3. 計算方法の次のオプションの中から、性能値の計算方法を選択します。
 - USP(米国薬局方)
 - EMG (指数修正ガウス分布)
 - DAB (ドイツ薬局方) DAB の計算式は、BP(英国薬局方)、EP(ヨーロッ パ薬局方)および ASTM とも呼ばれます。

- AOH (面積/高さ)
- JP (日本薬局方)
- このチャンネルのカラム性能値を計算する を選択してメソッドのスータビリ ティの計算を有効にします。
- 入力が終わったらダイアログボックスを閉じてパラメータを取得し システム スータビリティテストの実行コマンドを実行します。

関連項目

カラム/性能パラメータ

システムスータビリティテストの実行とレポートの印刷

システムスータビリティテストを実行してシーケンスを作成するか、または既存のシー ケンスを変更してラボのニーズと **SOP** のニーズに従って実行する複数のシステムを含 めます。このコマンドは システムスータビリティの設定 と システムスータビリティの 計算 ダイアログの完了後に実行してください。

例えば、USP 法に従って、シーケンスの初めに試験用標準試料を5回繰返して測定します。これらはシーケンス内ではシステムスータビリティ試験として設定されます。シ ーケンスの終わりに適合性計算が行われ、EZChrom Elite クライアント/サーバーがシ ステムスータビリティ試験レポートを作成します。

1. シーケンススプレッドシートを開くにはシーケンス > 編集を選択します。

- スータビリティ設定の最初のサンプルにある分析タイプを設定してシステム スータビリティ開始を実行します。以降の適合性標準試料については、システムスータビリティ標準と設定し、適合性試験セット内の最後の試料はシステム スータビリティテスト終了と設定してください。指定した試料に対して、複数の分析タイプを選択することができます。
- シーケンスを実行すると適合性標準試料の最後にシステムスータビリティ試験 レポートが作成されます。スータビリティレポートを画面上で確認するにはレ ポート>表示>シーケンスレポートをクリックします。
- システムスータビリティ試験レポートを印刷するには、レポート >印刷> シ ーケンスレポートコマンドをクリックしてから、システムスータビリティレ ポート を選択します。シーケンス終了後、レポートを自動的に印刷させるに はシーケンスのプロパティ ダイアログの中でシーケンスレポート印刷 オプシ ョンを選択しておきます。シーケンスの処理を選択します。

System Suitability Report

Page 1 of 1 (1)

Sequence :	\\nas\qa\Users\Elite Enterprises\Elite32\Projects\Amy\Sequence\TP005.002\syssuitp.seq
User :	Amy T. Xu (qa3\axtech)
Printed :	9/6/2006 10:44:32 AM

Sample ID	Data Filename
PNA-STDS	\\nas\QA\Users\Elite Enterprises\Elite32\Projects\Amy\Data\TP005.002\multi calibration level 1.dat
PNA-STDS	\\nas\QA\Users\Elite Enterprises\Elite32\Projects\Amy\Data\TP005.002\multi calibration level 2.dat
PNA-STDS	\\nas\QA\Users\Elite Enterprises\Elite32\Projects\Amy\Data\TP005.002\multi calibration level 3.dat

System is Suitable

Channel A	Compound	Parameter	Min	Max	%RSD		
	Peak 1	area	0	400000	70		
Sample ID	Peak 2 Compound	height Parameter	0 Average	50000 Low	70 High	%RSD	Status
PNA-STDS		63056					Passed
PNA-STDS		171813					Passed
PNA-STDS		299360					Passed
	Peak 2	height	15943	5631	26843	66.600	
PNA-STDS		5631					Passed
PNA-STDS		15356					Passed
PNA-STDS		26843					Passed

インテグレーションについて

積分について

インテグレーションテーブルは、 クロマトグラムに含まれるいくつかのピークまたは 領域のインテグレーションをカスタマイズするために使用します。

メソッドにインテグレーションタイムイベントを追加するには、次の2つの方法があ ります。そのイベントをインテグレーションタイムイベントテーブルに手動で設定を追 加する方法と、クロマトグラム上をクリックしてグラフィカルに設定を行う方法です。 2 つのインテグレーションイベントがそれぞれの実行に必要です。ピーク幅とスレッショルド。これらのイベントは、ピークの開始点、終了点および頂点を検出し、ピークを ノイズから判別するのに使用されます。システムはデフォルト値として、[ピーク幅]は 0.2、[スレッショルド]は 50 を使用します。

インテグレーションタイムイベントを追加する前に、得られたクロマトグラムが現在 のメソッドにより解析されていることを確認してください。確認するには、クロマトグ ラムでベースラインとピークの開始点/停止点のチェックマークを確認します。あるい は、ツールバーの**解析** ボタンをクリックします。

関連項目

<u>クロマトグラムウィンドウについて</u>

インテグレーションテーブルについて

インテグレーションイベントテーブル

マニュアルインテグレーションテーブル

ベースラインコードの説明

グラフィカルプログラミング

インテグレーションテーブルについて

インテグレーションタイムイベントが保存されているテーブルは2つあります。

- メソッドのインテグレーションイベントテーブルは、そのメソッドでインテ グレーションしたすべてのデータに使用されます。
- マニュアルインテグレーションテーブル はデータファイルと一緒に保存され、 データファイルの再積分にのみ使用されます。

ユーザーがインテグレーションタイムイベントを<u>グラフィカルに</u>追加する場合、追加す る前にダイアログボックスが表示されます。ここで、そのイベントをどちらのテーブル に追加するかを選択します。インテグレーションイベントに応じてデフォルトのテーブ ルが選択されています。

- イベントを<u>インテグレーションイベントテーブル</u>に追加するには、メソッド ヘイベントを追加(すべてのデータ)>テーブルへ追加を選択します。メソッドが保存されると、そのメソッドを使って統合されたすべてのデータにイベントが適用されます。
- イベントを <u>マニュアルインテグレーションテーブル</u>に追加するには、このデ
 ータファイルのみイベントを追加 > テーブルへ追加を選択します。イベント
 はこのデータファイルにのみ適用されます。

インテグレーションイベントテーブル

インテグレーションイベントテーブルには、現在のメソッドチャンネルに対するすべて のインテグレーションタイムイベントが含まれています。使用可能な積分タイムイベン トはすべて、<u>グラフィカルプログラミング</u>を使ってメソッドに追加することができます。 インテグレーションテーブルの各行は、メソッド中のインテグレーションイベントを表 します。

インテグレーションテーブルにインテグレーションタイムイベントを追加して保存する と、その後、このメソッドを使用して解析されるすべての試料に対して適用されます。 (メソッドが保存された場合。)これは、試料内で常に生じるピークのインテグレーショ ンを修正するために通常使用されるイベントに対しては、これがデフォルトの選択とな ります。

インテグレーションイベントテーブルを表示する方法:

3つの方法でテーブルを表示することができます。

- ツールバーからインテグレーションイベントボタン かを選択します。
- **メソッド** メニューから、**インテグレーションイベント**を選択します。
- ナビゲーションペインでメソッド>メソッド/インテグレーションイベント
 を選択します。

イベントを手動で追加する方法:

- マニュアルインテグレーションテーブルの新しい行で、イベントフィールドのドロップダウンリストから選択します。
- 2. そのイベントの開始時間と終了時間と、必要に応じて「値」を入力します。
- あるイベントの効果を解析結果から消去するには、イベントをテーブルに残したまま、そのイベントの左側のチェックマークをクリックします。これにより、赤いチェックマークの付いたイベントのみが、その後の解析に影響します。

テーブルからイベントを完全に削除する方法:

1. イベントの行番号をクリックし、キーボードの削除 キーを押します。

テーブルからイベントを一時的に削除する方法:

イベントに隣接して選択されているチェックマークを外してください。チェックマーク が表示されていない場合、そのイベントはそのインテグレーションには適用されません。

コンテキストメニューを表示する方法:

テーブル内の任意の場所で右クリックすると、スプレッドシート内のセルおよび行を操 作するためのコマンドメニューが表示されます。

- 切り取り、コピー、貼り付け コマンドは、セルの内容を切り取り、コピー、貼り付けします。
- **下へコピー** コマンドは、選択した行を次の行にコピーします。
- **貼り付け挿入** コマンドは、その位置に貼り付けると同時に行を挿入する ために使用します。
- **行挿入** コマンドは、カーソル位置に空白行を挿入します。
- 削除 コマンドは、カーソルが置かれたセル、あるいは選択された行の内 容を削除します。
- **すべて削除** コマンドは、スプレッドシートのすべての内容を削除します。

マニュアルインテグレーションテーブル

マニュアルインテグレーションは、特定のクロマトグラムに対してのみ必要とされるイ ンテグレーションの調整をいいます。

<u>グラフィカルプログラミング</u>を使ってグラフィカルに行われた手動のインテグレーション調整は、マニュアルインテグレーションテーブルに記録されます。また、イベント ドロップダウンリストから変更したい積分を選択し、必要な場合は開始と停止時間お よび値を入力して、手動の変更をテーブルに入力することもできます。

インテグレーションに関するこれらの変更はメソッドの一部とはならず、個々のクロマ トグラムにのみ適用されてデータファイルにのみ保存されます。マニュアルインテグレ ーションは、そのクロマトグラムのインテグレーションを後で再現できるように、デー タファイルに保存されます。

マニュアルインテグレーションテーブルには、現在のデータファイルに対するすべての タイムイベントが含まれています。マニュアルインテグレーションテーブルに積分イベ ントを追加した時、適用されるのはこのデータに限られます。このように、マニュアル インテグレーション修正は1度限りのインテグレーションイベントです。これは、マ ニュアルベースラインの変更のようなインテグレーションに対する1度限りの修正の ため、通常使用するイベントの既定の選択となります。これらのイベントを使用した結 果も、データファイルに保存されます。これにより、単独の測定にのみ必要なマニュア ルインテグレーションイベントを使用して得られた結果を後で再現することができます。

マニュアルインテグレーションテーブルを表示する方法:

3つの方法でテーブルを表示することができます。

- ツールバーから **MIF テーブル** ボタン **が**を選択します。
- **データ** メニューから、マニュアルインテグレーションを選択します。
- ナビゲーションペインでメソッド>データ/マニュアルインテグレーション
 を選択します。

イベントを手動で追加する方法:

- マニュアルインテグレーションテーブルの新しい行で、イベントフィールドのドロップダウンリストから選択します。
- 2. そのイベントの開始時間と終了時間と、必要に応じて[値]を入力します。

あるイベントの効果を解析結果から消去するには、イベントをテーブルに残したまま、そのイベントの左側のチェックマークをクリックします。これにより、赤いチェックマークの付いたイベントのみが、その後の解析に影響します。

テーブルからイベントを完全に削除する方法:

1. イベントの行番号をクリックし、キーボードの**削除**キーを押します。

テーブルからイベントを一時的に削除する方法:

イベントに隣接して選択されているチェックマークを外してください。チェックマーク が表示されていない場合、そのイベントはそのインテグレーションには適用されません。

コンテキストメニューを表示する方法:

テーブル内の任意の場所で右クリックすると、スプレッドシート内のセルおよび行を操 作するためのコマンドメニューが表示されます。

- 切り取り、コピー、貼り付け コマンドは、セルの内容を切り取り、コピー、
 貼り付けします。
- **下へコピー** コマンドは、選択した行を次の行にコピーします。
- **貼り付け挿入** コマンドは、その位置に貼り付けると同時に行を挿入するため に使用します。
- **行挿入** コマンドは、カーソル位置に空白行を挿入します。
- 削除 コマンドは、カーソルが置かれたセル、あるいは選択された行の内容を 削除します。
- **すべて削除** コマンドは、スプレッドシートのすべての内容を削除します。

ベースラインコードの説明

ベースラインコードは、カスタムレポートに含めることも、クロマトグラムのピーク情報として付加することもできます。ベースラインコードは2つの文字からなります。 最初の文字はピーク開始点でのベースラインタイプを表し、2番目の文字はピーク終了 点でのベースラインタイプを表します。

コード	ベースラインタイプ
В	ベースライン
f	ピーク開始点/終了点の変更(ユーザー定義)
I	解析オフイベントによりピーク終了
Ν	ネガティブピーク開始
Ρ	ネガティブピーク終了
н	前方ベースライン水平処理
h	後方ベースライン水平処理

М	マニュアルベースラインまたはマニュアルピーク
---	------------------------

- m ベースラインの開始点/終了点の移動
- **S** 肩ピーク処理
- T テーリング処理またはリーディング処理
- V 谷
- **v** 谷の強制指定位置
- **x** ピークの垂直分割
- E クロマトグラムの終了点はピークの終了点が現れる前に確認されます。 ピークの終了点として使用されるクロマトグラムの終了点。
- R ベースラインリセット
- L 最下点ベースライン水平処理

グラフィカルプログラミング

グラフィカルプログラミングメニューでは、表示したクロマトグラムをクリックする とインテグレーションテーブルやピーク/グループテーブルを設定できます。これらの コマンドは、機器ウィンドウの下部にあるグラフィカルプログラミングツールバーから も利用できます。ここでは、例をあげて表示されたクロマトグラムの積分に対する各イ ンテグレーションタイムイベントの影響を示し、クロマトグラフィーメソッド内のイン テグレーションタイムイベントの使用法について説明します。

インテグレーション/グラフィカルプログラミングツールバーは機器ウィンドウ 下部に あり、グラフィカルイベントボタンがついています。 インテグレーションによるヘル プは、グラフィカルイベントボタンを選択した時にインテグレーションメッセージウィ ンドウに表示されるよう設定してください。

インテグレーションツールバーを表示する方法:

- 1. 表示 > 表示オプションを選択します。
- 2. ツールバーオプション下の インテグレーションを選択します。
- 3. ツールバーを表示する と ツールチップを選択します。

インテグレーションメッセージウィンドウを表示する方法:

- 1. 表示 > 表示オプションを選択します。
- 2. ツールバーオプション下の インテグレーションを選択します。
- 3. オプション下のグラフィカルプログラミングツールチップを表示を選択します。



グラフィカルプログラミングでは以下のコマンドが使用できます。

コマンド	アクション
1. <u>ピーク幅</u>	クロマトグラム上で選択した点のピーク幅をテ ーブルへ挿入します。
2. <u>スレッショルド</u>	クロマトグラム上で選択した点の検出感度をテ ーブルへ挿入します。
3. <u>肩ピーク処理</u>	クロマトグラム上で選択した点の肩ピーク処理 をテーブルへ挿入します。
4. <u>インテグレーションオフ</u>	クロマトグラム上で選択した点のインテグレー ションオフをテーブルへ挿入します。
5. <u>谷渡り処理</u>	検出されたベースラインに対して谷渡り処理を 設定します。
6. <u>ベースライン水平処理</u>	クロマトグラム上で選択した点に対してベース ライン水平処理を実行します。

- 7. 後方ベースライン水平処
 クロマトグラム上で選択した点に対して後方ベ

 理
 ースライン水平処理を実行します。
- <u>最下点ベースライン水平</u> クロマトグラム上で選択した点に対して最下点
 <u>処理</u> ベースライン水平処理を実行します。
- **9.** テーリング処理 テーリング処理を実行します。

10. <u>前方テーリング処理</u> 前方テーリング処理を実行します。

11. <u>最小ピーク面積</u> 定します。 検出されたピークに対して最小ピーク面積を設

12. <u>ネガティブピーク処理</u> 検出されたピークに対してネガティブピーク処 理を設定します。

13. ピーク終了検出を無効 ピーク終了検出を無効にします

14. 同定ピークの変更

同定されたピークの代わりに、別のピークをキ ャリブレーションされたピークとして設定しま す。

15. マニュアルベースライン ベースラインをマニュアル設定します。

16. <u>マニュアルピーク</u> ピークの開始点と終了点を手動で定義します。

17. ピークの垂直分割 ピークの垂直分割を実行します。

18. ピーク開始点変更 ピークの開始点を変更します。

19. ピーク終了点変更 ピークの終了点を変更します。

20. ベースラインの移動 ベースラインを手動で移動します。

- 21. ベースラインリセット ベースラインをリセットします。
- 22. 谷渡り処理ベースライン 谷渡りベースラインリセットを実行します。 リセット

23. エクスポーネントスキミ より大きいピークのテーリングエッジにある小 ング

さなピークを統合します。

24. 前方エクスポーネントス キミング

親ピークのリーディングエッジにある子ピーク にエクスポーネントベースラインを設定しま す。

25. リテンションタイムウィ ピークのリテンションタイムを調整します。 ンドウの調整

26. グループ範囲の調整 グループ範囲を調整します。

27. <u>シングルピーク設定</u>	ピークをピークテーブルへ追加します。
28. <u>ピーク定義</u>	複数のピークをピークテーブルへ追加します。
29. <u>グループ指定</u>	グループをグループテーブルへ追加します。
30. <u>サンプリング間隔</u>	クロマトグラムのサンプリング間隔を設定しま す。

ピーク幅

ピーク幅イベントは、インテグレーションアルゴリズムが適用される前にデータポイン トをまとめたり、あるいは平滑化の値を計算するために使用されます。 インテグレー ションは、1 つのピークのデータポイントが 20 点のときに最も良い結果が得られます。 オーバーサンプリング(例えばサンプリング周波数が高すぎる)の場合は、 ピーク幅 パ ラメータを使用してデータの平均値を取り、インテグレーションアルゴリズムがピーク 内に 20 点だけのデータを認識するようにします。 ピーク幅 の値をグラフィカルに設 定する場合、そのクロマトグラム中で最も幅の狭いピークに対して設定します。

頂点の前かピークの頂点の上に起こる限り、**ピーク幅** イベントは与えられたピークに 適用されます。 ピーク幅 パラメータは、オーバーサンプリングの補正にのみ使用されます。 アンダー サンプリングのデータ(サンプリング周波数が低すぎて、最も幅の狭いピーク中のポイ ント数が 20 点未満の場合)の補正には使用できません。

注: ほとんどの場合、クロマトグラム内で最も狭いピークから求めたピーク幅の初期値 を使用すれば、すべてのピークを正しくインテグレーションできます。 ただし、ピー ク幅が2倍になるたびに、新しい[ピーク幅]イベントを入力すべきです。

スレッショルド

このパラメータは一次微分であり、インテグレーションアルゴリズムでベースラインの ノイズおよびドリフトからピークの開始点および終了点を区別するために使用されます。 スレッショルドの値をグラフィカルに設定する場合は、ベースラインの一部を選択し ます。選択したベースライン部分で求められる一次微分の最大値に基づいて、スレッシ ョルドの推奨値が決定されます。

下の図は、ピークのピーク幅とスレッショルドの値がベースラインにどのような影響を 及ぼすかについて示した例です。



ピーク幅とスレッショルドの両方の値が不適切(大きすぎ、または小さすぎ)な場合、ピ ークが検出されない場合がありますので注意してください。

肩ピーク処理

このパラメータは、大きなピーク上の肩ピークを検出するために使用します。数値が大 きいほど肩ピークの感度が低下し、数値が小さいほど肩ピークに対する感度が高くなり ます。**肩ピーク処理**の値をグラフィカルに設定するときは、ベースラインの一部を選 択します。選択されたベースライン部分から求められる二次微分の最大値から、**肩ピー ク処理**の推奨値が決定されます。

- 1. 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、**肩ピーク処理** ボタ ンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、ベースラインセグメントの開始点と終了点を選択します。

- 3. 肩ピーク処理 ダイアログボックスから、メソッドへイベントを追加 (すべてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択します。
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
 - このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



肩ピーク処理の設定値が高すぎる



肩ピーク処理の設定値が適切

インテグレーションオフ

解析オフイベントは、指定した時間範囲で、クロマトグラムのインテグレーションを無 効にさせるために使用します。クロマトグラムの一部に不要な領域があり、その区間の ピークの解析結果レポートが必要ない場合に有効です。

- インテグレーションツールバーの機器ウィンドウ下部で、インテグレーション オフ ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- インテグレーションオフ ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加 加(すべてのデータ)またはこのデータファイルのみイベントを追加を選択 します。

- メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



デフォルトのインテグレーション



0分から5分までをインテグレーションオフしたインテグレーション

谷渡り処理

このイベントは、完全に分離されない(例えばベースラインまで戻らない)ピークの谷か ら谷を結ぶベースラインを引くために使用します。このイベントを使用しない場合、ベ ースラインはクロマトグラムがベースラインに戻る次のポイントに投影され、ベースラ インまで戻らないピークに対して垂直線が引かれます。

- 1. 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、谷渡り処理 ボタン を選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- 3. 谷渡り処理 ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加 (すべての データ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択します。
 - メソッドへイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベント
 は テーブルへ追加 ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブル

へ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってイン テグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。

- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



デフォルトのインテグレーション


谷渡り処理 を使用したインテグレーション

ベースライン水平処理

ベースライン水平処理イベントは、指定した時間範囲で、前方から水平なベースライン を引くために使用します。

- インテグレーションツールバーの機器ウィンドウ下部で、ベースライン水平処 理 ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- ベースライン水平処理 ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加 (すべてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択しま す。
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。

- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



ベースライン水平処理をしていないインテグレーション



1.8 から3.6 分までベースライン水平処理をしたインテグレーション

後方ベースライン水平処理

このイベントは、水平ベースラインをクロマトグラムの開始方向に向けるため用いられ ます。後方ベースライン水平処理はイベントが指定した回数で作成されます。

- インテグレーションツールバーの機器ウィンドウ下部で、後方ベースライン水 平処理 ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- 後方ベースライン水平処理 ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを 追加(すべてのデータ)またはこのデータファイルのみイベントを追加を選 択します。
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。

- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



デフォルトのインテグレーション



後方ベースライン水平処理を適用したインテグレーション

最下点ベースライン水平処理

このイベントは、クロマトグラムのベースライン開始位置が最下点であることを除いて は、ベースライン水平処理と同様です。このイベントのために入力した開始時間はソフ トウェアが検出した最下点となります。終了時間は ソフトウェアが最下点の検出を終 了した時間となります。

- インテグレーションツールバーの機器ウィンドウ下部で、最下点ベースライン 水平処理 ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- 最下点ベースライン水平処理 ダイアログボックスから、メソッドヘイベント を追加(すべてのデータ)またはこのデータファイルのみイベントを追加を 選択します。
 - メソッドへイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントは
 テーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブル

へ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってイン テグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。

- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



最下点ベースライン水平処理をしていないインテグレーション



最下点ベースライン水平処理をしたインテグレーション

タンジェントスキム

テーリング処理イベントは、大きいピークの終わりの方にある小さなピークのインテグ レーションを行うときに使用します。小さなピークのベースラインは、大きい方のピー クの谷からそのクロマトグラムに対して引かれた接線になります。

- 1. インテグレーションツールバーの機器ウィンドウ下部で、**タンジェントスキム** ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- タンジェントスキム ダイアログボックスから、メソッドへイベントを追加 (すべてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択しま す。

- メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。







タンジェントスキムをしたインテグレーション

フロントタンジェントスキム

フロントタンジェントスキムイベントは、大きなピークの立上がり部分にある小さなピ ークのインテグレーションを行うときに使用します。

- 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、フロントタンジェン
 トスキム ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- フロントタンジェントスキム ダイアログボックスから、メソッドヘイベント を追加(すべてのデータ)またはこのデータファイルのみイベントを追加を 選択します。
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。

- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



タンジェントスキムをしないインテグレーション



タンジェントスキムをしたインテグレーション

最小面積

このイベントは、ピーク検出するための最小面積値を設定します。ここで設定した値よ りも面積値の小さいピークに対しては、インテグレーションおよびピークとしての解析 結果のレポート作成は行われません。このイベントは、レポートからノイズや不純物ピ ークを排除するのに有効です。

- 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、最小ピーク面積 ボ タンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- 3. 最小面積 ダイアログボックスから、メソッドへイベントを追加 (すべてのデ ータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択します。
 - メソッドへイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントは テーブルへ追加 ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブル

へ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってイン テグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。

- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



最小面積イベントを使用しないインテグレーション



最小面積イベントを使用したインテグレーション

ネガティブピーク

このイベントは、ベースラインよりも下側に出たクロマトグラムに対して、通常のピー ク処理方法を用いてインテグレーションを行い、真のピークとしてレポートするときに 使用します。このイベントは、ある化合物に対して負の応答を示す示差屈折率検出器な どを使用している場合に有効です。

- 1. 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、**ネガティブピーク** ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- ネガティブピーク ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加 (す べてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択しま す。
 - メソッドへイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントは
 テーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブル

へ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってイン テグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。

- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



デフォルトのインテグレーション



ネガティブピーク を使用したインテグレーション

簡易グルーピング

[簡易グルーピング]イベントは、指定した時間範囲で、ピーク終了点の検出を無効にして、その範囲内にあるピークを単一のピークとして処理させるために使用します。連続する一連のピークの面積を合わせて1つの面積を求めるのに便利なイベントです。各ピークが1つのピークの一部とみなされるため、リテンションタイムは、簡易グルーピングイベント開始後の最初のピーク頂点の時間になります。

- 1. インテグレーションツールバーの機器ウィンドウ下部で、**簡易グルーピング** ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- 簡易グルーピング ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加 (す べてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択しま す。

- メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



デフォルトのインテグレーション



0.4 から2.2 分まで簡易グルーピングを設定したインテグレーション

ピークの再割り当て

このイベントは、同定されたピークの代わりに別のピークを、キャリブレーションされ たピークとして設定したい場合に使用します。このイベントはピークテーブルの値を変 更しません。

- 1. 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、ピークの再割り当て ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- ピークの再割り当て ダイアログボックスから、メソッドへイベントを追加 (すべてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択しま す。

- メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。

以下の例では、ピーク2が新しいピークとして再指定されています。



ピーク2の指定を変更しないインテグレーション



ピーク2の指定を変更したインテグレーション

マニュアルベースライン

このイベントは、インテグレーションパラメータを変更せずに、ピークのベースライン の引き方を変更したい場合に使用します。これは、そのクロマトグラム上で、他のピー クのベースラインの引き方を変更せずに、特定ピークのベースラインの引き方を変更で きます。

マニュアルベースライン は新しいベースラインを挿入するのに用いられます。新しい ベースラインを挿入するにはマニュアルベースライン コマンドを選択し、挿入するベ ースラインの開始点でマウスをクリックし、その後挿入するベースラインの終了点でも う一度マウスをクリックします。

- 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、マニュアルベースラ イン ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。

- マニュアルベースライン ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加 加(すべてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択 します。
 - メソッドへイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
 - このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。

マニュアルベースライン イベントは、デフォルトでは、マニュアルインテグレーショ ンテーブルに保存されます。



デフォルトのインテグレーション





マニュアルピーク

このコマンドは、検出されなかったピークをグラフィカルに定義するために使用します。 これは、全体のインテグレーションパラメータを変更せずに、ピークのインテグレーシ ョンを強制的に行いたい場合に有効です。

- 1. 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、マニュアルピーク ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- マニュアルピーク ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加 (す べてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択しま す。
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
 - このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



デフォルトのインテグレーション



マニュアルピーク イベントによる小さなピークの強制的なインテグレーション

ピークの垂直分割

このイベントは、ピーク中に強制的に垂線を引いてインテグレーションしたい場合に使 用します。このイベントは、設定時間内に垂線を引きます。

- 1. 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、スプリットピーク ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- スプリットピーク ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加 (す べてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を選択しま す。
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
 - このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。

ピークの垂直分割イベントは、デフォルトではマニュアルインテグレーションテーブル に保存されます。



ピークの垂直分割をしていないインテグレーション



5.3分でピークの垂直分割したインテグレーション

強制ピーク開始点/終了点変更

これらのイベントは、ピークのインテグレーションの開始点または停止点を強制的に指 定した点に変更したい場合に使用します。

- 1. 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、**強制ピーク開始点、** または**強制ピーク終了点**ボタンを選択します。
- 2. クロマトグラムで、開始点と終了点を選択します。
- 強制ピーク開始点コマンドまたは、強制ピーク終了点ダイアログボックスから、 メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)またはこのデータファイルの みイベントを追加を選択します。
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
 - このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- このタイムイベントを無視して動作を取消す場合は、キャンセルボタンをクリックします。このイベントをテーブルに追加して、このイベントを使用してクロマトグラムを解析する場合には、解析実行ボタンをクリックします。

ピークの垂直分割イベントは、デフォルトではマニュアルインテグレーションテーブル に保存されます。



デフォルトのインテグレーション



中央ピークの開始点を33.1 分に設定した後のインテグレーション

ベースライン移動

これらのイベントは、ベースラインの開始点または終了点をクリックして、新しいベー スライン開始点または終了点を移動するために使用します。

- ベースライン移動 または[ベースライン終了点移動]を選択すると、ベースラ インの修正したい部分をクリックするよう促されます。次に、ベースラインの 開始点(または終了点)にボックスを付けてハイライトさせます。
- 開始点(または終了点)の範囲内の位置にカーソルを移動すると、カーソルは 「アンカー」に変わります。マウスの左ボタンをクリックして、ベースラインの 開始点(または終了点)を新しい位置までドラッグしてから、マウスボタンを離 します。
- ベースラインが正しい位置になるまで、このように「クリックしてドラッグ」を 続けます。その後、[Esc]キーを押します。古いベースラインと新しいベース ラインの開始点および終了点の値を備えたダイアログが表示されます。
- 移動したいベースラインの選択ボタンにチェックマークを付けます。このボ ックスが選択されていなければ、ベースラインの移動イベントはインテグレー ションに使用されません。
- 5. メソッドヘイベントを追加 (すべてのデータ)を選択した場合、イベントはメ ソッドのインテグレーションテーブルへ追加されます。そのメソッドを使って インテグレートされるすべてのデータにイベントが適用されます。このデータ ファイルのみイベントを追加を選択してこのベースラインを現在のデータファ イルに変更します(マニュアルインテグレーション)。
- 6. テーブルへ追加 ボタンをクリックすると、 タイムイベントは手順5 で選択し た項目に応じてインテグレーションイベントテーブルまたは マニュアルイン

テグレーションテーブルへ挿入されます。このタイムイベントを無視して動作 を取消す場合は、キャンセルボタンをクリックします。このイベントをテーブ ルに追加して、このイベントを使用してクロマトグラムを解析する場合には、 **解析実行** ボタンをクリックします。

7. ベースライン開始点移動イベントと[ベースライン終了点移動]イベントは、デ フォルトではマニュアルインテグレーションテーブルに保存されます。



ベースライン開始点移動 イベントを使用した一例を示します。

ベースラインを移動しないインテグレーションベースラインの開始点と終了点が表示さ れます



ベースラインの開始点を約71.7分へ移動

ベースラインリセット

このイベントは、クロマトグラム上の指定した位置でベースラインを引きます。 ときは、ウィンドウの下部にある[ベースラインリセット]ボタンをクリックしてか ら、イベントを設定したい場所の上でクリックします。

ベースラインリセットイベントをグラフィカルに設定する手順は以下の通りです。

- クロマトグラム ウィンドウの下部にある ベースラインリセット ボタンをクリ ックします。
- 2. イベントを設定したい場所の上でクリックします。
- インテグレーションテーブルへ追加かマニュアルインテグレーションテーブ ルへ追加のいずれかを選択してテーブルへ追加ボタンをクリックします。

- **4. テーブルへ追加** ボタンをクリックしてインテグレーションイベントテーブル に追加します。
- 5. ベースラインリセット ダイアログボックス
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
 - このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントは テーブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテーブルへ追加され、そのデータファイルにのみ適用されます。
 - このタイムイベントを無視して動作を取消す場合は、キャンセルボタンをクリックします。このイベントをテーブルに追加して、このイベントを使用してクロマトグラムを解析する場合には、解析実行ボタンをクリックします。

谷渡りベースラインリセット

このイベントは、指定した位置の後にあるピークの谷に対して谷渡り処理を行いま す。

注:このイベントは一群のピークの開始点(谷渡り処理を行う不分離ピークの開始点)の 後に設定してください。

- 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、谷渡りベースライン リセットボタンを選択します。
- このイベントは、クロマトグラムで一群のピークの開始点(谷渡り処理を行う 不分離ピークの開始点)の後に設定してください。
- 3. 谷渡りベースラインリセット ダイアログボックスから、メソッドヘイベント を追加(すべてのデータ)またはこのデータファイルのみイベントを追加を 選択します。
 - メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
 - このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。

このイベントを使用したクロマトグラム例を示します。



谷渡りベースラインリセットをしていないインテグレーション



谷渡りベースラインリセットをしたインテグレーション

タンジェントスキム

テーリング処理イベントは、大きいピークの終わりの方にある小さなピークのインテグ レーションを行うときに使用します。小さなピークのベースラインは、大きい方のピー クの谷からそのクロマトグラムに対して引かれたエクスポーネントラインになります。

- インテグレーションツールバーの機器ウィンドウ下部で、タンジェントスキム ボタンを選択します
- エクスポーネントスキミング ダイアログボックスから、メソッドヘイベント を追加 (すべてのデータ) または このデータファイルのみイベントを追加を 選択します。

- メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使ってクロマトグラムの解析を実行します。



エクスポーネントスキミングイベントを実行する前に



エクスポーネントスキミングイベントを実行した後に

フロントタンジェントスキム

エクスポーネントスキミングイベントは、大きなピークの立上がり部分にある小さなピ ークのインテグレーションを行うときに使用します。

- 機器ウィンドウ下部のインテグレーションツールバーで、フロントタンジェン
 トスキムボタン を選択します。
- 前方エクスポーネントスキミング ダイアログボックスから、メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)またはこのデータファイルのみイベントを追加を選択します。
- メソッドヘイベントを追加(すべてのデータ)を選択した場合、イベントはテーブルへ追加ボタンを押すとインテグレーションイベントテーブルへ追加されます。そのメソッドを保存すると、そのメソッドを使ってインテグレートされたすべてのデータにイベントが適用されます。
- このデータファイルのみイベントを追加を選択した場合、イベントはテー ブルへ追加ボタンを押すとデータのマニュアルインテグレーションテー ブルへ追加されます。
- 3. キャンセル を押してタイムイベントを無視して操作をキャンセルするか、または解析実行 をクリックしてイベントをテーブルに追加してイベントを使っ てクロマトグラムの解析を実行します。



前方エクスポーネントスキミングイベント前



前方エクスポーネントスキミングイベント後

RT ウィンドウの調整

RT ウィンドウをグラフィカルに調整する場合、次の操作で行うことができます。キャ リブレーションしたピークのリテンションタイムウィンドウはすべて、このイベントを 用いてグラフィカルに変更することができます。

注: グラフィカルに RT ウィンドウを調整するために、RT ウィンドウの注釈を有効に してください。 クロマトグラムウィンドウで RT ウィンドウを有効にするには、 右ク リックで注釈を選択してください。 ピーク情報のプロパティで、下部の「その他」の ペインに RT ウィンドウが選択されていることを確認してください。

クロマトグラム上から RT ウィンドウを調整する手順は以下の通りです。

 クロマトグラムウィンドウ 下部のリンテンションタイム ウィンドウの 調整 ボタンをクリックし、調整したい RT ウィンドウをクリックします。カ ーソルは 2 つの終端を持つ矢印に変わり、2 つのドラッグボックスが表示され ます。

- 表示されている RT ウィンドウバーの一方の端、または RT ウィンドウバー自 身をドラッグして RT ウィンドウを調整することができます。
- RT ウィンドウバー自体をドラッグして移動した場合、予測リテンションタイムは変更されますが RT ウィンドウは変わりません。
- RT ウィンドウバーの一方の端をドラッグして移動した場合、もう片方は現在の位置に保たれますが予想リテンションタイムと RT ウィンドウは変更されます。
- 5. 手順を繰り返し、追加の RT ウィンドウを調整します。
- 6. RT ウィンドウの調整が終了したら、キーボードの ESC ボタンをクリックします。変更を加えた RT ウィンドウが適用されたテーブルを表示するダイアログボックスが現れます。各行には ピーク 名、古いリテンションタイム、新しいリテンションタイム、古いリテンションタイムウィンドウ、新しいリテンションタイムウィンドウが表示されます。新しいリテンションタイム と新しいリテンションタイムウィンドウ を、フィールドをクリックして希望する値を入力すると、手動で調整することができます。
- 既定値では、すべての RT リテンションタイムアップデートは 選択に設定されています。含めたくない各 RT ウィンドウ調整アップデートの選択 ボックスを削除します。

更新をクリックすると、リテンションタイムはピークテーブルで更新されます。
 このタイムイベントを無視して動作を取消す場合は、キャンセルをクリックします。
 解析実行 をクリックしてピークテーブルを更新し、更新されたリテンションタイムと RT ウィンドウを用いてクロマトグラムを解析します。

サンプリング間隔

データを収集するために使用するサンプリング間隔は、インテグレーションのアルゴリ ズムがクロマトグラムの描画およびインテグレーションを行う際、どれほどの多くの情 報を利用できるかを決定します。サンプリングレートはメソッドの 機器の設定 で設定 します。サンプリング間隔が適切であることを確認するには、グラフィカルプログラミ ングでサンプリング間隔 コマンドを使用します。多少サンプリングが多い程度ならば、 ピーク幅 イベントで補正されるため、問題ありません。しかし、サンプリングが多す ぎると良好なインテグレーションが実行できず、コンピュータのハードディスクも無駄 に消費するので避けるべきです。ただし、もっと重要なのはサンプリングが少なすぎる 場合です。得られたデータポイント数がピーク検出およびインテグレーションを行うの に不十分な場合、それを補う方法が無いためです。

インテグレーションタイムイベントを追加する前に、得られたクロマトグラムが現在 のメソッドにより解析されていることを確認してください。確認するには、クロマトグ ラムでベースラインとピークの開始点/停止点のチェックマークを確認します。あるい は、ツールバーの**解析** ボタンをクリックします。

サンプリング間隔

- クロマトグラムを右クリックし、グラフィカルプログラミング > サンプリン グ間隔を選択します。
- ステータスバーの指示に従って必要なピークのうち最も狭いピークの始点で一 度クリックし、次にそのピークの終点でもう一度クリックします。ソフトウェ

アがサンプリング間隔(またはサンプリング時間)の数値を提案します。この数 値は機器の設定ボタンにより、ユーザーのサンプリング間隔として入力する ことができます。

シーケンスについて

シーケンスは自動操作を行う上で重要なものです。シーケンスを用いることで、複数回 の測定の自動取り込み、解析、保存ができます。測定の取り込み時またはシーケンスの 再解析による取り込み後に、シーケンスを使用してキャリブレーションを自動化できま す。シーケンスを自動実行するためのランキューを設定し、シーケンス内の測定結果に 基づいてイベントを起動することもできます(「シーケンスランのアクションの設定」 を参照)。一旦、シーケンスでデータを取り込むと、<u>ランキュー</u>機能を用いてシーケン スの進捗状況をモニタできます。

関連項目

シーケンスウィザードを用いたシーケンスの作成

シーケンスファイルのオープン

<u>シーケンスの編集</u>

<u>シーケンスの保存</u>

<u>シーケンスプロパティ</u>

シーケンススプレッドシートについて

<u>データ取り込みとコントロールについて</u>

結果シーケンスについて

シーケンスレポートについて

シーケンスウィザードを用いたシーケンスの作成

シーケンスウイザードは、新しいシーケンスを作成するために使用します。

シーケンスウィザードを開始する方法:

- 機器ウィンドウの機器ウイザードボタン ぎをクリックし、シーケンスの作成 ボタンをクリックします。
- ウィザードに入力してシーケンスを定義します。このウィザードは、選択と設定した機器による取得および再処理したシーケンスの作成に必要な様々なパラメータ画面を通して進みます。ウィザードの最初の画面はシーケンスウィザード・メソッドです。
- 3. 設定が完了したら完了ボタンをクリックします。
- シーケンスを保存するには、メニューから ファイル > 名前を付けて保存をク リックします。 シーケンス シーケンスを保存するフォルダを確認し、シーケ ンスファイル名を入力し、保存ボタンをクリックします。 シーケンスの保存 選択します。

関連項目

チュートリアル - サンプルシーケンスの作成

シーケンスウィザード - メソッド

シーケンスウィザード - 未知試料

<u>シーケンスウィザード - オートサンプラ</u>

<u>シーケンスウィザード - キャリブレーション</u>

シーケンスウィザード - レポート

再解析シーケンスの作成

シーケンスウィザード - メソッド

- 1. シーケンスに使用するメソッドを選択するか、ファイルオープンボタンをクリ ックして既存のメソッドのリストから選択します。
- 2. データファイルタイプ を以下のオプションから選択します。
 - 新規(分析用) データ取込のために使用する新しいファイル名を指定でき ます。
 - 既存(解析用) データディレクトリにある既存のデータファイルのリスト から、データファイル名を選択することができます。これは通常、再解析 に使用するシーケンスを作成するために使用されます。詳細については、 「再処理用シーケンスを作成する」を参照してください。
- 3. 定量結果の補正の項では、未知試料の濃度を計算する際に使用される値を入 力できます。
 - サンプル量 この値は、濃度計算時に除数として使用されます。これは、
 秤量による試料間の誤差を補正するために使用します。または、注入で検
 出された量を求めるのではなく試料の総量に対するパーセント値を求めた
 い場合に使用します。

- ISTD 量 キャリブレーション測定を行う場合、内部標準物質量はメソッドのピークテーブルから採用されます。未知試料の測定の場合は、未知 試料内の内部標準物質の量を入力します。
- 補正係数 これらの測定で使用する1から3個の乗数を入力します。定 量化されたすべてのピークに、これらの乗数が掛けられます。
- 希釈係数 これらの測定で使用する1から3個の希釈係数を入力します。
 定量化されたすべてのピークは、これらの希釈率で割られます。
- このダイアログを完了したら、次へボタンをクリックして続行します。シーケンスウィザード 未知試料を参照してください。

シーケンスウィザード - 未知試料

このダイアログでは、データ保存とシーケンスランについての情報を入力します。

試料の識別名を入力します。これは、数字または テキスト形式を用いることができ、各データファ イルとともに保存されます。

システムに自動でサンプル ID を付けさせたい場合は、青い矢印をクリックし、サンプル ID のベースに使用するパラメータを選択します。2 つ以上のパラメータを選択することもでき、これはサンプル ID に続けて追加されます。

行番号および機器名を選択した場合、シーケンス

の行番号の後に機器名が続いた形のサンプル ID が付けられます。 **3HPLC**

繰上げ番号オプションを使用するには、括弧内に 繰上げの開始番号を入力します。例えばは、数字 33から始まります。デフォルトでは、繰上げ番号 オプションは3桁まで許容します。桁数を減らし たり増やしたりするには、括弧内の桁を調整しま す。(例)

データファイル名を入力します。それぞれ異なる データファイル名を自動的に作成するために、シ ステムパラメータに基づいて、ユーザーのファイ ル名をシステムに自動的に付けさせることもでき ます。青い矢印をクリックし、データファイル名 のベースとなるパラメータを選択します。2 つ以 上のパラメータを選択することもできます。ソフ トウェアは、自動的に、データファイル名に.DAT という拡張子を付けますが、これは変更、削除す ることもできます。

例えば、サンプル ID をデータファイル名として 使用することもできます。

注: 各データファイルに異なるファイル名を自動 的に付加させるためには、ファイル名のどこかに [行番号]や[繰上げ番号]が含まれていることを確

データファイル

認してください。

そのシーケンスで収集または再解析する未知試料 未知試料の数 の数を入力します。

1つの未知試料を繰返して測定する回数を入力し 未知試料ごとの繰り返し回数 ます。

未知試料のそれぞれの繰り返し測定を、このシー ケンスでの1つ1つの行に分けて作成したい場合 は、このボックスをクリックします。このボック 各繰り返し分析を1行ずつに分 スを選択しない場合、未知試料の繰返し測定に対 して、個々のデータファイルが作成されます。し かしシーケンススプレッドシートには各繰り返し 測定が表示されません。

このダイアログを完了したら、次へボタンをクリックして続行します。シーケンスウィ ザード-オートサンプラを参照してください。

けて作成

Sequence Wizard - Unknow	wns			
	Sample ID : Data file : Number of unkn Repetitions per r	<####> <m> <id> own runs in sequence : un : warate row in the sequence f</id></m>	3 1 for each repetition	
	Cancel	< <u>B</u> ack	Next > Fini	sh

シーケンスウィザード - オートサンプラ

オートサンプラに制御オプションがある場合には、このシーケンスウィザード画面が表示されます。これは、シーケンスの最初の未知試料バイアル番号と最初のキャリブレーション標準試料バイアル番号を設定するために使用します。デフォルトの注入量を入力することもできます。これは、このシーケンススプレッドシートにおいて、測定ごとに変更することもできます。

このダイアログを完了したら、**次へ**ボタンをクリックして続行します。<u>シーケンスウィ</u> <u>ザード - キャリブレーション</u>を参照してください。

シーケンスウィザード - キャリブレーション

このダイアログでは、シーケンスにおけるキャリブレーション用標準試料について設定します。

キャリブレーション試料の識別名を入力しま す。これは、キャリブレーションデータファイ ルに使用されるテキスト値です。キャリブレー ション ID とキャリブレーションファイルを関 連付けるため、[サンプル ID]からの識別名が自 動的に入力されます。必要であれば、システム パラメータに基づいてキャリブレーション ID をシステムに自動的に付けさせることもできま す。青い矢印をクリックし、キャリブレーショ ン ID のベースに使用するパラメータを選択し ます。

キャリブレーションデータファイルの名前を入 力します。システムは、シーケンスの各キャリ ブレーションファイルの前に自動的に **Cal**_と いう接頭語を適用します。これは変更が可能で す。キャリブレーションファイル名をデータフ ァイル名と関連付けるため、データファイル名 をもとにしたキャリブレーションファイル名が 自動的に入力されています。これは、青い矢印 をクリックして、キャリブレーションファイル 名に使いたいパラメータを選択することによ

キャリブレーション **ID**

キャリブレーションファイル

り、変更が可能です。2つ以上のパラメータを 選択することもできます。

注: 各データファイルに異なるファイル名を自 動的に付加させるためには、ファイル名のどこ かに[行番号]や[インクリメント番号]が含まれ ていることを確認してください。

キャリブレーションレベルの数 そのシーケンスで測定するキャリブレーション レベルの総数を入力します。

> 各キャリブレーションレベルについて、繰り返 して測定する回数を入力します。

レベル毎の繰り返し回数 注:繰り返し測定回数に 2 以上を指定した場合、測定ごとに生成されるデータファイル名には Rep1、Rep2 などが付加されます。

シーケンスのスタート時に検量線 をすべて削除 シーケンスの最初の測定を開始する前に、すべてのキャリブレーション情報をクリアする場合に選択します。

各繰り返し分析を 1 行ずつに分け て作成 キャリブレーションの繰り返し測定をシーケン スでの1つ1つの行に分けて作成したい場合に 選択します。このボックスを選択しない場合 は、キャリブレーションの繰返し測定に対し て、個々のデータファイルが作成されます。し かしシーケンススプレッドシートには各繰り返 し測定が表示されません。

複数のキャリブレーションセット を使用 各キャリブレーションレベルを(その繰り返し測 定を含めて)2回以上測定する場合は、このボッ クスを選択します。

複数のキャリブレーションセットを使用ボック スを選択している場合、このオプションが表示 されます。各キャリブレーションセットの間に 測定したい未知試料の数を入力します。

セット間の未知試料の数

バイアル

オートサンプラコントロールオプションがイン ストールされている場合は、バイアルオプショ ンを利用できます。

キャリブレーションセットの間で未知試料を測 定したい場合は、キャリブレーションバイアル の間に未知試料バイアルをセットするを選択し ます。

間に未知試料を入れずにキャリブレーションセットを続けて測定したい場合は、最初のキャリ ブレーションに使ったバイアルを再利用するを 選択します。

231

このダイアログを完了したら、**次へ**ボタンをクリックして続行します。シーケン スウィザード - レポートを参照してください。

Sequence Wizard - Calibration		
	Calibration ID : <pre><####><m> Calibration file : Cal_<id>.dat Number of calibration levels : 1 Repetitions per level : 1 Clear all calibration at start of sequence Create a separate row in the sequence for each repetition Multiple calibration sets Number of unknown runs between sets : 1 CINTERSPERSE calibration vials with unknown vials CINTERSPERSE calibration vials from first calibration set</id></m></pre>	
	Cancel < <u>B</u> ack <u>N</u> ext> Fin	ish

シーケンスウィザード - レポート

このダイアログは、シーケンスに関するサマリーレポートを設定するのに使用します。

1h	これらのオプションにより、サマリー分析を指
₩~ y —	定することができます。
サマリーレポートに未知試料分析	サマリーレポートに未知試料の測定を含めたい

を含める 場合は、このボックスを選択します。これらの 測定の分析タイプは、サマリーとして設定され ます。

サマリーレポートにキャリブレーションの測定
 サマリーレポートにキャリブレー
 を含めたい場合は、このボックスを選択しま
 す。これらの測定の分析タイプは、サマリーと
 して設定されます。

システムスータビリティ ンステムスータビリティ リティ試験を指定することができます。

> オプションのシステムスータビリティ試験用ソ フトウェアを持っていて、キャリブレーション 測定をシステムスータビリティ試験として指定 したい場合は、このボックスを選択します。ま た、システムスータビリティ試験を行う方法と して[最初のキャリブレーションセットのみ]ま たは[すべてのキャリブレーションセット]から 選択します。

> これにより、シーケンススプレッドシートにシ ステムスータビリティ試験パラメータが表示さ れます。

> 最初のキャリブレーションセットのみ または すべてのキャリブレーションセットのいずれか

う

システムスータビリティ試験を行

を選択します。 システムスータビリティについ てを参照してください。

QC チェック標準 未知試料ごとに QC 標準試料番号を設定しま す。 す。

シーケンスにおいてメソッドが変更された時に はいつでも、メソッドの内容レポートが自動的 に作成するためには、このボックスを選択しま す。このオプションが有効な時には、そのシー ケンスでの前回の測定からメソッドが変更され た各測定に追加レポートを印刷するという分析 タイプが自動的に追加されます。これは、シー ケンススプレッドシートに示されたどの測定に 対しても、変更したり、削除したりすることが できます。

このダイアログの設定が完了したら**完了**ボタンをクリックします。シーケンスウィザー

ドで指定された情報を使ってシーケンスが作成され、スプレッドシートとして表示されます。

新しいシーケンスは[無題.seq]として表示されます。新しいシーケンスを保存するには ファイル/名前を付けて保存 > シーケンスコマンドを使用して、新しいシーケンスの 名前を入力します。

メソッド内容レポートを含む

シーケンススプレッドシートを閉じるには、スプレッドシートの右上隅のコーナーのX ボタンをクリックします。現在のシーケンスのスプレッドシートを開くには、シーケン ス/編集コマンドを使用するか、ツールバーのシーケンス編集ボタンをクリックします。

Sequence Wizard - Reports 🛛 🗙
Summary Include unknown runs in summary report Include calibration runs in summary report Include calibration as system suitability Include calibration as tonly Include calibration set only Include calibration set only
Cancel < Back Next > Finish

再解析シーケンスの作成

シーケンスウィザードを使って、既存のデータファイルを含むシーケンスを、解析だけ のために作成することができます。

シーケンスを作成する方法:

- 1. 機器ウィンドウの機器ウイザードボタン ぎをクリックし、シーケンスの作成 ボタンをクリックします。
- シーケンスウィザード に入力して再解析に使用するメソッドとデータファイ ルを選択します。
- 3. シーケンスウィザード メソッドで既存(解析用)をデータファイルの種類と して選択します。これにより、データ取込シーケンスの作成に必要なウイザー ド画面が飛ばされ、再解析するデータファイルを選択することができます。さ らに、選択されたデータファイルのサンプル量がシーケンスへ入力されます。
- 4. 設定が完了したら完了ボタンをクリックします。
- シーケンスを保存するには、メニューから ファイル > 名前を付けて保存>
 シーケンスをクリックします。 シーケンスを保存するフォルダを確認し、シ ーケンスファイル名を入力し、保存ボタンをクリックします。

シーケンスの編集

シーケンスの作成が完了していれば、機器ウィンドウでそれを見たり変更したりできま す。

現在のシーケンスを編集する方法:

- 1. シーケンスメニューの編集コマンドをクリックします。
- 2. <u>スプレッドシート</u>シーケンスでシーケンスを編集します。

関連項目

<u>シーケンスファイルを開く</u>

<u>シーケンスの保存</u>

シーケンスプロパティ

シーケンス > プロパティ を選択して概説や説明、電子署名、監査証跡ログ及びデータ ファイルの監査証跡を編集・表示します。

関連項目

シーケンスプロパティオプション

シーケンスプロパティ監査証跡のログ

シーケンスプロパティの監査証跡

シーケンスプロパティオプション

<u>シーケンスウィザード</u>を使用して新しいシーケンスを作成すると、内容説明を入力して データとメソッドに関するデフォルトディレクトリを指定することができます。

これらのプロパティを設定する手順は以下の通りです。すると、次のようなダイ アログボックスが表示されます。

- 1. シーケンス メニューから プロパティコマンドをクリックします。
- 2. シーケンスプロパティ ダイアログボックスから、オプションを選択します。
- 3. シーケンスのプロパティを入力してください。
 - 説明 -必要であれば、そのシーケンスに関する説明内容を入力してください。この説明はシーケンスファイルに保存され、シーケンスを開くダイアログボックスで見ることができます。

- エクスポートサマリー このボックスは、サマリーレポートをエクスポートする時にクリックします。サマリーテキストファイルを保存したいパスを入力します。このサマリーは"シーケンスサマリー 000005000.txt" その中の数値は nBatchTower, nReportRunTypeID, nReportNumber を表わします。
- ファイルパス メソッド、データおよびオートサンプラを使用している 場合は、それに使用するデフォルトパスを入力します。このフィールド横 のファイルボタンをクリックすることにより、ディスク上で使用できるパ スを選択することもできます。これらのパスは、シーケンステーブル内に ファイルがパス無しで指定されている場合に使用されます。

シーケンスプロパティの監査証跡

シーケンスの監査証跡を有効にする方法:

- 1. シーケンス メニューから プロパティコマンドをクリックします。
- 2. シーケンスプロパティ ダイアログボックスから、監査証跡を選択します。
- 監査証跡を使用するボックスをチェックします。監査証跡を使用するボックス を一度チェックすると、チェックを解除することはできません。そのファイル を新しいファイル名で保存しない限り、そのシーケンスに対しての監査証跡が 有効のままとなります。
- 監査証跡を使用するボックスをチェックすると、変更の記録に関して次のよう なオプションが選択できます。
 - 変更するたびに理由を入力する このオプションを選択するとメソッド
 を変更するたびにその理由を入力するよう求められます。

- シーケンス保存時に理由を入力する このオプションを選択すると、テンプレートの保存時に変更の理由をそれぞれ入力するよう求められます。
- 理由を入力しない-このオプションを選択すると、変更は記録されますが 変更理由の入力は要求されません。

シーケンスプロパティ監査証跡のログ

現在のシーケンスの監査証跡ログを見る方法:

- 1. シーケンス メニューから プロパティコマンドをクリックします。
- 2. シーケンスプロパティ ダイアログボックスから、監査証跡を選択します。
- 3. 次の情報を入力します。
 - ユーザー
 - ロケーション
 - 説明
 - 理由
 - 開始日/時間
 - 終了日/時間
- 4. 以下の中から選択してください。
 - **エクスポート -** これを選択して、監査証跡ログをエクスポートします。
 - 印刷 これを選択して、監査証跡ログを印刷します。

• **検索** - これを選択して、監査証跡ログを検索します。

シーケンススプレッドシートについて

シーケンスはスプレッドシートとして表示され、その各行がクロマトグラフィー測定ま たは再解析すべきファイルを表します。各行に対して、メソッド、データファイル名、 試料がキャリブレーションスタンダードかどうか、そのデータをどのように解析するか、 などさまざまな設定を行うことができます。以下の項では、シーケンススプレッドシー トの機能について説明します。

関連項目

シーケンススプレッドシートコンテキストメニュー

下ヘコピー

新しいシーケンスを挿入

<u>シーケンススプレッドシート列のカスタマイズ</u>

<u>シーケンススプレッドシート列</u>

試料分析タイプの設定

QC チェックの設定

濃度オーバーライド

シーケンスカスタムパラメータ

シーケンスランのアクションの設定

シーケンススプレッドシートコンテキストメニュー

すべてのシーケンスは、下図に示したようなスプレッドシート内に表示されます。各フ ィールド内の情報は異なりますが、スプレッドシートは常にいくつかの基本的な機能を サポートします。スプレッドシートカラムのリストと定義については、<u>シーケンススプ</u> レッドシートカラムを参照してください。

各行には**ラン番号(#)**が割り当てられ、この後にシーケンス内の各測定に関する情報が 含まれた列が続きます。行およびフィールドの情報は、切り取り、コピー、貼り付けお よび削除することができます。これらのコマンドを選択するメニューは、スプレッドシ ート内の任意の場所を右クリックすることで呼び出します。

コンテキストメニューコマンド

このコマンドは、現在選択されているものを切り取 り、これをクリップボードに貼り付けます。その 後、貼り付けコマンドを使用してこの情報を別のア プリケーションに貼り付けたり、スプレッドシート 内の別の場所を選択してから、**貼り付け**コマンドを 使用することでそこに移動することができます。注: スプレッドシートからある行をクリアまたは削除す ると、そのシーケンススプレッドシートを閉じて再 度開くまで、あるいは**F5**キーを押すまで、空白の 行がスプレッドシートに残ります。

このコマンドは、クリップボード内に貼り付けた情報の正確なコピーを作るのに使用します。コピーコマンドを選択すると、その情報を別のアプリケーシ

切り取り

ョンに貼り付けたり、 あるいはスプレッドシート内 の場所にコピーすることができます。

このコマンドは、現在、クリップボード内にある情 **貼り付け** 報を、スプレッドシート内のカーソル位置に貼り付 けるのに使用します。

このコマンドは、スプレッドシート内の1つのフィ
 ールドまたは行の情報を、そこから下に向かってス
 プレッドシートの残りの部分に自動的にコピーする
 ことができます。

このコマンドは、行の挿入と貼り付けの2つのコマ ンドを組み合わせたような働きをします。現在のク リップボードに貼り付けられている項目は、カーソ ル位置の上の新しい行に貼り付けられます。

行挿入 このコマンドは、スプレッドシート内のカーソル位 置の上に空白行を挿入します。

削除

このコマンドは、選択された位置にある情報を削除 するのに使用します。(キーボードから[Delete]キ ーを押しても削除できます。**F5**キーは、スプレッ ドシートから削除された行を消去させるのに使用し ます。

```
シーケンスについて
```

このコマンドは、そのスプレッドシート全体を削除

すべて削除 するのに使用します。 このコマンドは、そのスプレッドシート全体を選択 すべて選択 するのに使用します。 このコマンドは、そのスプレッドシート内の現在選 メソッドを開く 択されている測定に結びついたメソッドを開きま す。 このコマンドは、そのスプレッドシート内の現在選 択されている測定に結びついたデータファイルを開 きます。このデータファイルは、最新の結果と一緒 データを開く に開きます。もし、最新の結果が見つからない場合 は、データファイルはオリジナルの結果と一緒に再 度呼び出されます。 このコマンドは、[シーケンス解析]のダイアログを シーケンス解析 開き、ユーザが現在のシーケンスのすべてまたは一 部を解析できます。

シーケンスラン このコマンドは、[シーケンスラン]ダイアログを開き、そのシーケンスランを開始できます。

<u>新しいシーケンスを挿入</u> このコマンドは、新しいシーケンスを作成するため

のシーケンスウィザードが起動され、これを現在の シーケンス中で選択されている行より下に挿入しま す。

このコマンドは、分析タイプを選択するための一覧 分析タイプの設定 を表示し、それを現在のシーケンス中で選択されて いる行へ設定します。

このコマンドは、そのシーケンスの説明の追加/編集 と、データファイルおよびメソッドファイルに関す るデフォルトパスを選択するための[プロパティ]ダ イアログを開きます。

注:データシステムから他のアプリケーションへスプレッドシートをコピーまたは貼り 付けする場合、 このスプレッドシートには表示されない隠れたパラメータ(アクション 項目パラメータなど)は貼り付けられません。

下ヘコピー

下へコピーコマンドを使用すると、1つのフィールドまたは行の情報を、スプレッドシートの残りの部分へ自動的にコピーすることができます。

下へコピーコマンドを使用する方法:

- シーケンススプレッドシートで、コピーしたいフィールドまたは行をマウスで 選択します。
- 2. 右クリックして下へコピーコマンドを選択します。スプレッドシートでレベル や繰り返し回数などの数値フィールドを選択していた場合、それは選択した位

置から下に向かって自動的にスプレッドシートにコピーされます。行やデータ ファイル名やサンプル ID などを選択していた場合、以下のようなダイアログ が表示されます。ここで、名前を指定したり、それに関連する付加番号の繰り 上げを設定したりできます。

 サンプル ID とデータファイル名フィールドでは、インクリメントのチェック ボックスをクリックすることで、自動的に番号を繰り上げたり、名称を変更 したりできます。青い矢印をクリックすると、シーケンスウィザードで使われ ているのと同じ[インクリメント]のパラメータをリストから選択できます。
 (必ず正しい桁数を入力してください。例えばから始める場合であっても、フ ァイルの数が 100 と 1000 の間の場合には を入力してください。OK ボタン をクリックすると、この情報がスプレッドシートの下方向にコピーされます。

新しいシーケンスを挿入

シーケンス行を作成してスプレッドシートへ挿入する方法:

- シーケンススプレッドシートで、シーケンス行を挿入したいところで右クリックし、新しいシーケンスを挿入コマンドをクリックします。
- シーケンスウィザードが表示されます。ウィザードに挿入するシーケンス行についての設定を入力します。
- 3. [完了] をクリックします。新しいシーケンス行は、選択した行の上に挿入 されます。

シーケンススプレッドシート列のカスタマイズ

シーケンススプレッドシートをカスタマイズして使用する列だけを含めることができま す。これらの選択は、ユーザごと/機器ごとに保存されます。すなわち、各ユーザは、 各機器に対して、スプレッドシートのプロパティを設定できます。

- 1. <u>シーケンススプレッドシート</u>で右クリックし、**プロパティ**コマンドをクリック します。
- プロパティ ダイアログボックスで、ピークテーブルに表示させる列を選択し ます。チェックマークのある列が、スプレッドシートに表示されます。チェッ クマークの付いていない項目は表示されません。
- 青い"アンカー"(錨マーク)は、ユーザーのスプレッドシートで左右のスクロー ルを固定する列を示しています。アンカーが設定されると、アンカーの右にあ る列が左右にスクロールされます。アンカーの左にある列は、スクロールでき なくなります。アンカーを変えるには、アンカーとして指定する列の名前をク リックし、アンカーの設定 ボタンをクリックします。すると、青いアンカー が指定されたアンカー列へと移動します。

注:アンカーを使用する場合には、スプレッドシートから不要な列を取り除き、アンカ ーを設定する前にスプレッドシートをできるだけ幅広く使えるようにします。現在スプ レッドシート上に表示されていない列にアンカーを設定すると、スプレッドシートを スクロールすることができなくなります。

シーケンススプレッドシート列

以下のカラムは、シーケンスプレッドシートと<u>結果シーケンス</u>に表示されます。<u>シー</u> <u>ケンスウィザード</u>によって自動的にシーケンスを作成できますが、シーケンス測定を 行う前に、各測定の情報が正しいかどうかを確認してください。 フィールドを選択するには、該当するフィールドをクリックしてハイライトさせます。 ある行を選択するには、ラン回数をクリックして、この行全体をハイライトさせます。 スプレッドシート全体を選択するには、右クリックメニューから**すべてを選択**コマンド をクリックします。

列の幅を変更するには、幅を変えたい列のタイトルエリアにカーソルを移動させます。 カーソルは矢印が付いた2つの垂直線に変わります。カーソルをクリックしてカラム が希望のサイズになるまでドラッグし、マウスキーを離します。

スプレッドシートを表示するには、ナビゲーションウィンドウで**シーケンス > 編集**を 選択します。

シーケンスによるデータ取り込みまたは解析が進行中の

ステータス 時は、このフィールドが有効となります。これは、その 測定の現在の状態を表示します。

> フィールドの矢印ボタンをクリックすることにより、利 用可能なタイプから [分析タイプ] を選択します。ダイ アログボックスが表示されるので、ここで分析タイプを 選択できます。分析タイプと処理のリストを表示するに は、「<u>サンプルの分析タイプの設定</u>」を参照してくだ さい。

分析タイプのパラメータ

分析タイプ

選択された各分析タイプについて、使用する分析タイプ に必要なパラメータを入力するように求められることが あります。ほとんどの場合、これにはレポートに使用す るテンプレートの選択が含まれます。

複数測定における分析タイプの設定

複数の測定について、分析タイプを素早く変更すること ができます。このためには、スプレッドシート内の目的 の行をハイライトさせて右クリックし、分析タイプの設 定を選択します。表示されたリストから分析タイプを 選択すると、選択した行にそのタイプが適用されます。

キャリブレーション測定について、キャリブレーション スタンダードのレベル番号を入力する必要があります (例えば、5 つのキャリブレーション濃度レベルがある 場合、各キャリブレーション測定には、そのレベルを表 す番号が付きます。ただし、この数はスタンダードの濃 度量ではありません。濃度量はピークテーブルに入力さ れます)。

このフィールドには、選択したキャリブレーション測定 での1つまたは複数のピークに関する濃度オーバーラ イドを入力します。これは、選択した測定がキャリブレ ーション測定時のみ有効となります。

このフィールドをクリックすると カスタムパラメータ *オスタムパラメータ* ダイアログボックスが表示されます。ここでピークごと あるいはシステム全体のシーケンスカスタムパラメータ を設定できます。利用可能なカスタムパラメータは構成

レベル

248

されているシーケンス行のアクティブなメソッドから取 得します。

回数 バイアルごとの繰り返し注入回数を入力します。

フラクションコレクタの開始ロケーション (バイアルま たはウェル)を選択します。

ここには、サンプルの識別名を入力します。これは、文字と数字で構成されます。サンプル ID には固有の番号が追加されます。新規シーケンスダイアログに < サンプル ID という形式で入力します。サンプル ID は、データファイルに保存されます。

データ取り込みおよび解析に使用するメソッド名です。 メソッド名がわからない場合にはこのボタンをクリック し、表示されたディスク上のリストからメソッド名を選 択します。

ファイル名

測定で得られた生データの保存に使用するデータファイ ル名を入力します。ファイル名にはすでに固有の番号が 追加されています。新規シーケンスダイアログにデータ ファイル名を <データファイル名> という形式で入力 します。

注:繰り返し測定回数に2以上を指定した場合、測定ご

とに生成されるデータファイル名には Rep1、Rep2 な どが付加されます。

この値は、濃度計算時に除数として使用されます。これ は、秤量による試料間の誤差を補正するために使用しま す。または、注入で検出された量を求めるのではなく試 料の総量に対するパーセント値を求めたい場合に使用し ます。

キャリブレーション測定を行う場合、内部標準物質量はメソッドのピークテーブルから採用されます。未知試料の測定の場合は、未知試料内の内部標準物質の量を入力します。

サンプル量

この測定で使用する最高 3 個までの乗数を入力しま **補正係数 1,2,3,4,5** す。定量化されたすべてのピークに、これらの乗数が掛 けられます。

この測定で使用する最高 3 個までの希釈率を入力しま **希釈係数 1,2,3,4,5** す。定量化されたすべてのピークは、これらの希釈率で 割られます。

 アクションダイアログを呼び出すと、各測定について、

 アクション

 テスト、結果、アクションの組み合わせを指定すること

 ができます。アクションの設定の詳細については、

 「シーケンスランのアクションの設定」を参照してく

ださい。

注:クライアント/サーバシステムにおいては、ユーザと 関連したアクション (ポーズやアラームなど) はクライ アントマシン上のユーザ入力を要求しません。これはサ ーバが機器をコントロールしていることによりま す。

この試料に関する説明などを入力します。これは、生デ 説明 ータファイルに保存されるテキスト情報です。

試料分析タイプの設定

分析タイプは、シーケンスの各サンプルに解析、キャリブレーションまたはレポートに 関する設定に使用されます。各サンプルは、複数のランタイプを割り当てることができ ます。新しいシーケンスの作成にシーケンスウィザードを使用している場合、何種類か のランタイプが自動的に割り当てられます。

シーケンスが作成された後に分析タイプを変更または追加する方法:

- 1. シーケンススプレッドシートで、**分析タイプ**フィールドの矢印ボタンをクリッ クします。
- 下記一覧の利用可能な分析タイプの中から、該当するボックスをチェックして 選択します。

選択した分析タイプによっては[分析タイプのパラメータ]が表示されます。その場合、パラメータに値を入力したり、解析に使用するテンプレートを選択したりしなければなりません。

分析タイプ	アクション
検量線をすべて削除	すべてのキャリブレーションレベルについて、キャリブ レーションのレスポンスファクターおよび係数を削除し ます。
このレベルの検量線を削 除	現在のレベルに対するレスポンスファクターおよび係数 のみを削除します。
検量線を印刷	キャリブレーションの終わりにキャリブレーションレポ ートを印刷します。
繰り返し測定値の平均	繰返し測定値の平均を強制的に行います。
繰り返し測定値を削除	キャリブレーション前に、このレベルでのキャリブレー ション繰返し測定値を削除します。
ループ開始 (LPV)	無限ループの開始というフラグを立てます。これらのフ ラグ位置とその間の測定は、停止されるまで連続的に行 われます。
ループ終了 (LPE)	無限シーケンスループの終了のフラグを立てます。
- スタートアップ スタートアップ試料としてのフラグを立てます。(使用 中の機器がサポートする場合に表示されます。)
- **シャットダウン** シャットダウン試料としてのフラグを立てます。

追加レポート印刷 印刷のためのレポートテンプレートを追加指定すること ができます。

システムスータビリティ システムスータビリティ試験の最初の測定に適用しま開始 す。

システムスータビリティシステムスータビリティ試験開始と終了の間のシステムスタンダードスータビリティ試験測定に適用します。

システムスータビリティ システムスータビリティ試験の最後の測定に適用しま終了 す。

最初のランはシーケンスサマリーに含まれ、サマリーレ
 ポートに使用されるサマリーレポートテンプレートの役
 割もあります。シーケンスレポートを参照してください。

シーケンスのサマリーに含まれる測定に適用します。
 シ
 <u>ーケンスレポート</u>を参照してください。

- **サマリー終了** す。<u>シーケンスの</u>サマリーに含まれる最後の測定に適用しま
- **バイアルサマリー** 指定した行について、バイアルサマリーレポートを作成 する際に適用します。

 QC チェック用標準試料に適用します。シーケンス中に

 挿入されたチェック用標準試料は、QC チェック用標準

 レポートを作成するために使用します。これは、キャリ

 ブレーションなしでクロマトグラムおよび条件をチェッ

 クするための手段です。

添加なし添加あり/添加なし試料ペアのうち、未添加試料に適用し、添加回収レポートに使用されます。

 シングルレベルの添加回収分析に使用される添加試料

 添加
 (未知試料と添加試料)に適用します。

添加 1/2添加 1/2添加 1/2します。

添加 2/2 デュプリケートレポートに使用されるデュプリケート試料に適用します。

デュプリケート デュプリケートレポートに使用されるデュプリケート試

料に適用します。

キャリブレーションサマリーレポートに使用する最初の キャリブレーション試料に適用します。この分析タイプ に出会うと、データシステムはすべての同定ピークの現 在のリテンションタイムを保存します。これらは"古い RT"としてレポートに表記されます。キャリブレーショ ンレポート終了に指定された試料の測定後、更新された リテンションタイムは保存され、キャリブレーション レポートに"新しい RT"と表記されます。さらに、各 ピークについて、平均レスポンスファクターが計算さ れ、%RSD が計算され、ピークテーブルから予 想%RSD と比較されます。この%値を上回ると、それ がトリガーとなって[Fail]アクションが(設定されていれ ば)実行されます。

キャリブレーション終了 キャリブレーションサマリーレポートで使用される最後

(CAE) のキャリブレーション試料に適用します。

ベースラインチェック ベースラインチェックを有効にします。

ブランク補正に使用するベースラインファイルとして使ベースラインファイル用します。シーケンスの二次的ファイルから減算するチャンネルを選択します。

QC チェックの設定

QC チェック標準を設定する手順は以下の通りです。

- シーケンススプレッドシートで、QC チェック標準を設定したいサンプルの分 析タイプ をクリックします。
- 2. サンプルの分析タイプダイアログボックスで QC チェック標準チェックボタ ンをクリックします。
- 3. QC チェックスタンダード数を入力し、続いて QCCheckStd.rep テンプレ ートでレポートに使用するレポートテンプレートを選択します。

シーケンスの複数のサンプルを QC チェック標準に設定する手順は以下の通りです。

- シーケンススプレッドシートで、QC チェック標準に設定したい先頭行のラン
 回数をクリックし、QC チェックスタンダードに設定したい最終行までドラッ グします。
- 2. 選択した行の上で右クリックし、分析タイプの設定/QC チェック標準コマン ドをクリックします。
- 何サンプルごとに QC チェックサンプルを設定するか入力します。(例えば 2 を入力した場合、最初の行が QC チェックスタンダードに設定されますが続く 2、3回目のランは QC チェックスタンダードに設定されず、4回目のランが QC チェックスタンダードに設定される、というようにハイライトされた最終 行まで設定が行われます。)OK をクリックします。ランタイプは QC チェッ ク標準に設定されます。

濃度オーバーライド

濃度オーバーライドは、メソッドに設定されているものとは違うキャリブレーションの 濃度に修正するために使用します。これは、シーケンススプレッドシートから以下の手 順で実行できます。

濃度オーバーライドを入力する方法:

- 1. シーケンススプレッドシートの**濃度オーバーライド** をクリックして変更した い濃度を実行します。
- 2. 編集したいチャンネル を選択します。
- 新しい濃度を入力したいピークを位置づけ、NewConc をクリックします。 指定済みの実行としてこのピークに使用したい濃度を入力します。必要であれ ば複数の成分(またはグループ)の濃度が変更できます。
- 4. **OK** ボタンをクリックします。

注:シーケンススプレッドシートの濃度オーバーライドは、キャリブレーション測定だ けで有効です。

シーケンスカスタムパラメータ

カスタムパラメータは、レポートを作成したりユーザプログラムを使用したりできるユ ーザが入力する値(もしくはテキスト)です。

シーケンスのカスタムパラメータを設定する方法:

- 1. <u>シーケンススプレッドシート</u>のカスタムパラメータフィールドを選択します。
- カスタムパラメータ ダイアログで、チャンネル または システムワイド値 の 範囲のいずれかが有効になります。これは、カスタムパラメータがシーケンス のこの行に指定されたメソッドでの定義方法によって決定されます。 (カスタ ムパラメータを参照してください)。
 - チャンネルが有効である場合、定義したいピークごとのパラメータのチャンネルをドロップダウンメニューから選択します。そのチャンネルに定義されたピークがスプレッドシートに表示されます。ピーク名の下に、表示される各ピークのカスタムパラメータの値を入力します。
 - システムワイド値が有効である場合、使用する値を入力します。この値 は全体のクロマトグラムに適用されます。
- 複数のランにパラメータを設定するには、上下の矢印を使ってシーケンスの次、 または前のランに移動します。<u>コピー</u>または<u>下へコピー</u>パラメータは、各ラ ンが同じメソッドを使用している場合は異なるランの間で変わらずに使用する ことができます。
- 4. **OK** をクリックします。

Custom P	arameters			X
Run #: Sample ID:	2			
Method: File:	Newtutorial.met			
Channel:	Det-1:1		•	
		Peak Name		
System wide	e values:			
	Parameter	Value		
1 T V		OK	Cancel	Help

シーケンスランのアクションの設定

シーケンスランの結果に応じて実行されるアクションを設定できます。アクションは該 当するランのシーケンススプレッドシートで指定されます。

シーケンスランのアクションを指定する方法:

1. 機器ウィンドウのシーケンス編集ボタン Market シーケンススプ レッドシートを開きます。

- シーケンススプレッドシートを右側へスクロールし、アクション列を表示させます。(カラムが可視状態にない場合 シーケンススプレッドシートカラムのカスタマイズを参照してください。)
- 3. アクションセルの青色の矢印をクリックします。
- アクション ダイアログボックスでテストを選択すると、その結果は選択した ポストランアクションをトリガーします。選択できるテストには以下がありま す。
 - 任意の条件
 - キャリブレーション
 - QC
 - システムスータビリティ
 - ハードウェアステータス
 - 濃度リミット
 - ベースラインチェック
- 5. 結果セルをクリックし、アクションを実行するトリガーとなるテスト結果を選 択します。結果には以下の項目が含まれます。
 - 合格
 - 不合格
 - 回復可能

- 限度超過
- 限度未満
- アクションセルをクリックし、テスト結果を満たした場合に実行するアクションを選択します。
 - 中止
 - ポーズ
 - アラーム
 - シャットダウン
 - 継続
 - 再注入
 - ユーザプログラムを実行する
 - 移動
 - システムスータビリティを再開する
- 7. 選択したアクションによってはパラメータの入力が必要です。([パラメータ] が不要の場合、このセルは無効になります。



中止 シーケンスを中止します。	と シーク	ケンスを中止します。
-----------------	-------	------------

ポーズ 現在実行中のラン終了後にシーケンスを一時中断 し、ユーザがシーケンスを再開するのを待ちます。

アラーム アラームを起動します。

分析タイプが[シャットダウン]の行があるかどうか次
 行以降から検索し、最初に見つけた行を実行しま
 す。「シャットダウン」ランタイプが見つからない
 場合、シーケンスの開始から検索されます。

継続

シーケンスを継続します。

以下のアクションを選択した場合、パラメータの入力が必要です。

再注入	注入が失敗した時に、試料の再注入を試みる 回数を入力します。
ユーザプログラムを実行する	実行したいプログラムの UNC パス名を入力 します。正しいパスとファイル名を使用して いることを確認するには、ファイルボタンを クリックしてロケーションを参照し、ファイ ルを選択します。

シーケンスについて

セルのボタンをクリックして[移動先の行番 号]ダイアログボックスを開き、[移動先の行 番号]にシーケンス内の行番号を、[繰り返し 回数]に新しい行へ移動する前に再試行する回 数を入力します。

システムスータビリティを再開する

システムスータビリティ試験を再実行する回 数を入力します。

- 8. 必要であれば複数のアクションが設定できます。完了したら、[OK]ボタンを クリックします。
- 注:クライアント/サーバシステムにおいては、ユーザと関連したアクション (ポーズやアラームなど)はクライアントマシン上のユーザ入力を要求しません。 これはサーバが機器をコントロールしていることによります。

データ取り込みとコントロールについて

コントロールメニューのコマンドは、データ取込と機器のコントロールに関したもので す。一般に、データ取込には2つの方法があります。

- 1. シングルランでは1回の注入のデータを取得します。
- シーケンスラン: 注入回数、メソッド、データファイル名およびキャリブレー ションを定義したシーケンステーブルをあらかじめ作成しておき、それを使っ て一連のデータ取込を自動的に行います。なお、コントロールメニューに追加 されるコマンドは機器構成に依存します。

移動

関連項目

シングルランによるデータ取込

<u>シーケンスランの取得</u>

オーバーラップ前処理モードについて

ブラケット(挟み込み)キャリブレーション

<u>シーケンスの再解析</u>

ランキューについて

<u>キューに測定を追加</u>

結果に測定を追加

実行中の測定へのユーザーのアクセス

実行中の測定を中止

<u>分析時間の延長</u>

ランキューに項目を追加または削除

データを取り込むための解析解除

<u>フラクションコレクタコンフィグレーション</u>

シングルランによるデータ取込

データを収集する方法は 2 つあります。1 つはシーケンスラン (複数試料の測定)、も う 1 つはシングルラン (単独試料の測定)です。データ取込のためにシングルランを行 うには、分析に使用するメソッドと収集したデータを保存するためのファイル名を指定 する必要があります。

注:データ取込に使用するメソッドは、その機器の設定において、データを収集するようにチャンネルを選択し、サンプリング間隔と分析時間が指定されていなければなりません。

シングルランを作成する方法:

- ツールバーのシングルラン ボタンか 、またはメニューのコントロール >
 シングルランを選択します。
- 2. シングルラン ダイアログボックスで、下記テーブルに一覧表示したフィール ドをすべて入力します。
- 3. シングルランダイアログの設定が完了したら、スタートボタンをクリックしてデータ取込を開始します。
- 4. データが収集され、ディスクに保存される間、現在のデータはクロマトグラム ウィンドウに表示されます。測定終了後、メソッドのパラメータにしたがって クロマトグラムが解析され、指定してあればレポートが作成されます。データ 取込が終了しても解析が行われない場合、解析結果を見るには【解析】ボタン をクリックします。

この部分では、測定に使用するファイルを指定します。

 分析情報
 サンプル ID - 測定する試料のサンプル ID を入力 します。これにはテキストおよび数字を含めること ができ、データファイルとともに保存されます。こ のフィールド横にある矢印ボタンをクリックして、 あらかじめ定義されている ID の番号の中から選択 することもできます。

- メソッド データ取込と解析に使用するメソッドの ファイル名を入力します。そのメソッドがデフォル トのメソッドディレクトリに含まれていない場合 は、ファイル名だけではなくパス名も入力してくだ さい。フィールド横のファイル ボタンをクリック し、ディスク上のメソッドリストからメソッドを選 択することもできます。
- データファイル ディスクにデータを保存するためのファイル名を入力します。このフィールド横にある矢印ボタンをクリックすることより、あらかじめ指定されている名前を選択することもできます。既存のファイルが [public] という語を含むパスを持つディレクトリに保存されている場合を除き、既存のファイル名と同じ名前は使用できません。例えば、データファイルを [C:\Public\Date] という名前のディレクトリ内に保存すると、このディレクトリに保存されているファイルは上書きできます。ソフトウェアは自動的に.dat という拡張子を付けます。
- 結果パス 測定でデータ取込されるデータを保存す るためのパス名を入力します。ファイルオープンボ

タンをクリックして、ディスク上のリストからパス を選択します。

• 結果名 - 結果ファイルに名前を入力します。

測定したい回数を入力します。測定は、指定した通りにデー タファイル名に番号をつけながら、試料測定が終了するまで 確認することなしに自動的に続けられます。シングルランの シーケンスが中止され、どのパラメータも変更せずにシング ルのデータ取込を繰り返すと、ラン番号は、続きの番号から 開始されます。例えば、測定番号 101 から開始して 4 回の 測定を設定し、次に 102 回目の測定中に中止したとしま す。測定を再開すると、次のラン番号は 105 となります。 サンプル ID もインクリメント番号を設定している場合、同 様に自動的に繰り上げられます。

- PDF に保存 このボックスをチェックすると、レ ポートはラン終了後に PDF 形式で保存されます。
- ハードコピーの印刷 このボックスをチェックする
 と、レポートは測定終了時に印刷されます。
 - プリンタの選択 ハードコピーの印刷のボックスを チェックすると、ドロップダウンメニューからプリ ンタを選択します。

濃度 濃度の計算方法に関係する値を入力することができます。メ

分析回数

レポート

ソッドをキャリブレーションする前にデータ取込のためにシ ングルランをする場合は、これらの数値はデフォルトレベル のままにしておいてください。

この値は、濃度計算時に除数として使用されます。これは、 **サンプル量** は、注入で検出された量を求めるのではなく試料の総量に対 するパーセント値を求めたい場合に使用します。

キャリブレーション測定を行う場合、内部標準物質量はメソ
 ISTD ッドのピークテーブルから採用されます。未知試料の測定の
 場合は、未知試料内の内部標準物質の量を入力します。

補正係数 浦正係数 れたすべてのピークに、これらの乗数が掛けられます。

 ・徹底の一般で使用される1~3個の希釈係数を入力します。定量

 ・他されたすべてのピークは、これらの希釈率で割られます。

検量線作成

サンプルをキャリブレーションサンプルとして使用する場合 は、このボックスを選択します。このボックスをクリックす ると、以下のフィールドおよびオプションが使用可能となり ます。

キャリブレーションレベル - このキャリブレーション標準サンプルのキャリブレーションレベルを入

カします。シングルレベルキャリブレーションであ れば**1を入力します。**

- 検量線をすべて削除(CCA) サンプルを測定する 前に、使用するメソッドから既存のキャリブレーションファクターをすべて削除したい場合は、このボックスをクリックします。
- このい、Nの検量線を削除(CCL) サンプルを測定 する前に、このレベルに対する既存のレスポンス ファクターを削除したい場合は、このボックスをク リックします。
- 検量線を印刷(CPT) サンプルの測定後にキャリ ブレーションレポートを印刷したい場合は、このボ ックスをクリックします。

繰り返し測定値の削 ゆ ゆ から既存の繰り返し測定値をすべて削除したい場合は、こ のボックスをクリックします。

繰り返し測定値の平 このキャリブレーション レベルに対する測定値の平均値を均 取りたい場合は、このボックスをクリックします。

ベースラインチェック
 このボックスは機器構成で、ベースラインチェック
 オプションを選択した場合に表示されます。このボックスをチェック
 すると分析ラン実行時にベースラインテストが実行されま

す。

初期設定では、分析は即時実行されます。ランの開始時間を 指定するには スケジュールラン ジョンを選択します。 スケジュールラン ダイアログボックスで次のオプションか ら選択します。

分析開始

- 即時 即時
- 指定時間後 時間を指定した後
- **指定日時** 特定の日時

説明… このボタンをクリックすると、測定のメモを入力することが できます。

機器がこの機能をサポートしている場合、スタートアップ/ シャットダウンが表示されます。このボックスにより分析ラ ンをスタートアップサンプルあるいはシャットダウンサンプ ルとして設定できます。これらのボックスがチェックされる と、それは機器のスタートアップ/シャットダウンルーチン のトリガーとなります。詳細は機器コントローラの取扱説明 書を参照してください。

オートサンプラ 構成されたオートサンプラが、メソッドで注入量を指定する ことができるのであれば、このセクションが表示されます。

- プログラムの使用 オートサンプラの サンプル前 処理 を使用したい場合、このチェックボックスを クリックします。チェックボックスをクリックした 後、フォルダボタンをクリックし、使用する前処理 ファイルを選択します。
- バイアル 注入するオートサンプラバイアル番号を 入力します。
- フラクションスタート 注入に使用するフラクションコレクタバイアル番号を入力します。
- 注入量-このランの注入量を入力します。オートサンプラでサポートされている場合は、使用するメソッドオプションが表示されます。選択すると、このオプションでは、機器の機器条件で指定されているデフォルトの注入量を使用します。

シーケンスランによるデータ取込

シーケンスを作成し、保存すると、これを使用して、データの収集、解析ができ るようになります。

シーケンスによるデータ取込を開始する方法:

- 2. シーケンスラン ダイアログボックスで、下記テーブルに一覧表示したフィ ールドをすべて入力します。
- 3. 開始をクリックしてシーケンスの取得を開始します。「現在のデータ」の 表示が選択されている場合、クロマトグラムウィンドウにリアルタイムで データが表示されます。

この部分では、測定に使用するファイルを指定します。

- シーケンス名 使用するシーケンス名を入力する
 か、ファイルボタンをクリックして利用可能なシーケンスリストからシーケンスファイルを選択します。ファイル名は 70 文字を超えることはできません。
- 結果パス 測定でデータ取込されるデータを保存するためのパス名を入力します。ファイルオープンボタンをクリックして、ディスク上のリストからパスを選択します。
 - 結果名 結果ファイルに名前を入力します。

シーケンスを実行したい範囲を選択します。

- すべて シーケンス中のすべての測定を実行する時
 にはこれをクリックします。
- 選択 -シーケンススプレッドシート内の一連の測定
 をハイライトして選択している場合に、その部分だけを実行するには、これをクリックします。

実行範囲

シーケンス情報

 範囲 - 実行したい測定範囲を入力します。例えば 「4-6」と入力すると、シーケンスの4、5、6行が 測定されます。「4-」と入力すると、4^{行目}から最後 の行までが測定されます。

タワー、処理モード、ブラケットキャリブレーションについて選択します。

- タワー 機器としてデュアルタワーが設定されている場合は、シーケンス実行用としてタワーモードを 選択することができます。デュアル、フロントおよびバックを選択できます。
- 処理モード データを再処理するためのモードを選択します。選択できるオプションは機器構成に依存します。機器がその機能をサポートしていない場合、そのオプションはグレーで表示され選択できません。[重複サンプル前処理]モードを使用できるオートサンプラもあります。このモードの使用についての情報および制限事項は、<u>重複サンプル前処理</u>についての項を参照してください。
- ブラケットキャリブレーション 実行するブラケットのタイプを選択します詳細については<u>ブラケット</u> (挟み込み) キャリブレーションの項を参照してください。
 - **なし** ブラケットキャリブレーションを行い

モード

ません。

- 標準標準モードのブラケットキャリブレーションを実行します。
- シーケンス シーケンスモードのブラケット キャリブレーションを実行します。
- シーケンス/再計算 シーケンスモードのブ ラケットキャリブレーションを実行し、さ らに戻ってキャリブレーションランを計算 します。
- 結果レビュー 各行の間のシーケンスを一時停止さ せて解析結果を確認する場合にクリックします。
- キャリブレーションレビュー 各キャリブレーションセットの後で、シーケンスを一時停止させたい場合にクリックします。キャリブレーションセットとは、あるシーケンス中に生じる1つまたは複数のキャリブレーションランと定義されます。

レポート

- PDF に保存 このボックスをチェックすると、レポートはラン終了後に PDF 形式で保存されます。メソッド または シーケンス レポートのいずれかを選択します。
 - ハードコピーの印刷 -このボックスをチェックする

と、レポートは測定終了時に印刷されます。

 プリンタの選択 - ハードコピーの印刷のボックスを チェックすると、ドロップダウンメニューからプリ ンタを選択します。

初期設定では、分析は即時実行されます。ランの開始時間を 指定するには スケジュールラン の ボタンを選択します。 スケジュールラン ダイアログボックスで次のオプションから 選択します。

分析開始

- **即時 -** 即時
- 指定時間後 時間を指定した後
- 日時指定 特定の日時

このフィールドは指定されたアドレスへの E-Mail 通知を有 効にするために使用します ([宛先:]フィールドに入力)。

- シーケンス開始時に E-Mail 通知を行うには 開始時
 を選択します。
- 電子メール受信者
- シーケンス停止またはエラー発生時に E-Mail 通知 を行うには 終了またはエラー時 を選択します。

オーバーラップ前処理モードについて

シーケンスランを実行するときにオーバーラップ前処理オプションをシーケンスラン ダイアログボックスから選択すると、ソフトウェアは(1行ずつではなく)すべてのシー ケンスをハードウェアへ送ります。このオプションは、サンプルの前処理を並行して実 行することで、オートサンプラの処理の最適化を可能にします。

サンプル前処理モードの制約は以下の通りです。

- 分析タイプにループ開始とループ終了は使用できません。
- 不合格時のアクションに指示できるのはアラーム、継続、そして E-Mail 送信 だけです。
- シーケンスラン開始後はシーケンスを編集できません。

サンプル前処理モードをサポートするオートサンプラのために、シーケンスの行と、シ ーケンスのその次の行のバイアル番号と前処理プログラムが機器へ送信されます。サン プル前処理では以下を行います。

- 一連のシーケンスが分析される間、次のサンプルバイアルを事前に吸引します。
- シリンジを事前に洗浄し、サンプルを注入します。

これらのオートサンプラのために、シーケンステーブルオプションは禁止されません。 割り込み分析、シーケンスの中止、あるいはスマートシーケンスによって処理の順番が 変わる場合、事前吸引したサンプルは分析されませんが、それは無駄になります。

注:サンプル前処理モードは、それをサポートしているオートサンプラだけで利用でき ます。サンプル前処理が備わっているかどうか、オートサンプラのドキュメントを確認 してください。

ブラケット(挟み込み)キャリブレーション

<u>シーケンスラン</u>ダイアログボックスの**ブラケットキャリブレーション**オプションで、 シーケンスの「ブラケット」で囲まれた試料のキャリブレーション繰り返し測定値を使 用してデータを処理することができます。これにより、一貫したレスポンスファクター を使用してデータファイルを解析することができます。ブラケットオプションを選択す ると、キャリブレーション標準試料が未知試料の周囲にブラケットされていることとは 無関係に、未知試料の結果を計算する前にキャリブレーション標準が解析されるような 形で、結果が解析されます。ブラケットする操作は、シーケンス再解析の一部として実 行することもできます。

- 標準のブラケットキャリブレーション -標準のブラケットキャリブレーション
 を選択した場合、シーケンス中の未知試料グループの前後にあるキャリブレーション標準試料により決定されるレスポンスファクターに基づいて、未知
 試料の各グループが計算されます。
- シーケンスのブラケットキャリブレーション ブラケットキャリブレーションオプションを選択した場合、シーケンス中の未知試料は、測定した位置に関係なく、そのキャリブレーション標準試料により作成されたレスポンスファクターに基づいて計算されます。キャリブレーションはすべてのサンプルとキャリブレーション標準試料の測定後に行われます。
- 逆算でシーケンス解析 シーケンス/再計算の方法では、シーケンスのブラケット法を使用します。その後、シーケンスの最初に戻り、最終的に計算された検量線を使用して、濃度計算しレポートします。このとき、キャリブレーションランに対しても再計算が行われます。

以下のシーケンスを例にして説明します。標準のブラケットキャリブレーションを使用 すると、キャリブレーション測定1と2、および5と6の終了後に求められるレスポ ンスファクターを使用して、未知試料3と4が計算されます。未知試料の測定7と8 は、キャリブレーション試料5と6、および9と10の測定後に求められたレスポンス ファクターを使用して計算されます。

同じシーケンスについて、シーケンスのブラケットキャリブレーションを使用すると、 すべてのキャリブレーション標準(1、2、5、6、9 および 10)が完了した後で求められ たレスポンスファクターを使用して計算されます。

Sequence: Bracket.seq							
Bun #	Status	Run Type	Level	Sample ID	Method	Filename 🔺	
1		Calibration 💿 🕨	1	Bracket01	test.met 🔸	Bracket01 📀	
2		Calibration	2	Bracket02	test.met	Bracket02	
3		Unknown	0	Bracket03	test.met	Bracket03	
4		Unknown	0	Bracket04	test.met	Bracket04	
··· 5 ···		Calibration	1	Bracket05	test.met	Bracket05	
6		Calibration	2	Bracket06	test.met	Bracket08	
7.000		Unknown	0	Bracket07	test.met	Bracket07	
8,		Hinknown	Π	Bracket08	test met	Bracket08	

シーケンスの再解析

データ取り込み後、シーケンスを使用して、シーケンス内のファイルのすべてあるいは いくつかを自動的に解析または再解析できます。シーケンスの再処理は、積分または他 のメソッドパラメータを変更した場合や一連のデータファイルに対する新しい結果を生 成したい場合のデータの再解析に便利な方法です。また、シーケンスを使用して、マル チレベルキャリブレーションメソッドをキャリブレーションまたは再キャリブレーショ ンできます。

シーケンスを処理するには

1. <u>結果セットを開く。</u>

3. 以下のフィールドを入力してください。

シーケンス名、結果パス、および **結果名** は自動追加されま す。

シーケンスを実行したい範囲を選択します。

- すべて シーケンス中のすべての測定を実行する時
 にはこれをクリックします。
- 選択 -シーケンススプレッドシート内の一連の測定
 をハイライトして選択している場合に、その部分だけを実行するには、これをクリックします。
 - 範囲 実行したい測定範囲を入力します。例えば 「4-6」と入力すると、シーケンスの4、5、6行が 測定されます。「4-」と入力すると、4^{行目}から最後 の行までが測定されます。

タワー、処理モード、ブラケットキャリブレーションについて選択します。

モード

実行範囲

 タワー - 機器としてデュアルタワーが設定されている場合は、シーケンス実行用としてタワーモードを 選択することができます。デュアル、フロントおよ びバックを選択できます。

- 処理モード データを再処理するためのモードを選択します。再解析を選択すると、各行について、指定されたメソッドを使用して生データの解析が行われます。最新の結果を使用を選択すると、データファイルに保存されている最新の結果を使用して、レポートまたはシーケンスサマリーが印刷されます。オリジナルの結果を使用を選択すると、データファイルに保存されている当初の結果を使用して、レポートまたはシーケンスサマリーが印刷されます。ファイルを検討するのみの場合には、表示のみを選択します。
- ブラケットキャリブレーション 実行するブラケットのタイプを選択します詳細については<u>ブラケット</u> (挟み込み) キャリブレーションの項を参照してください。
 - なしブラケットキャリブレーションを行い ません。
 - 標準標準モードのブラケットキャリブレーションを実行します。
 - シーケンス シーケンスモードのブラケット
 キャリブレーションを実行します。
 - **シーケンス/再計算** シーケンスモードのブ

ラケットキャリブレーションを実行し、さ らに戻ってキャリブレーションランを計算 します。

- 結果レビュー 各行の間のシーケンスを一時停止さ せて解析結果を確認する場合にクリックします。
- キャリブレーションレビュー 各キャリブレーショ ンセットの後で、シーケンスを一時停止させたい場 合にクリックします。キャリブレーションセットと は、あるシーケンス中に生じる1つまたは複数のキ ャリブレーションランと定義されます。
 - PDF に保存 -メソッドのまたはシーケンスの選択。このボックスをチェックすると、レポートはラン終了後に PDF 形式で保存されます。
- ハードコピーの印刷 メソッドまたはシーケンスの 選択。このボックスをチェックすると、レポートは 測定終了時に印刷されます。
 - プリンタの選択 ドロップダウンメニューからプリンタを選択します。

関連項目

確認

データを取り込むための解析解除

ランキューについて

ランキューは <u>シングルラン</u> と <u>シーケンスラン</u>の管理とスケジューリングに用いられま す。一旦、シーケンスまたはシングルランを開始すると、自動的にランキューに入力さ れます。

現在のランキューを表示するには**ランキューの表示** ボタン と を 選択します。ランキューの各行は実行中または大気中の試料またはシーケンスを表します。この機器に対する 試料やシーケンスの取り込みと再解析の両方が表示されます。

ランキューから、以下の項目を含むキューの中の各測定またはシーケンスの詳細を表示 できます。

- **タイプ** シングルランまたはシーケンス
- 名前 結果データファイルの名称
- 状態 保留中、実行中、完了
- **ステータス** 正常に完了、中止、失敗、**X** 分ごと。
- ユーザー
- バイアル
- ボリューム
- 説明

シーケンスを実行する場合、シーケンススプレッドシートに示されるステータスは、シ ーケンス内の個々の測定のステータスを表示します。

ランキューに項目がある場合は、ウィンドウ上部のボタンが使用可能です。

- 開始を一時停止ボタンの後に押すと、ランキューを再開します。サンプルを 測定中か、ランキューが空の場合、このボタンは無効になります。
- 一時停止は実行が1件完了すると直ちにランキューを一時停止して次のアクションに備えて待機します。シーケンス全体が完了するまで待つ必要はありません。
- **中止** を押すとキューで現在実行中の項目をすぐに終了し、シーケンスを一時 停止します。
- ランキューウィンドウを右クリックすることで、ランキューの<u>追加機能</u>を実行 できます。

キーに測定を送信

分析の追加ボタンは、現在のシーケンスまたはシングルランを使ってデータ取り込みを している時にシングルランまたは シーケンスラン ダイアログボックスのいずれかに表示されます。

分析の追加ボタンを使えば、現在の測定が終了した時にシングルランを行うように予約 することができます。現在、一連の測定をシーケンスで行っている場合は、このランは ランキューの終わりに追加されます。

関連項目

キューに測定を追加

キューに測定を追加

キューに測定を追加する方法:

- 1. ツールバーのランキューの表示 ボタン 2020を選択します。
- ランキューダイアログボックスのメソッドドロッブダウンメニューから実行 したいメソッドを選択します。表示されるメソッドは、現在のプロジェクトの ものです。
- サンプル ID ボックスに、サンプルに使用する固有のサンプル ID を入力します。シングルランダイアログのサンプル ID としてサポートされている有効なサンプル ID パラメータを入力できます(など)。このフィールドは、【送信】ボタンを押すごとに増えます。
- 4. 実行の追加情報を指定するには詳細/シングルラン ダイアログを選択します。
- 5. 分析の追加をクリックしてランキューにシングルランを送信します。

結果に測定を追加

複数または単一のランを既存のコンテナに追加することができます。

複数のランを既存のコンテナに追加する方法:

- 1. メニューからコントロール > ランを結果に 追加を選択します。
- 2. ランを結果に追加 ダイアログボックスで、フィールドはオープンメソッドと ともに追加されます。必ずすべてのフィールドを入力してください。
- 3. 開始を選択します。

シングルランを結果に追加する方法:

- 1. メニューからコントロール > シングルランを結果に 追加を選択します。
- 2. シングルランを結果に追加 ダイアログボックスで、フィールドはオープンメ ソッドとともに追加されます。必ずすべてのフィールドを入力してください。

3. 開始を選択します。

新しいランを <u>結果レビューモード</u>の<u>結果シーケンス</u> ダイアログボックスで確認してく ださい。

実行中の測定へのユーザーのアクセス

測定またはシーケンスを送信したユーザーは、<u>分析中止</u>、<u>分析時間の延長</u>、または シ ーケンス中止機能にアクセスすることができます。

測定またはシーケンス送信したユーザー以外の場合、機器のアクセス権を持っていれば 測定を見ることはできますが、別のユーザが開始した測定またはシーケンスを停止する ことはできません。システム管理者または機器管理者権限を持つユーザーは、測定とシ ーケンス機能へのフルアクセスが可能になります。

ー旦、クライアントワークステーションから取り込みコントローラに測定やシーケンス を送信すると、メソッドを修正することができます。このメソッドを使用する二次的な シーケンスランに使用するように変更するには、ファイルを保存(ファイル>メソッ <u>ドの保存</u>)する必要があります。複数のクライアントでメソッドが変更・保存された場 合、最後のクライアントで変更された内容が保存され、ほかのクライアントで行った変 更はすべて失われます。このメソッドを用いた次のシーケンスランの開始前にメソッド を保存しないと、次のシーケンス開始時にクライアントでの変更は失われます。

取り込みコントローラにシーケンスを送信したユーザーは、クライアントワークステー ションから送信したシーケンスへの測定の追加、または削除することができます (ユー ザーが適切な権限を持っている場合)。シーケンスの変更を有効にするには、シーケン スを保存する必要があります (ファイル > シーケンス > 保存)。シーケンスが保存さ れると他のすべてのクライアントは変更の通知を受け、またシーケンスの次の測定は変 更されたシーケンスで実行されます。

実行中の測定を中止

測定が中止されると、それまでのデータはデータファイルに保存されます。ただし、そ のデータの解析は行われません。中止した測定のレポートを作成したり解析結果を見た りしたい場合は、そのデータファイルを解析しなければなりません。

測定またはシーケンスの処理依頼をしたユーザではない場合、あるいはオフライン機器 を使用している場合、[分析中止]コマンドにはアクセスできません。

注:[分析中止]ボタンを使用する際には、[分析中止]ボタンのアイコン表示が押された 状態に変わるまで、マウスボタンを押したままにしてください。

ランの実行中にデータ取得を停止する方法:

- 1. コントロール > 分析中止を選択します。
- 2. 測定をどのように中止するかを選択します。
 - 現在進行中のランのみ中止 現在進行中の測定を中止する時にこれを選 択します。その測定がシーケンスの一部である場合、シーケンスの次の測 定が続けられます。
 - 現在進行中のランとシーケンスを中止 -現在進行中の測定を中止し、この 測定を含むシーケンスが終了します。ランキューにあるその他の項目は続 けられます。
 - 現在進行中のラン終了後にシーケンスを中止 このコマンドを選択する と、現在進行中のラン終了後にシーケンスを中止します。
 - 処理依頼をしたランキュー項目をすべて中止 現在進行中の測定を中止し、自分が処理依頼をしたランキュー中の他の項目をすべて終了します。
 ランキュー中の、他のユーザが処理依頼した項目には影響しません。

ランキュー項目をすべて中止 - 現在進行中の測定を中止し、同時にランキュー中のすべての項目を終了します。

分析時間の延長

測定中にデータ取込時間を延長することができます。このコマンドを選択すると下図の ようなダイアログが表示されますので、ここで、延長する時間を入力します。測定また はシーケンスを依頼したユーザでない場合、あるいは機器を解析専用で使用している場 合、[分析時間の延長]コマンドにはアクセスできません。

- 1. メニューからコントロール/分析時間の延長コマンドをクリックします。
- 2. 延長時間を入力するための下図のようなダイアログが表示されます。
- 3. 延長する時間を分単位で入力し、OK ボタンをクリックします。

ランキューに項目を追加または削除

ランキューは、シーケンス測定またはシーケンス解析の進行を追跡するために使用され ます。シングルランまたはシーケンスランが開始されると、それは自動的にランキュー に組み込まれます。

ランキューの追加・削除する方法:

- 機器ウィンドウでランキューの表示 ボタン 2 をクリックするか、[コント ロール]メニューから ランキュー... をクリックします。.
- 2. 変更したいランキュー上で右クリックします。
- 3. コマンドを選択します。
4. 終了したらランキューを閉じます。

選択した項目をランキューから削除するコマンドで 削除 す。 追加した項目だけをランキューから削除するコマン 自分で設定したランの削除 ドです。 ランキューからすべての項目を削除するコマンドで すべて削除 す。 ランの開始時間を指定するには スケジュールラン **└─**」ボタンを選択します。**スケジュールラン** ダイ アログボックスで次のオプションから選択します。 開始時間の変更 今すぐ - 即時 • 指定時間後 - 時間を指定した後 日時指定 - 特定の日時 • **PDF に保存 メソッド** - このボックスをチ

レポート

エックすると、メソッドレポートはラン終

了後に PDF 形式で保存されます。

 PDF に保存 シーケンス - このボックスを チェックすると、シーケンスレポートはラ

ン終了後に PDF 形式で保存されます。

- ハードコピーの印刷メソッド -このボックスをチェックすると、メソッドレポートはラン終了後に印刷されます。
- ハードコピーの印刷 シーケンス このボ ックスをチェックすると、シーケンスレポ ートはラン終了後に印刷されます。
- プリンタの選択 ハードコピーとしての メソッド または ハードコピーとしてのシ ーケンス をチェックした場合、ドロップ ダウンメニューからプリンタを選択しま す。

 ランキューで選択してハイライトさせた項目のメソ ッドレポート印刷がオンになっていると、チェック マークが表示されます。メソッドレポート印刷機能
 をオフにするにはメソッドレポートの印刷をクリッ クしてチェックマークを消します。レポートの印刷
 > PDF としてのメソッド、PDF としてのシーケン ス、ハードコピーとしてのメソッド、ハードコピー としてのシーケンスとは違います。

シーケンスレポート印刷 ランキューで選択してハイライトさせた項目のシー ケンスレポート印刷がオンになっていると、チェッ クマークが表示されます。選択したキューエントリ ーのシーケンスレポート印刷機能をオフにするには シーケンスレポートの印刷をクリックしてチェック マークを消します。レポートの印刷 > PDF として のメソッド、PDF としてのシーケンス、ハードコ ピーとしてのメソッド、ハードコピーとしてのシー ケンスとは違います。

ランキューにシングルランによるデータ取込を追加 するコマンドで、実行するとシングルランダイアロ グが開きます。データ取込中の場合、追加ボタンを クリックしてシングルランをランキューへ追加しま す。ランキューに項目を追加するために割り込みボ タンをクリックすると、追加した項目が現在の測定 の終了と同時に実行されるようにランキューへ追加 されます。割り込んだ項目が完了すると、前に実行 していたシーケンスが再開されます。

このコマンドにより解析/シングルレベルキャリブ レーション ダイアログ ボックスが開き、シングル ラン再解析 (解析/シングル レベル キャリブレー ション)をランキューへ追加します。データ取込中 の場合、追加ボタンをクリックしてシングルランを ランキューへ追加します。ランキューに項目を追加 するために割り込みボタンをクリックすると、追加 した項目が現在の測定の終了と同時に実行されるよ

シングルランを参照するか、 または以下の項目上でツール バーまたはボタンを右クリッ クしてください。コントロー ル**>?**

シングル解析

うにランキューへ追加されます。割り込んだ項目が 完了すると、前に実行していたシーケンスが再開さ れます。

ランキューにシーケンスランを追加するコマンド で、実行するとシーケンスランダイアログが開きま す。データ取込中の場合、追加ボタンをクリックし てシーケンスプロセスをランキューへ追加します。 ランキューに項目を追加するために割り込みボタン をクリックすると、追加した項目が現在の測定の終 了と同時に実行されるようにランキューへ追加され ます。割り込んだ項目が完了すると、前に実行して いたシーケンスが再開されます。

ランキューにシーケンス解析を追加するコマンド で、実行するとシーケンス解析ダイアログが開きま す。データ取込中の場合、追加ボタンをクリックし てシーケンスをランキューへ追加します。ランキュ ーに項目を追加するために割り込みボタンをクリッ クすると、追加した項目が現在の測定の終了と同時 に実行されるようにランキューへ追加されます。割 り込んだ項目が完了すると、前に実行していたシー ケンスが再開されます。

シーケンスラン

シーケンス解析

注:シーケンスを再処理中にランキューへシーケンスを追加するためには、1回ごとに 一時停止オプションを選択しておく必要があります。このオプションを選択せずにシー ケンスを再処理している場合は、シーケンスを一度停止し、[1回ごとに一時停止]オ プションを選択してから再開する必要があります。この時点で、ランキューに1つま たは複数のシーケンスを追加できます。

データを取り込むための解析解除

データを収集してハードディスクに保存したいが、データを確認するまで解析を延期 したいという場合は、データを収集する前に[分析終了後に解析する]オプションを無 効にします。

その手順は以下の通りです。

- 1. メニューバーのメソッド/プロパティコマンドをクリックします。
- 2. オプションボタンをクリックします。
- 分析終了後に解析するチェックボックスをクリックしてチェックマークを消し ます。分析終了後に解析するのチェックボックスを選択すると、このメソッド とともに生成されたデータファイルがインテグレートされて各取得後に結果フ ァイルとして自動生成されます。このチェックボックスが解除されている場合、 解析は行われません。データはディスク上に保存されますが、結果は作成され ません。

注:分析終了後に解析するを無効にするオプションはメソッドの一部です。したがって、 シーケンスのすべてのデータ取込が完了するまで解析を延期したい場合は、シーケン ス中で指定されたすべてのメソッドでこのオプションが無効になっていることを確認 してください。

関連項目

シーケンスの再解析

フラクションコレクタコンフィグレーション

- [コントロール > コンフィグレーション > フラクションコレクタ]を選択します。
- 詳細については、 [フラクションコレクタコンフィグレーション] ダイアログボッ クスで、 [ヘルプ] を選択するか、セクションの [F1] を押します。

関連項目

フラクションコレクタコンフィグレーション

結果シーケンスについて

結果シーケンスは取得した実行とそれを備えたデータシーケンスです。

関連項目

結果レビューモードの表示

<u>結果シーケンスを開く</u>

結果シーケンスに署名を追加

署名の取り消し

<u>結果セットプロパティ</u>

結果セットの保存

結果レビューモードの表示

結果レビューモードはデータレビューにいることを通知するコマンドです。

- 1. ツールバーの表示 > 表示オプションを選択します。
- 2. 表示オプションダイアログ ボックスのツールバーオプションから結果を選択 します。
- 3. ツールバーを表示するを選択します。
- 4. **OK** *を*クリックします。

黄色の **結果レビューモード** が機器ウィンドウに表示されます。

関連項目

結果シーケンスに署名を追加

署名は結果シーケンスに適用されます。

- 1. 結果シーケンスを開く。
- 2. ツールバーから ファイル > 署名を適用を選択します。
- 3. 電子署名の適用 ダイアログボックスで次のオプションから選択します。
 - 現在のファイルの署名 これにより現在のファイルに署名を追加します。
 - 指定範囲 シーケンスを実行したい範囲を選択します。それは列のセットか、または列範囲の場合もあり、例えば 1, 3, 5, 7 または 1-3, 7-10 などです。
 - **すべてのファイルの署名** これにより開いている結果ファイルのすべて のファイルに署名を追加します。
- 5. ユーザー名 と パスワードを入力します。
- 6. プルダウンリストから理由を選択します。
- 7. 必要な場合はコメントを追加します。
- 8. 署名ボタンをクリックします。データは分析を促進するためにロックされます。

関連項目

署名の取り消し

署名の取り消し

取り消しの権限をもつユーザーは電子署名を取り消すことができます。一度電子署名を 取り消すとデータを解析することができます。電子署名が取り消されると、そのデータ ファイルの監査証跡に記録されます。

- 1. 結果シーケンスを開く。
- 2. ツールバーから ファイル > 署名を取り消しを選択します。
- 3. 警告ダイアログボックスで、**はい**を選択します。
- 4. 電子署名の解除 ダイアログボックスで次のオプションから選択します。
 - 現在のファイルを取り消し これは現在のファイルの署名を取り消すコ マンドです。
 - 指定範囲 シーケンスを実行したい範囲を選択します。それは列のセットか、または列範囲の場合もあり、例えば 1, 3, 5, 7 または 1-3, 7-10 などです。
 - **すべてのファイルを取り消し** これにより開いている結果ファイルの全 ファイルの署名を取り消します。
- 5. ユーザー名 と パスワードを入力します。
- **6. 理由**を入力します。
- 7. 署名ボタンをクリックします。データを分析できるようになります。

関連項目

結果シーケンスに署名を追加

結果セットプロパティ

メニューから 結果セット > プロパティ を選択して結果セットオプションや監査証跡 ログを表示して監査証跡を有効にします。

結果セットオプション

- 1. 結果(**.rst**)ファイルを開きます。
- 2. 結果セット メニューから プロパティコマンドをクリックします。
- 3. 結果セットプロパティ ダイアログボックスから、オプションタブを選択しま す。
 - 説明 このダイアログボックスに結果ファイルのテキスト情報を入力し ます。この説明はファイルを開くダイアログから確認できるため、ディ スク内のデータファイル確認の際に便利です。
 - エクスポートサマリー このボックスはサマリーをエクスポートする時
 にクリックします。次にファイルを保存する場所を選択します。
 - パス サマリーエクスポートパスを入力します。
 - **メソッド** メソッドパスを入力します。

結果セット監査証跡ログを表示します。

- 1. 結果(.rst)ファイルを開きます。
- 2. 結果セット メニューから プロパティコマンドをクリックします。

- 3. 結果セットプロパティ ダイアログボックスから、監査証跡ログを選択します。
- 4. 次の情報を入力します。
 - ユーザー
 - ロケーション
 - 説明
 - 理由
 - 開始日/時間
 - 終了日/時間
- 5. 以下の中から選択してください。
 - **エクスポート -** これを選択して、監査証跡ログをエクスポートします。
 - 印刷 これを選択して、監査証跡ログを印刷します。
 - 検索 これを選択して、監査証跡ログを検索します。

結果セット監査証跡を有効にします

- 1. 結果(.rst)ファイルを開きます。
- 2. 結果セット メニューから プロパティコマンドをクリックします。
- 3. 結果セットプロパティ ダイアログボックスから、監査証跡を選択します。

- 4. 監査証跡を使用するボックスをチェックします。監査証跡を使用するボックス を一度チェックすると、チェックを解除することはできません。
- 5. 警告ダイアログボックスで、はいを選択します。 監査証跡を使用するを選択 すると半永久的にチェックされていることになります。
- 6. 以下の中から選択してください。
 - 変更するたびに理由を入力する-このオプションを選択するとメソッドを 変更するたびにその理由を入力するよう求められます。
 - シーケンス保存時に理由を入力する このオプションを選択すると、テンプレートの保存時に変更の理由をそれぞれ入力するよう求められます。
 - 理由を入力しない このオプションを選択すると、変更は記録されます が変更理由の入力は要求されません。

シーケンスレポートについて

シーケンスの測定の結果を含んだレポートを作成できます。シーケンスファイルはレポ ートを含みませんが、シーケンスランあるいはシーケンス解析レポートの作成に使用す る外部テンプレートを指定できます。

<u>シーケンススプレッドシート</u>用のレポートは、そのサンプルの<u>分析タイプ</u>の一部として設定されます。分析タイプにサマリーが選択されると、サンプルはシーケンスサマリーレポートに含まれます。分析タイプに追加レポート印刷が選択されると、指定されたレポートが印刷されます。

メニューでシーケンスラン情報を含むカスタムレポートテンプレート(シーケンスサマ リーレポートなど)を作成するには、メニューから <u>詳細サポート</u>を選択します。詳細レ ポートは、シーケンスのレポートを作成するために使用できるシーケンスサマリーテン プレート(.tpl ファイル)を作成できます。テンプレートはシーケンスの一部として保存 されず、どのシーケンスにおいてもデータのサマリーレポートテンプレートとして使用 することができます。

シーケンスサマリーテンプレートの作成方法についての詳細は <u>詳細レポートの作成に</u> ついてを参照してください。

関連項目

シーケンスサマリーレポートの生成

シーケンスレポートの表示

シーケンスレポート印刷

シーケンスレポートテンプレートの編集

シーケンス目次レポートの編集及び印刷

シーケンスサマリーレポートの生成

取得または再処理中にシーケンスレポートを生成するには、サマリーレポートに含む実 行をシーケンスのサマリーの実行として指定する必要があります。シーケンスウィザー 上を使用している場合、これらのファイルはウィザードの レポートの の段階でシーケン スの作成中に選択されます。

実行をシーケンスレポートに含まれるように指定する方法:

- 1. シーケンスファイルを開いていない場合は開きます。
- 2. メニューバーでシーケンス/編集コマンドをクリックします。
- 3. シーケンスサマリーレポートに含めたいシーケンスの最初の行の分析タイプを クリックします。
- 4. サンプルの分析タイプダイアログボックスで、サマリー開始ボックスを選択し ます。
- 5. ファイルオープンボタン をクリックして、レポートの作成に使用されるレ ポートテンプレートを選択します。(「summary.tpl」ファイルはデフォルトの テンプレートとして提供されます)。
- 6. サマリーレポートに含めたい各行で、分析タイプをクリックしサマリーランボ ックスを選択します。
- サマリーレポートに含めたい最後の行で、分析タイプをクリックしサマリー終 了ボックスを選択します。
- 8. <u>シーケンスの保存</u>。サマリーの開始と終了の実行中およびそれらを含むすべて の指定されたサマリーの実行が、このレポートに集約されます。
- 9. <u>シングルラン</u>、<u>シーケンスラン</u>、または <u>シーケンス解析</u> ダイアログボックス から**ハードコピーの印刷** ボックスを選択します。

10. シーケンスを実行します。

シーケンスランあるいはシーケンス解析が終了した後、レポートはデフォルトプリンタ へ印刷されます。機器ウィンドウからレポートの表示を開くこともできます。 関連項目

シーケンスレポートの表示

シーケンスレポート印刷

シーケンスレポートテンプレートの編集

シーケンス目次レポートの編集及び印刷

シーケンスレポートの表示

シーケンスレポートを表示する方法:

- 1. シーケンスサマリーレポートの生成。
- 2. レポート メニューから表示/シーケンスレポートを選択します。
- 現在のシーケンスレポートのリストを示すリストボックスが表示されます。各 シーケンスレポートのレポートタイプが示されます。レポートに含まれるシー ケンスの行と、レポートの作成に使用されたレポートテンプレートも示されま す。画面上でレポートを見るには、該当するレポートをクリックしてハイライ トさせ、次に表示ボタンをクリックします。

注:シーケンスを実行するか、または解析された場合にのみ、シーケンスレポートがこ のウィンドウに表示されます。

注:シーケンスサマリーレポートを表示するためには、シーケンスサマリーの詳細レポ ートテンプレートが指定されていなければなりません。また、このレポートに含まれる シーケンス測定について、サマリーをシーケンステーブルに含めるよう、このレポート の作成に使用した正しいシーケンスサマリーテンプレートを指定して、分析タイプを設 定していなければなりません。

関連項目

シーケンスサマリーレポートの生成

シーケンスレポート印刷

シーケンスレポートテンプレートの編集

シーケンス目次レポートの編集及び印刷

シーケンスレポート印刷

シーケンスレポートを自動印刷する方法:

- 1. シーケンスサマリーレポートの生成。
- シングルラン、シーケンスラン、またはシーケンス解析 ダイアログボックス からハードコピーの印刷 ボックスを選択します。
- 3. シーケンスを実行します。

シーケンスレポートを手動で印刷する方法:

- 1. <u>シーケンスサマリーレポートの生成</u>。
- 2. メニューバーからレポート > 印刷 > シーケンスレポートを選択します。
- 3. シーケンスレポート印刷 ダイアログから、シーケンスレポートを選択します。 レポートタイプ、シーケンス行およびレポートテンプレートが表示されます。

4. 印刷を選択します。

注:シーケンスを実行するか、または解析された場合にのみ、シーケンスレポートがこ のウィンドウに表示されます。

注:シーケンスサマリーレポートを表示するには、シーケンスサマリーの詳細レポート テンプレートが指定されていなければなりません。また、このレポートに含めるシーケ ンス測定について、サマリーをシーケンステーブルに含めるようレポートの作成に使用 した正しいシーケンスサマリーテンプレートを指定して、分析タイプを設定する必要が あります。

関連項目

シーケンスサマリーレポートの生成

シーケンスレポートの表示

シーケンスレポートテンプレートの編集

シーケンス目次レポートの編集及び印刷

シーケンスレポートテンプレートの編集

<u>詳細レポート</u>機能を使用することで、既存のシーケンスサマリーレポートテンプレートを修正できます。

編集するために既存のテンプレートファイルを開く方法:

1. ファイル > 開く > 詳細レポートを選択します。

- 2. Summary.tpl テンプレートファイル(あるいは修正したいサマリーテン プレートファイル)を選択してハイライトさせ、開くボタンをクリックし ます。
- 3. <u>詳細レポート</u> エディターを使用してレポートテンプレートを修正し、ファ イル > 保存 > 詳細レポートを保存します。

関連項目

シーケンスサマリーレポートの生成

シーケンスレポートの表示

シーケンスレポート印刷

シーケンス目次レポートの編集及び印刷

シーケンス目次レポートの編集及び印刷

シーケンス目次レポートは、印刷フォーマットとして

SequenceContentsReport.Irp テンプレートファイルを使います。このファイル は、現在のプロジェクトの*テンプレート*フォルダに保存されています。

現在のシーケンスのテンプレートを編集する方法:

- 機器ウィンドウからファイル>開く>標準レポートを選択し、現在のプロジェクトのテンプレートフォルダを開きます。
- 2. SequenceContentsReport.rep を選択して 開くをクリックします。

- 標準レポートウィンドウのシーケンス印刷レポートテーブル画面上で右クリッ クすると、テーブルの内容をカスタマイズすることができます。レポートエデ ィタの使用を参照してください。
- ファイル > 名前を付けて保存 > 標準レポートを選択します。テンプレート フォルダを開いてテンプレートを、SequenceContentsReport.rep という名 前を付けて保存します(既存のテンプレートに上書きされます)。

現在のシーケンスを印刷する方法:

- 1. 機器ウィンドウからファイル > 印刷 > シーケンスを選択します。
- 2. プリンタの設定 ダイアログボックスの 名前 のドロップダウンメニューから選 択します。
- 3. **OK** をクリックします。

シーケンス目次レポートが指定のプリンタに印刷されます。

関連項目

シーケンスサマリーレポートの生成

<u>シーケンスレポートの表示</u>

シーケンスレポート印刷

シーケンスレポートテンプレートの編集

キャリブレーションについて

未知のピーク面積から正確な含有量を計算するには、計算の元になる検量線を含むメソ ッドが必要です。そのためには、キャリブレーションされた標準試料のピーク面積デー タを受け取るようにデータ取込メソッドを設定し、次に標準試料を実際に測定して、メ ソッドに標準試料の面積値が入力されるようにします。メソッドのキャリブレーション を完全に行うまでは、正確な結果は得られません。言い換えれば、キャリブレーション されたメソッドを完成するためには、キャリブレーションの各レベルに対する標準試料 を測定しなければならないということです。

メソッドをキャリブレーション用に設定したら、標準試料中の各ピークの面積をメソッ ドに入力して、キャリブレーションを完成します。これらの面積値でメソッドを更新す ることを、「キャリブレーション」または「メソッドのキャリブレーション」と呼びます。 キャリブレーションは、各標準試料の測定とともに自動的にメソッド中のキャリブレー ションデータを更新するか、あるいは前にデータ取込してディスクに保存してあった標 準試料のデータファイルを使用してシーケンス再解析を実行することによって行うこと もできます。

キャリブレーション試料を測定する、あるいは保存されているデータファイルの再解析 のためにシーケンスを作成する手順は、「シーケンスについて」の項を参照してください。

シングルランを使って、1度に1つずつ、キャリブレーション標準を測定することもで きます。ディスクに保存されているシングルキャリブレーション標準を使用してシング ルレベルメソッドのキャリブレーションを行うには、次の保存されたデータファイル によるシングルレベルキャリブレーションの手順に従ってください。

関連項目

キャリブレーションの理論

<u>検量線作成のステップ</u>

<u>キャリブレーションの実行</u>

<u>シングルピーク設定</u>

<u>ピーク定義</u>

ピークテーブルについて

ピークテーブルのプロパティの変更

保存されたデータファイルを用いたシングルレベルキャリブレーション

<u>ピーク ID の番号付け直し</u>

検量線の確認

濃度計算

キャリブレーションの平均計算

グループとグループキャリブレーションについて

キャリブレーションの理論

正確な結果を得るためには、通常、クロマトグラフィー機器のキャリブレーションが必要です。機器のキャリブレーションを行う目的は、所定の成分に対する検出器の応答を確認することです。同じ検出器でも、同じクロマトグラフィー条件のもとでの同量の異なる成分に対しては、異なる応答を示すことがあります。キャリブレーションを行うもう1つの理由は、検出器の直線性です。多くの化合物に対する検出器の反応速度は、成分の濃度が高くなるにつれて遅くなるため、同じ成分の様々な濃度レベルで、検出器のキャリブレーションを行う必要があります(マルチレベルキャリブレーション)。



マルチレベルキャリブレーション

すべてのキャリブレーション標準試料を測定すると、キャリブレーションされた各成分 に対する検量線が得られますが、これはその濃度範囲での化合物に対する検出器の反応 を表すものです。未知の試料を測定する場合は、その成分の面積(高さ)に対応する量を 検量線から見つけることにより、各成分濃度が検量線から決定されます。サンプルをキ ャリブレートする一般的な方法は2つあります。内部標準法と絶対検量線法

内部標準法

内部標準法では、各試料(標準試料および未知試料とも)に既知量の既知化合物(内部標準物質)を添加します。その後、各試料を測定すると、内部標準物質を使って面積が補 正されます。この方法は、試料の調整や注入方法におけるバラツキを補正するために使 用されます。

絶対検量線法

絶対検量線法は、標準物質を添加しません。すべて未知試料は補正なしに標準試料と比較されるので、注入量が正確でしかも再現性があることが重要です。

シングルレベルおよびマルチレベルキャリブレーション

検量線は、1 つだけのレベルであることも、また多数のレベルが含まれることもありま す。シングルレベルの検量線は、1 つだけの標準試料を測定して得られます。したがっ て、各ピークに対する検量線は、標準試料中の各ピークの面積/含有量の関係を示す点 と原点を通る直線となります。

2 つ以上の標準試料を異なる濃度で測定すると、多点(マルチレベル)の検量線が得られ ます。与えられた成分に対する検量線は、各濃度におけるその成分の面積/含有量の関 係を表す点同士を結ぶ直線となります。場合によっては、検量線は強制的に原点を通る ように指示され、直線が通る点のうちの1つは原点となります。これにより、面積の 小さなピークについて負の値を持つ濃度が計算される可能性がなくなります。実際の曲 線の計算に使える計算方法には、いくつかのタイプ(検量線の種類)があります。もっと も良い検量線とは、各キャリブレーションポイントがその線に最も近くなるものです。

キャリブレーションと定量計算に使用される公式については、<u>カスタムパラメータの公</u> 式の項を参照してください。

検量線作成のステップ

あるメソッドのためにマルチレベルキャリブレーションを設定する作業には、以下の各 ステップが含まれます。

- 自分のデータ取込メソッドを使用して、1つのキャリブレーション標準試料を 測定し、それをディスクに保存します。使用しているクロマトグラフィー条件 およびインテグレーション が適切であることを確認します。
- 2. 保存された標準試料のデータファイルを使用して、シングルピーク設定または ピーク設定 コマンドによりピークテーブルをグラフィカルに作成します。

- 3. キャリブレーションされた各化合物に対するすべてのキャリブレーションパラメータが、ビークテーブルに入力されます。ピーク情報がグラフィカルに入力され、次に各ピークの特定情報が手動で入力されます。複数のチャンネルのキャリブレーションを行う場合は、必ず各チャンネルについてキャリブレーションパラメータを設定することを忘れないでください。ピークテーブルにピーク名および濃度、リファレンスピーク、内部標準ピーク番号、その他使用する試料に必要なパラメータを入力して完成させます。
- 4. メソッドを保存します。
- メソッドのキャリブレーションを行います。キャリブレーションは、以前に収 集した標準試料を測定するときに自動的に行うことも、または標準試料を測定 するときに自動的に行うこともできます。キャリブレーションは以下の方法で 行います。

シングルレベルのキャリブレーション

- 保存されている標準試料のデータファイルから得られた面積を使用して、
 キャリブレーションを更新します。
- 標準試料を測定してキャリブレーションを行います。
- 測定シーケンスの一部としてキャリブレーションを行います。

マルチレベルのキャリブレーション

保存された標準試料のデータファイルを使って更新します(1回に1レベル、あるいはシーケンス再解析)

- 保存されている標準試料のデータファイルを使って、ブラケットキャリブレーションを更新します(ブラケットキャリブレーションによるシーケンス再解析)
- データ取込シーケンスの一部としてキャリブレーションを行います

注:使用するメソッド内に完全な検量線が保存されていない限り、未知試料の測定に対 する濃度結果は計算されません。

キャリブレーションの実行

キャリブレーション標準試料を測定するためには、 定量したいすべてのピークの名前、 それらを同定するための予想リテンションタイム、および標準試料中に存在する量がメ ソッドに含まれていなければなりません。これらの値は、[ピークテーブル]と呼ばれる スプレッドシート形式のテーブルに入力されます。

同定したいピークをグラフィカルに定義する方法:

使用するメソッドにこのデータを入力する最も効率的かつ正確な方法は、最初の標準試 料を注入してデータファイルをディスクに保存し、次に保存されているクロマトグラム を使用して、必要なデータのほとんどをグラフィカルに入力することです。

注:以下の各ステップでは、データ取込のサンプリング速度およびインテグレーション 部分が、データ取込したい試料に対して最適化されているものと前提しています。

最初の標準試料のデータ取込を行う場合は、ステップ1のデータ取込を行ってください。もし、すでにキャリブレーション標準試料をすでにデータ取込済みであり、それが ディスクに保存している場合は**ステップ3**から進めてください。 メニューからコントロール>シングルラン コマンドを選択するか、ツールバ ーのシングルラン ボタンをクリックします。下図のようなダイアログボック スが表示されます。次に記載する情報を入力します。この時点では、[定量結 果の補正]をデフォルトのままにしておきます。

メソッド

測定する試料のサンプル ID を入力します。これサンプル IDータファイルとともに保存されます。

データ取込と解析に使用するメソッドのファイル 名を入力します。そのメソッドがデフォルトのメ ソッドディレクトリに含まれていない場合は、フ ァイル名だけではなくパス名も入力してくださ い。フィールド隣にある[オープンファイル]ボタ ンをクリックして、ディスク上のリストからメソ ッドを選択することもできます。

ディスクにデータを保存するためのファイル名を
 入力します。既存のデータファイルに上書きする
 ことはできません。既存のデータファイル名を使
 用するためには、Windows ユーティリティを使
 用して既存のファイルの名前を変更するか、それ
 を別のディレクトリに移動する必要があります。

結果パス データ/結果ファイルが保存されるパスを入力し ます。[ファイルオープン]ボタンをクリックして

キャリブレーションについて

パスを選択することもできます。

結果名 結果ファイル名を入力します。

この時点では、キャリブレーションを行うための 検量線作成 メソッドの準備ができていないため、このボック スは使用しないでください。

- 2. 準備ができたら、スタート ボタンをクリックして試料のデータ取込を開始し ます。
- 測定が完了すると、ベースラインが描かれたクロマトグラムが画面に表示されるはずです。(すでに収集済みのデータファイルを起動する場合は、そのファイルが開かれており、すでに解析されていることを確認してください。
- ベースラインが表示されない場合には、解析 ボタンをクリックして、クロマ トグラムが解析されたことを確認します。それでもベースラインが表示されな い場合は、クロマトグラムのウィンドウ内で右クリックしてデザイン を選択 します。 ベースラインがカラー表示されて画面上で見えることを確認します。 クロマトグラムデザインの変更を参照してください。これで、キャリブレーシ ョンされたピークを定義する準備ができました。
- 5. キャリブレーションピークを定義する方法は2つあります。ピーク指定を使う場合は、興味のあるピークをすべてピークテーブルに追加し、名前および完全なレベル情報をピークテーブルに入力します。シングルピーク設定を使う場合は、各ピークをピークテーブルに追加しながら、それぞれに名前を付けて定義します。

シングルピーク設定

シングルピーク設定 ボタンで、キャリブレーションピークテーブルの列を単一のピー クとして作成できます。その後、<u>ピークテーブル</u>内のピークを編集することもできま す。

ピークテーブルに単一のピークを追加する方法:

- 1. データファイルを開く でクロマトグラムを表示します。
- クロマトグラムを右クリックしてグラフィカルプログラミング > シングルピーク定義を選択するか、またはツールバーの統合でシングルピーク設定 ボタン へを選択します。
- 3. 定義したいピークを選択します。
- シングルピーク定義 ダイアログボックスに、最初に検出したピークのリテンションタイムが表示されます。このピークをピークテーブルに追加しない場合、
 【次へ】ボタンをクリックします。クロマトグラムの特定のピークに移動する場合、マウスでそのピークをクリックします。ダイアログに表示されたリテンションタイムは、選択したピークのリテンションタイムに変わります。以下のフィールドを入力してください。
- **ピーク名** このフィールドに化合物名を入力します。

濃度レベル1が表示されます。この濃度レベルに対する
 濃度レベル
 この化合物の量を入力します。この化合物について複数
 のレベルで測定を行う場合は、濃度レベル2とそのレベルでの化合物量を入力します。必要なキャリブレーショ

キャリブレーションについて

ンレベルの数だけ濃度レベルを入力します。そのメソッ ドのピークテーブルで濃度レベル量を入力したり、編集 したりすることもできます。

単位 結果の表示に使用する単位を入力します。

することもできます。

ISTD ID #

内部標準法でキャリブレーションを実行する場合は、こ の化合物の内部標準試料ピークの ID 番号を入力しま す。これはピークテーブルからのピーク ID 番号です。 これがわからない場合には、後でピークテーブルに追加

 このピークに使用されるリテンションタイム リファレン

 スピーク ID 番号を入力します。これはピークテーブル

 からのピーク ID 番号です。これがわからない場合に

 は、後でピークテーブルに追加することもできます。リ

 ファレンスピークは、相対リテンションタイムの計算に

 使用されるものです。

リテンションタイム ウィンドウは、キャリブレーション されるピークの予想リテンションタイムの前後に設定さ れます。リテンションタイムウィンドウを使うと、ピー クが多少(許容幅内で)変動してもキャリブレーションピ ークとして認識されるので、リテンションタイムウィンドウを設定 しない場合、ピークが同定されるべき成分として認識さ

317

せるためには、そのピークが常に正確に予想リテンショ ンタイムに溶出しなければなりません。相対 または絶対 のリテンションタイム ウィンドウを選択することができ ます。

相対リテンションタイム ウィンドウは、その成分の予想 リテンションタイムの%値で与えられます。デフォルト 設定にすると、相対リテンションタイム ウィンドウは 2.5%に設定されています。 これは、そのキャリブレー ションされたピークに対する相対リテンションタイムウ ィンドウがその予想リテンションタイムの 2.5%に設定 されるということです。相対リテンションタイムウィン ドウを設定することは、クロマトグラムの始めの方で溶 出するピークよりも、クロマトグラムの後の方で溶出す るピークの方が大きなリテンションタイムウィンドウを 持つことになります。注目しているピークが測定中に時 間が経つにつれて変動する傾向があるピークについて は、相対リテンションタイムウィンドウを使用します。

絶対リテンションタイムウィンドウは、キャリブレーシ ョンされたすべてのピークに対して同一のリテンション タイムウィンドウを設定するものです。すべてのピーク で使用するリテンションタイムウィンドウの値を入力し てください。絶対リテンションタイムウィンドウは、キ ャリブレーションされたピークのリテンションタイムに

相対

絶対

よって変化することはありません。

- 【次へ】をクリックすると、次に検出したピークに移動します。【戻る】をクリ ックすると、クロマトグラムで前に検出されたピークに移動します。特定のピ ークに直接進むには、クロマトグラム中でそのピークをクリックします。クロ マトグラム中の現在のピークと全ピーク数がダイアログボックスの右側に表示 されます。
- ピークテーブルへのピークの追加が完了したら、[完了] ボタンをクリックします。
- キャリブレートした各化合物のピークテーブルの処理については、ピークテー ブルについてで説明しています。

ピーク定義

ピークの定義 ボタンにより、指定した範囲に検出された各ピークについて、ピークテ ーブル内に行を作成することができます。その後、<u>ピークテーブル</u>内の各ピークを編 集することもできます。

ピークテーブルにピークを追加する方法:

- 1. データファイルを開く でクロマトグラムを表示します。
- クロマトグラムを右クリックしてグラフィカルプログラミング > ピークの定 義を選択するか、またはツールバーの統合でピークの定義 ボタン を選択 します。
- 3. 定義したいピークを選択します。

4. ピークの定義 ダイアログボックスで、クロマトグラム中の最初のキャリブレ ーションピークの左側で一度マウスをクリックして、次にクロマトグラムの最 後のキャリブレーションピークの右側でもう一度クリックして、キャリブレー ションを行うピークを入力します。ダイアログが表示されますので、ピークテ ーブルに追加するピークのパラメータのいくつかを設定します。以下のフィー ルドを入力してください。

 表示されている開始時間 と 終了時間 の範囲内で検出され たすべてのピークがピークテーブルに追加されます。この
 時間の範囲
 範囲は、クロマトグラム上でマウスをクリックすることに より定義したものです。これらの時間は、必要であれば、 表示されたボックスの中で手動で変更できます。

> リテンションタイムウィンドウは、キャリブレーションさ れるピークの予想リテンションタイムの前後に設定されま す。リテンションタイムウィンドウを使うと、ピークが多 少(許容幅内で)変動してもキャリブレーションピークとし て認識されるので、リテンションタイムウィンドウは重要 です。リテンションタイムウィンドウを設定しない場合、 ピークが同定されるべき成分として認識させるためには、 そのピークが常に正確に予想リテンションタイムに溶出し なければなりません。相対または絶対のリテンションタ イムウィンドウを選択することができます。

> > 相対 リテンションタイムウィンドウは、その成分の予想リ テンションタイムの%値で与えられます。デフォルト設定 にすると、相対リテンションタイムウィンドウは 2.5%に

リテンションタイム

ウィンドウ

320

設定されています。これは、そのキャリブレーションされ たピークに対する相対リテンションタイムウィンドウがそ の予想リテンションタイムの 2.5%に設定されるというこ とです。相対リテンションタイムウィンドウを設定するこ とは、クロマトグラムの始めの方で溶出するピークより も、クロマトグラムの後の方で溶出するピークの方が大き なリテンションタイムウィンドウを持つことになります。 注目しているピークが測定中に時間が経つにつれて変動す る傾向があるピークについては、相対リテンションタイム ウィンドウを使用します。

絶対 リテンションタイムウィンドウは、キャリブレーショ ンされたすべてのピークに対して同一のリテンションタイ ムウィンドウを設定するものです。すべてのピークで使用 するリテンションタイムウィンドウの値を入力してくださ い。絶対リテンションタイムウィンドウは、キャリブレー ションされたピークのリテンションタイムによって変化す ることはありません。

単位 単位 結果のラベルに使用される単位を入力します。

レスポンスファクターを面積 と高さ のいずれを使って算 定量方法 出するかを選択します。注:内部標準法を使用してピークと グループの両方を定量する場合は、ピークとグループの両 方が同じ定量方法(面積または高さ)を使用する必要があり

キャリブレーションについて

ます。

最小ピーク面積を入力すると、定義された範囲内にあるピークのうち、面積がこの限界値未満のピークはキャリブレーションピークとはみなされません。したがって、キャリブレーションピークテーブルに入力されません。

テーブルにすべての ピークを追加このボタンは、現在の定義されたピーク範囲内にあるピー
クを、キャリブレーションテーブル内にある既存のピーク
へ追加する時に選択します。

このボタンは、現在のキャリブレーションピークテーブル **テーブル中のピーク** 内のすべてのピークを、定義されたピーク範囲のピークで 置き換えたい時に選択します。

- 3. 選択に誤りがなければ**OK** ボタンをクリックします。
- スプレッドシート形式でのピークテーブルの表示は、選択されたピーク範囲 内の各ピークのリテンションタイムの表示と共に行われます。キャリブレート した各化合物のピークテーブルの処理については、ピークテーブルについてで 説明しています。

ピークテーブルについて

検量線を利用して未知のピークの濃度を計算するために必要な情報は、すべてピークテ ーブルに含まれます。ピークテーブルの各行は、キャリブレーションされた成分の1 つを表します。各ピークをグラフィカルにピークテーブルに入力したら(<u>キャリブレー ションをグラフィカルに作成</u>参照)、各ピークを正しく同定し、その未知成分の濃度を 計算するために必要な情報を入力し、ピークテーブルを完成させなければなりません。 なお、スプレッドシートのすべての列を使う必要があるとは限りません。注目している 各ピークの含有量の計算に必要な列の情報だけを入力してください。

注:ピークテーブルのパラメータ列の扱いに慣れたら、テーブルの表示形式をカスタマ イズできます。テーブル上で右クリックして[プロパティ]コマンドを選択し、興味のあ る列だけを表示するようにできます。 <u>ピークテーブルのプロパティ</u>を参照してくださ い。

ピーク/グループテーブルを開く方法:

- 1. 3つの方法でピーク/グループテーブルを開くことができます。
 - ナビゲーションペインでメソッド>ピーク/グループを選択します。
 - メニューからメソッド>ピーク/グループを選択します。
 - ツールバーからピーク/グループボタン
 な
 を選択します。
- ピーク/グループテーブルダイアログボックスで、同定 ピーク タブを選択し ます。
- ピークテーブルの以下に示す列は、キャリブレーションピークの結果を計算す るために使用されます。

行の番号です。 # 表示されているリテンションタイムと一致する成分の 名前 名前を入力します。 ピークの同定番号です。データシステムは、各ピーク に1から始まるピーク ID#を自動的に割り当てま す。この ID#は、リファレンスピークや内部標準物 質ピーク番号などを指定するのに使用されます。既存 のピークテーブルにピークを追加する場合は、ピーク テーブル内で右クリックしてからピーク ID の再取得 ID #を選択することにより、新しいピークテーブルに自 動的に番号を付け直すことができます。 注:ピーク ID#を付け直す場合は、ピーク ID#を使用 する可能性のあるカスタムパラメータプログラムやそ の他のユーザープログラムが、新しいピーク **ID**#に 対応してすべて更新されるようにしてください。 キャリブレーションされたピークの予想リテンション タイムです。ピークをピークテーブルに入力するのに グラフィカルイベントを使用した場合、そのテーブル リテンションタイム の作成に使用された標準試料ファイル内の検出ピーク のリテンションタイムを使って、リテンションタイム が自動的に入力されます。

324
キャリブレーションされたピーク同定に使用するリテ ンションタイムウィンドウで、キャリブレーションさ れたピークの同定に使用されるものです。この許容幅 の範囲が示され、その中心はリテンションタイムの値 となります。あるピークのリテンションタイム(リフ ァレンスピークの移動のために調整された値)がこの 許容幅の範囲内にないと、それはキャリブレーション ピークとはみなされません。複数のピークがこの許容 幅内に入っている場合、許容幅の中心に最も近いピー クがキャリブレーションされた成分と判定されます。 新しい値を分単位で入力すれば、許容幅の大きさを変 更できます。

必要に応じて、分離能の計算に使用するピークの ID#を入力します。これを空白にしておくと、このピ ークの分離能の計算は、これの前に検出されたピーク に基づいて行われます。ここで入力したピークが検出 されていない場合、あるいはあるピークが分離度 ID#に関してそのピーク自体を参照するように指定し ている場合、分離能は計算されません。

この成分に対してリファレンスピークとして使われる
 ピークの ID#を入力します。リファレンスピーク
 は、クロマトグラフにおける流量のような条件の変化
 に対して補正するようにキャリブレーションされた成

許容幅

分離度 ID #

分の、予想リテンションタイムを調整するために使用 されます。複数のピークがリファレンスピーク許容幅 に入っている場合、許容幅内で最大のピークがリファ レンスピークとして使用されます。各ピークには、そ れぞれ独自のリファレンスピークが割り当てられま す。

理想的なリファレンスピークとは、試料中に常に存在 し、かつクロマトグラム中において他のピークから十 分に識別できるものをいいます。(内部標準は優れた リファレンスピークを作成します。)

同定ピークにリファレンスピークが割り当てられる と、その予想リテンションタイムは次のように計算さ れます。

予想リテンションタイム = (リファレンスピークの実 測リテンションタイム÷リファレンスピークの予想リ テンションタイム)×ピークリテンションタイム

内部標準法を使用している場合に、この成分に対して 内部標準物質として使用されるピークの **ID**#を入力 します。

ISTD.ID# 注:内部標準法を行う場合は、キャリブレーションさ れた各成分に対して ISTD ID#を入力する必要があ ります。もし、そのピークが内部標準物質である場合 は、ISTD ID#の列にそれ自身の ID#を入力しま す。絶対検量線法でキャリブレーションを行う場合 は、すべての成分の ISTD ID#に「0」を入力する必要 があります。内部標準物質は複数指定することができ ます。

単位結果のレポートに使用される濃度単位を入力します。例えば、mg/mL や vol%などを入力します。

ピークテーブル内の予想リテンションタイムをどのよ うに更新したいかを選択します。この選択には、「な し」、「分析毎」、「キャリブレーション毎」、「分析およ びキャリブレーション毎」があります。

このパラメータは、そのピークがそのメソッドについ て以前に定義された通りの検出限界値の範囲内にある かどうかを判定するのに使用し、ASTM LOD(検出限 界)を計算するために使用します。ここで入力する数 値は、このピークの計算に使用する S/N 比(信号/ノ イズの比率)です。この計算は、絶対検量線法または 内部標準法を指定した場合にのみ有効です。

このパラメータは、そのピークがそのメソッドにつ いて以前に定義された通りの定量限界値の範囲内にあ るかどうかを判定するのに使用し、ASTM LOQ(定 量限界)を計算するために使用します。ここで入力す る数値は、このピークの計算に使用する S/N 比(信号

RT 更新

LOD

LOQ

/ノイズの比率)です。この計算は、絶対検量線法また は内部標準法を指定した場合にのみ有効です。

キャリブレーションと定量をピーク面積とピーク高さ のどちらに基づいて行うかを選択します。注:内部標 準法を使用してピークとグループの両方を定量する場 合は、ピークとグループの両方が同じ定量方法(面積 または高さ)を使用する必要があります。

データに適用させる検量線の種類を選択します。

注:5種類の選択肢から校正曲線の描画方法を選べま す。二点間/、直線および二次曲線、三次曲線および 平均 RF 法。直線には少なくとも2つのキャリブレ ーションレベル(ゼロは含まない)、二次曲線には3レ ベル、そして三次曲線には4レベルが必要です。

ゼロに強制指定 通るよう引かれます。 このボックスを選択すると、検量線は強制的に原点を

置換または平均の選択により、使用しているメソッド内の各ピークのキャリブレーション面積(または高さ)が標準試料の測定により、どのように影響されるかが決まります。すなわち、それらが書き換えられるか、あるいはキャリブレーションメソッド内の現在の繰り返し測定の面積との平均が求められるかが決まり

定量

近似の種類

キャリブレーションフラグ

ます。繰り返し重みを **100** 以外の数値に設定する と、面積(または高さ)の重み付け平均値が計算されま す。キャリブレーションの平均計算は、<u>繰り返し測定</u> と平均を使ったキャリブレーションについて を参照 してください。

キャリブレーションの平均計算が行われるたびに、その数値は最終面積(または最終高さ)としてメソッド内 に保存され、その後、重み付け平均値の計算に使用さ れます。

繰り返し測定値を平均するために重みを指定すること ができます。重み付け係数は、以下の例に示すよう に、繰り返し注入に適用されます。

現在の測定の数値(たとえば面積) 101

繰り返し測定1 104

繰り返し測定2 100

キャリブレーション重量

繰り返し測定3 102

最終面積の現在値 = 102

重み付け係数を 60 とすれば、新しいメソッドでの平 均値は以下のようになります。

[((104 + 100 + 102) / 3) * .6] + [101 * .4] = 101.6

注:内部標準法によるキャリブレーションでは、繰り 返し測定のそれぞれの測定結果は、内部標準ピークの 面積(または高さ)に対する成分の面積(または高さ)の 比率を表します。

これを選択すると、キャリブレーション中に得られた ピーク面積(または高さ)と、メソッド中の現在のピー ク面積(または高さ)の間の%差に基づく許容差が設定 されます。これらの値の%差がこの限界値を超えた場 合、このピークでキャリブレーションは更新されませ ん。

> このパラメータは、検量線にスケールファクターを適 用します。このファクタは入力された濃度あるいはレ スポンス値から検量線計算時に適用されます。スケー ルファクターを使用する目的は面積(または高さ)と濃 度あるいはレスポンスとの関係を多項式で近似するも のです。スケールファクターはどの検量線の種類にも 適用できます。使用可能なスケール演算は以下の通り です。

なし

1/アマウント 1/アマウント² In[アマウント]

% キャリブレーションマー ジン

スケール

1/ln[アマウント] **sqrt**[アマウント] アマウント2 1/レスポンス 1/レスポンス² ln[レスポンス] 1/ln[レスポンス] sqrt[レスポンス] レスポンス ² Log (アマウント) 1/log (アマウント) log (レスポンス) 1/ log (レスポンス) ln (アマウント)&ln(レスポンス) log(アマウント)&log(レスポンス) 重み付け

最小二乗法による回帰計算に使用する LSQ 重み付け 方法として、なし、1/レスポンス、1/レスポンス²、 1/アマウント、1/アマウント²のいずれかから選択し ます。重み付けを行うと、回帰計算において小さな濃 度および面積の値の比重が高くなります。

レベル1という列に、最初のキャリブレーション標 準試料中の各化合物の厳密な量(純度について補正済 み)を入力します。シングルレベルキャリブレーショ ンを行う場合は、他のレベル列に入力する必要はあり ません。マルチレベルのキャリブレーションを行う場 合(例えば、複数のキャリブレーション標準の混合物 を行う場合)は、注入しようとする各標準試料の濃度 レベルに対して、このプロセスを繰り返します。

例えば、成分Aが標準混合物1中には10ppm、標準
混合物2の中に20ppm、標準混合物3の中に
30ppmの濃度で含まれるマルチレベルキャリブレーション試料を測定すると仮定します。その場合、レベル1列には10を、レベル2列には20を、レベル3列には30を入力します。

注:場合によって、あるキャリブレーションレベルの 混合物中に、名前の分かっている成分が存在しないと いう場合があります。このとき、検量線に誤差が入り 込むのを防ぐために、その成分の該当するレベルを空 白のままにしておきます(そのセルをクリックしてキ ーを押します)。これにより、そのレベルにおけるそ の成分の面積を無視できます。

レベル

標準サンプルを持たないピーク濃度を計算したい場合 は、異なるピークを用いた検量線を指定できます。 STD 係数(以下参照)を使用して、結果を乗算して比 例数を求めることができます。

濃度の計算に使用するために別のピークを指定した場 合には、使用する乗数を入力します。目的ピークの濃 度は以下の式で計算されます。

$$Conc_{i} = f(Area_{i})x \frac{Mult_{s}}{Mult_{i}}$$

ここで、

標準係数

標準 ID #

f = 選択された検量線(直線、二次曲線、折れ線など)に対応するキャリブレーションポイントの式

Conc_i = 目的ピークの濃度

Area_i = 目的ピークの面積

Mult_s = 指定された STD ピークの STD 係数

Mult_i = 目的ピークの STD 係数

標準試料から計算されたレスポンスファクターを使う のではなく、あるピークに使用されるレスポンスファ クターに特定の値を割り当てたい場合は、ここに入力

マニュアル RF

します。手動入力のレスポンスファクターがこのフィ ールドにある場合は、検量線を使う代わりに、この値 を使ってピークの含有量が計算されます。

この列には、濃度の下限値を入力することができま す。各解析の後、データシステムはピークの計算され た濃度値をこの値と比較します。計算値がこの下限値 よりも小さい場合は、そのメソッドに対して指定され た測定後の動作を起動できます。注:「ゼロ」値を入 力した場合、この機能は無効になります。

この列には、濃度の上限値を入力することができま す。各解析の後、データシステムはピークの計算され た濃度値をこの値と比較します。計算値がこの上限値 よりも大きい場合は、そのメソッドに対して指定され た測定後の動作を起動できます。

QC レポートパラメータ

ピークテーブルの下記の各パラメータは、QC レポートの計算に使用されます。

	指定されたチェック用標準試料に含まれる成分の含有量を入
QC チェック Std	力します。(最高5点までのチェック用標準試料を定義する
15 濃度	ことができます。「ゼロ」値を入力した場合、このチェック
	は無効になります。注:「ゼロ」値を入力した場合、このチ

ェックは無効になります。

QC チェック Std

1...5 %RD

QC チェック標準レポートを作成する場合は、%相対差の限 界として使用される値をここに入力します。測定を行うと、 ピークの計算された濃度が、ピークテーブルで指定された QC チェック Std 濃度と比較されます。その差がここで設定 した値より小さい場合は、その成分は合格となります。設定 した値より大きい場合は、その成分は不合格となり、シーケ ンスのその行に対する不合格時の対応動作が行われます。最 高5点のチェック用標準試料を定義することができます。 注:「ゼロ」値を入力した場合、このチェックは無効になり ます。

 添加回収率レポート用に、1番目の添加試料に添加した成分

 の量を入力します。

SP2 添加量 添加回収率レポート用に、2番目の添加試料に添加した成分 の量を入力します。(添加を2回行う場合)

添加回収率の下限値(%)を入力します。計算された添加回収率がこの値と比較されます。添加回収下限値よりも小さい場合は不合格となります。注:「ゼロ」値を入力した場合、このチェックは無効になります。

添加回収率の上限値(%)を入力します。計算された添加回収添加回収率上限 率がこの値と比較されます。添加回収上限値よりも大きい場合は不合格となります。

デュプリケートレポートの%相対偏差として使用する値を入
 デュプリケー
 カします。%相対偏差がこの値よりも大きい場合は、試料は
 ト %RD 上限
 不合格となります。注:「ゼロ」値を入力した場合、このチ
 ェックは無効になります。

RF%RSD上限
キャリブレーションのレスポンスファクターに対する%相対標準偏差を入力します。[キャリブレポート開始]と[キャリブレポート除了]がシーケンステーブルの分析タイプに指定されていれば、この値を使ってキャリブレーションが合格か不合格を判定します。注:「ゼロ」値を入力した場合、このチェックは無効になります。

PDA パラメータ PDA オプションを使用すると下記のオプションが選択でき ます。

ピークの同定を行う基準を選択してください。「リテンションタイム」を選択すると、リテンションタイムのみでピーク
 同定方法の同定を行います。「リテンションタイムおよびスペクトル
 確認」を選択すると、リテンションタイムと指定したスペクトルとの類似度がピークの同定の基準となります。

類似度をピークの同定の基準とする場合は、比較に使用する スペクトルを指定します。このフィールドの右にあるアイコ ンをクリックするとスペクトルファイルを指定できます。こ こで指定したリファレンススペクトルとピークトップのスペ クトルとを比較し、類似度を計算します。計算した類似度が ピークテーブルの類似度で指定した値以上である場合、ピー クは同定されます。

類似度がピークの同定の基準として指定されていない場合 は、この設定は無視されます。

類似度をピークの同定の基準とする場合は、ここにピーク同 定の基準とする最低類似度を指定します。リファレンススペ クトル(前のセクションを参照)とピークトップのスペクトル と比較し、類似度を計算します。計算した類似度がここに設 定した類似度以上である場合、ピークは同定されます。

類似度がピークの同定の基準として指定されていない場合 は、この設定は無視されます。

解析チャンネル 解析に使用する DAD の波長チャンネルを選択してくださ い。選択肢は DAD によって決まります。

スペクトル

類似度

ピークテーブルのプロパティの変更

ピークテーブルに提示されたパラメータを複数使用していない場合、ビューから削除す ることができます。ここで行う選択は、機器ごとおよびユーザーごとに保存されます。 そのため、各ユーザーが、各機器のための自分のピークテーブルパラメータを設定でき ます。

ピークテーブルに表示された列を変更する方法:

- 1. ピークテーブルで右クリックし、**プロパティ**コマンドをクリックします。
- プロパティ ダイアログボックスで、ピークテーブルに表示させる列を選択し ます。チェックマークの付いた項目が、ピークテーブルのスプレッドシートに 表示されます。チェックマークの付いていない項目は表示されません。
- 青い"アンカー" は、ユーザーのスプレッドシートで左右のスクロールを固定する列を示しています。アンカーが設定されると、アンカーの右にある列が左右にスクロールされます。アンカーの左にある列は、スクロールできなくなります。アンカーを変えるには、アンカーとして指定する列の名前をクリックし、アンカーの設定ボタンをクリックします。すると、青いアンカーが指定されたアンカー列へと移動します。

注:アンカーを使用する場合には、スプレッドシートから不要な列を取り除き、アンカ ーを設定する前にスプレッドシートをできるだけ幅広く使えるようにします。現在スプ レッドシート上に表示されていない列にアンカーを設定すると、 スプレッドシートを スクロールすることができなくなります。

保存されたデータファイルを用いたシングルレベルキャリブレーション

使用したいキャリブレーションが既にディスクに保存されている場合、このファイルの 面積データを使用してメソッドのキャリブレーションを行うことができます。これによ りデータの取得は開始されません。これは、指定した保存データファイルの面積値を使 用して、指定したメソッドを更新するためのものです。

- 1. そのためには、解析メニューから 解析/シングルレベルキャリブレーション コマンドを選択します。
- 2. 下記フィールドを入力します。
- ダイアログでの設定が完了したら、スタートボタンをクリックします。保存されているデータファイルを開き、キャリブレーションされたピークの面積を使用して指定されたメソッドを更新します。

サンプル ID 選択したデータファイルのサンプル ID が表示されます。

キャリブレーションを行いたいメソッドの名前を入力し
 ます。そのメソッドがデフォルトのメソッドディレクト
 リに含まれていない場合は、ファイル名だけではなくパ
 ス名も入力してください。フィールド横の[ファイル]ボ
 タンをクリックし、ディスク上のメソッドリストからメ
 ソッドを選択することもできます。

データファイル そのメソッドのキャリブレーションに使用するファイル の名前を入力します。フィールド横の[ファイルオープ

ン]ボタンをクリックすることにより、データファイルを 選択することもできます。

結果ファイルの保存場所を示すパス名を入力します。[フ結果パス アイルオープン]ボタンをクリックすることにより、リストからパス名を選択することもできます。

結果名を入力します。

 PDF として保存
 このボックスをチェックすると、メソッドレポートを

 PDF として保存します。
 PDF として保存します。

ハードコピーの印刷 このボックスをチェックすると、メソッドレポートを印 刷します。

> 濃度の計算方法に関係する値を入力することができま す。メソッドをキャリブレーションする前にデータ取込 のためにシングルランをする場合は、これらの数値はデ フォルトレベルのままにしておいてください。

> > この値は、濃度計算時に除数として使用されます。これ は、秤量による試料間の誤差を補正するために使用しま す。または、注入で検出された量を求めるのではなく試 料の総量に対するパーセント値を求めたい場合に使用し ます。

濃度

サンプル量

内部標準物質量
キャリブレーション測定を行う場合、内部標準物質量は
メソッドのピークテーブルから採用されます。未知試料の測定の場合は、未知試料内の内部標準物質の量を入力します。

この解析/キャリブレーションに使用する 1~3 個の乗数 補正係数 を入力します。定量化されたすべてのピークに、これら の乗数が掛けられます。

この解析/キャリブレーションで使用する 1~3 個の希釈 希釈係数 係数を入力します。定量化されたすべてのピークは、こ れらの希釈率で割られます。

試料をキャリブレーション用試料として使用する場合 は、このボックスを選択します。このボックスをクリッ クすると、以下のフィールドおよびオプションが使用可 能となります。

キャリブレーションレ ペル 保存されているキャリブレーション標準により表される キャリブレーションレベルを入力します。シングルレベ ルキャリブレーションであれば**1**を入力します。

キャリブレーションを行う前に、使用するメソッドから検量線をすべて削除既存のキャリブレーションファクターをすべて削除したい場合は、このボックスをクリックします。

このレベルの検量線を削 存のレスポンスファクターを削除したい場合は、このボ ックスをクリックします。

キャリブレーションを行った後にキャリブレーションレ 検量線を印刷 ポートを印刷したい場合は、このボックスをクリックし ます。

キャリブレーションを行う前に、既存のキャリブレーシ 繰り返し測定値の削除 ョンレベルから既存の繰り返し測定値をすべて削除した い場合は、このボックスをクリックします。

繰り返し測定値の平均 このキャリブレーションレベルに対する測定値の平均値 を取りたい場合は、このボックスをクリックします。

ピーク ID の番号付け直し

ピーク ID 番号は、それらが追加された順番に従って、キャリブレーションされたピー クに割り当てられます。 ピークテーブルにピークを追加する場合、ピーク ID を再取得 して ID 番号がピークのリテンションタイムの順番に並ぶようにしてください。

ピーク ID を再取得するには、<u>ピークテーブル</u>を右クリックしてピーク ID の再取得を 選択します。ピークテーブル中のピーク ID 番号が振り直されます(変更を反映するの に、Ref ID#および ISTD ID#も対応して変わります)。 注:ピーク ID#を振り直したい場合、カスタムパラメータまたはカスタムレポート中で ピーク ID#が振付けられた項目を新しいピーク ID#を使って再度定義する必要があり ます。

検量線のレビュー

使用しているメソッドに対するキャリブレーション標準をすべて測定したら、**キャリブ** レーション レビューボタン ど をクリックして、検量線とそれに関連するデータを確 認することができます。 [検量線の確認] ウィンドウが表示されます。

[検量線の確認] ウィンドウでは以下を行うことができます。

- キャリブレーションされた各ピークの検量線を見ることができます。
- 検量線の種類を変更したり重ね合わせたりすることができます。
- 検量線の式を見たり、それぞれについて R-二乗値(整合性の指標)を調べたり することができます。
- 検量線からデータポイントを一時的に除去することができます。
- レスポンスファクター、繰り返し測定の面積、および標準偏差値を見ることができます。
- 濃度計算機能を使用して、手動で入力した面積から含有量を計算できます。

検量線を表示させる

ウィンドウ右上には、キャリブレーションされた**ピークの一覧**があります。あるピーク のキャリブレーション情報を見るには、ピークの一覧の中でそのピーク名をクリックし ます。そのピーク名がハイライトされ、そのピークのキャリブレーション情報を含むよ うに、スプレッドシートと検量線が更新されます。 選択したピークに対する検量線は、ウィンドウの左下の部分に表示されます。

ウィンドウの右下の部分には、表示している検量線に関するパラメータと計算結果が表示されます。ウィンドウの右下のボックスは、表示されている検量線のパラメータと計算データを表示します。これには、平均レスポンスファクター、レスポンスファクター 標準偏差、レスポンスファクター% RSD、スケールファクター、LSQ 加重係数、原 点通過の有無、繰り返し測定モード、表示されている各検量線の式、およびその r² 値 が含まれます。

検量線から一時的にポイントを除く

検量線から1つのポイントを除いたらどうなるかを見るには、そのポイントをマウス で一度クリックすることにより、一時的に計算から除外することができます。除外され たポイントは赤色に変わり、それが検量線の計算に現在使われていないことを示してい ます。スプレッドシートセルのそのポイントに対応するセルも赤く変わります。除いた ポイントを元に戻すには、もう一度そのポイントをクリックします。スプレッドシート 内のセルをクリックしてから **Delete** キーを押せば、点をスプレッドシートで無効に することもできます。ポイントを元に戻すには、もう一度 **Delete** キーを押します。

マウスの右ボタンを使う

右クリックすることでクイックメニューにアクセスできます。ウィンドウの検量線領域 内で右クリックすると以下のメニューが表示され、表示されている検量線の特性を変更 することができます。

検量線の表示

グラフ中に表示させたい新しい検量線の種 類を選択します。その検量線は現在の検量 線に重ねて表示されます。また**すべて表示** または**すべて消去**をメニューから選択す

ることもできます。

検量線に適用する新しい検量線の種類を選 択します。検量線の種類を変更すると、そ の変更はこのピークに対するピークテーブ ルへも入力されます。

検量線に対する新しいスケールファクター を選択します。このスケールファクター は、表示されるすべての検量線に適用され ます。そして、このピークに対するピーク テーブルへ適用されます。

最小二乗重み付け係数を選択して、キャリ ブレーション曲線に適用してください。(適 用できるのは直線、三次曲線および二次曲 線のみです。)選択した LSQ 加重がこのピ ークに対するピークテーブルへ入力されま す。

原点を通る検量線を描きたい場合はこれを 選択します。これを変更すると、このピー クに対するピークテーブルが自動的に変更 されます。

検量線の変更

LSQ 加重

原点を通過

スケール

オティード ピーク とグループ のいずれの情報を表示 させるか選択します。

テーブルの表示形式

レスポンスファクターの設定

現在の検量線を印刷

これで、キャリブレーションデータスプレ ッドシートに表示したい測定値を選択でき ます。面積/高さを選択して測定する面積 や高さを表示します。レスポンスファクタ ーを選択して測定レスポンスファクターを 表示します。

レスポンスファクターを計算/表示する方法 として面積/濃度あるいは濃度/面積を選択 します。これらの選択はメソッド>プロパ ティ>オプション ダイアログにあるメソッ ドの、面積/濃度 または 濃度/面積 で行う ことができます。

これを選択すると、現在選択されているピ ークまたはグループの情報が印刷されま す。

すべての検量線を印刷 *ブループ*情報が印刷されます。

元の倍率に戻す 検量線の表示倍率を100%に戻します。

濃度計算機能により、面積または高さを入 力することにより、含有量を計算させるこ とができます。<u>濃度計算</u>を参照してくださ い。

キャリブレーションデータを見る

ピークリストからピークを選択すると、 ウィンドウ上部のスプレッドシート内にその ピークのキャリブレーションデータが表示されます。スプレッドシートの各行がその化 合物のキャリブレーションレベルを表します。

キャリブレーションレベルは、検量線上のあるポ イント(あるいは繰り返し測定を使用する場合に は複数のポイント)に対応し、ピーク面積とキャ リブレーションされた量の関係を表します。キャ リブレーションレベルの数は、成分ごとに異なる 可能性があります。EZChrom ソフトウエアで は、成分ごとに無制限の数の濃度レベルを扱うこ とができます。各レベルについて、以下のフィー ルドが表示されます。

濃度/濃度比このレベルにより表される成分の含有量(絶対件
稜線法の場合)または濃度比(内部標準法の場合)

濃度計算

です。

指定されたレベルに対するピーク面積または高さ 面積(または高さ)/面積比(また (絶対件稜線法の場合)または面積比または高さ比 は高さ比) (内部標準法の場合)です。

> 指定されたレベルでのピークのレスポンスファク ターです。

繰り返し注入を行わない場合は、 これが指定さ れたレベルでのピークに対する最新の面積または 最新面積(面積比)または高さ(高 高さ(あるいは面積比/高さ比)となります。繰り 返し注入を行われた場合には、繰り返し測定の古 い平均値となり、重み付けのために使用されま す。

残渣とは、入力した濃度と計算された検量線から 残渣 読み戻った濃度との差です。

繰り返し測定値の標準偏差 繰り返し測定の標準偏差です。

RF

さ比)

繰り返し測定値の % RSD 繰り返し測定の%相対標準偏差です。

各レベルに対して、複数の繰り返し測定値を割 Rep 1...x 面積(面積比)/高さ り当てる(同じレベルの標準試料を繰り返して注 (高さ比) 入する)ことができます。Rep1は最新のキャリ

ブレーション測定値で、Rep 2 はその1 つ前の 測定値です。一連の繰り返し測定値の中で新しく キャリブレーションが行われるたびに、前の測定 による面積が右(大きな番号)に移動します。繰り 返し測定標準が使用され、繰り返し重みが 100 に設定されると、レスポンスファクターは、そ のキャリブレーションレベルにおけるすべての繰 り返し測定値の真の平均値に基づいたものになり ます。繰り返し平均値が使用されるためには、ピ ークテーブルの[繰り返しモード]で平均を選択 する必要があります。選択しない場合、そのレベ ルで注入されるたびに、新しいキャリブレーショ ン面積(または高さ)に書き換えられます。

繰り返し測定データを使用して、キャリブレーションを最後に行った時に記録されたユーザー名です。

Rep 1...x データファイル *構り返し測定データが保存されているデータファ* イルです。

Rep 1...x サンプル ID 繰り返し測定試料に対するサンプル ID です。

 Rep 1...x キャリブレーション
 繰り返し測定を使用して、キャリブレーションが

 時間
 最後に行われた日時です。

349

濃度計算

濃度計算機能により、面積または高さを入力することにより、含有量を計算させること ができます。濃度計算をするためには、キャリブレーションされたメソッドを開いてお かなければなりません。

濃度計算の手順は以下の通りです。

- 1. 機器ウィンドウで**キャリブレーション レビュー** ボタン **ビ**をクリックします。
- 2. 検量線の確認ウィンドウ上で右クリックし、**濃度計算**コマンドをクリックしま す。
- 3. 以下のフィールドを入力してください。
 - 適合タイプ 濃度または面積を計算するのに使用する検量線の種類を選 択します。
 - スケール 必要であれば、計算に使用するスケールファクターを選択し ます。
 - LSQ 加重 必要であれば、使用する最小二乗法の重み付け係数を選択し ます。
 - **原点を通過** 原点を通る検量線を計算したい場合は、これを選択します。
 - 面積 含有量(濃度)を計算したい場合は、計算したいピークの面積を入力し、計算ボタンをクリックします。

キャリブレーションの平均計算

以下の選択は、メソッドにおいて平均化をどのように扱うかを指定します。

自動キャリブレーション平均化を有効にするには、メソッド/プロパティ/キャリブレ ーションを選択します。 自動的に繰り返し測定値を平均するにチェックを入れます。 無効にするには、このボックスのチェックを外します。 <u>繰り返し測定値を自動的に平均化</u>を参照してください。

キャリブレーションランタイプを指定するには、コントロール > シングルランを選択 します。繰り返し測定値の平均にチェックを入れます。無効にするには、このボックス のチェックを外します。

<u>シングルランまたはシーケンスの一部としてのキャリブレーション平均計算</u>を参照して ください。

キャリブレートしたピーク面積を平均するには、<u>ピークテーブル</u>のピークのキャリブ レーションフラグを**平均**に設定します。ピーク面積の平均を使いたくない場合は、そ のピークのキャリブレーションフラグを**[置換]に設定します。**

繰り返し測定と平均を使ったキャリブレーションについてを参照してください。

繰り返し測定値を自動的に平均化

キャリブレーション平均の自動計算は、1つのグループにまとめられたキャリブレーション繰り返し測定の平均を素早く求める方法であり、最も一般的に使用されています。

すべてのキャリブレーションが平均化されるようなメソッドの設定方法:

 メソッドメニューの プロパティ をクリックし、キャリブレーション タブを クリックします。その場合、毎回キャリブレーションを行うごとに、自動的に 平均を計算するオプションを選択することができます。自動平均計算機能を有 効にするとき、[自動的に繰り返し測定値を平均する]という項目にチェックマ ークが付いていることを確認してください。これは、デフォルトで選択されて います。このデフォルトによる平均について、以下に説明します。メソッドの プロパティのキャリブレーションを参照してください。

繰り返しの測定の自動平均機能を選択すると、繰り返し測定値が削除されるまで、与 えられたレベルのすべての繰り返し測定の平均が計算されます。シーケンスキャリブレ ーション(またはシーケンス再解析キャリブレーション)が行われると、与えられたレベ ルにおけるすべての繰り返し測定の平均操作が、そのレベルにおける一連のキャリブレ ーション繰り返し測定の終わりに自動的に行われます。そのポイントでの面積または高 さの平均値が、[最新面積]としてメソッドに保存されます。新しいレベルになると、前 のレベルに対する繰り返し測定は自動的にそのメソッドから削除されます。

注: 平均計算は、ピーク/グループテーブルの[キャリブレーションフラグ]が[平均]に設 定されたピークについてのみ行われます。

自動平均計算機能を無効した場合には、シングルランで[繰り返し測定値の平均]を選択 するか、またはシーケンスランの分析タイプに[繰り返し測定値の平均]を選択して強制 的に平均を計算させない限り、繰り返し測定モードが平均に設定されたピークに対して 結果の計算が行われないことに注意してください。

移動平均によるキャリブレーション

[メソッド]>[プロパティ]>[キャリブレーション] タブで移動平均の繰り返し測定 値の値を入力した場合、移動平均は、繰り返し測定値について以下に示すように計算さ れます。メソッドのプロパティのキャリブレーションを参照してください。

移動平均は、以下の例のように行われます。

あるデータ取込のシーケンスについて、S=標準試料、U=未知試料、また移動 平均での繰り返し測定回数=4

S1, U1, S2, U2, S3, U3, S4, U4, S5, U5, S6, U6, S7, U7

上記のデータ取込のシーケンスにおいては、U1 は S1 を使用して定量され、 U2 は S1 と S2 の平均値を使用して定量され、U3 は S1 と S2 と S3 の平均 値を使用して定量され、U4 は S1 と S2 と S3 と S4 の平均値を使用して定量 され、U5 は S2、S3、S4 および S5 の平均値を使用して定量されます。この 例では、4 回のキャリブレーション繰り返し測定値ごとに平均を出します。

自動平均計算機能を使うとキャリブレーションシーケンス中に繰り返し測定がどのように扱われるのかを、以下の例で説明します。

- 各測定データが解析されると、それぞれの同定ピークの面積がメソッド内に現 在の面積値として保存されます。測定3が終わると、レベル1の測定1-測 定3の繰り返し測定値から真の平均値が計算されます。この値は、レベル1 のキャリブレーションの領域と高さです。
- 測定4で、レベル2のキャリブレーションが開始されます。レベル2の繰り返し測定が、測定4、5および6に対して保存されます。
- 測定6の終わりにレベル2の繰り返し測定が平均化され、レベル2のキャリ ブレーションポイントの計算に使用されます。この領域と高さは、レベル2 の「最終面積」として保存されます。
- 測定7の開始時に、レベル1の既存の繰り返し測定値が削除され、新たなレベル1の繰り返し測定値が測定7と測定8に対して保存されます。

5. 測定8の終わりに、既存のキャリブレーションの面積(または高さ)が最終面積 となり、測定7および8の真の平均値が計算され、この値と最終面積を使っ て重み付け平均が計算されます([キャリブレーション重量]の項の計算を参照 してください)。[繰返し重み]が100に設定された場合、最終面積の値は考慮 されないことに注意してください。

Sequence: Calib.seq							
Bun #	Status	Run Type	Level	Sample ID	Method		
····1···		Calibration 🕒 🕨	1	Test01	ultilevel calibration.met 🔸		
··· 2 ···		Calibration	1	Test02	multilevel calibration.met		
3		Calibration	1	Test03	multilevel calibration.met		
4		Calibration	2	Test04	multilevel calibration.met		
*** 5 ***		Calibration	2	Test05	multilevel calibration.met		
··· 6 ···		Calibration	2	Test06	multilevel calibration.met		
		Calibration	1	Test07	multilevel calibration.met		
8		Calibration	1	Test08	multilevel calibration.met		
9							

シングルランまたはシーケンスの一部としてのキャリブレーション平均計算

シングルラン

自動計算機能を使用するかどうかに関係なく、シングルランの開始時に、あるいはシー ケンスの**分析タイプ**の一部として、平均計算を指定することができます。

キャリブレーションランタイプを指定するには、コントロール > シングルランを選択 します。繰り返し測定値の平均にチェックを入れます。繰り返し測定値は平均され、新 しいキャリブレーションポイントを計算する際にキャリブレーション重量とキャリブレ ーションフラグと連動して用いられます。

シーケンス

シーケンスの場合、キャリブレーションの平均計算は**分析タイプ**の一部として指定されます。

シーケンススプレッドシート の 分析タイプ フィールドを選択します。サンプルの 分 析タイプ ダイアログボックスで、繰り返し測定値の平均を選択します。繰り返し測定 値は平均され、新しいキャリブレーションポイントを計算する際にキャリブレーション 重量とキャリブレーションフラグと連動して用いられます。

キャリブレーション測定に繰り返し測定値の平均の分析タイプが設定されているかどう かは、シーケンステーブルを見ることで簡単に確認することができます。繰り返し測 定値の平均に指定されている測定は、分析タイプの列に繰り返し測定値の平均コードが 表示されています。

これらの測定の1つの[分析タイプ]をクリックすると、その試料の[分析タイプ]に対 する**繰り返し測定値の平均**ボックスがチェックされていることを確認できます。この試 料の[分析タイプ]から[繰り返し測定値の平均]を削除したい場合は、このチェックマー クを再度クリックします。

注:自動平均計算機能が無効になっている時は、キャリブレーション測定開始時にこれ を削除するか平均するかをしない限り、キャリブレーションの繰り返し測定値がメソッ ド内に保存され続けます。

繰り返し測定と平均を使ったキャリブレーションについて

メソッドには、最初はキャリブレーションが含まれません。最初のキャリブレーション 標準試料を測定すると、キャリブレーションされた各ピークの面積(または高さ)がメソ ッドキャリブレーションに入力されます。その後で標準試料を同じキャリブレーション レベルで測定する(**繰返し測定)**場合は、キャリブレーションに対する新しい面積(また は高さ)をデータシステムにどのように扱わせるかを選択することができます。

キャリブレートしたピーク面積を平均するには、<u>ピークテーブル</u>のキャリブレーショ ンフラグ を 平均に設定します。ピーク面積の平均を使いたくない場合は、キャリブレ ーションフラグ を置換に設定します。

置換は、既存のキャリブレーションを更新するものです。これを選ぶと、前の繰り返し 測定の面積(または高さ)値が、新しい繰り返し測定の値に置き換わります。最新の繰り 返し測定の面積(または高さ)だけを使用して、検量線が作成されます。それ以前の繰り 返し測定値は無視されます。

平均を選択すると、前の繰り返し測定による面積(または高さ)値を今回の値と平均する ことにより、検量線の各キャリブレーションポイントが決定されます。以下の例で説明 します。

> 既存のキャリブレーションデータを持たない、シングルレベルキャリブレ ーションのための、出発点となるメソッドを仮定します。n 個のキャリブ レーション繰り返し測定用の一連の試料を測定した後で、検量線が以下の ように決定されます。

レベル1 繰り返し測定 面積

- **1.** 面積₁
- 2. 面積 2
- 3. 面積 3

. .

. .

356

n 面積 n

. .



結果として得られた検量線を上に示します。ここで、点(x,y)はレベル1 のキャリブレーションポイントを示します。この点の面積 y は、このレ ベルでの各繰り返し測定値の平均から計算されます。

$y = \frac{area_1 + area_2 + \dots area_n}{n}$

この平均 y は、最終面積としてメソッド内に保存されます。この数値は、 以下のように、このレベルに対する新たな一連の繰り返し測定値を行った ときに、重み付け平均を計算するために使用されます。

レベル1 繰り返し測定 面積

1 面積1

2 面積 2

3 面積 3

· ·

. .

• •

m 面積 m

このレベルに対して一連の繰り返し測定が行われたのは、これが2回目 なので、ここでピークテーブルの[キャリブレーション重量](荷重係数)に 設定された係数を使用して重み付け平均値が計算されます。

新たな検量線が以下のように計算されます。



面積 **y2** を以下のように計算して、キャリブレーションポイント(**x2,y2**) を使用して、新しい検量線が作成されます。

$$\left[\left(\frac{area_1 + area_2 + ...area_m}{m} \right) * W \right] + \left[y * (1 - W) \right]$$

ここで、
 $y_2 = x_{+} y_{-} y$

グループとグループキャリブレーション

グループとグループキャリブレーションについて

「グループ」とは何らかの形で互いに関連する複数のピークの集まりです。データシステムでは、グループをいくつでも定義できます。グループを構成するピークは、クロマトグラムにおいて連続するピークである必要はありません。以下の3つのいずれかの方法で処理されます。

- キャリブレーションされていない範囲。このタイプのグループ分けを行うには時間範囲を指定します。その時間範囲内に検出するキャリブレーションされていないピークの濃度を決定するため、マニュアルレスポンスファクターが適用されます。
- <u>キャリブレーションされている範囲(グループキャリブレーション)</u>。この方法
 を使用すると、複数のピークをまとめて1つにグループとしてキャリブレー

ションを行い、そのグループに対して共通のレスポンスファクターを作成しま す。キャリブレーション範囲内の複数ピークは、そのグループ内に共通のレス ポンスファクターを使用して、1つのピークとしてレポートに報告されます。

 同定ピークを指定してグループに含める(ピークグルーピング)。この方法を使用すると、そのグループに使用されたすべてのグループキャリブレーションピークの、濃度の合計がグループレポートに示されます。グループ内のすべての ピークはピークテーブルにも示されるので、それらを別々にレポートすること もできます。

関連項目

グループの定義

グループテーブルのプロパティ

キャリブレートされていないグループ範囲

グループキャリブレーション (キャリブレーションされている範囲)

グループテーブル

グループ範囲設定

グループキャリブレーションの例

<u>キャリブレーションされたピークの分類(同定ピーク)</u>

同定ピークグループの設定

グループ範囲の調整
グループ物質量のレポート

グループの定義

グループの定義は、キャリブレーションされたピークの定義に似ています。グループは、 グループテーブルに情報をタイプすることで手動で定義するか、 あるいはインテグレ ートされたクロマトグラムを使用してグラフィカルに定義することもできます。

図を用いてグループを定義するには

- 1. データファイルを開く でクロマトグラムを表示します。
- クロマトグラムを右クリックしてグラフィカルプログラミング > グループの 定義を選択するか、またはツールバーの統合でグループの定義 ボタン 選択します。
- 定義したいグループを選択します。そのグループに追加したいピーク領域の始めでクリックし、終わりでもう一度クリックします。グループ領域をクリックすることにより、グループの追加を続けられます。グループ領域の定義が終了したら[ESC]キーを押します。
- **4. ピークの定義** ダイアログボックスで、以下のフィールドを設定してグループ をより詳しく定義します。
- **グループ名** このグループに付けたい名前を入力します。
- **グループタイプ** 定義したいグループのタイプを選択します。
- **定量方法** レスポンスファクターの計算に面積と高さのどちらを

使用するかを選択します。注:内部標準法を使用して ピークとグループの両方を定量する場合は、ピークと グループの両方が同じ定量方法(面積または高さ)を使 用する必要があります。

そのグループのキャリブレーションに内部標準法を使 用する場合は、試料に既知量の内部標準物質を添加す る必要があります。内部標準物質は、使用しているピ ークテーブルに入力され、キャリブレーション量が割 り当てられていなければなりません。ピークテーブル における内部標準物質のピーク ID 番号をこのフィー ルドに入力します。

リファレンスピークを使用する場合は、リファレンス ピークとして使用されるピークのピーク ID 番号をピ ークテーブルから入力します。リファレンスピークの リテンションタイムは、グループウィンドウの開始お よび終了時間を調整するために使用されます。リファ レンスピークは、ピークテーブル中で定義されてお り、また予想リテンションタイムが指定されていなけ ればならないので注意してください。リファレンスピ ークについては、キャリブレーションレベルが割り当 てられている必要はありません。

単位

Ref ID#

グループ濃度結果を報告するのに使用される単位を入

ISTD ID

力します。

個々にキャリブレーションされたピーク(同定ピーク) をこのグループに含めたい場合は、このボックスをク リックします。同定ピークの面積が、そのグループの レスポンスファクターの計算に使用されます。

グループの未同定ピークの濃度を計算ボックスを選択 すると、グループ中の同定されていない(キャリブレ ーションされていない)ピークの濃度が、そのグルー プのレスポンスファクターを使って計算され、「ピー クレポート」のセッションに掲載されます。ピークレ ポートには未同定ピークの濃度は含まれますが、グル ープの濃度は含まれません。グループ濃度は、それと は別の「グループレポート」のセクションに報告されま す。

グループの未同定ピークの

濃度を計算する

同定ピークを含める

注:このボックスにチェックすると、グループのトー タル面積および高さはピークテーブルの一部とみなさ れることはありません。したがって、ピークレポート の面積%と高さ%の列は、合計すると100%となり ます。分析レポートにグループを報告する場合は、グ ループだけを含むような別のレポートセクションを作 成します。ここには、このオプションを使用しても、 グループのトータル濃度だけが表示されます。このボ ックスを選択しない場合は、そのグループはピークテ ーブルの一部とみなされ、面積%、高さ%、濃度は 合計すると100%以上となることがあります。

様々なグループキャリブレーションオプションを用いたレポートの例については、<u>グル</u> ープキャリブレーションの実施例を参照してください。

グループテーブルについて

グループテーブルのプロパティを見る方法は以下の通りです。

- 1. 3つの方法でピーク/グループテーブルを開くことができます。
 - ナビゲーションペインでメソッド>ピーク/グループを選択します。
 - メニューからメソッド>ピーク/グループを選択します。
 - ツールバーからピーク/グループボタン
 を選択します。
- 2. ピーク/グループテーブルダイアログボックスで、グループタブを選択します。
- グループキャリブレーションするためには、各グループのキャリブレーション 量を入力する必要があります。レベル1、などのラベルが付いたグループテ ーブルの列に、そのグループの検量線の計算で使用するキャリブレーション量 を入力します。また、グループ結果レポートで使用する濃度単位を単位という 列に入力します。
- **4.** 適切にグループキャリブレーションをするために、以下のパラメータを指定してください。

キャリブレーションについて

#	行の番号です。
名前	成分名を入力します。
Ref. ID#	この成分に対してリファレンスグループとして使われる グループの ID#を入力します。
	内部標準法を使用している場合に、この成分に対して内 部標準物質として使用されるグループの ID#を入力し ます。
ISTD.ID#	注:内部標準法を行う場合は、キャリブレーションされ た各成分に対して ISTD ID#を入力する必要がありま す。もし、そのピークが内部標準物質である場合は、 ISTD ID#の列にそれ自身の ID#を入力します。外部 標準法でキャリブレーションを行う場合は、すべての成 分の ISTD ID#に「0」を入力する必要があります。内部 標準物質は複数指定することができます。
グループタイプ	グループタイプ のフィールドには グループキャリブレ ーションと表示されているはずです。
グループ定義	グループ定義 のフィールドをクリックすると、グルー プを定義するためにマウスを使って選択した領域のリテ ンションタイムレンジが表示されます。

キャリブレーションについて

単位結果のレポートに使用される濃度単位を入力します。例えば、mg/mL や vol%などを入力します。

定量

キャリブレーションと定量をピーク面積とピーク高さの どちらに基づいて行うかを選択します。注:内部標準法 を使用してピークとグループの両方を定量する場合は、 ピークとグループの両方が同じ定量方法(面積または高 さ)を使用する必要があります。

データに適用させる検量線の種類を選択します。

注:5 種類の選択肢から校正曲線の描画方法を選べま

近似の種類
 す。二点間、直線および二次曲線、三次曲線および平均
 RF 法。直線には少なくとも2つのキャリブレーション
 レベル(ゼロは含まない)、二次曲線には3レベル、そし
 て三次曲線には4レベルが必要です。

ゼロ このボックスを選択すると、検量線は強制的に原点を通 るよう引かれます。

 伊換または平均の選択は、各グループのキャリブレーション面積(または高さ)が標準試料の測定によってどのように影響されるかが決まります。すなわち、それらが書き換えられるか、あるいはキャリブレーションメソッド内の現在の繰り返し測定の面積との平均が求められるかが決まります。繰り返し重みを100以外の数値に設

定すると、面積(または高さ)の重み付け平均値が計算さ れます。キャリブレーションの平均計算は、繰り返し測 定と平均を使ったキャリプレーションの項を参照して ください。

キャリブレーションの平均計算が行われるたびに、その 数値は最終面積(または最終高さ)としてメソッド内に保 存され、その後、重み付け平均値の計算に使用されま す。

繰り返し測定値を平均するために重みを指定することが できます。重み付け係数は、以下の例に示すように、繰 り返し注入に適用されます。

現在の測定の数値(たとえば面積) 101

繰り返し測定1 104

繰り返し測定2 100

キャリブレーション重量 繰り返し測定3 102

最終面積の現在値 = 102

重み付け係数を 60 とすれば、新しいメソッドでの平均 値は以下のようになります。

[((104 + 100 + 102) / 3) * .6] + [101 * .4] = 101.6

注:内部標準法によるキャリブレーションでは、繰り返

し測定のそれぞれの測定結果は、内部標準ピークの面積 (または高さ)に対する成分の面積(または高さ)の比率を 表します。

これを選択すると、キャリブレーション中に得られたグ ループ面積(または高さ)と、メソッド中の現在のグルー プ面積(または高さ)の間の%差に基づく許容差が設定さ れます。これらの値の%差がこの限界値を超えた場合、 このグループでキャリブレーションは更新されません。

このパラメータは、検量線にスケールファクターを適用 します。このファクタは入力された濃度あるいはレスポ ンス値から検量線計算時に適用されます。スケールファ クターを使用する目的は面積(または高さ)と濃度あるい はレスポンスとの関係を多項式で近似するものです。ス ケールファクターはどの検量線の種類にも適用できま す。使用可能なスケール演算は以下の通りです。

スケール

ージン

%キャリブレーションマ

なし

1/アマウント 1/アマウント² ln[アマウント] 1/ln[アマウント]

368

sqrt[アマウント]

アマウント2

1/レスポンス

1/レスポンス²

ln[レスポンス]

1/ln[レスポンス]

sqrt[レスポンス]

レスポンス ²

Log (アマウント)

1/ log (アマウント)

log (レスポンス)

1/log (レスポンス)

ln (アマウント)&ln(レスポンス)

log(アマウント)&log(レスポンス)

最小二乗回帰フィットの計算に使用する重み付けメソッ

 重み付けメソッド
 ドを 1/Response, ^{1/Re sponse²}, 1/Amount,

 1/Amount²の中から選択するか、または何も選択しません。
 0中から選択するか、または何も選択しません。

および面積の値の比重が高くなります。これは、直線、 二次曲線および三次曲線のみ適用されます。

グループのレスポンスファクターの計算に使用される1 以上のキャリブレーションレベルを指定しなければなり ません。各レベルに対して、そのキャリブレーション試 料中のグループの量を入力します。

注:あるグループを、グループ内の他のグループよりも 少ない数でキャリブレーションしたいという場合があり ます。(例えば複数のキャリブレーション混合物があり 同じ濃度レベルを計算する場合。)このとき、検量線に 誤差が入り込むのを防ぐために、そのグループの該当す るレベルを空白のままにしておきます(そのセルをクリ ックしてキーを押します)。空白にするには、そのセル をダブルクリックして[Delete]キーを押します。

QC チェックを行う場合は、各グループの該当する列に必要なデータを入力しなければ なりません。こうした列の詳細については<u>キャリブレーション</u>の項を参照してください。

注:グループテーブルでは、ピークテーブルと同様、 自分のグループキャリブレーショ ンのために必要なパラメータの列のみを表示するようにカスタマイズすることができま す。グループのパラメータを選択するには、そのグループ内のスプレッドシート上で右 クリックして、ドロップダウンメニューから[プロパティ]を選択します。このダイアロ グから、スプレッドシートに含めたいパラメータをクリックします。

メソッドを保存することを忘れないでください。グループキャリブレーションを完了す るには、含有量が入力されている各レベルについてのキャリブレーション標準試料を測 定しなければなりません。これは保存されているデータファイルを使用して手動で入力 するか、あるいはシーケンスの一部として行うことができます。キャリブレーションメ ソッドの詳細については<u>キャリブレーション</u>の項を参照してください。

グループテーブルのプロパティの変更

グループテーブルに提示されたパラメータを複数使用していない場合、ビューから削除 することができます。ここで行う選択は、機器ごとおよびユーザーごとに保存されます。 そのため、各ユーザーが、各機器のための自分のピークテーブルパラメータを設定でき ます。

グループテーブルに表示された列を変更する方法:

- 1. グループテーブルで右クリックし、プロパティコマンドをクリックします。
- プロパティ ダイアログボックスで、グループテーブルに表示させる列を選択 します。チェックマークの付いた項目が、グループテーブルのスプレッドシー トに表示されます。チェックマークの付いていない項目は表示されません。
- 3. 青い"アンカー"→は、ユーザーのスプレッドシートで左右のスクロールを固 定する列を示しています。アンカーが設定されると、アンカーの右にある列が 左右にスクロールされます。アンカーの左にある列は、スクロールできなくな ります。アンカーを変えるには、アンカーとして指定する列の名前をクリック し、アンカーの設定 ボタンをクリックします。すると、青いアンカーが指定 されたアンカー列へと移動します。

注:アンカーを使用する場合には、スプレッドシートから不要な列を取り除き、アンカ ーを設定する前にスプレッドシートをできるだけ幅広く使えるようにします。現在スプ レッドシート上に表示されていない列にアンカーを設定すると、 スプレッドシートを スクロールすることができなくなります。

キャリブレートされていないグループ範囲

[マニュアル RF]のグループは、指定されたリテンションタイムの範囲内に溶出するキャリブレートされていないピークに対して、レスポンスファクターを入力するために使用します。クロマトグラムが解析されると、このグループ範囲内に溶出する未同定ピークの濃度は、このグループ範囲に対して入力されたレスポンスファクターを使って計算されます。

キャリブレートされていない範囲のグループの指定は、保存されているクロマトグラム を使用して行われます。単にキャリブレートされていないピークの範囲を定義している だけなので、グループを作成するためにクロマトグラムを解析する必要はありません。

キャリブレートされていないグループ範囲を定義する方法:

- 1. ファイル > 開く > データを選択します。グループに含めたい範囲を含むデ ータファイルを開きます。
- 2. 解析ボタンをクリックします。そのグループに含めたいすべてのピークが検出 されていることを確認します。(オプション)
- グループの定義ボタンをクリックするか、右クリックしてから、[グラフィカ ルプログラミング]メニューから[グループ設定]コマンドを選択します。この 機能では、1つまたはそれ以上のグループウィンドウをマウスを使って定義し ます。マウスにより定義された領域は、そのグループのキャリブレートされて いない領域となります。クロマトグラム内の任意の領域を、そこにピークがあ るかないかに関係なく、どの領域でもクロマトグラムとして定義することがで きます。

- **4.** クロマトグラム上のグループ領域の始まりを指定したい点でマウスを一度クリ ックします。
- 5. グループ領域の終わりに指定したい点でもう一度クリックします。
- 同じグループにピークを追加したい場合は、上記の操作を必要なだけ繰り返し ます。グループへのピークの追加が終了したら[ESC]キーを押します。
- そのグループに対するダイアログが表示されます。グループタイプとして【マニュアル RF】を選択し、グループ名に名前を入力します。キャリブレートされていない範囲の濃度はマニュアルレスポンスファクターから計算されるため、レポートのための単位を除き、その他のフィールドにも値を入力する必要はありません。
- ダイアログボックスへの入力が完了したら OK ボタンをクリックします。グ ループテーブルに入力した情報を含む行が追加されます。
- グループテーブルを見るには、ツールバーのピーク/グループテーブル ボタン をクリックします。グループの情報テーブルを見るには、グループ タブをク リックします。
- **10.** そのグループに対するマニュアル **RF** の列に、 キャリブレートされていない 範囲のグループに対して使用するレスポンスファクターを入力します。
- 11. リファレンスピークを使用する場合は、リファレンスピークとして使用される ピークのピーク ID 番号をピークテーブルから入力します。リファレンスピー クのリテンションタイムは、グループウィンドウの開始および終了時間を調整 するために使用されます。リファレンスピークは、ピークテーブル中で定義さ れており、また予想リテンションタイムが指定されていなければならないので

注意してください。リファレンスピークについては、キャリブレーションレベ ルが割り当てられている必要はありません。

12. 他のパラメータはすべて不要です。[ピーク/グループテーブル]ボックスを閉 じるには、右上の[x]ボタンをクリックします。メソッドを保存することを忘 れないでください。

グループキャリブレーション (キャリブレーションされている範囲)

グループ中に指定された複数のピークを1つのピークとみなしてキャリブレーション と解析が行われます。1回またはそれ以上のキャリブレーション測定をもとに、そのグ ループに共通のレスポンスファクターが計算されます。このとき、濃度レベルは、その グループに対して定義されます。さらに、キャリブレーションされた(同定された)ピー クをグループに含めることもできます。

以下の例では、ピークのキャリブレートを個別に行っていません。代わりにクロマトグ ラムの指定した領域でピークを一つに結合してグループとしてキャリブレートし、各グ ループに一意のレスポンスファクターを作成しています。グループの設定の手順は以下 の通りです。



グラフィカルに保存されたクロマトグラムを使用してピークのグループを定義す る方法:

- 1. ファイル > 開く > データを選択します。グループ内に含めたい範囲を含む データファイルを開きます。
- 2. 解析ボタンをクリックします。そのグループに含めたいすべてのピークが検出 されていることを確認します。
- グループの定義ボタンをクリックするか、右クリックしてから、[グラフィカ ルプログラミング]メニューから[グループ設定]コマンドを選択します。この 機能では、1つまたはそれ以上のグループウィンドウをマウスを使って定義し ます。グループウィンドウ内のすべての検出されたピークは、いま定義されて いるグループの一部となります。これにより、クロマトグラム中で連続しない ピークを含むグループを作成することができます。
- グループに含めたい最初のピークの左側で一度クリックします。これにより、 グループウィンドウの開始点が定義されます。

- グループウィンドウに含めたい最後のピークの右側でもう一度クリックします。
 これにより、グループウィンドウの終了点が定義されます。
- 6. 同じグループにピークを追加したい場合は、上記の操作を必要なだけ繰り返し ます。グループへのピーク追加を終えたら[ESC]キーを押します。
- ダイアログが表示されるので、ここでそのグループに名前と番号を付けます。 また必要であれば、そのグループに対するリファレンスピークと内部標準ピー クを指定します。以下のフィールドを入力してください。

```
グループ名 このグループに付けたい名前を入力します。
```

定量方法

ISTD ID #

グループタイプ ブループタイプ リブレーションを選択します。

> レスポンスファクターの計算に面積と高さのどち らを使用するかを選択します。注:内部標準法を 使用してピークとグループの両方を定量する場合 は、ピークとグループの両方が同じ定量方法(面 積または高さ)を使用する必要があります。

> そのグループのキャリブレーションに内部標準法 を使用する場合は、試料に既知量の内部標準物質 を添加する必要があります。内部標準物質は、使 用しているピークテーブルに入力され、キャリブ レーション量が割り当てられていなければなりま せん。ピークテーブルにおける内部標準物質のピ

キャリブレーションについて

ーク ID 番号をこのフィールドに入力します。

リファレンスピークを使用する場合は、リファレンスピークを使用する場合は、リファレンスピークとして使用されるピークのピーク ID 番号をピークテーブルから入力します。リファレンスピークのリテンションタイムは、グループウィンドウの開始および終了時間を調整するために 使用されます。リファレンスピークは、ピークテーブル中で定義されており、また予想リテンションタイムが指定されていなければならないので注意してください。リファレンスピークについては、キャリブレーションレベルが割り当てられている必要はありません。

グループ濃度結果を報告するのに使用される単位 を入力します。

個々にキャリブレーションされたピーク(同定ピ ーク)をこのグループに含めたい場合は、このボ ックスをクリックします。同定ピークの面積が、 そのグループのレスポンスファクターの計算に使 用されます。

グループの未同定ピークの濃度 を計算する ・ ・ ・ ・ ・ グループの未同定ピークの濃度を計算ボックスを 選択すると、グループ中の同定されていない(キ ・ ・ ャリブレーションされていない)ピークの濃度

単位

377

が、そのグループのレスポンスファクターを使っ て計算され、「ピークレポート」のセッションに掲 載されます。ピークレポートには未同定ピークの 濃度は含まれますが、グループの濃度は含まれま せん。グループ濃度は、それとは別の「グループ レポート」のセクションに報告されます。

注:このボックスにチェックすると、グループの トータル面積および高さはピークテーブルの一部 とみなされることはありません。したがって、ピ ークレポートの面積%と高さ%の列は、合計す ると100%となります。分析レポートにグルー プを報告する場合は、グループだけを含むような 別のレポートセクションを作成します。ここに は、このオプションを使用しても、グループのト ータル濃度だけが表示されます。このボックスを 選択しない場合は、そのグループはピークテーブ ルの一部とみなされ、面積%、高さ%、濃度は 合計すると100%以上となることがあります。

- 8. ダイアログボックスへの入力が完了したら**OK**ボタンをクリックします。グ ループテーブルに入力した情報を含む行が追加されます。
- グループを指定したら、グループテーブルにキャリブレーションレベルを入力 しなければなりません。それから、グループのレスポンスファクターを求める ために、キャリブレーション試料を測定します。グループのレスポンスファク

ターの設定手順については[グループテーブル]と[グループ範囲の定義]の項を 参照してください。

10. ピーク情報を表示するように設定してある場合、グループの設定とキャリブレ ーションが終わった後、クロマトグラム上にグループ指定したピーク情報が表 示されます。

様々なグループキャリブレーションオプションを用いたレポートの例については、<u>グル</u> ープキャリブレーションの実施例を参照してください。

グループ範囲設定

グループに対して現在選択されているクロマトグラムの時間範囲を表示または変 更する手順は以下の通りです。

- 1. <u>グループテーブル</u>を開くために ピーク/グループテーブル ボタン 図をクリ ックし、グループをクリックします。
- グループ定義フィールドをクリックします。そのグループに対して現在定義 されている範囲を示した グループ範囲設定 ダイアログが表示されます。必要 であれば、その範囲を手動で変更することができます。

注:選択されたグループは同定ピークグループで、異なるダイアログボックス が表示されます。同定ピークグループの設定を参照してください。

 同定ピークを含める オプションをクリックすると、その範囲に存在する同定 された(キャリブレーションされた)ピークをグループに含めることができます。 これを選択した場合、その範囲に存在する同定ピークの面積が、そのグループ のレスポンスファクターの計算に使われます。これを選択しない場合、その範 囲内に存在する同定ピークはそのグループの一部とはみなされず、そのグルー プのレスポンスファクターの計算に面積は使われません。

4. グループの未同定ピークの濃度を計算ボックスを選択すると、グループ中の同定されていない(キャリブレーションされていない)ピークの濃度が、そのグループのレスポンスファクターを使って計算され、「ピークレポート」のセッションに掲載されます。ピークレポートには未同定ピークの濃度は含まれますが、グループの濃度は含まれません。グループ濃度は、それとは別の「グループレポート」のセクションに報告されます。

注:このボックスにチェックすると、グループのトータル面積および高さはピ ークテーブルの一部とみなされることはありません。したがって、ピークレポ ートの面積%と高さ%の列は、合計すると100%となります。分析レポート にグループを報告する場合は、グループだけを含むような別のレポートセクシ ョンを作成します。ここには、このオプションを使用しても、グループのトー タル濃度だけが表示されます。このボックスを選択しない場合は、そのグルー プはピークテーブルの一部とみなされ、面積%、高さ%、濃度は合計すると 100%以上となることがあります。

さまざまなグループキャリブレーションのオプションを使用したレポートの例について はグループキャリブレーションの例の項を参照してください。

キャリブレーションされたピークの分類(同定ピーク)

この方法は、個別にキャリブレーションされたピークがクロマトグラム中にあることを 前提としています。グループテーブルの中で、各グループに含めたい同定ピークを指定 し、各グループに名前を付けることにより、グループを定義します。 注:ピークグループをグラフィカルに定義するには、1) 現在のクロマトグラムが使用 したいクロマトグラムであることを確認し、2) 自分のメソッド内において、キャリブ レーションされたピークテーブルを作成されていることを確認し、3) そのクロマトグ ラムを解析してあることを確認します。

- グループ内に含めたいキャリブレーション範囲を含むデータファイルを開きます。解析ボタンをクリックしてそのクロマトグラムのインテグレーションを行い、ピークが検出されたことを確認します。
- 保存されたクロマトグラムを使用してグラフィカルに定義することにより、そのグループに属するピークを定義します。そのためには、ツールバーのグループ指定ボタンをクリックするか、右クリックしてから、[グラフィカルプログラミング]メニューから[グループ設定]コマンドを選択します。グループに含めたい最初のピークの左側でマウスをクリックした後、グループに含める最後のピークの右側で再度マウスをクリックします(連続するピークの場合)。ピークの領域を定義するクリック操作により、グループへのピークの追加作業を継続できます。ピークの追加作業を完了したら、キーボードの Esc キーを押します。次のようなダイアログが表示されます。
- 3. グループ名 フィールドに、そのグループに付けたい名前を入力します。
- グループタイプ]に同定ピークを選択します。 設定に問題がなく、ダイアログ を閉じたい場合は、OK ボタンをクリックします。
- ツールバーのピーク/グループテーブル ボタンをクリックします。グループテ ーブルを見るにはグループ タブをクリックします。
- グループタイプフィールドには、同定ピークと表示されているはずです。グル ープ定義の矢印をクリックして、このグループに対して選択された同定ピー

クを確認します。このグループに対して同定ピークを定義する詳細については 「ピークグループの定義」を参照してください。

同定ピークグループの設定

ピークグループを確認あるいは編集する手順は以下の通りです。

- ツールバーのピーク/グループテーブル ボタンをクリックし、グループ タブ を選択します。
- 確認あるいは編集したいグループの グループ定義フィールドをクリックします。このグループが 同定ピーク グループである場合、同定ピークグループの 設定 ダイアログボックスが表示されます。

注:選択されたグループが同定ピークグループでない場合、異なるダイアログ ボックスが表示されます。グループ範囲設定を参照してください。

- 3. 右側にある選択したピークのリストを見ます。グループに含めたくないピーク があれば、それをマウスでクリックしてから**削除**ボタンをクリックします。
- ピークをグループに追加するには、同定ピークリストで選んでから追加ボタン をクリックします。すべて追加ボタンやすべて削除ボタンを使用すれば、す べてのピークを簡単に追加あるいは削除することができます。
- 編集が終了したら OK ボタンをクリックします。選択したピークリスト内の ピークがこのグループに対して定義されたピークとなり、グループテーブルが もう一度表示されます。
- キャリブレーションされたピークグループを使用する場合は、テーブルにレベル 情報を入力する必要はありません。それは、グループ内の個々のピークに

対してキャリブレーションされた量を使用して計算されるからです。グループ テーブルを閉じるには、右上の**[X]**ボタンをクリックします。

ー度ピークグループを定義すると、レポートのプロパティで**グループ**を選択すること により、カスタムレポートの一部として含まれます。

グループ範囲の調整

グラフィカルにグループ範囲を変更するには、グループ範囲の注釈を表示するオプションが必要です。

- グループ範囲の注釈を有効にするには、クロマトグラムを右クリックして 注
 釈を選択します。ピーク情報のプロパティダイアログボックスで、グループ範囲を選択します。
- クロマトグラム上からグループ範囲を調整するには、 画面下部のグループ範囲の調整ボタン かをクリックし、調整したいグループ範囲をクリックしてく ださい。
- 調整したいグループ範囲を選択します。カーソルは2つの終端を持つ矢印に 変わり、2つのドラッグボックスが表示されます。表示されているグループ範 囲バーの一方の端、またはグループ範囲バー自身をドラッグしてグループ範囲 を調整することができます。グループ範囲バー自身をドラッグして移動させる と、現在のグループ範囲の幅のまま、グループ範囲の[開始点]と[終了点]が変 更されます。グループ範囲バーの一方の端をドラッグして移動させると、移動 した端の指定点が変更され、もう片方の端の指定点は保持されます。

注:結果からのグループとメソッドはグループ#に基づいて照合されています。 したがって、 グループ範囲の図形処理プログラミングを行う前に1番目を分 析してください(メソッドを変更した場合)。

- 4. RT 許容幅の調整が終了したら、キーボードの ESC ボタンをクリックします。
- 5. グループ範囲の調整 ダイアログボックスの 更新を選択します。グループ範囲 はグループテーブルで更新されます。 解析実行 を選択してグループ範囲を用 いてクロマトグラムを解析します。

グループ物質量のレポート

新規標準レポートのグループ量を報告する方法:

- 1. ナビゲーションペインで レポート > 標準レポートを選択します。
- 2. レポートエディタを右クリックして レポートの挿入 > レポート実行を選択し ます。
- 3. レポート実行 ダイアログボックスで グループを選択します。
- マニュアル RF グループの一部であるピークをレポート化するには、未同定ピ ークを選択します。
- **5. OK** をクリックします。

既存のレポート実行テーブルにグループ量を追加する方法:

- 1. 既存のレポート実行テーブルを右クリックし、レポートプロパティを選択しま す。
- 2. レポート実行 ダイアログボックスで グループを選択します。
- マニュアル RF グループの一部であるピークをレポート化するには、未同定ピ ークを選択します。
- 4. **OK** をクリックします。

グループキャリブレーションの例

グループキャリブレーションのためのピークオプションを使った場合のレポートの例を、 簡単なクロマトグラムを用いて以下に示します。この例では、ピーク1~4までの同 定された(キャリブレーションされた)4つのピークと、グループ1という名前の[グル ープキャリブレーション]に指定された1つのグループが存在します。なお、グループ 1に指定された時間範囲内には、ピーク2が存在します。この状況において、様々なオ プションを選択することにより、グループの一部として同定ピークがどのように処理さ れるかを示します。



グループ範囲設定 ダイアログで選択されたオプションにより、様々なレポートが作成 されます。このダイアログは、グラフィカルプログラミングによってグループを指定し たとき、あるいはグループテーブルで[グループ設定]フィールドをクリックした時に表 示されます。

例1

この例では、ピーク 2 の濃度はそれ自身のレスポンスファクターを使用して計算され、 その面積がグループのレスポンスファクターを計算するのに使用されます。(同定ピー クを含む オプションを オンにします。)グループ範囲内の未同定ピークの濃度は、グ ループのレスポンスファクターを使用して計算されます。グループの濃度は、グループ に指定されたピークの濃度の合計することによって計算されます。グループの合計は、 個々のピークレポートに含まれませんが、「グループレポート」セクションには表示され ます。グループ合計はピークテーブルに別々の線として含まれていないので、面積%と ノーム濃度は最大 100%を付加します。(同定ピークを含む オプションを オンにして 濃度を計算します。)

Name	Retention	Area	Area Percent	ESTD Conc	NORMConc	Response
	Time					Factor
Peak1	5.719	462656	25.363	40.000	30.891	10405.54
Peak 2 (Group1)	6.558	394564	21.630	8.000	6.178	38653.03
Group 1	6.932	1750	0.096	2.479	1.914	705.93
Group 1	7.435	6360	0.349	9.009	6.958	705.93
Peak3	8.264	375582	20.589	30.000	23.168	10020.50
Peak4	8.530	583249	31.974	40.000	30.891	13135.42
Totals						
		1824161	100.000	129.488	100.000	
Group 1		402674	22.074	19.488	15.050	705.93
Totals		402674	22.074	19.488	15.050	

例 2

この例では、ピーク 2 の濃度はそれ自身のレスポンスファクターを使用して計算され、 その面積がグループのレスポンスファクターを計算するのに使用されます。(同定ピー クを含む オプションを オンにします。)グループ範囲内の未同定ピークの濃度は、 個々に計算されて報告されることはありません。グループの濃度は、グループに指定さ れたすべてのピークの面積合計と、グループのレスポンスファクターを使用して計算さ れます。グループの合計は、個々のピークレポートに含まれます。グループ合計はピー クテーブルに別々の線として含まれているので、面積%とノーム濃度は最大 100 % を 付加しません。(同定ピークを含む オプションを オフにして濃度を計算します。)

Name	Retention	Area	Area Percent	ESTD Conc	NORM Conc	Response
	Time					Factor
Peak1	5.719	462656	25.363	40.000	5.810	10405.54
Peak 2 (Group1)	6.558	394564	21.630	8.000	1.162	38653.03
Group 1	6.932	1750	0.096	0.000	0.000	705.93
Group 1	7.435	6360	0.349	0.000	0.000	705.93
Peak3	8.264	375582	20.589	30.000	4.358	10020.50
Peak4	8.530	583249	31.974	40.000	5.810	13135.42
Group 1		402674	22.074	570.414	82.859	705.93
_						
Totals						
		2226835	122.074	688.414	100.000	

例 3

この例では、Peak 2 の濃度はそれ自身のレスポンスファクターを使用して計算されま す。その面積はグループレスポンスファクターの計算に使用されません。(同定ピーク を含む オプションを オフにします。)グループ範囲内の未同定ピークの濃度は、グル ープのレスポンスファクターを使用して計算されます。グループの濃度は、グループに 指定されたピークの濃度の合計することによって計算されます。グループの合計は、 個々のピークレポートに含まれませんが、「グループレポート」セクションには表示され ます。グループ合計はピークテーブルに別々の線として含まれていないので、面積%と ノーム濃度は最大 100%を付加します。(同定ピークを含む オプションを オンにして 濃度を計算します。)

Name	Retention	Area	Area Percent	ESTD Conc	NORMConc	Response
	Time					Factor
Peak1	5.719	462656	25.363	40.000	2.649	10405.54
Peak 2 (Group1)	6.558	394564	21.630	8.000	0.530	38653.03
Group 1	6.932	1750	0.096	300.343	19.892	5.83
Group 1	7.435	6360	0.349	1091.533	72.293	5.83
Peak3	8.264	375582	20.589	30.000	1.987	10020.50
Peak4	8.530	583249	31.974	40.000	2.649	13135.42
Totals						
10003		1824161	100.000	1509.876	100.000	
Group 1		8110	0.445	1391.876	92.185	5.83
Totals						
		8110	0.445	1391.876	92.185	

例4

この例では、Peak 2 の濃度はそれ自身のレスポンスファクターを使用して計算されま す。その面積はグループレスポンスファクターの計算に使用されません。(同定ピーク を含む オプションを オフにします。)グループ範囲内の未同定ピークの濃度は、個々 に計算されて報告されることはありません。グループの濃度は、グループに指定された すべてのピークの面積合計と、グループのレスポンスファクターを使用して計算されま す。グループの合計は、個々のピークレポートに含まれます。グループ合計はピークテ ーブルに別々の線として含まれているので、面積%とノーム濃度は最大 100 % を付加 しません。(同定ピークを含む オプションを オフにして濃度を計算します。)

Name	Retention	Area	Area Percent	ESTD Conc	NORM Conc	Response
	Time					Factor
Peak1	5.719	462656	25.363	40.000	2.649	10405.54
Peak 2 (Group1)	6.558	394564	21.630	8.000	0.530	38653.03
Group 1	6.932	1750	0.096	0.000	0.000	5.83
Group 1	7.435	6360	0.349	0.000	0.000	5.83
Peak3	8.264	375582	20.589	30.000	1.987	10020.50
Peak4	8.530	583249	31.974	40.000	2.649	13135.42
Group 1		8110	0.445	1391.876	92.185	5.83
Totals						
		1832271	100.445	1509.876	100.000	

レポートについて

標準レポートとメソッドレポートはレポートエディタを使用しており、文書処理プログ ラムと似ています。フォント、色、マージン、差し込みクロマトグラム、グラフィック ス、システム情報、マルチメディアサウンドおよびビデオクリップまでも変更すること ができます

詳細レポートはスプレッドシートアプローチを使用します。式を入力して、データの簡 単な統計や複雑な数学計算をカスタマイズした表示を作成します。

インテリジェントレポート

標準レポートテンプレートは、簡単にレポートを印刷できるよう提供されています。

関連項目

レポートテンプレートについて

標準レポート

詳細レポート

インテリジェントレポート

標準レポートテンプレート

レポートテンプレートについて

レポートテンプレートは、再利用可能な、あるいは要望通り修正できるレポートデザインを作ることによってレポートをカスタマイズできるレポートデザインです。

すべてのタイプのレポートに使用できる標準レポートテンプレートー式が付属されてい ます。これらは、そのまま使用することも、編集することも、新しいテンプレートとし て保存することもできます。

標準レポートテンプレート

データシステムにはすべてのレポートに使用できる標準テンプレートが付属しています が、独自のテンプレートを作成したり、付属のテンプレートを編集したりできます。標 準レポートテンプレート(面積%法、外部標準法、内部標準法および修正%法)に は.SRP という拡張子が付いています。レポートテンプレートに.SRP という拡張子を 付けて保存することにより、新しい標準レポートテンプレートを作成することができま す。標準レポートの例については、標準レポートの項を参照してください。

シーケンスレポート

シーケンスサマリーレポートは、詳細レポートエディタを使用して作成および編集できます。メソッドのカスタムレポートと違い、シーケンスレポートテンプレートは、シーケンスファイルの一部として保存されません。したがって、シーケンスレポートテンプレートを使ってレポートを作成したい場合は、テンプレートファイルとして保存しなければなりません。シーケンスレポートの標準テンプレート(キャリブレーション、サマリー、デュプリケート、QCチェック、添加回収、システムスータビリティ)は.BRPあるいは.TPL 拡張子を持つファイルとして保存されています。シーケンスレポートについてを参照してください。

シーケンスカスタムレポートのテンプレートは、バッチによるシーケンス動作中に作成 されたデータのレポート作成のために使用されます。例えば、ある種の**分析タイプ**は、 データのレポート作成のためにレポートテンプレートを必要とします。例えば、ある測 定を**サマリー開始**測定として指定すると、サマリーレポートのテンプレート名を指定す るよう求められます。テンプレートを必要とするその他の分析タイプには、システムス ータビリティ試験、QC チェックおよびデュプリケートがあります。

標準レポート

レポートエディタで標準レポートおよびメソッドレポートを作成・編集します。

関連項目

標準レポートを開く

<u>メソッドレポートを開く</u>

レポートエディタの使用

標準レポートを開く

標準レポートを開くには、ナビゲーションウィンドウの **レポート > 標準レポート**を選 択します。

メソッドレポートを開く

メソッドレポートを開くには **メソッド > レポート**を選択します。レポート作成用のブ ランクページを備えたレポートエディタが表示され、そこでレポートまたは現在のメソ ッドのカスタムレポートを作成できます。 編集するメソッドレポートを開くには、ツールバーの**カスタムレポートの編集** ボタン **認識** をクリックします。

メソッドレポートはメソッドの一部ですのでテンプレートとして保存することはできません。

レポートエディタの使用

レポートエディタの使用

レポートエディタでレポートの作成と編集が可能です

レポートエディタはワードプロセッサプログラムと同様です。フォント、色、マージン、 差し込みクロマトグラム、グラフィックス、システム情報、マルチメディアサウンドお よびビデオクリップまでも変更することができます

フリーフォームのテキストの他に、広範囲の情報やオブジェクトを選択して、レポート に挿入することができます。これらの項目は4つの「カテゴリ」で提示されます。

- フィールド項目は、現在のデータに関連する情報の各フィールドです。クロマ トグラフィーのフィールド項目には、ファイル名、メソッド名、注入量などが あります。
- 図項目は、一般にグラフィック的に関連づけられた情報のグループを含みます。
 クロマトグラムは図の一例です。これらの項目は、レポート上で他の項目から
 独立に配置、移動および編集することができます。
- レポート項目は、情報のテーブルであり、その各列はユーザーが定義します。
 レポートのテーブルには、例えば、化合物名、リテンションタイムおよび濃度

の他、試料に関連する様々な項目を含めることができます。レポートテーブル は、フォント、センタリング、および小数点位置によりフォーマットすること ができます。行の数が固定ではなく測定ごとに変更できるので、レポートはテ ーブルとして挿入することができます。

 オブジェクト項目は、レポートをより有用にするための、クロマトグラフィー とは関係ないオブジェクトです。これらのオブジェクトには、ビットマップグ ラフィックス、Excel スプレッドシートまたはグラフ、オーディオまたはビデ オクリップが含まれます。

関連項目

<u>ベーシックレポートエディタ機能</u>

印刷プレビューの使用

<u>ショートカット</u>

<u>ヘッダーとフッターの作成</u>

線とボックスの追加

フィールドの追加

クロマトグラムの追加

レポートのインポート

レポートの隣にグラフを配置

オブジェクトの追加

キャリブレーション曲線の追加

レポートの印刷

レポートテーブルの挿入

ベーシックレポートエディタ機能

デフォルトフォントを設定する方法:

フォントは、2つの方法のどちらかで変更できます。テキストで選択した範囲のフォー マットを変更しないで、デフォルトフォントを使用したい場合、右クリックしてから [編集]/テキストコマンドをクリックします。レポートに入力するテキストのデフォル トフォントを設定するには、[編集]/[テキスト]/フォント コマンドを選択します。

フォントの選択はツールバーでも選択可能です。ドロップダウンにて、フォント選択を 選択して現在のフォントを変更するか、デフォルトのフォントを変更せずにハイライト されたテキスト部分をすばやく変更することもできます。色の他、太字、イタリック (斜体)、下線、取り消し用横線ボタンを使って、テキスト特長をすばやく設定できます。

正当化を設定する方法:

マウスの右クリックから**編集 > テキスト > 左揃え、中央揃え**または**右揃え**を選択し ます。これらのコマンドはツールバーでも利用できます。

箇条書きを追加する方法:

- レポートエディタの箇条書き ボタン
 をクリックするか、またはマウスの右クリックから 編集 続いて テキスト次に 箇条書きを選択します。
- このボタンがアクティブになると、テキストの各々に箇条書きマークが付けられます。
- 3. 箇条書きを解除するには**箇条書き** ボタンを再度クリックします。

境界線と影を追加する方法:

- 1. 項目を選択して 境界線と影 ボタン ・ をクリックするか、または右クリッ クして編集 から テキスト 続いて 境界線と影をクリックします。
- 2. 境界線と影が表示されるチェックボックスを選択します。
- 3. 必要であれば網かけの割合(%)を指定します。
- 4. OK ボタンをクリックして罫線と網掛けを適用します。

ズームレベルを設定する方法:

ツールバーのズームボタンをクリックしてから、ズームレベル%を選択して、レポートを見るための拡大率を選択します。サイズを拡大して見るには「ズームイン(ズーム
レベル%を上げる)」するか、サイズを縮小して見るには「ズームアウト(ズームレベル% を下げる)」します。

デフォルトマージンを設定する方法:

レポートのマージンを設定するには、右クリックしてから余白設定 コマンドをクリッ クします。単位(インチまたは cm)と、そのページのマージンの位置(右、左、上、下) を設定するダイアログが表示されます。

その他の機能

- ページとの相対的な位置を示すルーラーがあります。黒い矢印をドラッグして、
 必要に応じてマージンやインデントを設定できます。
- フォーマットのために頻繁に使用するコマンドを含むツールバーがあります。
 これらのボタンには、太字、イタリック(斜体)、アンダーライン、取り消し用 横線、色、左揃え、中央揃え、右揃え、ヘッダー/フッターの表示、箇条書き、 罫線/網かけ、および拡大・縮小をボタンで選択できます。これらのボタンを クリックすると、それが表す編集機能が現在選択されているテキストまたは項 目に適用されます。フォーマットボタンをクリックすると、それを再度クリッ クするまではその効果が次の文にも及びます。
- 右クリックにより、クロマトグラム、レポートオブジェクト、クロマトグラフィー、メソッド情報、および電子署名の各フィールドを挿入するためのメニューにアクセスすることができます。
- レポートに挿入する項目は、まずそれをクリックしてアクティブな状態にしなければ、編集や移動が行えません。

レポートテーブルを素早く削除するには、テーブル内で右クリックしてから、
 テーブル削除 コマンドを選択します。

印刷プレビューの使用

ツールバーで**印刷プレビュー** ボタン をクリックするか、右クリックして**印刷プレビュー**コマンドを選択するとカスタムレポートをプレビュー表示することができます。 印刷プレビュー画面では、現在のレポートの1ページまたは2ページを一度に確認す ることができます。

印刷プレビュー画面内では、カーソルが一時的に「虫めがね」の形に変わります。レポー ト上の任意の位置をクリックすると、拡大して詳しく見ることができます。

印刷

レポートを印刷するには、このボタンをクリックします。

次ページ

レポートの次のページを見る時には、このボタンをクリックします。

前ページ

レポートの前のページを見る時には、このボタンをクリックします。

2ページ

レポートの2つのページを一度に見る時には、このボタンをクリックします。

拡大

クロマトグラムの一部を拡大する時には、このボタンをクリックします。これは、 カーソルが虫めがねの形になっているときにレポートをクリックするのと同じ効果 があります。

縮小

拡大レベルを1つ下げる時には、このボタンをクリックします。

閉じる

カスタムレポートエディタに戻る時には、このボタンをクリックします。

ショートカット

レポートエディター内の情報の表示形式をカスタマイズするためのショートカット機能 があります。

元に戻す

今行ったばかりの動作を元に戻したり、取り消したりしたい場合には、**Ctrl+Z キー**を 押します。直前に行った操作が取り消されます。これは、右クリックして **編集/元に戻 す** コマンドを選択するのと同じです。

すべてを選択する

カスタムレポート全体を選択するには Ctrl+A キー を押します。

コピー、切り取り、貼り付け

選択した項目をコピーするには Ctrl+C キーを押します。

その項目を貼り付けるには Ctrl+V キーを押します。

選択した項目を切り取るには Ctrl+X キーを押します。

改ページ

レポートのある部分を常に新しいページの先頭に印刷したい場合は、その項目の前に改 ページを挿入します。カスタムレポートで改ページを挿入するには、新しいページを始 めたい位置にカーソルを置き、Ctrl+Enter キーを押します。これにより、レポート でこの後に続くものが何であっても、すべて次のページに印刷されます。カスタムレポ ートテンプレート上で、改ページは、ページを左端から右端まで引かれた点線で表され ます。改ページを削除するには、カーソルを改ページの行のすぐ下に置き、改ページが 完全に消去されるまで Back space キーを押します。

タブ停止

タブストップは、ページ上の各項目を揃えるために使用します。デフォルト設定では、 タブストップは 1/2 インチ単位に設定されています。ただし、タブストップを移動し て、各項目間の変化(例えば、長さの変わるフィールド項目)を受け入れる余裕を持たせ ることができます。新しいタブストップを設定するには、マウスを使用して、ページの 上部のルーラーバーにタブを挿入します。新しいタブストップを挿入すると、それをク リックし、水平ルーラー上の新しい位置にドラッグすることにより、移動させることが できます。タブストップを削除するには、それをクリックしてから、水平のルーラー上 の左端までドラッグします。

左タブストップ ・ ルーラー上の新しいタブの位置で左クリックします。左タブストップは、タブの付けられたテキストの左端をその位置に揃えます。

右タブストップ ルーラー上の新しいタブの位置で右クリックします。右タブストッ プは、タブの付けられたテキストの右端をその位置に揃えます。 **中央タブストップ[★]Shift** キーを押したままで、ルーラー上の新しいタブの位置で左ク リックします。中央タブストップは、タブの付けられたテキストの中央をその位置に合 わせます。

中央タブストップ[↑]Shift キーを押したままで、ルーラー上の新しいタブの位置で左ク リックします。数値タブストップは、タブの付けられたテキストをその小数点位置に合 わせます。

ヘッダーとフッターの作成

レポートのすべてのページに表示したい情報を入力するには、ヘッダー/フッター表示 ボタン をクリックするか、あるいはレポート内の任意の位置で右クリックしてか ら ヘッダー/フッターを選択します。これにより、レポートのヘッダーおよびフッター エリアを表示および編集できます。ヘッダーまたはフッターエリアを編集するには、表 示されたヘッダーまたはフッターエリアでマウスをクリックさせ、そこに入れたい情 報を入力します。このエリアには、フリーテキストだけでなくクロマトグラフィーフィ ールドおよびオブジェクトの両方を入れることもできます。レポートテーブルや描画オ ブジェクトを入れることはできません。

ヘッダーやフッターのフォーマットが終了したら、ヘッダー/フッター表示ツールバー のボタンをもう一度クリックするか、または右クリックしてから ヘッダー/フッターを 選択すれば、ヘッダーおよびフッターの表示を消すことができます。ただし、ヘッダー /フッター の横のチェックマークが消えたことを確認してください。

線とボックスの追加

重要な部分に線を引いたりボックスで囲んだりすることにより、レポートの各部を強調 させることができます。

線やボックスを追加する方法:

カスタムレポート画面で、線あるいはボックスを描きたい位置で右クリックし、**描画>** 線、長方形あるいはテキストボックスをクリックします。

線

レポートに線を引くには、右クリックしてから、**描画** に続いて **直線**を選択します。す ると、カーソル位置に線が表示されます。線の上で、クリックしてアクティブな状態に します。線の両端にボックスが表示され、カーソルが「+」に変わります。線のハンドル をクリックして、ドラッグすると、その大きさとページ上での向き(角度)を変更できま す。線をマウスで選択し、マウスボタンを押したままレポート上の希望の位置までドラ ッグする「ドラッグ&ドロップ」で変更することもできます。

ボックス

レポートにボックスを書くには、右クリックしてから、**描画/長方形**コマンドを選択し ます。レポート上のカーソル位置に長方形が表示されます。ボックスの寸法を設定する には、それをクリックして、縁を希望の寸法までドラッグします。ボックスを移動する には、ボックスをクリックしてアクティブにしてから、カーソルをボックスのすぐ**外側** に出します。カーソルが「+」マークに変わったら、マウスボタンを押したままドラッグ して、新しい位置にボックスをドロップします。

テキストボックス

レポート中にテキストボックスを作るには、右クリックして、 **描画/ テキストボック** スコマンドを選びます。長方形が表示され、そのカーソル位置にテキストを入力できま す。このツールは、カーソル位置に独立したテキストボックスを作るものです。テキス トボックスを移動するには、それをクリックしてから、カーソルをテキストボックスの すぐ **外側** に出します。カーソルが「+」マークに変わったら、マウスボタンを押したま まドラッグして、新しい位置にテキストボックスをドロップします。

グラフを表の隣りに入れる

テキストボックス機能を使用して、レポートの表の隣りにクロマトグラムまたはその他 のグラフを移動することもできます。そのためには、まずテキストボックスを作成しま す。それからテキストボックスの内側をクリックして、グラフを挿入します。グラフが テキストボックスに挿入されると、テキストボックスの「ドラッグ&ドロップ」機能を使 用して、クロマトグラムまたはグラフをカスタムレポート上のレポートテーブルの隣に 移動できます。

挿入/削除を元に戻す

レポートにある項目(フィールド、レポート、グラフなど)を挿入した後で、キーボード で **Ctrl+Z** キーを押すことにより、その動作を取り消すことができます。

フィールドの追加

情報の選択フィールドを追加する方法:

- 1. レポートエディタで、フィールドを挿入したい位置で右クリックし、フィール ドの挿入コマンドをクリックします。
- 2. 表示されたフィールドから挿入したいものを選択します。

フィールド項目のどれかをクリックすると、それがレポート内の現在のカーソル位置に 貼り付けられます。これらの項目は個別に配置することもできれば、ひとまとめにして レポートのクロマトグラフィー情報に関するカスタムエリアとして作成することもでき ます。これらの項目は、レポートを表示または印刷するたびに、これらの項目はそのと きの最新データ情報を反映して更新されます。また、右クリックから フィールドを更 新 コマンドを選択するか、**F9** キーを押しても、現在のフィールドの更新ができます。 注:レポート中にデータファイルとして表示されるディレクトリパスは、たとえそのデ ータが後に移動されている場合であっても、最初に指定されたディレクトリパスとなり ます。

レポートにフィールドが追加されたら、それを移動したり、フォントや表示形式を変更 することができます。各レポートが印刷されるときに、その時の最新の情報を反映しま すが、フォーマットは変更されません。

クロマトグラムの追加

カスタムレポートに好きなだけ多くのクロマトグラムを含めることができます。各クロ マトグラムをそれぞれ別の領域に表示することも、また複数のクロマトグラム、ポンプ プロファイルまたはグラフを同じ領域に表示することもできます。ディスクに保存され ているクロマトグラムや、データ取込のたびに変化する現在のデータを含めることもで きます。

クロマトグラムまたはトレースを追加する方法:

- レポートエディタでトレースを追加したい位置で右クリックし、図の挿入 続いて クロマトグラムコマンドをクリックします。
- クロマトグラムのプロパティで、データソースを選択し、軸の設定とデザイン を設定します。スプレッドシートでは、現在のクロマトグラムやその他のトレ ースを追加することができます。各行は、このグラフに表示されるトレースを 表します。各行について、データの表示方法を指定する必要があります。
- 3. グラフの挿入後、これらの項目を変更したりトレースを追加したりするには、 そのグラフ上で右クリックして設定を変更します。

クロマトグラムの拡大

レポート上にクロマトグラムを挿入したら、それをクリックしてアクティブにしてから、 クロマトグラムウィンドウ内で行う場合と同じ方法で拡大して、クロマトグラムの表示 を調整することができます。前の拡大率に戻るには、レポート上のクロマトグラムの領 域内でダブルクリックします。

クロマトグラムのスクロール

拡大したクロマトグラムをそのまま左右にスクロールすることができます。**Ctrl**キー +Shift キーを押しながらマウスをクリックするとカーソルが手の形に変わるので、そ のまま左右にドラッグしてスクロールします。

範囲外の内容を表示するために、X 軸またはY 軸をスクロールさせることもできます。 この場合は、Ctrl+Shift キーを押したまま、カーソルをグラフの領域外で目的とする 軸の近くに持っていきます。マウスをクリックするとカーソルが、Y 軸付近では上下方 向の矢印に変わり、X 軸付近では右左方向の矢印に変わります。このモードでマウスを 動かすと、グラフが上下方向または右左方向へスクロールできます。

元の表示に戻すには、クロマトグラムウィンドウ内で右クリックし、**元の倍率に戻す** コマンドを選択します。

注 現在、データ取込中のデータ(現在のデータ)をレポートに挿入すると、現在のデー タが変化するたびに更新されます。そのため、カスタムレポート画面を見ながら、[解 析]ボタンをクリックすることにより、インテグレーションの効果を確認できます。

レポートのインポート

既存のレポートテンプレートはレポートエディタでレポートにインポートすることがで きます。レポートテンプレートをインポートすると、それが現在のレポートに代わりま す。

既存のレポートをインポートする方法:

- 1. レポートエディタで右クリックして レポートのインポート を選択します。現 在のレポートを上書きするか否かの確認メッセージが表示されます。
- はいボタンをクリックすると、挿入するレポートを選択することができるダイ アログボックスが開きます。新しいレポートを選択して 開く、現在のレポー ト情報を選択したレポートに置き換えます。
- **3. いいえ**ボタンをクリックすると、レポートの挿入は実行されず、既存のレポートが残ります。

注:詳細レポートテンプレートをメソッドレポートまたは標準レポートにインポートす ることはできません。

レポートの隣にグラフを配置

レポートに隣接したクロマトグラム(または他のグラフ)を挿入する方法:

- レポートにテキストボックスを描くには右クリックして描画/テキストボック スコマンドを使用します。
- 2. テキストボックス内部で右クリックして、図を挿入/クロマトグラム コマン ドを使用してボックス内にクロマトグラム(またはその他のグラフ)を挿入しま す。
- クロマトグラムまたはグラフを中に含むテキストボックスを移動させるには、 テキストボックスの縁をクリックして、黒い長方形のマークを表示させます。 次にカーソルを縁のすぐ外側に移動して、カーソルを「+」に変化させます。マ ウスの左ボタンを押したまま、テキストボックスをグラフごとに新しい位置 (例えばレポートの横)にドラッグし、マウスボタンを離します。

 クロマトグラム/グラフ(ピーク情報など)を編集するには、そのクロマトグラム/グラフ内でマウスをダブルクリックします。テキストボックスではなく、 クロマトグラムであることを確認してください。クロマトグラムのサイズを変 更するには、テキストボックスを選択(テキストボックスの「ハンドル」を探す) してから、クリックして「ハンドル」をドラッグして希望のサイズにします。

注:2つのレポートを並べて置くことはできません。



オブジェクトの追加

カスタムレポートは OLE(オブジェクトのリンクと埋め込み)をフルサポートしていま す。すなわち、ユーザーは Excel のような Windows アプリケーションとリンクしたオ ブジェクトを追加することができます。レポートにビデオクリップや音声記録も追加で きます。これらの情報は、オブジェクトとしてレポートに追加されます。

様々なオブジェクト(グラフ、テーブル、ビットマップ、ロゴ、ワード文書)をカスタム レポートに追加できます。

カスタムレポートにオブジェクトを追加する方法:

- レポートエディタで、オブジェクトを挿入したい位置で右クリックします。オ ブジェクト挿入をクリックします。
- 新規作成 を選択してオブジェクトの種類から選択した新しいオブジェクトを 作成するか、またはファイルから作成 で既存のファイルからオブジェクトを 選択します。ファイルから作成する場合、リンクボックスをチェックすると、 そのオブジェクトはファイルにリンクして変更されます。
- アイコンで表示ボックスをクリックしてチェックすると、オブジェクトがアイ コン表示されます。また、オブジェクトのアイコンは選択することができます。

コンピューターにインストールしてあるアプリケーションに基づいて、様々なオブジェ クトを挿入できます。多くのタイプでは、オブジェクトを挿入すると、レポートエディ ター内でアプリケーションが実行され、ユーザーによるオブジェクトの修正や編集がで きます。アプリケーションを終了してカスタムレポートに戻るには、レポート上のその オブジェクトエリア外の任意の場所をクリックします。新しいオブジェクトを作成して 挿入することもできれば、既存のオブジェクトファイルを開いて挿入することもできま す。

以下に示す例では、Microsoft Excel のチャートをカスタムレポート中のオブジェクト として挿入しています。Excel のチャートが挿入されると、Microsoft Excel からメニ ューやリボンを使用して、オブジェクトの編集や修正を行うことができます。

Microsoft Excel のチャート等、OLE 機能のオブジェクトがリンクされたオブジェクト として挿入された場合、チャートが変更されると、カスタムレポート内のオブジェクト も自動的に更新されます。これは、レポート用にデータを組み合わせる非常に効率的な 方法です。

キャリブレーション曲線の追加

- 1. レポートエディタを右クリックします。図の挿入/検量線 コマンドを選択しま す。
- 2. 検量線のプロパティ ダイアログボックス が表示されます。
 - キャリブレーションデータソース 検量線を描くためのデータをどこか
 ら採用するか選択します。
 - ソース ドロップダウンリストから 検量線のデータソース/ソース ドロ ップダウンリストを選択します。使用したいピークキャリブレーションテ ーブルとして、ピーク グループまたはテンプレート を選択します。 キャリブレーションレポートテンプレートを編集する場合だけ、テンプレ ート を選択します。メソッドレポートテンプレート内でこのオプション を選択しても、この情報は印刷されません。テンプレートを選択した場合 は、.crp キャリブレーションレポートテンプレートファイル内での定義 に従って、すべてのピークのキャリブレーション情報が自動的に印刷され ます。
 - トレース 検量線のトレースとして、表示する特定のデータを選択します。そのトレースのためのデータチャンネルを選択した場合は、ピークフィールドのリストからピークを選択しなければなりません。このピークは常に表示されます。
 - すべてのポイントを表示 このボックスは、レポートの検量線上に繰返し測定データポイントを表示したい場合に選択します。
- 検量線をユーザーのカスタムレポートに挿入するには、OK ボタンをクリック します。

レポートの印刷

レポートを印刷するには、以下の4つの方法があります。

- レポートエディター内で操作する方法:カスタムレポートエディターからレポートを印刷するには、印刷プレビュー画面で[印刷]ボタンを使用するか、直接右クリックしてから 印刷コマンドを使用してレポートを印刷します。
- 機器ウィンドウから操作する方法:現在のカスタムレポートを印刷するには、 メニューバーから レポート/ 印刷コマンドをクリックし、印刷したいレポー トを選択します。
- データ取込または再解析の一部として実行する方法:カスタムレポートは、各 解析終了時、データ取込終了時、あるいはシーケンス中またはその終了時に印 刷できます。メソッドのカスタムレポートを印刷するかどうかは、シングルラ ン、シーケンスラン、または再解析を開始する時にメソッドレポート印刷オ プションを選択することにより決定します。このオプションが選択されていな い場合には、レポートの印刷は行われません。シーケンスレポートはシーケ ンスレポート印刷オプションが選択されるまで印刷されません。
- シーケンスランから実行する方法:分析タイプで、追加レポートを印刷 オプションを選択します。これにより、印刷のためのレポートテンプレートを選択したり、そのレポートをいつ印刷したいかを指定することができます。

注:オンラインで機器を開くと、ユーザーには関係なく、その機器に対して、構成され ているプリンターに印刷されます。機器をオフライン(解析専用)で開くと、その機器 のユーザーに対して、構成されているプリンタに印刷されます。

レポートテーブルの挿入

レポートテーブルの挿入

レポートテーブルは標準レポートに挿入できます。以下のトピックはレポートテーブル のタイプ、作成および編集について説明します。

関連項目

<u>レポートテーブルの追加</u>

<u>レポートテーブルパラメータの変更</u>

レポートテーブルの外観を編集

設定した時間でレポートデータを表示

レポートテーブルの削除

レポートテーブルの種類

レポートテーブルの追加

標準レポートに追加できるレポートテーブルには様々な種類があります。

レポートテーブルを追加する方法:

- カスタムレポートエディタで、レポートテーブルを追加したい位置で右クリックし、レポートの挿入...コマンドを選択します。利用可能なレポートテーブルのリストが表示されます。
- 2. 挿入したいレポートタイプを以下のオプションから選択します。

ベースラインチェックレポート

このコマンドは、ベースラインチェックの情報が含まれたテーブルを挿入する時 に使用します。

キャリブレーション情報

このコマンドは、キャリブレーションの詳細情報が含まれたテーブルを挿入する 時に使用します。

キャリブレーションテーブル

このコマンドは、ピークキャリブレーションの詳細が含まれたテーブルをレポー トに挿入する時に使用します。

データの監査証跡

このコマンドは、データファイルの履歴をレポートに挿入する時に使用します。

電子署名テーブル

このコマンドは、電子署名テーブルをレポートに挿入する時に使用します。

追加シーケンス列

このコマンドは、シーケンス列の名前とデータを含むテーブルを挿入する時に使 用します。

フラクションレポート

このコマンドは、フラクションレポート情報を含むテーブルを挿入する時に使用 します。

ユーザーレポート

このコマンドは、ユーザー独自のプログラムにより作成されたレポートテーブル を挿入する時に使用します。ダイアログで、ユーザーレポートのファイル名を入 力します。ファイルオープンボタンをクリックしてファイルを選択することもで きます。 汎用レポート作成のために必要なフォーマットの詳細に関しては、汎用レポート テーブルについてを参照してください。

機器アクティビティログ

このコマンドは、機器アクティビティログ(LogViewInstActReport.lrp)を見た り印刷したりするために、テンプレートを作成または更新するのに使用します。

機器コンフィグレーションレポート

このコマンドは、機器コンフィグレーションのレポートを挿入する時に使用しま す。

ライブラリ定義レポート

このコマンドは、ライブラリ定義が含まれているテーブルを挿入する時に使用します。

ライブラリ検索レポート

このコマンドは、ライブラリ検索レポートを挿入する時に使用します。

メソッドの監査証跡

このコマンドは、メソッドの履歴(LogViewMethodAuditReport.lrp)を見たり 印刷したりするために、テンプレートを作成または更新するのに使用します。

メソッドレポート

このコマンドは、メソッドの詳細が含まれているレポートを挿入する時に使用します。

ピーク純度レポート

このコマンドは、ピーク純度レポートを挿入する時に使用します。

分析レポート

このコマンドは、クロマトグラフィーの結果が含まれているテーブルをレポート に挿入する時に使用します。

シーケンスの監査証跡

このコマンドは、シーケンスの履歴を挿入する時に使用します。

スペクトルレポート

このコマンドは、スペクトルレポートを挿入する時に使用します。

レポートテーブルパラメータの変更

レポートを再定義せずにレポートパラメータを変更する方法:

- 1. 該当するレポートパラメータのタイトル上で右クリックし、パラメータ変更コ マンドを選択します。
- 現在のパラメータがハイライト表示されます。リストから新しいパラメータを 選択します。
- 3. 表示したい小数点桁数を入力します。(数値パラメータの場合)
- 4. 列ヘッダーに表示するパラメータ名を入力します。
- 5. OK ボタンをクリックし、新たに選択したパラメータへ置き換えます。

注:このコマンドは既存のパラメータを置き換える、あるいは新しいパラメータ名や小 数点桁数に更新するために使われます。

現在のパラメータが選択されています。これを変更するには、リスト内の別のパラメー タをクリックし、**OK** ボタンをクリックします。

レポートテーブルの外観を編集

右クリックすると、レポートテーブルを修正するためのコマンドにアクセスできます。

列幅の変更

列の幅を変更するには、カーソルをその列の境界線まで移動して、二重の縦線が表示さ れるようにします。マウスボタンを押したまま、その列の境界線をドラッグして、列を 希望の幅まで広げます。

フォントの変更

テーブル内のテキストのフォントを変更するには、マウスでそのテキストを選択してハ イライトさせるか、そのフィールド内を一度クリックします。次にフォーマットボタン のいずれかをクリックして希望のフォーマットに変更します。列の先頭とデータフィー ルドの両方に対して、フォントを変更することができます。

列のタイトルを変更する

そのレポート用に選択された各パラメータのデフォルトタイトルが入力されています。 この列のタイトルは**列ヘッダー**フィールドを編集することで変更できます。そのため には、**右クリックしてレポートプロパティ**コマンドを選択します。なお、データフィー ルドに対しては、フォーマットの変更以外はできません。

レポートテーブルの削除

レポートテーブルを素早く削除するには、テーブル内で右クリックしてから、**テーブル 削除** コマンドを選択します。

設定した時間でレポートデータを表示

デフォルトでは、ユーザーが標準レポート内にレポートテーブルを作成するとき、ソフ トウェアは実際のデータを表示しない状態でテンプレートフィールドを表示します。 テンプレートの編集中に実際のデータを見るには、レポートエディターでテーブルを右 クリックして**設計時にデータ表示**コマンドをクリックします。これが可能であれば、レ ポートテーブルのデータは編集中に常にテンプレートに表示されます。

レポートテーブルの削除

リンクを削除する方法:

- 1. カスタムレポート画面で、削除したいテーブル上で右クリックしてテーブ ル削除 コマンドをクリックします。
- 2. はい ボタンをクリックしてテーブルを削除します。

レポートテーブルの種類

レポートテーブルの種類

次のレポートを標準レポートに挿入するには、レポートエディタで右クリックしてレポ ートの挿入を選択します。

関連項目

キャリブレーション情報の挿入

キャリブレーションレポートの挿入

<u>電子署名の挿入</u>

<u>フィルタメソッドレポートの挿入</u>

<u>汎用レポートの挿入</u>

機器アクティビティログの挿入

機器構成レポートの挿入

メソッドの履歴レポートの挿入

メソッドレポートの挿入

実行レポートの挿入

<u>分析レポート情報の修正</u>

シーケンスキャリブレーションレポートの挿入

シーケンスチェックレポートの挿入

シーケンスデュプリケートレポートの挿入

シーケンス添加回収レポートの追加

シーケンステーブル (カスタマイズ)の挿入

シーケンステーブル(すべて)

システムスータビリティレポートの挿入

フラクションレポートの挿入

キャリブレーション情報の挿入

キャリブレーション情報を追加する方法:

- カスタムレポートエディタで、キャリブレーションレポートを追加したい位置 で右クリックし、レポートを挿入/キャリブレーション情報コマンドをクリッ クします。
- 2. キャリブレーション情報の設定 ダイアログボックスの次のフィールドを入力 します。

 ソース - ドロップダウンリストから キャリブレーション データソース/ ソース ドロップダウンリストを選択します。使用したいピークキャリブレーションテーブルとして、ピーク グループまたは テンプレート を選択します。

キャリブレーションレポートテンプレートを作成または編集する場合のみ、 テンプレートを選択します。メソッドレポートテンプレート内でこのオプ ションを選択しても、この情報は印刷されません。テンプレートを選択し た場合は、Calibration.brp キャリブレーションレポートテンプレート ファイル内での定義に従ってすべてのピークのキャリブレーション情報が 自動的に印刷されます。

- 検出器
- ピーク

キャリブレーションレポートの挿入

レポートにキャリブレーションテーブルを追加する方法:

- カスタムレポートエディタで、キャリブレーションレポートを追加したい位置 で右クリックし、レポートを挿入/キャリブレーションテーブルコマンドをク リックします。
- カスタムレポートのキャリブレーションテーブルに含めたい情報を指定して OK ボタンをクリックします。

- ソース ドロップダウンリストから 検量線のデータソース/ソース ドロ ップダウンリストを選択します。使用したいピークキャリブレーションテ ーブルとして、ピーク グループまたは テンプレート を選択します。キャ リブレーションレポートテンプレートを作成または編集するのでないかぎ り、テンプレートは選択しないでください。テンプレートを選択した場合 は、.Crp キャリブレーションレポートテンプレートファイル内での定義 に従って、すべてのピークのキャリブレーション情報が自動的に印刷され ます。
- 検出器
- ピーク
- 複製 RF の表示 キャリブレーションテーブルのすべての繰り返しについてのレスポンスファクターを表示したい場合は、これをクリックします。
- 複製 ID 情報の表示 各繰り返し測定についてユーザー、サンプル ID お よびキャリブレーション日時を表示したい場合はこれを選択します。
- ブレーク前に印刷するレベル数- 各行に印刷するキャリブレーションレベルの数値を入力します。
- カスタムレポートテンプレート上にキャリブレーションテーブルを入力したい 場合は、OK ボタンをクリックします。キャリブレーションテーブルを素早く 削除するには、テーブル内で右クリックしてから、テーブル削除 コマンドを 選択します。

電子署名の挿入

電子署名テーブルを追加するには、カスタムレポートウィンドウのレポートで右クリッ クしてレポートの挿入/電子署名テーブルを選択します。このコマンドにより、この データファイルの電子署名が含まれたテーブルがレポートに挿入されます。

電子署名テーブルを削除するには、右クリックして テーブル削除 /OK ボタンをクリ ックします。

フィルタメソッドレポートの挿入

フィルタメソッドレポートは圧縮したメソッドレポートです。 カスタムレポートにフ ィルタメソッドレポートを追加することができます。フィルタメソッドレポートのレイ アウトは、レイアウトの一覧を表示するために事前に作られていなければなりません。

フィルタメソッドレポートの挿入

- レポートエディタで、右クリックしてレポートの挿入 / フィルタメソッドレポートコマンドをクリックします。
- 追加されるフィルタメソッドレポートレイアウトを選択します。ここで使用するフィルタメソッドレポートレイアウトは事前に作成しておかなければなりません。レイアウトを選択すると、それがレポートに追加されます。

汎用レポートの挿入

このコマンドは、ユーザー独自のプログラムにより作成されたレポートテーブルを挿入 する時に使用します。

汎用レポートを挿入する方法:

- 1. ナビゲーションペインで レポート > 標準レポートを選択します。
- 2. レポートエディタを右クリックして レポートの挿入 > 汎用レポートを選択し ます。
- ダイアログで、ユーザーレポートのファイル名を入力します。ファイルオープ ンボタンをクリックしてファイルを選択することもできます。

ユーザーレポート作成のために必要なフォーマットの詳細に関しては、汎用レポートテ ーブルのトピックを参照してください。

機器アクティビティログの挿入

機器アクティビティログのコピーを挿入する方法:

- カスタムレポートエディタで、機器構成レポートを追加したい位置で右クリックし、レポートを挿入/機器アクティビティログを選択します。
- 機器アクティビティログのテーブルがレポートに挿入されます。このテーブル はテンプレートの各欄の位置を示す表組みであり、カスタムレポートが印刷さ れるまでは、実際の機器アクティビティログレポートを表示しません。

User	Logged	Activity
Demo	01\02\99.12:34:56	What was changed and how

機器コンフィグレーションレポートの挿入

現在の機器コンフィグレーションのリストを追加する方法:

カスタムレポートエディタで、機器コンフィグレーションレポートを追加したい位置で右クリックし、レポートを挿入/機器コンフィグレーションレポートを選択します。

機器コンフィグレーションレポートのテーブルがレポートに挿入されます。この機器コンフィグレーション情報は、右クリックして印刷プレビューを使用するか、あるいはレポートの印刷時に確認できます。

Instrument Configuration

Instrument Name: Instrument 1 Instrument Type: Generic System

External Events: Name Source Configuration Trigger SS420 Board: 0, In0, State : Closed

Dete ctor Name : Dete ctor A - Chamel A Dete ctor Model: Analog Acquisition Source : SS420 Board: 1, Analog hput: Chan A

Y-Axis Units: Volts Y-Axis Multiplier: 0.00

メソッドの監査証跡レポートの挿入

現在のメソッドの監査証跡のリストを挿入する方法:

- カスタムレポートエディタで、レポートを挿入したい位置で右クリックし、レ ポートを挿入/メソッドの監査証跡コマンドをクリックします。
- 履歴レポートのテーブルテンプレートが、カスタムレポートテンプレートに挿 入されます。このテーブルは、テンプレートの各欄の位置を示す表組みで、カ スタムレポートが印刷されるまでは、実際の監査証跡レポートを表示しません。

User	Logged	Source	Activity	Reason
Demo	01\02\99	Source of	What was changed	Why it was changed
	12:34:56	change	and how	

メソッドレポートの挿入

現在のメソッドに関する詳細情報をレポートに追加するには、右クリックしてレポート を挿入 /メソッドレポートコマンドを選択します。ダイアログボックスが表示されます ので、ここでレポートに含めたい項目をメソッドから選択できます。

ドロップダウンメニューから、どのチャンネルのメソッド情報を表示したいかを選択し ます。次に、希望の項目のチェックボックスをクリックすることにより、表示したいメ ソッド項目を選択します。完了したら、[OK]ボタンをクリックします。

メソッドレポートをカスタムレポートテンプレートから削除するには、テーブル内で右 マクリックしてから**テーブル削除**コマンドを選択します。

実行レポートの挿入

レポートに分析レポートを追加する手順は以下の通りです。

- レポート画面で、分析レポートを追加したい位置で右クリックし、レポートの 挿入 /分析レポートコマンドをクリックします。
- 2. ダイアログボックスが表示されるので、分析レポートに出力する項目を設定し ます。
- 3. **OK** ボタンをクリックして分析レポートを追加します。
- **データソース**どのデータ(現在のデータまたは格納されているデータファイル)と
 トレース(チャンネル)からの情報を表示したいかを選択します。
- **レポート** レポートさせたいピークをチェックボックスで選択します。

同定ピーク

検出されたかどうかに関係なく、すべてのキャリブレーションされ たピークのレポートが欲しい場合は**すべて**を選択します。その試料 で検出されたキャリブレーションピークのみのレポートを作成した い場合は**検出時限定**を選択します。

未同定ピーク

レポート中にキャリブレーションされていないピークをレポートに 含めたい場合に選択します。別々のテーブルは生成されません。未 定義のピークがグループの一部である時、グループ名はレポートの ピーク名フィールドに使用されます。

グループ

レポートに定義されたグループを含めたい場合に選択します。

合計

レポートに数値列に対する総計を含めたい場合に選択します。

レポートで作成することができるパラメータのリストがこのボック スに表示されます。これらのパラメータのうち1つをレポートに加 えるには、それをダブルクリックするか、クリックして選択した後

ラメータ

利用可能なパ

で緑色の矢印をクリックし、これを**次のパラメータをレポート**ボッ クスに移動させます。一度に複数のパラメータを選択するには、 Shift キー(連続するパラメータを選択する)または Ctrl キー(連続 していないパラメータを選択する)を押しながら選択します。

各数値パラメータについて、表示したい小数点以下の桁数を入力し **小数点桁数** ます。選択された項目 ボックス内のパラメータをクリックしてか ら、そのパラメータを表示するための小数点以下の桁数を入力しま す。すべての数値パラメータに対して、デフォルトの桁数が表示さ れます。

列ヘッダー レポートを表示させる各パラメータのタイトルを入力または編集す るのに使用します。

カスタムレポートの現在のカーソル位置に分析レポートテーブルを挿入するには**OK** ボタンをクリックします。各列のタイトルおよびデータフィールドを持ったレポートテ ーブルが、カスタムレポートのページ上に表示されます。

分析レポート情報の修正

レポートに分析レポートを追加すると、その情報を編集できます。

実行レポート情報を編集する方法:

1. レポートエディタで、分析レポート上で右クリックし、レポートプロパティコ マンドをクリックします。

- 2. 分析レポートダイアログで、プロパティを再定義したり追加したりします。
- 3. 編集が終了したら**OK**ボタンをクリックします。

シーケンスキャリブレーションレポートの挿入

カスタムレポートにシーケンスキャリブレーションレポートを追加するには

- カスタムレポートエディタで、機器構成レポートを追加したい位置で右クリックし、レポートを挿入/シーケンスキャリブレーションを選択します。
- シーケンスキャリブレーションレポートとして、テーブルがシーケンスレポートに挿入されます。ただし、このテーブルに表示されるのは、場所を確保するためのサンプルデータであり、システムで収集されたデータは含まれていません。

Channel A						
Compound	Old RT (Min)	NewRT	RF Average	RF %RSD	RF %RSD	Status
_		(Min)	_		Limit	
Peak 1	44.350	43.758	231.1234567	21.12345678	25.00	Passed
			89	9		
Peak 2	44.350	43.758	231.1234567	21.12345678	20.00	FAILED
			89	9		

注:シーケンスレポートの印刷時にキャリブレーションレポート情報を含めるには、メ ソッドとシーケンスでシーケンスキャリブレーションレポートを作成できるよう設定さ れていることを確認してください。まず、メソッドのピークテーブル にキャリブレー ションの各ピークに[RF% RSD 上限]が設定されていることを確認してください。また、 シーケンステーブルにおいて、そのシーケンス内の該当する測定で、キャリブレーショ ン開始、キャリブレーション終了、および検量線を印刷の正しい分析タイプが設定され ていることを確認してください。 シーケンスチェック標準レポートの挿入

カスタムレポートにシーケンス QC チェックレポートを追加する手順は以下の通 りです。

- シーケンスカスタムレポートエディタで、右クリックしてレポートの挿入 / シーケンスチェック標準コマンドをクリックします。
- ファイル名にパス名を含めるかどうかを指定するように求められます。ファイ ル名に全パスを含めたい場合、パスを含めてファイル名を表示ボックスをチェ ックします。
- シーケンスQCチェックレポート用のテーブルが、シーケンスレポートに挿入 されます。ただし、このテーブルに表示されるのは、場所を確保するためのサ ンプルデータであり、システムで収集されたデータは含まれていません。

File	Sample ID	Acquired			
D:\CHROM\Dat	Multi 1	1/30/97 9:28:38			
a\Multical.001		Monday			
Channel A					
Compound	Expected Conc.	Actual Conc.	%RD Actual	%RD Limit	Status
Peak 1	24.000	25.232	4.883	5.000	Passed
Peak 2	24.000	25.232	4.883	4.000	FAILED

シーケンスレポートを印刷する時にQCチェックレポート情報を含めるには、メソッド およびシーケンスにおいて、QCチェックレポートを作成するよう設定されていること を確認する必要があります。

メソッドのピークテーブルには、QC チェック試料の化合物の濃度が入力されます。実際の含有量と計算された含有量の間の%相対差の限界値が[QC チェック Std1...5%RD] として入力されます。 シーケンステーブルで、QC チェック用試料として使用したい試料に対する分析タイプ に[QC チェック]を選択します。

QC チェック用試料が分析されると、ピークテーブルからの予想濃度値、濃度実測値、 その試料の%相対差の実測値、ピークテーブルからの%相対差の限界値、およびそれ らの結果の合格/不合格の状態を表示する QC チェックレポートが印刷されます。

以下は、QC チェックレポートの一例です。

QC チェックレポート

File	Sample ID	Acquired
C:\datasystem\data\multileve1002.dat	Multilevel Calibration Level 2	2/18/97 12:58:38 PM

Channel A

Compound	Expected Conc.	Actual Conc.	%RD Actual	%RD Limit	Status
Peakl	25.000	20.000	20.000	25.000	Passed
Peak2	15.000	6.000	60.000	25.000	FAILED
Peak3	25.000	20.000	20.000	25.000	Passed
Peak4	25.000	20.000	20.000	25.000	Passed

このQC チェックレポートでは、以下の式が使われます。

%RD = <u>Abs | (</u>予想濃度) - (実際の濃度) | × 100

予想濃度

シーケンスデュプリケートレポートの挿入

 シーケンスカスタムレポートエディタで、右クリックしてレポートの挿入 / シーケンス重複コマンドをクリックします。

- ファイル名にパス名を含めるかどうかを指定するように求められます。ファイル名に全パスを含めたい場合、パスを含めてファイル名を表示ボックスをチェックします。
- シーケンスデュプリケートレポート用のテーブルが、シーケンスレポートに挿入されます。ただし、このテーブルに表示されるのは、場所を確保するためのサンプルデータであり、システムで収集されたデータは含まれていません。

Туре	File	Sample ID	Acquired			
Dup 1	D:\CHROM\	Multi 1	1/30/97			
	Data\Multical		9:28:38			
	.001		Monday			
Dup 2	D:\CHROM\	Multi 1	1/30/97			
-	Data\Multical		9:28:38			
	.001		Monday			
Channel A						
Compound	Dup 1 Conc.	Dup 2 Conc.	Mean Conc.	%RD Actual	Dup %RD	Status
					Limit	
Peak 1	15.000	20.000	17.500	28.571	30.000	Passed
Peak 2	15.000	20.000	17.500	28.571	25.000	FAILED

シーケンスレポートを印刷する時に、デュプリケートレポート情報を含めるには、メソ ッドおよびシーケンスにおいて、シーケンスデュプリケートレポートを作成するよう設 定されていることを確認する必要があります。

メソッドのピークテーブルには、デュプリケート試料の各濃度計算値の間の%相対値の 限界値として[デュプリケート%RD上限]を入力します。

シーケンステーブルにおいて、目的試料に対する分析タイプの行で[デュプリケート]を 選択します。また、各デュプリケートとして試料にデュプリケートレベル を指定する 必要があります。(例:デュプリケート1 と デュプリケート 2。)

デュプリケート試料が分析されると、2つの試料の濃度計算値、濃度平均値、その2つの試料間の%相対差における計算値、ピークテーブルに入力された%相対差、および

それらの結果の合格/不合格の状態を表示する QC デュプリケートレポートが印刷されます。

以下は、QC デュプリケートレポートの一例を示します。

デュプリケートレポート

Туре	File	Samp le ID	Acquired
Dup 1	C:\datasystem\data\multical001.dat	Multilevel Calibration Level 1	11/26/90 8:48:53 PM
Dար 2։	C:\datasystem\data\multical002.dat	Multilevel Calibration Level 2	11/26/90 8:49:09 PM

Channel A

Compound	Dup 1 Conc.	Dup 2 Сонс.	Mean Conc.	%RD Actual	Dար%aRD	Status
					Limit	
Peakl	10.000	20.000	15.000	66.667	50.000	FAILED
Peak2	5.000	6.000	5.500	18.182	60.000	Passed
Peak3	15.000	20.000	17.500	28.571	50.000	Passed
Peak4	10.000	20.000	15.000	66.667	50.000	FAILED

このQCデュプリケートレポートでは、以下の式が使われます。

平均濃度 = (Dup 1 濃度) + (Dup 2 濃度)

2

%RD = <u>|(Dup 2 濃度) - (Dup 1 濃度) | × 100</u>

平均濃度

シーケンス添加回収レポートの追加

カスタムレポートにシーケンス添加レポートを追加するには

- シーケンスカスタムレポートエディタで、右クリックしてレポートの挿入 / シーケンス添加コマンドをクリックします。
- 添加しない試料の後に添加した試料が続くレポートが欲しい場合、添加あり/ 添加なしボタンを選択します。添加しない試料の後に1回目の添加試料と2
 回目の添加試料が続くレポートが欲しい場合、添加 2/2 ボタンを選択します。
- 3. ファイル名に全パスを含めたい場合、完全修飾ファイル名 ボックスをチェッ クします。
- OK をクリックします。シーケンス添加レポート用のテーブルが、シーケン スレポートに挿入されます。ただし、このテーブルに表示されるのは、場所を 確保するためのサンプルデータであり、システムで収集されたデータは含まれ ていません。

Туре	File	Sample ID	Acquired				
UnSpiked	D:\CHRO	Multi 1	1/30/97				
	M\D ata\Mu		9:28:38				
	1tica1.001		Monday				
Spiked	D:\CHRO	Multi 1	1/30/97				
	M\D ata\Mu		9:28:38				
	1tica1.001		Monday				
Channel A							
Compound	Unspiked	Spiked	Spike	Spike	Low Limit	High Limit	Status
	Conc.	Amount	Conc.	Recovery			
Peak 1	30.094	30.000	40.034	33.133	25.000	45.000	ОК
Peak 1	30.094	30.000	40.034	33.133	45.000	55.000	Low
Peak 1	30.094	30.000	40.034	33.133	5.000	25.000	High

シーケンスレポートを印刷する時に添加回収レポートが含まれるためには、 メソッド およびシーケンスにおいて、シーケンス添加回収レポートを作成するように設定されて いることを確認する必要があります。

メソッドのピークテーブルには、SP1添加量とSP2添加量(2つの添加試料を測定す る場合)、添加回収率下限値と添加回収率上限値が入力されます。添加回収率の下限お よび上限値は、試験が合格か不合格かの判定に使われるパーセント回収率として入力さ れます。

シーケンスでは、1つの試料が添加なしの分析タイプでなければなりません。これは 添加していない試料です。この試料の次に、添加の試料が続かなければなりません。 この試料は、添加なしと同じ成分に標準成分を添加してある点だけが違います。

未添加試料と添加試料を分析した後に、未添加試料におけるその化合物の濃度計算値、 添加試料として入力された量、添加試料の計算濃度値、および回収された添加量のパー セント値を表示するレポートが印刷されます。この回収率のパーセント値は、下限値お よび上限値と比較され、その判定結果が印刷されます。

以下は QC 添加回収レポート(テンプレート Spike 1.brp)の例で、ここでは、未添加試料の次に添加試料が示されます。

添加レポート

Туре	File	Sample ID	Acquired
U nSpiked	C:\datasystem\data\multileve1003.dat	Multilevel Calibration Level 3	11/26/90 8:49:21 PM
Spiked	C:\datasystem\data\multileve1004.dat	Multilevel Calibration Level 4	11/26/90 8:49:34 PM

Channel A

Compound	U nsp iked	Spiked	Spike Conc.	Spike	Low	High	Status
	Conc.	Amount		Recovery	Limit	Limit	
Peakl	30.000	10.000	40.000	100.000	90.000	110.000	OK
Peak2	7.000	1.500	8.000	66.667	75.000	125.000	ок
Peak3	25.000	4.500	30.000	111.111	90.000	110.000	ок
Peak4	30.000	10.000	40.000	100.000	90.000	110.000	OK
この QC 添加レポートでは、下記の式が使用されます:

添加回収率 = 100 × (添加濃度) - (未添加濃度)

添加量

シーケンステーブル (カスタマイズ)の挿入

シーケンステーブルの一部の情報だけをカスタムレポートへ追加することができます。

シーケンステーブルのすべてをレポートへ追加する手順は以下の通りです。

- レポートウィンドウでシーケンステーブルを挿入したい位置で右クリックし、
 レポートの挿入/シーケンステーブル(カスタマイズ)コマンドをクリックします。
- プロパティダイアログが表示されるので、レポートに含めたい項目のチェック ボックスを選択します。すべて選択ボタンをクリックするとすべての項目を素 早く選択でき、全て削除をクリックすると選択した項目すべてを直ちに解除で きます。選択を終えたら OK ボタンをクリックしてテーブルをレポートへ挿 入します。
- レポートを修正するには、シーケンステーブルの領域で右クリックし、オプションメニューにアクセスします。フォントやレポート内での文字揃えを変更するには テキスト コマンドをクリックします。現在のシーケンスの情報を埋め込むには設計時にデータ表示コマンドをクリックします。シーケンステーブルを削除するにはテーブル削除コマンドをクリックします。レポートの内容を変更するためのプロパティダイアログを開くにはレポートプロパティコマンドをクリックします。

4. 印刷プレビューを見るには、編集画面の上にある**印刷プレビュー**ボタン をクリックします。

シーケンステーブル(すべて)

シーケンステーブルのすべてとは、シーケンスのすべての行と列の情報です。

シーケンステーブルのすべてをレポートへ追加する手順は以下の通りです。

- カスタムレポートウィンドウで、シーケンステーブルを挿入したい位置で右ク リックし、レポートの挿入 /シーケンステーブル(すべて)コマンドをクリック します。
- レポートを修正するには、シーケンステーブルの領域で右クリックし、オプションメニューにアクセスします。フォントやレポート内での文字揃えを変更するには テキスト コマンドをクリックします。現在のシーケンスの情報を埋め込むには設計時にデータ表示コマンドをクリックします。シーケンステーブルを削除するにはテーブル削除コマンドをクリックします。レポートの内容を変更するためのプロパティダイアログを開くにはレポートプロパティコマンドをクリックします。
- 3. 印刷プレビューを見るには、編集画面の上にある**印刷プレビュー**ボタン をクリックします。

システムスータビリティレポートの挿入

レポートにシステムスータビリティレポートを追加する方法:

 シーケンスカスタムレポートエディタで、右クリックしてレポートの挿入 / システムスータビリティコマンドをクリックします。 システムスータビリティレポート用のテーブルがシーケンスレポートに挿入されます。ただし、このテーブルに表示されるのは、場所を確保するためのサン プルデータであり、システムで収集されたデータは含まれていません。

		SYSTEM IS NOT SUITABLE					
Channel A	Compound	Parameter	Min	Max	%RSD		
	Peak 1	Area	1234.23	1468.99	0.094		
Sample ID	Compound	Parameter	Average	Low	High	%RSD	Status
	Peak 1	Area	1287.84	1178.23	1397.45	0.067	
Samp 1		1397.45					Passed
Samo 2		1170 22		FAILED			EATLED
	1	: 11/0.25		FAILED			FAILED
		11/0.23		FAILED			FAILED
Channel A	Sample ID	Test	Start(Min)	Stop(Min)	Threshold	Result	Status

シーケンスレポートを印刷する時にシステムスータビリティレポート情報を含めるには、 メソッドおよびシーケンスにおいて、システムスータビリティレポートを作成するよう 設定されていることを確認する必要があります。その詳細手順については システムス ータビリティ の項を参照してください。

フラクションレポートの挿入

レポートエディタウィンドウで、レポートを挿入する位置で右クリックし、【レポート を挿入 > フラクションレポート】を選択します。フラクションレポートのテーブルが レポートに挿入されます。以下にフラクションレポートの一例を示します。

Fraction Report			
Sample ID:			
Data File:	C:\projects\Elite \Exe\Enterprise\P rojects\Default\D ata\4-7-2011		
Method File:	3-14-41 PM.dat C:\Projects\Elite \Exe\Enterprise\P rojects\Default\M ethod\VBSample.me t		
User Name:	System		
Acquisition Time:	4/7/2011 3:14:48 PM		
Fraction Data	4		
Instrument Name:	VB Sample		
Fraction Number	Vial Number	Start Time (min.)	Stop Time (min.)
1	1	0.00	0.25
2	2	0.25	0.49
3	3	0.49	0.74
4	4	0.74	0.98
1			

詳細レポート作成

詳細レポート作成について

詳細レポート作成機能では、複雑なカスタマイズされたレポートの作成を容易にするた め、スプレッドシートフォーマットを使用します。ユーザーのアプリケーションに合わ せて容易に変更することができる種々の標準テキストのレポートテンプレートが提供さ れています。(例えばシーケンスサマリーレポートは、詳細レポートテンプレートを使 用して作成されます。)さらに、どのようなデータやファイル情報でも抽出し、これに 数学的処理を適用できる、完全にカスタマイズされたレポートテンプレートを作成する ことができます。例えば、複数のチャンネルからのピークデータを組み合わせて1つ のレポートとして作成することができます。あるいは、シーケンスランからの測定結果 を取得して、これらについて統計的解析を行うこともできます。

それぞれの詳細レポートは、詳細レポートテンプレートから始まります。レポートのテ ンプレートを作成し保存しておけば、以後は、シーケンスにおける測定の分析タイプか らレポートテンプレートを指定することにより、シーケンスランまたはシーケンスの再 解析により、レポート作成および印刷に使用することができます。

注:詳細レポートをエクスポートするために、エクスポートを実行するコンピュータに プリンタを設定しなければなりません。

関連項目

詳細レポートテンプレートの作成

詳細レポートのセルスタイルの設定

詳細レポートヘッダー/フッターの定義

詳細レポートにチャートを追加

詳細レポートのセルにカラーを追加

詳細レポートグリッドプロパティの変更

<u>テーブルウィザードを用いたテーブルの追加</u>

関数ウィザードを用いた関数の追加

詳細レポート監査証跡

詳細レポート監査証跡ログの表示

レポートをテンプレートとして保存

詳細レポートテンプレートの作成

新しい詳細レポートテンプレートを作成する方法:

- 1. ナビゲーションペインで レポート > 詳細レポートを選択します。空白の スプレッドシートテンプレートが表示されます。
- レポートテンプレートは、データシリーズ、公式およびテキストをこのス プレッドシートの各セルに挿入することにより作成されます。また、ヘッ ダーとフッターを定義してデータのチャートを挿入し、セルをフォーマッ トすることもできます。これらのテーマのリンクについては詳細レポート についてを参照してください。
- 3. ファイル > 名前を付けて保存 > 詳細レポートを選択します。詳細レポー トファイルを保存する ダイアログボックスから、テンプレートフォルダ を開きます。ファイル名を入力して保存をクリックします。

詳細レポートのセルスタイルの設定

選択したセルのスタイルを自動的に設定するには、様々な方法があります。

- 1. スタイル設定するセルを選択して**セルスタイル** ボタン ⁸⁰⁰をクリックします。
- セルスタイル ダイアログボックスからカテゴリを選択します。ユーザーの選択に基づき、右側のフィールドが、そのセルスタイルをさらに定義するために アクティブになります。

- 3. 数値データについて、表示する小数点桁数を入力します。
- 4. 以下の中から選択してください。
 - 浮動 これを選択した場合、セルの幅を超えたテキストまたは数値デー タが、自動的に次のセル(空白の場合)へと移動します。この選択を無効 (オフ)にした場合、セル幅の制限値を超えたテキストやデータは、切り捨 てられるか、選択したオーバーフローインジケータ付きで表示されます。
 - 右端で折り返す このボタンを選択すると、セルに入力された情報は、
 そのセルの右端一杯まで表示されると、次の行に送られます。
 - ノーマル このボタンを選択すると、情報はデフォルトモードで表示されます。
- 5. オーバーフローインジケータ ドロップダウンボックスから、セルにオーバー フローを表示させる方法を選択します。インジケータなし、省略附あり (例 セルオーバーフローは...)、またはポンド記号 (########)あり。
- 6. **OK** をクリックします。

詳細レポートヘッダー/フッターの定義

レポートのヘッダーまたはフッターを定義するには、スプレッドシート上で右クリック して**ヘッダー/フッター** コマンドを選択します。ヘッダーおよびフッターの内容を定義 するためのダイアログが表示されます。 左揃え、中央揃え、右揃えという列のうち1つのフィールドをクリックします。揃え を表示した状態でテキストをタイプすることもできれば、日付、時間、ページ番号など の項目を自動挿入するためにフィールドコードを挿入することもできます。セルを選択 してある場合、[フォント]ボタンをクリックし、希望のフォントおよび属性を選択する ことにより、**フォント**を変更することもできます。

注:フォントの色はヘッダーおよびフッターの項ではサポートしていません。

ヘッダーやフッターに挿入できるフィールドコード

- **\$F** レポートテンプレート名
- **\$P**ページ番号
- **\$N**ページ数
- **\$SEQNUM** シーケンスページ番号
- **\$D** 日付 例えば **\$D{%h:%m}**のように、付加的なパラメータ により日付の表示形式を指定することができます。

日付の表示形式:

- %a 省略した平日の名前
- **%**A すべての平日の名前
- %b 省略した月の名前
- **%B** 全ての月の名前
- %C その地域に合った日付および時間の表示
- %d 十進数での1ヶ月の日数(01-31)
- %H 24 時間フォーマットでの時間(00-23)
- %I 12時間フォーマットでの時間(01-12)

%j 十進数での1年の日数(001-366)

%m 十進数での月数(01-12)

%M 十進数での分数(00-59)

%p 12 時間時計用の AM/PM 表示

%S +進数での秒数(00-59)

%U 週の最初の日を日曜日とした、十進数での1年の週数(00-51)

%w 十進数での平日(0-6;日曜日は0)

%₩ 週の最初の日を月曜日とした、十進数での1年の週数(00-51)

%x デフォルトによる日付の表示

%X デフォルトによる時間の表示

%y 百年を除く、十進数での年数(00-99)

- %Y 百年を入れた、十進数での年数
- **%z, %Z**時間帯の名称または省略名;時間帯が未知の場合には、 文字なし

枠からの距離

ここで入力する数値は、ヘッダーおよびフッターを紙の端からどれくらいの距離にする かを決定します。この数値は、紙の余白からは独立したものであり、正しくない数値が 設定されると、レポート本体と重なる場合がありますので注意してください。

ヘッダーとフッターを表示する方法:

OK ボタンをクリックすると、定義されたヘッダーおよびフッターがテンプレートの一部となりますが、表示はされません。ヘッダーおよびフッターを見るには、**印刷プレビュー** ボタンをクリックし、詳細を見るため、拡大します。

詳細レポートにチャートを追加

詳細レポートヘチャートを追加する方法:

- 1. 詳細レポートテンプレートを開きます。
- 詳細レポートテンプレートエディタで、チャートを追加したい場所で右ク リックし、挿入 / チャートをクリックします。
- 3. パラメータの設定が終了したら、OK ボタンをクリックしてチャートを挿入します。
- **チャートのタイトル** チャートの上部に表示するタイトルを入力します。
- チャートタイトルのフォントを変更する場合に、このボタ ンをクリックします。
- **チャートスタイル** ドロップダウンリストからチャートのスタイルを選択しま す。

初期データを配置するセルを入力します(例えば、シリーズイニシャルセルの最初のセル)。多くの場合、入力したいセルの位置は、そのデータシリーズの公式が定義されているセルです。

データセット データシリーズをスプレッドシート上で縦方向と横方向の

どちらに広げるかを選択します。

1つのデータシリーズを表示する場合にはシングルを、1
 つ以上のデータシリーズを表示する場合にはマルチを選択します。例えば、サマリーテーブルに5つの測定からの4
 つのピーク面積が含まれるシーケンスサマリーレポートでは、1つのピークからの面積をチャートにする場合には[シングル]を、4つのすべてのピークからの面積をチャートにするには[マルチ]を選択します。

グループタイトル チャート作成したデータシリーズのタイトルに使用するセル、あるいは使用するテキストでのタイプを入力します。

このボックスは、詳細レポートのスプレッドシートで、チ

は印刷プレビューボタンをクリックします。)

サンプルチャートをャートの例を見たい場合にクリックします。(注:これは実表示データではありません。チャートの実データを表示するに

詳細レポートのセルにフィルカラーを追加

ペイントバケツツールを使用して詳細レポートのセルに色を追加します。

セルにフィルカラーを追加する方法:

1. 詳細レポートを開きます。

- 2. 色を追加したいセルを選択します。
- 3. ペイントバケツアイコン横の矢印で色を選択します 🖄 📩

詳細レポートグリッドプロパティの変更

詳細レポートの一般仕様にスタイル設定するには、スプレッドシートで右クリックして グリッドプロパティを選択します。 ダイアログはグリッドのサイズ、マージン、ペー ジの順番およびデフォルトのセルスタイルをカスタマイズできる場所に表示されます。

- **グリッドサイズ グリッドサイズ** イズを限定することができます。
 - レポートの行数を限定するには、ここに行数を入力しま す。

列数 レポートの列数を入力します。

 レポート作成時
 これを選択すると、印刷する時に、レポートに要求される

 にグリットを自
 行数および列数のみとなるように、スプレッドシートのグ

 リッドが自動的に削減されます。これを選択しない場合に
 は、空白のままの行および列が印刷されます。

ページの方向 印刷するページの方向を選択します。

浮動

表示されているフィールドにページの余白を入力します。
 これにより、詳細レポートの本体を印刷するのに使用する
 ための余白が設定されます。これらの余白はヘッダーおよびフッターでの「フレームまでの距離」とは完全に独立したものですので注意してください。

デフォルトセルスタセルスタイルのデフォルト設定を選択します。どのセルあイルるいはセルの範囲でも、これから独立して変更することができます。

これを選択した場合、セルの幅を超えたテキストまたは数 値データが、自動的に次のセル(空白の場合)へと移動しま す。この選択を**無効(オフ)**にした場合、セル幅の制限値を 超えたテキストやデータは、切り捨てられるか、選択した オーバーフローインジケータ付きで表示されます。

オーバーフロー インジケータ セルからあふれた場合の表示方法を選択します。インジケ ータなし、省略附あり(例 セルオーバーフローは...)、また はポンド記号(########)あり。

右端で折り返す このボタンを選択すると、セルに入力された情報は、その セルの右端一杯まで表示されると、次の行に送られます。

ノーマル このボタンを選択すると、情報はデフォルトモードで表示 されます。

テーブルウィザードを用いたテーブルの追加

テーブルウィザードを用いて、詳細レポートにテーブルを作成します。

- 1. ナビゲーションペインで レポート > 詳細レポートを選択します。
- 2. 配置したいテーブルの場所を選択して**テーブルウィザード** ボタンを選択しま す
- 3. テーブル タイプ ダイアログボックスの使用可能なテーブルタイプから 次へを 選択します。
- パラメータ ダイアログボックスのドロップダウンリストから、ピーク または グループ を選択します。
- 5. ダブルクリックして左のリストからパラメータを選択します。必要な数だけパ ラメータを選択することができます。パラメータが数値の場合には、[小数点 桁数]の数値を入力することも、表示されている数値を使用することもできま す。
- マルチチャンネルファイルの場合は、含めたいチャンネルのトレースインデックスを選択します。ここでは最初のトレース = 1、2番目のトレース = 2などで、次に次へをクリックします。

- 7. *タイプ* ダイアログボックスからボックスをクリックしてサマリーに含めたい ピークやグループのタイプを選択し、次へをクリックします。
- 8. 実行パラメータ ダイアログボックスでサマリーテーブルでの各実行時に含め たいパラメータをそれぞれダブルクリックし、次へをクリックします。
- 実行方向 ダイアログボックスでテーブルに表示したい実行方法を選択して、 次へをクリックします。
- 10. テーブルに統計セクションを含めたい場合は、統計 ダイアログボックスでは
 い を選択します。統計の計算値には、Min(最小値)、Max(最大値)、Mean(平均)、Std.(標準偏差値)および %RSD が含まれます。
- 11. 完了 をクリックします。詳細レポートの現在のセル位置にシーケンスサマリ ーテーブルが挿入されます。

関数ウィザードを用いた関数の追加

関数ウィザードを用いた関数の追加

関数によってデータシステムが求める情報を抜粋して、データをレポートに取り込みま す。関数ウィザードは、表示する情報の種類とレポートへの表示方法の選択を可能にし ます。ユーザーの選択結果は、公式(様々な機能を組み合わせたもの)となり、現在選択 されているスプレッドシートセルに配置されます。

関数ウィザードを使用する方法:

- 1. ナビゲーションペインで レポート > 標準レポートを選択します。
- 2. 配置したいテーブルの場所を選択して関数ウィザード ボタンを選択しま



関数ウィザードのステップにしたがって次のダイアログへと導かれ、これにより、選択したセルに挿入する情報を定義することができます。

関連項目

関数ウィザード - 関数の選択

関数ウィザード - ダイナミックデータ

関数ウィザード - データの方向

関数ウィザード - タイプ

<u>関数ウィザード - ID</u>

詳細レポート作成の式と関数

機能リファレンス

関数ウィザード - 関数の選択

関数ウィザードオプションは、このダイアログボックスでの選択によって変化します。

- 1. 関数の選択 ダイアログボックスのデータソースからシーケンスファイル また は 現在のデータファイルを選択します。
- 2. 以下の中からカテゴリーを選択してください。
 - データ データファイルで利用できるデータとパラメータ
 - **グループ -** グループテーブルからの情報

- **Instrument** 機器パラメータ(ID、名称、ユーザー名)
- Peak ピークテーブルからの情報
- **プロジェクト** プロジェクト名および関連するパス名
- **シーケンス** シーケンス名、測定数、分析タイプ
- **3.** 右手リストから関数を選択します。すべての関数の詳細な説明は、<u>詳細レポー</u>トの公式と関数 および 関数リファレンスに記載されています。
- 4. 公式を繰り返す を選択し、公式が連続したピークまたはファイルを繰り返す ことになっている場合は次へを選択します。

関連項目

関数ウィザード - ダイナミックデータ

関数ウィザード - データの方向

関数ウィザード - タイプ

関数ウィザード - ID

関数ウィザード - ダイナミックデータ

本画面は**公式を繰り返す**ボックスを選択した時に表示されます。ここでの質問に回答す ることより、繰り返す公式に関するデータソースを指定することができます。

詳細レポートは、シーケンスランからのデータや、ピークの数が変わり得る各測定から のピーク等のダイナミックデータ表示のために使用する場合、レポートは「ダイナミッ クデータ関数」を使用します。このタイプの関数は、指定の要求条件を満たすすべての データについて、その機能を繰返すことにより、レポートを拡大、縮小することができます。

1. ダイナミックデータ ダイアログボックスで次のオプションから選択します。

- シーケンスですべての実行の公式を繰り返す このボックスを選択して 実行するすべてのシーケンスから指定したデータを抜粋します。例えば、 選択した機能がシーケンスファイルからのピーク面積である場合に選択す ることで、そのシーケンスのトレースから1つのピークを選択した後で、 そのシーケンスにおける各測定について、その面積のレポート作成を行う ことができます。
- すべてのピークまたはグループに対して公式を繰り返す このオプションは、すべてのグループの指定された情報や選択するシーケンスランの全ピークを抜粋します。(このオプションが選択されている時、シーケンスラン番号がプロンプト表示されます。)例えば、選択した機能がシーケンスファイルからのピーク面積の場合、これを選択することで、選択したシーケンスランのすべてのピークまたはグループについて、その面積を抽出することができます。
- シーケンスですべての実行の公式を繰り返す と すべてのピークまたはグ ループに対して公式を繰り返す - 両方の オプションを選択した場合、公 式はすべての実行とシーケンスのピーク/グループのすべてに対して繰り 返されます。例えば、選択した機能がシーケンスファイルからのピーク面 積の場合、両方選択することで、それぞれのシーケンスランでのすべての ピークについての面積のリストを作成できます。
- 2. 次を選択します。

関連項目

関数ウィザード - 関数の選択

関数ウィザード - データの方向

関数ウィザード - タイプ

<u>関数ウィザード - ID</u>

関数ウィザード - データの方向

データの方向 ダイアログボックスから、データシリーズの表示方法を選択します。

- 行の 横方向
- 列の 下方向

関連項目

関数ウィザード - 関数の選択

関数ウィザード - ダイナミックデータ

関数ウィザード - タイプ

<u>関数ウィザード - ID</u>

関数ウィザード - タイプ

本画面では、ピークまたはグループの情報を選択することができます。

ピーク

使用

使用するピークのタイプについて、このボックスから選択します。

トレースインデックス

トレースの番号(マルチチャンネルファイルの場合)を選択します。最初のトレース = 1、 2 番目のトレース = 2、などです。

グループ

データを生成するためのグループを選択すると、以下の選択肢が表示されます。

使用

レポート作成するグループのタイプを選択します。キャリブレーションされたグループ と同定ピークグループがサポートされます。キャリブレーションされたグループを選択 した場合、未同定ピーク濃度を使用するか未同定ピーク濃度を使用しないか、目的のボ タンを選択することにより、グループレポート作成に含めることができます。

トレースインデックス

トレースの番号(マルチチャンネルファイルの場合)を選択します。最初のトレース = 1、 2 番目のトレース = 2、などです。 このダイアログを完了したら、完了ボタンをクリックします。現在選択されているセル に、関数ウィザードにおいて定義された関数が挿入されます。

関連項目

<u>関数ウィザード - 関数の選択</u>

関数ウィザード - ダイナミックデータ

関数ウィザード - データの方向

<u>関数ウィザード - ID</u>

関数ウィザード - ID

ピーク

ピーク機能を指定した場合、このダイアログにより、どのピークについてレポート作成 するかを指定することができます。

トレースインデックス

トレースの番号(マルチチャンネルファイルの場合)を選択します。最初のトレース = 1、 2 番目のトレース = 2、などです。

ピークインデックス

このボタンを選択する場合は、関連するピークについて、ピークインデックス番号を入 力します。最初のピーク = 1、2 番目のピーク = 2、などです。

ピーク **ID**

このボタンを選択する場合は、関連するピークについて、ピークテーブルからのピーク ID 番号を入力します。

使用

含めるピークのタイプを選択する場合、このボックスで選択します。

グループ

グループ機能を選択する場合には、このダイアログにより、どのグループのレポート作 成を行うか指定することができます。

トレースインデックス

トレースの番号(マルチチャンネルファイルの場合)を選択します。最初のトレース = 1、 2 番目のトレース = 2、などです。

グループインデックス

このボタンを選択する場合には、関連するグループについて、グループインデックス番号を入力します。最初のグループ = 1、2番目のグループ = 2、などです。

使用

レポート作成するグループのタイプを選択します。キャリブレーションされたグループ と同定ピークグループがサポートされます。キャリブレーションされたグループを選択 した場合、未同定ピーク濃度を使用するか未同定ピーク濃度を使用しないか、目的のボ タンを選択することにより、グループレポート作成に含めることができます。

関連項目

関数ウィザード - 関数の選択

関数ウィザード - ダイナミックデータ

関数ウィザード - データの方向

関数ウィザード - タイプ

詳細レポート監査証跡

詳細レポートの監査証跡を有効にする方法:

- 1. レポート メニューから詳細レポートプロパティを選択します。
- 2. 監査証跡タブを選択します。
- 3. 監査証跡を使用する を選択して詳細レポートテンプレートの履歴を有効にし ます。
- 4. 以下の中から選択してください。
 - ファイル保存時に理由を入力する このオプションを選択すると、テンプレートの保存時に変更の理由をそれぞれ入力するよう求められます。
 - 理由を入力しない-このオプションを選択すると、変更は記録されますが 変更理由の入力は要求されません。

詳細レポート監査証跡ログの表示

詳細レポートの監査証跡ログを見る手順は以下の通りです。

- 1. ツールバーから レポート > 詳細レポートプロパティを選択します。
- 2. 監査証跡ログタブを選択します。

- 3. 次の情報を入力します。
 - ユーザー
 - ロケーション
 - 説明
 - 理由
 - 開始日/時間
 - 終了日/時間
- 4. 以下の中から選択してください。
 - エクスポート これを選択して、監査証跡ログをエクスポート します。
 - 印刷 これを選択して、監査証跡ログを印刷します。
 - **検索** これを選択して、監査証跡ログを検索します。

レポートをテンプレートとして保存

- 1. ファイル > 名前を付けて保存 > 詳細レポートを選択します。
- 2. 詳細レポートファイルを保存する ダイアログボックスからテンプレートフォ ルダを選択します。
- 3. ファイル名を入力して保存をクリックします。

インテリジェントレポート

関連項目

インテリジェントレポートの作成

インテリジェントレポートのオープン

インテリジェントレポートの保存

インテリジェントレポートの作成

新しいインテリジェントレポートを作成するには、ナビゲーションウィンドウまたはツ ールバーからレポート > インテリジェントレポートを選択します。オープンラボイン テリジェントレポート (OLIR) エディタが開きます。

レポートウィザードを使用して新しいインテリジェントレポートを作成するには、ツー ルバーから レポート > ウィザード付きインテリジェントレポートを選択します。レポ ートウィザードが開きます。

インテリジェントレポートのオープン

プロジェクトファイルからインテリジェントを開く方法:

- 1. ツールバーからファイル > 開く > インテリジェントレポートを選択します。
- 2. インテリジェントレポートのオープン ダイアログボックスからテンプレート フォルダを開き、.rdl ファイルを選択します。
- 3. 開くを選択します。

データシステムのテンプレートからインテリジェントレポートを開く方法:

- 1. ツールバーから ファイル > 新規作成を選択します。
- 2. 新規ファイルテンプレートダイアログボックスから、レポートタブを選択しま す。
- 3. .rdl ファイルを選択します。
- 4. **OK** *を*クリックします。

インテリジェントレポートの保存

インテリジェントレポートの保存

ツールバーからファイル > 保存 > インテリジェントレポートを選択します。

または、

ツールバーから保存アイコン 『 の隣にあるドロップダウンメニューを選択し、**イン** テリジェントレポートの保存を選択します。

異なる名前やロケーションを持つインテリジェントレポートを保存する方法:

- ツールバーからファイル > 名前を付けて保存 > インテリジェントレポート を選択します。
- 2. インテリジェントレポートファイルに名前を付けて保存 ダイアログボックス から、レポートを保存したいフォルダを開きます。
- 3. ファイル名とタイプを入力して保存をクリックします。

標準レポートテンプレート

標準レポートテンプレートを開く

標準レポートテンプレートは、簡単にレポートを印刷できるよう提供されています。

標準レポートテンプレートを開く方法:

ファイル > 開く > 標準レポートを選択します。標準レポートファイルのオープン ダ イアログボックスから、テンプレート フォルダを開きます。

または、

ナビゲーションウィンドウのレポートで、次の標準レポートテンプレートの中から選択 します。

関連項目

面積%

<u>コンフィグコンテンツレポート</u>

ベースラインチェック

絶対検量線

内部標準

ノーマライズ

<u>エラー状態フラグ</u>

面積%レポート

面積%レポートテンプレート(面積%.srp)を使ったレポートの出力例を示します。

Area % Report

Page 1 of 1

Method Name:	C:\datasystem\methods\multicalibration.met
Data:	C:\datasystem\data\multicalib ration001.dat
User:	System
Acquired:	11/26/90 8:51:56 PM
Printed:	4/10/97 8:29:23 AM

Channel A Results						
Pk #	Retention Time	Area	Area %	Height	Height %	Codes
1	5.729	779320	25.26	90135	29.67	ВV
2	6.568	667324	21.63	68471	22.54	VV
3	7.041	2005	0.06	185	0.06	VV
4	7.475	8964	0.29	661	0.22	VV
5	8.273	633854	20.54	52979	17.44	VV
б	8.540	994037	32.22	91392	30.08	V V
Totals						
		3085504	100.00	303823	100.00	

関連項目

標準レポートテンプレートのオープン

コンフィグコンテンツレポート

コンフィグコンテンツレポート(コンフィグコンテンツレポート.srp)を使ったレポートの出力例を示します。

Page 1 of 1

User Name: System (Beth) Print Time: 8/13/2010 11:33:21 AM (GMT -07:00) Instrument Configuration

Instrument Name: Fake Instrument no privileges Instrument Type: Sample VB General Options System Suitability: Disabled SEC: Disabled PDA: Disabled Baseline Check: Disabled

<No configured devices>

関連項目

標準レポートテンプレートのオープン

ベースラインチェック

これはベースラインチェック**(ベースラインチェック.srp)**を使ったレポートの出力例を示します。

Baseline Check Report				
Noise Test	Test Not			
	Completed			
Drift Test	Test Not			
	Completed			
Required Stable Time	15.0 Minutes			
Total Test Time	0.0 Minutes			
Noise Test Type	rms			
Test End Time	7/7/2010 1:02:0	8 PM (GMT		
	-07:00)			
Channel	Threshold	Status	Threshold	Status
	(Noise Test)	(Noise Test)	(Drift/hr)	(Drift Test)

関連項目

標準レポートテンプレートのオープン

内部標準レポート

内部標準レポートテンプレート(ISTD.Srp)を使ったレポートの出力例を示します。

Internal Standard Report

Page 1 of 1

Method Name:	C:\datasystem\methods\istd.met
Data:	C:\datasystem\data\multical005.dat
User:	System
Acquired:	11/26/90 8:49:21 PM
Printed:	4/10/97 10:49:56 AM

Channel A Results				
Pk #	Name	Retention Time	Area	Conc
б	Peak 1	5.710	298528	1.000
7	Peak 2	6.558	250174	0.688
9	Peak 3	8.264	239475	0.985
10	Peak 4	8.530	376822	1.977
Totals				
			1164999	4.650

関連項目

標準レポートテンプレートのオープン

絶対検量線レポート

絶対検量線レポートテンプレート(ESTD.Srp)を使ったレポートの出力例を示します。

External Standard Report

Page 1 of 1

Method Name:	C:\datasystem\methods\test.met
Data:	C:\datasystem\data\multical005.dat
User:	System
Acquired:	11/26/90 8:51:56 PM
Printed:	4/10/97 10:38:56 AM

Channel A Results

Pk #	Name	Retention Time	Area	Conc
2	Acetone	5.729	779320	50.046
3	Carbon Tetrachloride	6.568	667324	9.017
6	Bromoethane	8.273	633854	35.026
7	1,3-TCE	8.540	994037	50.020
Totals				
			3074535	144.110

関連項目

標準レポートテンプレートのオープン

ノーマライズ レポート

ノーマライズレポートテンプレート(NORM.Srp)を使ったレポートの出力例を示しま す。

Page 1 of 1

Normalization Report

Method Name:	C:\datasystem\methods\test.met
Data:	C:\datasystem\data\multilevelD05.dat
User:	System
Acquired:	11/26/90 8:51:56 PM
Printed:	4/10/97 10:43:48 AM

	A Results		
etention Time	Pk # Name Re	Area	Conc
5.729	1 Peak1	779320 3	4.728
6.568	2 Peak2	667324	6.257
8.273	5 Peak3	633854 2	4.305
8.540	6 Peak4	994037 3	4.710
	Totals		
3		3074535 10	0.000

関連項目

標準レポートテンプレートのオープン

エラー状態フラグ

計算した値にエラーが発生すると[エラーフラグ]が印刷され、問題点の内容を表示しま す。これらフラグはレポート、エクスポートデータおよびある種のピーク情報として使 用されます。

- **0.00 BDL** 検出限度以下
- **0.00 ISTD** 内部標準物質ピークに問題あり
- **0.00 STD STD** ピークに問題あり
- **0.00 FIT** 検量線に問題あり

CAL 現在、キャリブレーション中、=現在のレベルに対するピークテーブル濃度

0.00 NEG 濃度が負の値

- LC 濃度が低い、 =濃度の計算値
- HC 濃度が高い、=濃度の計算値

[0.00]が表示されるレポートでは、[0.00]は、これ以上計算ができないのでエラー内 容がでることを示しています。

関連項目

標準レポートテンプレートのオープン

参照

関連項目

PENelson データファイルの変換

CDF ファイルのオープン

<u>CIO/DIO イベントの設定</u>

<u>ユーザープログラム</u>

GPIB 機器の停止

ASCII シーケンスファイルのフォーマットについて

機能リファレンス

詳細レポート作成の式と関数

カスタムパラメータ公式

PENelson データファイルの変換

TurboChrom バージョン 6.1 の.RAW データファイルや、AccessChrom の.RAW デ ータファイルのデータファイル変換をサポートしています。いくつかの変換で PENelson ソフトウェアは、変換の手段としてそれらのソフトウェアを要求する場合が あります。

以下の表は、データファイル変換の要求の概要です。

データファイル	PENelson ソフトウェアの要求
AccessChrom	なし
TurboChrom(4.0 以 前)	なし
TurboChrom(4.1 以 降)	TurboChrom がクライアント PC にインストールされてい なければなりません。 データシステムは、変換を実行する ために TurboChrom を自動的に起動します。
TotalChrom	TotalChrom がクライアント PC にインストールされてい て、ユーザは TotalChrom にログインできなければなりま せん。データシステムは、変換を実行するために TotalChrom を自動的に起動しますが、ユーザによるログ インが必要です。

いずれの場合でも、データポイントだけが変換されます。 データファイルの結果やその他の部分は変換されません。

CDF ファイルのオープン

CDF ファイルを開くと、ソフトウェアは以下のY軸ラベルから1つを探します。

"microvolts", "uvolts", "uv", "uau" or "millivolts", "mvolts", "mv", "mau" これらのY軸ラベルが見つからなかった場合、ソフトウェアはAIA.ini ファイルから のY軸ラベルの読み込みを試みます。AIA.ini ファイルは、非標準ファイルのための乗 数を得るのに用いられます。利用可能な AIA.ini ファイルがない場合、ソフトウェアは 値の範囲に基づいて見積もりを作成しようとします。

読まれているファイルが非標準ならば、 AIA.ini ファイルを作成し、それをデータシ ステムのプログラムフォルダに置く必要があります。 ファイルには y 軸のラベルと乗 算器を含めてください。

CIO/DIO イベントの設定

CIO /の **DIO** ボードのいずれかを使用している場合は、 イベント設定スプレッドシー トインチで**設定**フィールドをクリックするとき、ダイアログが表示されます。

- ボード イベントを設定したいボードを選択します。
- **コネクタ** 使用するコネクタを選択します。
- **信号** イベントの信号源を選択してください。
- アイドル状態 イベントのアイドル状態を選択してください:デフォルトで、 開いたり閉じたり。

設定が完了したら **OK** ボタンをクリックします。イベントが **設定**されると、機器で使用するこのボードを、メソッド画面でプログラムできるようになります。

ユーザープログラム

ユーザープログラムは、データ取込前および解析の前または後に実行するプログラムで す。これらのプログラムは、データシステムと機器、またはユーザーが実行する可能性 のあるデータ処理プログラムとの間で、動作を同期させるためのものです。ユーザープ ログラムは、アプリケーションファイル(.EXE)、またはダイナミックリンクライブラ リ(.DLL)ファイル形式となります。
ユーザープログラムがアプリケーションファイル(.EXE)の場合、データシステムはプ ログラムを立ち上げ、プログラムの終了まで待機状態となります。実行プログラムは3 つの文字列の引数を含むコマンドラインで立ち上げることができます:

addlParams - 'パラメータの追加' フィールド (ダイアログから)を含みます。

strMethod -現在のメソッドの完全修飾パス/ファイル名(引用符で囲む)

strData -現在のデータファイルの完全修飾パス/ファイル名(引用符で囲む)

ユーザープログラムが現在のメソッドおよびデータファイルを受け取りますが、実行プ ログラムはファイルの内容にアクセスしないので注意して下さい。

ユーザープログラムがダイナミックリンクライブラリ(.DLL)の場合、それは、現在の メソッドおよびデータファイルの全てのデータとパラメータにアクセスします。また、 データシステムでは、DLL 内の RunUserProg()と呼ばれる関数の終了を待ってから継 続します。.DLL は次の関数を実装する必要があります。

void RunUserProg ((LPCTSTR)m_addlParams, (CClientInfo*) m_pInfo)

'm_addlParams' は、'パラメーターの追加'フィールド(ダイアログから)のコンテ ンツ(内容)です。

'm_pInfo' は CClientInfo オブジェクトを指します。

注:初期値により、全てのユーザープログラムパス/ファイル名はドライブ名を指定 されます。UNC パスの命名規則を使用する代わりに、次のレジストリの場所(交 $\label{eq:hkey_local_machine} Key_local_MACHINE \forware \chromatographySystem \c:/datasystem \nlnst \chromatographySystem \chroma$

注意 - Windows のレジストリを変更する前に、ネットワーク管理者に必ず相談して ください。

GPIB 機器の停止

GPIB 基板が付属した 2 つの機器を使用する場合に重要なことは、機器の電源を切る前 に機器アプリケーションを閉じる(もしくは機器ウィンドウを閉じてからサーバを閉じ る)ことです。さもないと、もう一方の機器の GPIB 基板がフリーズする可能性があり ます。

ASCII ファイルのフォーマット

ASCII シーケンスファイルのフォーマットについて

ASCII シーケンスはインポートに適しており、複数のテキスト行(各行の最後は改行文 字)から成ります。ASCII シーケンスの最初の行は必ず "ASCIISequence n" でなけれ ばなりません。ここでnはASCII シーケンスのバージョン番号です。現在はこの番号 を "1" に設定してあるため、ASCII シーケンスの最初の行は "ASCIISequence 1" と なります。ASCII 文字ダブルエクスポートはASCII バージョン番号よりも大きいバー ジョンです。ASCII シーケンスの 2 行目以降は以下の 3 つの要素から成ります。

関連項目

ASCII シーケンスヘッダー

ASCII シーケンスレコード

ASCII アクションレコード

ASCII シーケンスファイルの例

ASCII デュアルタワーシーケンスファイルの例

ASCII シーケンスヘッダー

ASCII シーケンスのヘッダーには、シーケンスのヘッダー情報を以下形式で指定します。

=

例えば:

DATAPATH=C:\DATASYSTEM\DATA

以下のキーワードがシーケンスのヘッダーとして認識されます(キーワードは大文字と 小文字を区別するので、以下の通り入力してください)。

CREATIONDATE=

LASTCHANGEDATE=

METHODPATH=(最大 128 文字)

PRINTREPORTS=(YES または NO)

DATAPATH=(最大 128 文字)

PRETREATPATH=(最大 128 文字)

SUMMARYPATH=(最大 128 文字)

DESCRIPTION=

これらキーワードはいずれも必須ではありません。キーワードがテキストファイル中にない場合、デフォルト値が使用されます。

注:複数行の説明フィールドを作成する場合は、hex 0x07 文字はテキスト内のを(改行)を埋め込むために使用できます。通常これは、文字コードを直接入力できるプログラムが行います。いくつかのテキストエディタは、Alt キーを押しながら数値キーで07を押すことで文字コードを入力できます。

ASCII シーケンスレコード

ASCII シーケンスヘッダーに続いて、シーケンステーブルのレコードを指定する行を 指定します。各レコードは、シーケンスのその行の動作を示す要素をコンマで区切って 指定します。

注:オートサンプラの中にはバイアル位置(例: 'A7 は'ソラマイクロプレート用)非数 値指定を使用するものもあります。機器構成はこのようなオートサンプラが含まれてい る場合、ASCII シーケンスのインポートと互換性のある方法でエンコードする方法に についての詳細は、ドライバのインストールガイドを参照してください。

ASCII シーケンスレコードの形式は以下です。

RECORD=a,b,c,d,e,f,g,h,i,j,k,l,m,n,o,p,q,r,s,t,u

ここで、

- a = サンプル ID(最大 63 文字)
- b = Method name (最大 63 文字)
- c = File name (最大 63 文字)
- e = サンプル量(0より大きい実数)
- f = 内部標準物質量(0より大きい実数)
- g = 補正係数1(0より大きい実数)
- h = 注入バイアル位置
- i = 注入量
- j = 前処理ファイル名
- k = フラクションコレクタファイル名
- 1 = 未使用(カンマとカンマの間には何も指定しないこと)
- m = 分析タイプ(以下のリストを参照)
- n = アクション (空白のまま。今は使用していません。)
- **0 =** 測定のメモ
- p = バイアルの繰り返し注入回数(1-9)
- q = 補正係数 2(0 より大きい実数)
- r = 補正係数 3(0 より大きい実数)

s = 希釈係数1(0より大きい実数)

t = 希釈係数2(0より大きい実数)

u = 希釈係数3(0より大きい実数)

分析タイプ

10 進法 16 進法 名前

- 4 0x000004 添加なし
- 8 0x000008 添加あり
- 16 0x0000010 添加サンプル1
- 32 0x0000020 添加サンプル
- 64 0x0000040 デュプリケート1
- 128 0x0000080 デュプリケート2
- 256 0x0000100 システム適合性試験開始
- 512 0x0000200 システム適合性試験終了
- 1024 0x0000400 システム適合性試験
- 2048 0x0000800 シャットダウン
- 4096 0x0001000 キャリブレーションレポート開始
- 8192 0x0002000 キャリブレーションレポート終了
- 16384 0x0004000 QC チェック

32768 0x0008000 サマリー開始

65536 0x0010000 サマリー終了

131072 0x0020000 サマリー

262144 0x0040000 検量線をすべて削除

524288 0x0080000 このレベルのレスポンスファクターをすべて削除

1048576 0x0100000 レスポンスファクターを印刷

2097152 0x0200000 繰り返し測定値を平均化

4194304 0x0400000 繰り返し測定値を削除

8388608 0x0800000 ループ開始

16777216 0x1000000 ループ終了

ASCII アクションレコード

ASCII アクションレコードは、直前の ASCII シーケンスレコード行だけに関連します。

形式:

ACTION=a,b,c,d,e

a:条件:

0 任意の条件

1キャリブレーション

2 QC

- 3 システム適合性試験
- 4 ハードウェアステータス
- 5 濃度試験
- b:結果:
- 0 成功
- 1 失敗
- 2 限度未満
- 3 限度超過
- c:アクション:
- 0 中段
- 1 一時停止
- 2 再注入
- 3 ユーザプログラム実行
- 4 シャットダウン
- 5 アラーム
- 6 移動
- 7 システム適合性試験の再スタート
- d:パラメータ 1:

アクションが再注入または移動の場合 - 繰り返し回数

アクションがユーザプログラム実行の場合 - プログラムのパスと名前

e:パラメータ 2:

アクションが移動の場合 - 移動先の行番号

注意:メソッド名、ファイル名、前処理名およびフラクションコレクタファイル名に関 して:これらの項目にパス名が入っていない場合には、ヘッダーからの適切なパスが使 われます (フラクションコレクタファイルは、前処理ファイルパス内にあると仮定され ています)。レコード行の要素はすべて存在していなければなりません。 ただし、必要 のないレコード要素はコンマとコンマの間に何も指定せずに飛ばしても構いません。 Microsoft Excel を使って ASCII ファイルを作成している場合は、ファイルを "*.CSV" フォーマットで保存してください。サンプル ID は RECORD=と同じセルに 入れなければなりません。".CSV" はパスにコンマが追加されるので、メソッドとデー タパスはシーケンスプロパティを使って手動で選択しなければなりません。

ASCII シーケンスファイルの例

以下は ASCII シーケンスファイルの例です。

ASCII Sequence 1

CREATIONDATE=

LASTCHANGEDDATE=

METHODPATH = D:\System\Methods

PRINTREPORTS = NO

DATAPATH = D:\System\data

PRETREATPATH =

SUMMARYPATH =

DESCRIPTION = この ASCII シーケンスの説明。

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical001.dat,0,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,16384 ,1,,3

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical002.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,,2,Rec ord Desc,3

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical003.dat,3,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,16384

ACTION = 1,1,3,D:\CHROM\Program.EXE

ACTION = 1,0,2,4

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical004.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,,4,Rec ord Desc,3

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical005.dat,0,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,16384

ACTION = 3,1,6,7,2

ACTION = 3,0,2,4

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical006.dat,6,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,16384 ,3,,3

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical007.dat,0,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,,2,,3

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical008.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,76,,Re cord Desc,3

ACTION = 4, 1, 5

ACTION = 4,0,2,4

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical009.dat,9,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,16384 ,1,,3

RECORD=Samp,MULTICAL.MET,Multical010.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,16384 ,2,,3

ASCII デュアルタワーシーケンスファイルの例

ASCII Sequence 1

CREATIONDATE=

LASTCHANGEDDATE=

METHODPATH = \\Qa-glisowski01\transfer

PRINTREPORTS =

NO DATAPATH = \\Qa-glisowski01\transfer\public

PRETREATPATH =

SUMMARYPATH =

DESCRIPTION = この ASCII シーケンスの説明。

TOWER=0

RECORD=Front Samp 1, HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical001.dat,0,1.2,2.91,1.1,1,1,,,,16384,1,,3

RECORD=Front Samp 2, HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical002.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,1,,,,,2,Record Desc,3

RECORD=Front Samp 3, HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical003.dat,3,1.2,2.91,1.1,3,1,,,,16384,,,3

ACTION = 1,1,3,D:\CHROM\Program.EXE

ACTION = 1,0,2,4

RECORD=Front Samp 4, HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical004.dat,0,1.2,2.91,1.1,4,1,,,,,4,Record Desc,3

RECORD=Front Samp 5, HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical005.dat,0,1.2,2.91,1.1,5,1,,,,16384,,,3

ACTION = 3,1,6,7,2

ACTION = 3,0,2,4

RECORD=Front Samp 6,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical006.dat,6,1.2,2.91,1.1,6,1,,,,16384,3,,3

RECORD=Front Samp 7, HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical007.dat,0,1.2,2.91,1.1,7,1,,,,2,,

RECORD=Front Samp 8, HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical008.dat,0,1.2,2.91,1.1,8,1,,,,76,,Record Desc,3

ACTION = 4, 1, 5,

ACTION = 4,0,2,4,

RECORD=Front Samp 9, HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical009.dat,9,1.2,2.91,1.1,9,1,,,,16384,1,,3,

RECORD=Front Samp 10,HP6890 FRONT JL01.MET,FrontMultical010.dat,0,1.2,2.91,1.1,10,1,,,,16384,2,,3,

TOWER=1 ASCII Sequence 1

CREATIONDATE=

LASTCHANGEDDATE=

METHODPATH = \\Qa-glisowski01\transfer

PRINTREPORTS =

NO DATAPATH = \\Qa-glisowski01\transfer\public

PRETREATPATH =

SUMMARYPATH =

DESCRIPTION = この ASCII シーケンスの説明。

RECORD=Rear Samp 1,REAR

JL01.MET,RearMultical001.dat,0,1.2,2.91,1.1,11,1,,,,16384,1,,3

RECORD=Rear Samp 2, HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical002.dat,0,1.2,2.91,1.1,12,1,,,,,2,Record Desc,3

RECORD=Rear Samp 3, HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical003.dat,3,1.2,2.91,1.1,13,1,,,,16384,,,3

ACTION = 1,1,3,D:\CHROM\Program.EXE

ACTION = 1,0,2,4

RECORD = Rear Samp 4, HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical004.dat,0,1.2,2.91,1.1,14,1,,,,,4,Record Desc,3

RECORD=Rear Samp 5, HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical005.dat,0,1.2,2.91,1.1,15,1,,,,16384,,,3

参照

ACTION = 3,1,6,7,2

ACTION = 3,0,2,4

RECORD=Rear Samp 6, HP6890REAR

JL01.MET,RearMultical006.dat,6,1.2,2.91,1.1,16,1,,,,16384,3,,3

RECORD=Rear Samp 7, HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical007.dat,0,1.2,2.91,1.1,17,1,,,,2,,3

RECORD=Rear Samp 8, HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical008.dat,0,1.2,2.91,1.1,18,1,,,,76,,Record Desc,3

ACTION = 4, 1, 5

ACTION = 4,0,2,4

RECORD= Rear Samp 9, HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical009.dat,9,1.2,2.91,1.1,19,1,,,,16384,1,,3

RECORD=Rear Samp 10, HP6890 REAR

機能リファレンス

各関数は、表示するデータとそのデータソースの定義や、または数学処理(公式)の適用 にも使用されます。関数は、編集されている限りスプレッドシートに表示されません。 (セルにそのセルをダブルクリックして関数を表示します。)機能を定義した結果はス プレッドシートには表示されませんが、データがその機能を動作させる能力がある場合 は、印刷プレビューあるいはレポート印刷時に表示されます。(例えば、シーケンスサ マリーテーブルにはシーケンスが収集され、解析または再解析されるまでは有効データ が含まれません。

関数が使えないデータである場合は、エラーをスプレッドシートに表示させることがで きます。このようなことが生じた場合には、[OK]ボタンをクリックしてエラーを閉じ、 [印刷プレビュー]ボタンをクリックします。その機能が技術的には正常だが、利用可能 なデータがない場合、印刷プレビュー時にエラーメッセージは表示されません。印刷プ レビューにエラーメッセージが表示された場合は、関数は正しく入力されていません。

テンプレートエディタを使って <u>詳細レポート</u>を作成する時に、以下の関数を利用する ことができます。

構文の注意:

 ここに述べる関数はすべてテンプレートレポート用スプレッドシート内のセルの中 に置かれ、先頭は[=]記号としなければなりません。例えば、もし関数が
Custom.Func(["パラメータ A"])と記述されたとすると、実際の関数は次のようになります。=Custom.Func("Param A") [] この括弧は任意パラメータを示します。括弧そのものは実際のパラメータ内に含ま れません。例えば、もし関数が Custom.Func(["パラメータ A"])と記述されたとする と、実際の関数は次のようになります。=Custom.Func("Param A")

<> この括弧は要求されるパラメータを示します。括弧そのものは実際のパラメータ内 に含まれません。例えば、もし関数が Custom.Func(["パラメータ A"])と記述された とすると、実際の関数は次のようになります。=Custom.Func("Param A")

"" この様な引用符が要求されます。引用符は実際のパラメータ内に含まれます。例えば、もし関数が Custom.Func(["パラメータ A"])と記述されたとすると、実際の関数 は次のようになります。=Custom.Func("Param A")

Data.SystemWideParamByName

指定したデータファイルからカスタムシステムワイド結果を返します。

構文

=Data.SystemWideParamByName (,)

パラメータ

要求されたシステムワイドカスタムパラメータの 名称を指定します。

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

戻り値の型

ストリング/数値

Data.AcquisitionDate

指定したデータファイルの収集日時を返します。

構文

=Data.AcquisitionDate()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

日付/時間

Data.AnalysisDate

指定したデータファイルの最後の分析日時を返します。

構文

=Data.AnalysisDate()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

日付/時間

Data.BCDValue

指定したデータファイルの BCD 値を返します。

構文

=Data.BCDValue()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

数値

参照

Data.Description

指定したデータファイルのメモを返します。

構文

=Data.Description()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.Filename

指定したデータファイルのファイル名称を返します。ファイル名のみが戻され、パス情報は戻されません。

構文

=Data.Filename()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.FullFilename

指定したデータファイルの完全なファイル名を返します。ファイル名とパス情報が戻さ れます。

構文

=Data.FullFilename()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.InstrumentName

指定したデータファイルを収集したときの機器名称を返します。

構文

=Data.InstrumentName()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。 パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.ISTDAmount

指定したデータファイルの ISTD 量を返します。

構文

=Data.ISTDAmount()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

数値

Data.LastMethodFilename

指定したデータファイルを分析するのに使用した最終メソッドのファイル名称を返しま す。

構文

=Data.LastMethodFilename()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.LastMethodFullFilename

指定したデータファイルを分析するのに使用した最終メソッドのファイル名称とパスを 返します。

構文

=Data.LastMethodFullFileName()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.MultiplierFactor

指定したデータファイルの乗数を返します。

構文

=Data.MultiplierFactor()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

数値

Data.OriginalMethodFilename

指定したデータファイルを収集するのに使用したメソッドファイルの名称を返します。

構文

=Data.OriginalMethodFilename()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.OriginalMethodFullFilename

指定したデータファイルを収集するのに使用したメソッドファイルの名称とパスを返します。

構文

=Data.OriginalMethodFullFileName()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。 パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.SampleAmount

指定したデータファイルのサンプル量を返します。

構文

=Data.SampleAmount()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

数値

Data.SampleID

指定したデータファイルのサンプル ID を返します。

構文

=Data.SampleID()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。 パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.SystemWideParam

指定したデータファイルからカスタムシステムワイド結果を返します。

構文

=Data.SystemWideParam (,)

パラメータ

要求されたシステムワイドカスタムパラメータの数値識別子を指定します。

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

ストリング/数値

Data.TraceName

指定したインデックスおよびデータファイルのトレース名を戻します。

構文

=Data.TraceName(,)

パラメータ

要求されたトレースの数値インデックス

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.UserName

指定したデータファイルを収集したユーザーの名前を戻します。

構文

=Data.UserName()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

文字列

Data.Vial

指定したデータファイルのバイアルを戻します。

構文

=Data.Vial()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

数値

Data.Volume

指定したデータファイルのボリュームを戻します。

構文

=Data.Volume()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

パラメータの詳細に関しては付録を参照ください。

戻り値の型

数値

データファイル関数

収集し分析したデータファイルに関する情報を戻します。

Ex.D

データのダイナミックセットのセル範囲を戻します。セル内のデータがダイ ナミックに拡張されると、この関数を使ってデータが拡張されて入り込んだ セルへの参照を作成します。

構文

=Ex.D(,[範囲方向])

パラメータ

ダイナミックデータ範囲のために拡張されたセルへの参照を含みます。この 形態は[**B5**]、[**C12**]などです。 セル参照には囲む引用符はありません。

[範囲方向] これは用いるダイナミック拡張の方向を指定する任意数値パラメ ータです。データが1方向だけに拡張中の場合には、このパラメータは必要 ありません。データが横および下に拡張中の場合には、このパラメータを使 って使用範囲を規制することができます。このパラメータの値は以下の通り です。

- 不使用または 0 可能などんなダイナミック範囲でも使うことができま す。データが横および下に拡張する場合には、全拡 張を含む範囲を発生します。
- 1. スプレッドシートの横に拡張するダイナミックデータの範囲のみを 発生します。
- 2. スプレッドシートの下に拡張するダイナミックデータの範囲のみを 発生します。

戻り値の型

セル範囲

Ex.R

この関数はダイナミックデータセットに基づき囲んだスプレッドシート公式 を一連のセル内で繰り返すために使用することができます。例えば、この関 数は全範囲を作成し、データファイル内のすべてのピーク面積1組の合計を 示すことができます。

この関数を使う時には、囲んだ関数はラン、トレースまたはピーク情報を持っていてはいけません。例えば、第1トレースを使って現在のデータファイルから第1番目の同定ピークの面積を示す公式は、次のようになります。

=ピーク面積("RC", "T1", "P1;3")

しかし、第1トレースを使ってシーケンスのすべてのランからすべての同定 ピークの面積を示すために EX.R 関数で公式を繰り返す時には、公式は以下 のようになります。

=Ex.R(ピーク面積(), "RA;1;0", "T1", "PA;3;0;0")

構文

=Ex.R(,,[トレース情報],[ダイナミックピーク情報])

または

=Ex.R(,,[トレース情報],[ダイナミックグループ情報])

パラメータ

ダイナミックデータ範囲のために拡張されるすべての有効スプレッドシート 公式も含みます。

[範囲方向] これは用いるダイナミック拡張の方向を指定する任意数値パラメ ータです。参照されたセルが1方向だけに拡張中の場合には、このパラメー タは必要ありません。参照されたセルが横および下に拡張中の場合には、こ のパラメータを使って使用範囲を規制することができます。このパラメータ の値は以下の通りです。

- 不使用または 0 参照されたセルと全く同じに繰り返す。参照されたセ ルが横および下に繰り返す場合には、この公式は横 および下に繰り返されます。
- 1. 参照されたセルと同じくスプレッドシートの横にのみ公式を繰り返 します。
- 2. 参照されたセルと同じくスプレッドシートの下にのみ公式を繰り返 します。

公式を拡張するダイナミック範囲を決定するのに使います。

[トレース情報] これは公式を拡張するダイナミック範囲を決定するのに使う 任意パラメータです。このパラメータの記述につい ては<u>パラメータ記述</u>の項を参照してください。

[ダイナミックピーク情報] これは公式を拡張するダイナミック範囲を決定す るのに使う任意パラメータです。 戻り値の型

なし

[ダイナミックラン情報]は以下のいずれかにすることができます。

- "RC" 現在のランまたは現在搭載されているデータファイル。
- **"R"** ランにより指定されたシーケンスラン。
- "R;;" により指定されたシーケンスラン。ランはにより指定された方向 に繰り返され、行または列により分離されます。
- "RA;;" すべてのシーケンスラン。ランはにより指定された方向に繰り返 され、行または列により分離されます。

[ダイナミックピーク情報] は以下のいずれかにすることができます。

- "P; " あるピーク形式を持つのインデックスを持つピーク。
- "P;;;" あるピーク形式を持つの範囲内のインデックスを持つピーク。ピ ークはにより指定される方向に繰り返され、行または列により分 離されます。
- "PA;;;" あるピーク形式を持つすべてのピーク。ピークはにより指定され る方向に繰り返され、行または列により分離されます。

【ダイナミックグループ情報】'は以下のいずれかにすることができます。

- "G; " あるグループ形式を持つのインデックスを持つグループ。
- "G;;;" あるグループ形式を持つの範囲内のインデックスを持つグループ。 グループはにより指定される方向に繰り返され、行または列により 分離されます。
- "GA;;;" あるグループ形式を持つすべてのグループ。グループはにより指定 される方向に繰り返され、行または列により分離されます。

'方向 は以下のいずれかにすることができます。

- データはスプレッドシートの横方向に繰り返されます。
- データはスプレッドシートの下方向に繰り返されます。

'ピーク形式 は以下のいずれかの組合せにすることができます。

- 1 検出された同定ピークをレポート。
- **2** 検出されなかった同定ピークをレポート。
- 4 未同定ピークをレポート。

'グループ形式 は以下のいずれかにすることができます。

- グループ内の未同定ピークの濃度を計算するキャリブレーション範囲グ ループをレポート。
- 1 グループ内の未同定ピークの濃度を計算しないキャリブレーション範囲 グループをレポート。
- 2 同定ピークグループをレポート。

拡張ヘルパー機能

これはスプレッドシート内の他の機能を使いやすくするために設けられています。

Group.Area

要求されたグループの面積を戻します。

構文

```
=Group.Area(, , )
```

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。
戻り値の型

数値

Group.AreaPercent

要求されたグループの面積パーセントを戻します。

構文

```
=Group.AreaPercent(, , )
```

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Group.ESTDConcentration

要求されたグループの ESTD 濃度を戻します。

構文

=Group.ESTDConcentration(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

グループ関数

これらの関数はグループに関する情報を戻します。

Group.Height

要求されたグループの高さを戻します。

構文

=Group.Height(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Group.HeightPercent

要求されたグループの高さパーセントを戻します。

構文

=Group.HeightPercent(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Group.ISTDConcentration

要求されたグループの ISTD 濃度を戻します。

構文

=Group.ISTDConcentration(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Group.Name

要求されたグループのグループ名を戻します。

構文

=Group.Name(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

文字列

Group.NORMConcentration

要求されたグループの NORM 濃度を戻します。

構文

=Group.NORMConcentration(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Group.Number

要求されたグループのグループ番号を戻します。

構文

```
=Group.Number(, , )
```

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Group.Quantitation

要求されたグループのグループ定量を戻します。これは[面積]、[高さ]また は[カウント値]を戻します。

構文

=Group.Quantitation (, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

文字列

Group.ResponseFactor

要求されたグループのレスポンスファクターを戻します。

構文

=Group.ResponseFactor(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述については<u>パラメータ記述</u>の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Group.Units

要求されたグループの単位を戻します。

構文

=Group.Units(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値を抽出するために使用するグループ情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

文字列

機器関数

これらの関数は現在の機器に関する情報を返します。

Instrument.ID

現在の機器の内部機器 ID を返します。

構文

=Instrument.ID()

パラメータ

なし

戻り値の型

数値

Instrument.Name

現在の機器の機器名を返します。

構文

```
=Instrument.Name()
```

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

Instrument.UserName

現在の機器内に記録されたユーザー名を返します。

構文

=Instrument.UserName()

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

参照

パラメータの説明

要求されたデータファイル、ピークおよびグループ情報を記述するためにテンプ レート関数に渡すことの出来るパラメータを以下に説明します。

[ラン情報]は以下のいずれかにすることができます:

- "RC" 現在のランまたは現在搭載されているデータファイル。
- "R" ランにより指定されたシーケンスラン。

'トレース情報は以下のいずれかにすることができます。

"T" インデックスにより指定されたトレース

'ピーク情報 は以下のいずれかにすることができます。

"P;" あるピーク形式を持つのインデックスを持つピーク。

'グループ情報 は以下のいずれかにすることができます。

"G; " あるグループ形式を持つのインデックスを持つグループ。

'方向 は以下のいずれかにすることができます。

- **0** データはスプレッドシートの横方向に繰り返されます。
- 1 データはスプレッドシートの下方向に繰り返されます。

'ピーク形式 は以下のいずれかの組合せにすることができます。

- 1 検出された同定ピークをレポート。
- **2** 検出されなかった同定ピークをレポート。
- 4 未同定ピークをレポート。

'グループ形式 は以下のいずれかにすることができます。

- グループ内の未同定ピークの濃度を計算するキャリブレーション範囲グ ループをレポート。
- 1 グループ内の未同定ピークの濃度を計算しないキャリブレーション範囲 グループをレポート。
- 2 同定ピークグループをレポート。

Peak.CustomParamByName

要求されたピークのカスタムパラメータ結果を戻します。

構文

=Peak.CustomParamByName(, , ,)

パラメータ

要求されたピークカスタムパラメータ名称を記述します。

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。上記パラメータの記述についてはパラメー タ記述付属の項を参照してください。

戻り値の型

ストリング/数値

Peak.AOHResolution

要求されたピークの分離度(AOH)を返します。

構文

=Peak.AOHResolution(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.AOHTheoreticalPlates

要求されたピークの理論段数(AOH)を返します。

構文

=Peak.AOHTheoreticalPlates(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.AOHTheoreticalPlatesPerMeter

要求されたピークの理論段高さ(m)(AOH)を返します。

構文

=Peak.AOHTheoreticalPlatesPerMeter(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Area

要求されたピークの面積を返します。

構文

=Peak.Area(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.AreaPercent

要求されたピークの面積%を返します。

構文

```
=Peak.AreaPercent(, , )
```

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Asymmetry

要求されたピークのシンメトリー係数を返します。

構文

=Peak.Asymmetry(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.AsymmetryTenPercent

要求されたピークのシンメトリー係数(10%高さ)を返します。

構文

=Peak.AsymmetryTenPercent(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.CapacityFactor

要求されたピークのキャパシティファクタを返します。

構文

=Peak.CapacityFactor(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.CurrentResponseFactor

要求されたピークの現在のレスポンスファクタを返します。

構文

=Peak.CurrentResponseFactor(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.CustomParam

要求されたピークのカスタムパラメータ結果を戻します。

構文

=Peak.CustomParam(, , ,)

パラメータ

要求されたピークカスタムパラメータの数値識別子。

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

ストリング/数値

Peak.DABResolution

要求されたピークの分離度(DAB)を返します。

構文

=Peak.DABResolution(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.DABTheoreticalPlates

要求されたピークの理論段数(DAB)を返します。

構文

=Peak.DABTheoreticalPlates(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.DABTheoreticalPlatesPerMeter

要求されたピークの理論段高さ(m)(DAB)を返します。

構文

=Peak.DABTheoreticalPlatesPerMeter(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.EMGResolution

要求されたピークの分離度(EMG)を返します。

構文

=Peak.EMGResolution(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.EMGTheoreticalPlates

要求されたピークの理論段数(EMG)を返します。

構文

=Peak.EMGTheoreticalPlates(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.EMGTheoreticalPlatesPerMeter

要求されたピークの理論段高さ(m)(EMG)を返します。

構文

=Peak.EMGTheoreticalPlatesPerMeter(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.ESTDConcentration

要求されたピークの ESTD 濃度を返します。

構文

=Peak.ESTDConcentration(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.ExpectedRetentionTime

要求されたピークの予想リテンションタイムを返します。

構文

=Peak.ExpectedRetentionTime(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

ピーク関数

これらの関数は検出された同定ピークに関する情報を返します。

Peak.Height

要求されたピークの高さを返します。

構文

=Peak.Height(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.HeightPercent

要求されたピークの高さ%を返します。

構文

=Peak.HeightPercent(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Index

要求された同定ピークのピークインデックス情報をそのピーク ID に基づき 戻します。戻された情報は別の関数のの代わりに使うことができます。例え ば、現在のデータファイル内でピーク ID が 2 の同定ピークのピーク名を探 すには、次の公式を使います:=Peak.Name("RC", "T1", Peak.Index(2, "RC", "T1"))

構文

=Peak.Index(, ,)

パラメータ

要求された同定ピークの数値識別子。この数値はピークテーブルから取得し ます。 値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

文字列

Peak.IntegrationCodes

要求されたピークのインテグレーションコードを戻します。

構文

=Peak.IntegrationCodes(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

文字列

Peak.ISTDConcentration

要求されたピークの ISTD 濃度を戻します。

構文

=Peak.ISTDConcentration(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.JPResolution

要求されたピークの分離度(Old-JP)を戻します。

構文

=Peak.JPResolution(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.JPTheoreticalPlates

要求されたピークの理論段数(Old-JP)を戻します。

構文

=Peak.JPTheoreticalPlates(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.JPTheoreticalPlatesPerMeter

要求されたピークの理論段高さ(m)(Old-JP)を戻します。

構文

=Peak.JPTheoreticalPlatesPerMeter(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Name

要求されたピークのピーク名を戻します。

構文

=Peak.Name(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

文字列

Peak.NORMConcentration

要求されたピークの NORM 濃度を戻します。

構文

=Peak.NORMConcentration(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Number

要求されたピークのピーク番号を戻します。

構文

=Peak.Number(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Quantitation

要求されたピークのピーク定量を戻します。これは[面積]、[高さ]または[カ ウント値]を戻します。

構文

=Peak.Quantitation (, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

文字列

Peak.RelativeRetentionTime

要求されたピークの相対リテンションタイムを戻します。

構文

=Peak.RelativeRetentionTime(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Resolution

要求されたピークの分離度を戻します。

構文

=Peak.Resolution(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.ResponseFactor

指定したピークのレスポンスファクタを返します。

構文

=Peak.ResponseFactor(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.ResolutionID

要求されたピークの Resolution ID を戻します。

構文

```
=Peak.ResolutionID(, , )
```

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.RetentionTime

要求されたピークのリテンションタイムを戻します。

構文

=Peak.RetentionTime(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.StartTime

要求されたピークの開始時間を戻します。

構文

=Peak.StartTime(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.StopTime

要求されたピークの終了時間を戻します。

構文

```
=Peak.StopTime(, , )
```

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.TheoreticalPlates

要求されたピークの理論段数を戻します。

構文

=Peak.TheoreticalPlates(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.TheoreticalPlatesPerMeter

要求されたピーク理論段高さ(m)を戻します。

構文

=Peak.TheoreticalPlatesPerMeter(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Units

要求されたピークの濃度単位を戻します。

構文

```
=Peak.Units(, , )
```

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

文字列

Peak.USPResolution

要求されたピークの分離度(USP)を戻します。

構文

=Peak.USPResolution(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.USPTheoreticalPlates

要求されたピークの理論段数を戻します。(UPS)

構文

=Peak.USPTheoreticalPlates(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.USPWidth

要求されたピークの USP ベース幅を戻します。

構文

=Peak.USPWidth(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.USPTheoreticalPlatesPerMeter

要求されたピークの理論段高さ(m)(USP)を戻します。

構文

=Peak.USPTheoreticalPlatesPerMeter(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。
値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.Width

要求されたピーク幅を戻します。

構文

=Peak.Width(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.WidthFiftyPercent

要求されたピークの幅(50%)を戻します。

構文

=Peak.WidthFiftyPercent(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.WidthFivePercent

要求されたピークの幅(5%)を戻します。

構文

=Peak.WidthFivePercent(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Peak.WidthTenPercent

要求されたピークの幅(10%)を戻します。

構文

=Peak.WidthTenPercent(, ,)

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

値を抽出するために使うトレースを記述します。

値のために使うピークを記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

Project.DataPath

現在のプロジェクト内のデータファイルを保存するパス名を戻します。

構文

```
=Project.DataPath()
```

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

Project.Description

現在のプロジェクトの説明を戻します。

構文

=Project.Description()

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

プロジェクト関数

この関数は現在のプロジェクトについての情報を戻します。

Project.MethodPath

現在のプロジェクト内のメソッドファイルを保存するデフォルトパス名を戻 します。

構文

=Project.MethodPath()

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

Project.Name

現在のプロジェクト名を戻します。

構文

=Project.Name()

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

Project.RootPath

現在のプロジェクトのデフォルトパスを戻します。

構文

```
=Project.RootPath()
```

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

Project.SequencePath

現在のプロジェクト内のシーケンスファイルを保存するデフォルトパスを戻 します。

構文

=Project.SequencePath()

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

Project.TemplatePath

現在のプロジェクト内のレポートテンプレートファイルを保存するデフォル トパスを戻します。

構文

=Project.TemplatePath()

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

Sequence.Filename

報告用に使うシーケンスファイルのファイル名を戻します。ファイル名のみ が戻され、パス情報は戻されません。

構文

=Sequence.Filename()

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

Sequence.FullFilename

報告用に使うシーケンスファイルのフルネームを戻します。ファイル名とパス情報が戻されます。

構文

=Sequence.FullFilename()

パラメータ

なし

戻り値の型

文字列

シーケンス関数

これらの関数は、レポートの目的に使うシーケンスファイルについての情報を返します。

Sequence.RunNumber

指定したシーケンスランのラン番号を戻します。この関数は **EX.R()**公式と 共に用いられてシーケンス内のランのラン番号を発生します。例えば、次の

公式は進行中のシーケンスのすべてのラン番号を生成します。 =EX.R(SEQUENCE.RUNNUMBER(),"RA;1;0")

構文

=Sequence.RunNumber()

パラメータ

値を抽出するために使用するデータファイル情報を記述します。

上記パラメータの記述についてはパラメータ記述の項を参照してください。

戻り値の型

数値

詳細レポート作成の式と関数

本書では、EZChrom Elite クライアント/サーバーの <u>詳細レポート</u>機能に使われるス プレッドシートで利用できる公式の詳細について説明します。

関連項目

1. スプレッドシート式

公式はスプレッドシートの要素間の数学的関係を確立し、計算するためのスプレ ッドシートの骨組みです。数字入力は変更する前は同じままですが、公式により 定義されるセルは、セル間で互いに複合的に影響し合う場合であっても参照され たセル内の変更に応じて自動的に変更されます。

参照

スプレッドシート公式は、数値、テキスト、理論値、セル参照などの公式で計算 ができます。例えば一連のセルの和、フィールド内の値の合計、範囲内の最小ま たは最大値、別の公式の丸め結果またはセル入力の絶対値を容易に計算すること ができます。公式はセル間の複合的な相互影響を表現でき、入力可能な数値の限 界値または計算の際の特定条件など計算に関する制約を定義することができます。

公式は一旦セルの中に入力されるとセル内に隠れ、バックグラウンド中で計算を 行い、結果のみを表示します。セル内の公式を見るには、セルを選択してくださ い。スプレッドシートでは、「CGXGridParam::m_nDisplayExpression」を介し て、すべての公式が見えるオプションも用意しています。

スプレッドシートはまたある種の計算をする広範囲の機能も提供します。機能は 個々に公式または他の機能と組み合わせて使用することができます。スプレッド シートは典型的な財政スプレッドシートで見られる機能の他に多くの専門的機能 を提供します。

1.1 式の構文

スプレッドシート公式の一般的な形式は以下の通りです:

= expression ; constraint expression // comment

ここで expression はセルの値を発生させるに必要な計算を定義し、constraint expression は受け入れ可能な数値または計算が行われる際に制限を加え、 comment はセルに付加したい任意の本文を指します。

スプレッドシート公式の expression 部は、数値とそれらの間の関係を定義する演算子を持っているので代数公式のように見えます。

スプレッドシートは公式に以下の規則を用います:

公式はイコール(=)記号で始めなければなりません。セルの中に入力を始めるときに、もし以下の文字のいずれかが最初に来ると、スプレッドシートでは公式が入力されていると自動的に判断します。

0123456789.-@=+

公式には 511 もの文字があります。スペースを入力してもかまいませんが、スプレッドシートはそれを自動的に取り除きます。

1.2 式の値

公式には以下形式の数値のいずれまたは全部が入ってもかまいません。

- 数值、例) 123、-123、12.3。
- 単一セルのアドレス、例) A1、D5、Z100。
- セル範囲のアドレス、例) B12..G29、A1..D5
- 固定座標の前にドル記号(\$)を付けた絶対セル参照(\$A\$1、\$A1、A\$1)。これ は参照するセルが移動またはコピーされたときに更新されません。
- スプレッドシート機能、例) @SUM または@RADIANS、引数付き
- ダブルクォーテーションで挟んだテキスト、例) "The sum is"または"Total"
- ユーザー定義セル名またはセル範囲名、例) TOTALS または PROJECT1。

1.3 式の演算子

スプレッドシートは、C プログラミング言語で使われるすべての算術および論理演 算子をサポートしています。C 言語のアドレス演算子や++演算子のような作用の ある演算子はサポートしていません。スプレッドシートはC 言語では使えない指 数計算演算子(**)およびパーセント演算子(%)を用いることができます。

数値間の関係を定義するのにスプレッドシート公式には以下の演算子があります。

演算子 順位 定義

- %14 単項パーセント
- ** 13 指数計算
- + 12 単項プラス
- 12 単項マイナス

- ~ 12 ビット補数(整数)
- ! 12 論理否定
- * 11 乗算
- / 11 除算
- % 11 剰余(整数)
- +10 加算
- 10 減算
- << 9 左にシフト(整数)
- >> 9 右にシフト(整数)
- < 8 より小さい
- > 8 より大きい
- <= 8 より小さいまたは等しい
- = 8 より大きいまたは等しい
- == 7 等しい
- != 7 等しくない
- & 6 ビット単位の AND、または文字列連結子
- ^ 5 ビット単位の排他 OR(定数)
- |4 ビット単位の OR
- && 3 論理積
- || 2 論理和
- ?:1 条件付き

演算子が複数ある公式内では、スプレッドシートは演算子を上記の順位で高順位のものを先に評価します。すなわち、論理式の中ではAND/OR/NOT 演算子が不等号の後に評価され、算術式の中では乗算/除算演算子が減算/加算演算子の前に実行されます。順位が同一の演算子は左から右へと評価されます。

演算子の順位は評価順位を明示するため括弧を用いることにより解除することが できます。

以下にスプレッドシート演算子について特別に注意すべき点を示します:

- 上記で[(整数)]と記した演算子はオペランドを自動的に整数に変換します。
- &演算子は2つの役割を持ちます。オペランドが数値ならばビット単位のAND 演算子となり、オペランドが文字列ならば2つの文字列を連結する文字列連結子 となります。
- %演算子も2つの役割を持ちます。数字または数値式の後に付くと[パーセント]
 であり、2つの整数式の間に来るとCスタイル[モジュラス]となります。
- *等式/不等式(==および <)を定義する演算子は本文ストリングを語彙的に(アルファベット的に)比較するのに使用することができます。混合したストリングを 語彙的に比較するときには、スプレッドシートはストリングオペランドを数値オペランドよりも下にあるとみなします。
- 条件付き演算子は1番目のオペランドが真(ゼロでない)と評価すると2番目のオペランドを返し、偽(ゼロ)と評価すると3番目のオペランドを返します。
- 条件付き演算子付きの公式内では、2番目および3番目のオペランドは、範囲も 含めスプレッドシートがサポートするどんな形式でも可能です。例えば、式

=@SUM(A1 ?B1..C20 :C10..D15)

は A1 がゼロでないと評価されれば B1..C20 の和を返し、そうでなければ C10..D15 の和を返します。

スプレッドシートは MS Excel など他のスプレッドシートで使われる算術演算子
 についてほとんど受け入れられますが、構文と順位に少し違いがあります。

1.4 式の他のセルを参照

スプレッドシートの真の能力は公式の中に行/列座標またはアドレスを入力することにより、スプレッドシート内の異なったセル間の関係を計算することにあります。

セルをアドレスにより参照する場合:

式内のセルの行と列座標を入力します。例えば、列 D 内の行 5 を参照するには D5 と入力します。

セルの連続グループをアドレスにより参照する場合:

2 つのセルの行と列の座標を参照するブロックのピリオド2つ(..)の両側に入力します。 例えば、スプレッドシートの初めから5 つの列と初めから5 つの行を参照 するには[A1..E5]と入力します。

1.5 スプレッドシートのセル参照

スプレッドシートでは相対、絶対及び間接参照を区別しています。後の方はスプ レッドシート独特のものです。

1.5.1 相対参照

スプレッドシートではセルが参照されると、その位置をアドレスによってではな く公式に関する位置に基づき追跡します。例えば、もしセル A1 内の公式がセル B2 を参照すると、参照されたセルは1行下で1列右であると記憶します。セル A1 内の公式を他の場所(例えば D17)にコピーしたい場合には、公式は新しい場所 の1行下で1列右のセル(例えば E18)を参照します。

1.5.2 絶対参照

絶対参照は元の公式をどこに移動またはコピーしようと変わりません。例えばセルA1内の公式がセルB2を参照し、セルA1内の公式を他の場所(例えばD17)にコピーすると、公式は、前と同じセルB2を参照します。セルの絶対アドレスを指

定するには固定しようとするアドレス座標の前または、行と列両方の座標を固定 するならば両方の座標の前にドル記号(**\$**)を入れます。例えば:**\$B\$2**.

セルアドレスの全部または一部を絶対扱いにするには、固定させておきたいアドレス座標の前にドル記号(\$)を入れます。たとえば:

- B\$5 とするとアドレス全体が絶対扱いになります。
- \$B5 とすると列座標(B)は絶対扱いとなり、行座標(5)は相対扱いとなります。
- B\$5 とすると列座標(B)は相対扱いとなり、行座標(5)は絶対扱いとなります。

セル範囲も相対扱いであるので、セル範囲を移動するときにはその範囲内の公式 内での参照は新しい場所に基づいて更新されます。

絶対範囲参照を指定するには公式内の座標の前にドル記号(\$)を入れます。例えば 範囲[A1..D5]を絶対扱いにするには、参照を[\$A\$1..\$D\$5]と入力します。

セルの一部を絶対扱いに指定するには絶対扱いにしておきたい座標の前のみにド ル記号を入れます。例えば[**\$A1..\$D5**]とすると、セル参照の列座標は固定します が、行座標は新しい場所に基づき調整されます。

1.5.3 セル1 つまたは範囲を名前で参照

セルまたはセルブロックのあらかじめ割り当てた名前を公式内に入力します。

セル1個またはセル範囲に名前を割り当てるには、[SetRangeName]コマンドを 使います。

1.5.4 現在のセル参照

スプレッドシート文脈内の式の場合には、現在のセルを表現する手段が求められ ることがあります。

その例として[組み込みワークシート機能]内に述べる条件付き統計機能および制約 式(Constraint Expressions)の項内に述べる制約式が挙げられます。

現在のセルはどの式内でもポンド記号(#)で示されます。現在のセル付近のセルを 参照するには、[#]の後に、オフセット数値を中括弧({})で挟んで続けます。 オフセットは参照すべきセルのスプレッドシート上での位置で現在のセルとの関 連で示します。

フォーマットは以下の通りです。

#{列オフセット、行オフセット}

- オフセット数値が1つしかない場合には、列のオフセット数値と見なされます。
 例えば、オフセット参照#{-1}とすると現在のセルのすぐ左とみなされます。
- オフセット数値は定数でも式でも可能です。

例:

- #{0,-1} は現セルの上のセルを指します。
- #{-2}は現セルの2列左のセルを指します。
- #{1}は現セルの右のセルを指します。
- #{0,1}は現セルの下のセルを指します。
- @CSUM(C4..C100, #{-1} == "Joe")とすると、左の列に[Joe]ストリングを 持つ範囲[C4..C100]内すべての数値の和を計算します。
- @CCOUNT(C4..C100, # #{0,-1})とすると、範囲[C4..C100]内ですぐ上の セルの中身よりも大きい値を持つすべてのセルの数をカウントします。
- @XVALUE("master.xs3", #)とすると、指定したシートからこの機能が保存されているのと同じセル参照の値を返します。
- /verb/#-1+2/とすると、左のセルからセル数値に2を加えます。

1.6 制約表現

制約とはスプレッドシートに掛かる制限または条件のことです。これは公式に続く代数文で表現されます。制約式はセミコロン(;)と制約条件を公式の後に入力することによりどんな公式にも付加することができます。

制約式は公式が演算する条件または公式の有効結果の範囲を定義します。制約式 は単純な等式/不等式の関係のこともあり、任意の公式のこともあります。数値を 返す有効なスプレッドシート式はまた有効制約式でもあります。しかしセルの数 値を定義する式と違って、制約式はそれが存在するセルを記号[#]を使って参照す ることができます。

例えば、公式

=A1 + A2 ; #2 && #<=B5 || #==C7

は[現セルの値はセル A1 と A2 の和であり、その値は 2 より大きく、セル B5 の 値より小さいか等しいか、またはセル C7 の値に等しい]を意味します。

制約式は、例えば条件付き統計機能内で用いられます。

制約式は上記の例で示す通り、

現セル参照サポート(#)と組み合わせたときに最も利点が発揮されます。

1.7 明示的依存性

あるセルの値が変わるとき、公式内に自動再計算を起動するような暗黙の従属が ないときに再計算をどうしても行わなければならない事例があるかも知れません。 このオプションはバックスラッシュ(\)を従属公式の最後に付けることにより表示 されます。例えば、公式:

=@SUM(A1..A20)\D50

はスプレッドシートに D50 の内容が変化するときにはいつでも@SUM(A1..A20) を再計算するように指示します。この機能は、従属公式内に参照されているセル 範囲以外にセル参照を生ずるオフセット参照を含む制約式があるときには特に重 要です。このような状況においては、自動再計算は必ずしも起動されません。例 えば、公式:

@CCOUNT(C4..C100, # #{0,-1})

はすぐ上のセルの内容より大きい値を持つ範囲[C4..C100]内のすべてのセルの数 をカウントします。C4 を評価するためには、明示範囲[C4..C100]の一部でない C3 と比較しなければなりません。明示従属を示さなければ、C4 は正しく評価さ れることはありません。この場合、従属を以下の通り表示します。

@CCOUNT(C4..C100, # #{0,-1})\C3..C99

これは範囲[C3..C99]内のいずれかのセルが変化するときにはいつでもスプレッド シートに再計算するよう命令しています。

2. 組み込み関数

スプレッドシート関数はプログラムが提供するあらかじめ定義した公式です。こ れは長い複雑な公式の仕事を行う場合の近道を提供します。数学的および統計関 数は、数の列を合計し、平均を計算し、最小または最大値を決定し、または公式 の結果を丸めるのに使われます。他の関数は投資の将来値や、あるセル範囲と別 の範囲との乗算の積を計算するようなもっと専門とした目的に使用されます。テ キスト・ストリング処理のような算術演算子では扱えない計算を行う関数もあり ます。

スプレッドシート関数には以下の種類があります。

- 数学的関数
- 統計関数
- 条件付き統計関数
- 文字列
- 論理関数
- デジタル論理関数
- 財務関数
- 日付/時間関数
- その他の関数
- 組み込みツール

2.1 数学関数

数学的関数は絶対値を決定、数の整数部分を見つけます。 または定数値を確立す ると言った計算を行います。このような作業は公式で行えますが、関数を使うと 時間と手間が省かれます。

スプレッドシートは、sin.、cos.、tan.、arc sin.、hyperbolic sin.、hyperbolic arc sin.等の広範囲の三角関数並びにベクトルや行列式演算および処理を行うことができます。

数学的関数は数値を引数とし、数値を返すことにより計算を行います。

2.2 統計関数

統計関数は、最小、最大および平均計算のような集合演算を行います。

スプレッドシートはまた引数一覧として表現された数のグループについて演算を 行い、更に高度な統計試験関数も行うことができます。これには F-Test、T-Test、 相関係数、偏差およびすべての共通平均があります。

統計関数は数値を返します。

2.3 条件統計関数

条件付き統計関数は最後の引数について、スプレッドシートが引数リスト内の各 セルについて評価する制約式であることを除いては更に統計集合関数のように働 きます。

計算には制約基準を満足するセルだけが含まれます。制約式は数値結果を出すど んなスプレッドシート式であってもかまいません。

条件付き統計関数は数値を返します。

2.5 論理関数

論理関数は引数がある基準を満たす場合にはある値を返し、そうでない場合には 別の値を返します。 論理関数は条件文への付加として使われます。

論理関数は1、0または数値を返します。

2.4 文字列関数

ストリング関数は文字列を処理し、評価します。例えばストリング関数は文字列 の長さを返したり、範囲内で最初の文字を発見したり、文字列を大文字から小文 字またはその逆に変えたり、ある文字列を別の文字列と入れ替えたりすることが できます。

ストリング関数は文字列または数値を返します。

2.6 デジタル論理関数

デジタル論理関数は AND、OR、NOT などのデジタル論理演算を行います。

デジタル論理関数は 0、1 または-1(未知数)を返します。整数部分が 0 または 1 に等しくない値は、未知数と見なされます。未知入力値は未知出力値を生ずる可 能性があります。

2.7 財務関数

財務関数は年賦金の将来の額をある利率で計算、定額償却、2 段階下降償却、また は投資の支払期間のような共通財務計算を行います。スプレッドシート内の財務 関数は年賦金、キャッシュフロー、資産、債券および財務省証券を扱うことがで きます。

財務関数は1変数以外が全部分かっているキャッシュフローを解くのにとても有 用であります。例えば、投資の現在の額、利率および定期的支払いが分かってい る場合には、@FV Function を使って投資の将来の額を計算することができます。 将来の額と他の変数が分かっているが現在の額を知りたい場合は、@PV Function を用いることができます。

多くの財務関数は日計数ベースを指定する必要があります。日カウントベースと は1月内の日数と1年内の日数をカウントする方法を示します。大抵の証券の財 務関数には4通りの日カウントベースがあります。すなわち、30/360、実際/実 際、実際/360、および実際/365 です。30/360 日カウントベースでは1ヶ月当たり 30 日で1年当たり 360 日(12ヶ月×30日)とみなします。スプレッドシートは、また[月末]法則に従います。これは証券では月の最後の日に利子を支払い、

常に月の最後の日に利子を発生させるというものです。30/360 日カウントベース では2つの日付の間の日数を計算するのに特別な法則を適用します。

例えば Start_Date=D1/M1/Y1 で、End_Date=D2/M2/Y2 であるとします。

1.1.D1=31 ならば、スプレッドシートは D1 として 30 を使います。

2. 2. D2=31 ならば、スプレッドシートは 31 を使います(D1=30 または D1=31 の場合を除く)。

3. 後者の場合スプレッドシートは 30 を使います。3. D1 が 2 月(D1=28 または 閏年は 29)の最後の日ならば、スプレッドシートは D1 として 30 を使います。

4. D2 が 2 月(D1=28 または閏年は 29)の最後の日で、D1 も 2 月の最後の日ならば、

スプレッドシートは D2 として 30 を使います。

スプレッドシートの財務関数が用いる特別引数は表 TODO:に定義してあります。

財務関数は表[利率]計算に用いる利率に定義してあります。利率は年率、月率、4 半期率で指定することができますが、期間に使用する増分に適合していなければ なりません。特記がない場合、利率は年利となります。

現在額 投資の現在額。投資から既に受け取ったか約束された額を示します。

期間用立て金、投資または減価を計算する期間。期間は月、4半期または年で定義することができますが、利率を定義する増分に適合していなければなりません。

将来の額 投資の将来の額。現在の額、利率及び期間が与えられた場合。

cost 原価 減価する資本資産の当初の原価。

salvage value 残余額 原価期間が終了した後の資本資産の残額。

許容寿命 減価できる品目の許容寿命。

yield 利回り 財務手段の価格に等しい期待される将来のキャッシュフローの現在額 を生ずる利率。

price 価格 財務手段の利回りに等しい期待される将来のキャッシュフローの現在額。

coupon rate 回数 年間の利札支払い回数。

frequency 間隔 年間の利札支払い回数。

basis ベース 計算に使う日計数ベース。

関数関連固定収入証券には引数として通常特別の日付を必要とします。すなわち、 発行日、決済日、最初の利札日、最後の利札日、証券満期日です。指定されたと きには以下の制約があります。

決済満期発行

最初の利札満期発行

最後の利札満期発行

2.8 日付/時刻関数

日付/時間関数は特別な日付、月、年、時、分または秒に対応する値を返します。 セル内に現在のシステム時間および日付を入力するのに日付/時間関数を用いるこ ともできます。

このような関数は受取勘定を管理したり、試験回数を計算するなど多くの可能性を開きます。

スプレッドシートは、他の人気の高い表計算プログラムと同じ規則を使って日付 および時間情報を内部に保存します。

- 日付は1899.12.31からの日数に等しい整数として示されます。
- 従って1900.1.1は1に等しくなります。
- \時間は真夜中から始まる1日を小数として示されます。例えば6:00AMは、

0.25(1日24時間の1/4)として保存されます。

この規則を使って日付と時間の値を一緒にすることができます。例えば日付/時間 値

1.25 は 1900.1.1、6:00:00AM に対応します。

2.9 その他の関数

その他の関数は、参照を特定のセルまたは範囲に返したり、N番目の引数を引数 リストから返すなどの種々の計算を行います。

2.10 組み込みツール

はめ込みツールは、スプレッドシート内の強力な機能であります。その力の一部 は単に1つの数値でなく一連のデータを返す能力にあります。この機能は行列式 乗算および[生きた]再計算のような非スカラ演算(non-scalar operations)を通常 のスプレッドシート関数を使うのと同じ容易さで行います。

はめ込みツールは数値を隣接したセルのグループ内に保存します。これら隣接セルはその隣接セル上の明示従属を持った一定公式に設定されます。例えば、セル B2内のはめ込みツールはセル B3内に公式=1.3459\B2を作成するかも知れません。

B2 が生成できる 公式 =1.3459\B2 in cell B3.この公式はセルが現在定数 1.3459 を含んでいるが、その値はセル B2(はめ込みツールを持っているセル)の 中身に従属することを示します。

この明示従属の考え方は再計算にとって重要です。これは B3 を参照するセルは B2 が再計算された後でないと再計算されないことを保証します。このことにより、 はめ込みツールにより作成されたデータは常に現時点のものであることを保証し ます。

はめ込みツールは通常の関数のように見え、まさにスプレッドシート内の他の公 式のようにコピー、移動、フォーマットすることができます。ただし、1つの重要 なガイドラインに従う必要があります。はめ込みツールを同一公式内で他のはめ 込みツールと組み合わせることはできません。例えば、公式

@INVERT(@MMUL(A1..C4,F1..I3))

は許されません。

3.1 数学関数

- @ABS(X) -X の絶対値
- (a) ACOS(X) X O arc cos
- @ASIN(X) $X \oslash$ arc sin
- @ATAN(X) X X の 2 象限 arc tan
- @ATAN2(X,Y) Y/X の4象限 arc tan
- @CEIL(X) X より大きいか等しい、最も小さい整数
- @COS(X) X O cos
- @COSH(X) X の双曲線余弦
- @DEGREES(X) ラジアンで表現した角度を度()に変換
- @DET(M) 行列範囲 M の行列式。これは正方形行列でなければなりません。
- @DOT(R1,R2) ベクトルR1とR2のドット積
- @EXP(X) X 乗に上げた e
- @FACT(N) N! の値
- @FLOOR(X) X より小さいか等しい、最も大きい整数
- @FRAC(X) X の小数部分
- @GAMMA(X) X にて評価したガンマ関数の値
- @GRAND ゼロ平均および単位分散付きのガウス無作為数への 12 番目の 2 項近 似
- @INT(X) X の整数部分

- @LN(X) X の自然対数(底 e)
- @LNGAMMA(X) X にて評価したガンマ関数の対数底 e
- @LOG(X) X の対数底
- @LOG10(X) Xの対数底10
- @LOG2(X) X の対数底 2
- @MOD(*X*, *Y*) *X*/Y の剰余
- @MODULUS(X, Y) X/Y のモジュラス
- @PI pの値
- @POLY(X,...) X 内の N 番目の多項式の値
- @PRODUCT(X,...) 引数リスト内のすべての数値の積
- @RADIANS(X) 度で表現した角度をラジアン()に変換
- @RAND 区間上の均一無作為数[0,1]
- @ROUND(X, n) 小数点以下 n 桁(0 から 15)に丸めた X
- @SIGMOID(X) シグモイド関数の値
- @SIN(*X*) *X* sin
- @SINH(X) $X \oslash$ hyperbolic sin
- @SQRT(X) X の正の平方根
- @SUMPRODUCT(*R1, R2*) ベクトル *R1* と *R2*のドット積。 *R1* と *R2*の次元 は等しくなります。
- @TAN(*X*) *X* tan
- @TANH(X) $X \oslash$ hyperbolic tan

@TRANSPOSE(M) - 行列 M の転換

@VECLEN(...) - その引数の 2 乗和の平方根

3.2 統計関数

@AVG(...) - 引数の平均(算術平均)

@CORR(R1, R2) - 範囲 R1 および R2 内の対データのピアソン積・モーメント 相関係数

@COUNT(...) - 空白でない引数の個数

@F(*M*, *N*, *F*) - スネデカ *F* 分布の積分。 *M* および *N* は負の無限大から *F* までの 自由度

@ERF(*L[, U]*) -0 および *L* 間を積分したエラー関数。 *U* を指定すると *L* と *U* の 間

@ERFC(L) - L と無限大間で積分した補エラー関数

@FORECAST(...) - ある X について予想された Y

@FTEST(*R1, R2*) - 範囲 *R1* および *R2* で指定されたデータの分散に関する 2 面 *F* 試験の有効レベル()

@GMEAN(...) - その引数の幾何平均

@HMEAN(...) - その引数の調和平均

@LARGE(R, N) - 範囲 R の N 番目に大きい値

@MAX(...) - その引数の最大値

@MEDIAN(...) - 範囲 R1 の中位数

@MIN(...) - その引数の最小値

@MODE(...) - 最頻値すなわち最も頻繁に発生する値

@MSQ(...) - その引数の 2 乗の平均

@PERCENTILE(*R*, *N*) - *R*の中の*N*番目の百分順位にある範囲*R*からの値

@PERCENTRANK(*R*, *N*) - 範囲 *R* 内の値の内 *N* 番の百分順位

@PERMUT(S, T) - 順番が有効なセットTから選ぶことのできるS個の物の数

@PTTEST(R1, R2) - 範囲 R1 および R2 に含まれる対試料の2面F試験の有効 レベル()

@QUARTILE(*R*, *Q*) - 範囲 *Q* 内のデータの 4 分数 *R*.

@RANK(E, R[, O]) -範囲 R 内の数字引数 E のランク

@RMS(...) - その引数の2 乗平均の平方根

@SMALL(*R*, *N*) - 範囲 *R* 内の *N* 番目に小さい数

@SSE(...) - その引数の和の平方エラー。@VAR(...) @COUNT(...)と同等。

@SSQ(...) - その引数の2乗の和

@STD(...) - その引数の母集団標準偏差

@STDS(...) - その引数の試料標準偏差(N-1 重みづけ)

@SUM(...) - その引数の和

@T(*N*, *T*) -

学生の積分 T-N は負の無限大から T までの自由度

@TTEST(R, X) -範囲 R -内に含まれる母集団試料の 2 面単一母集団 T-Test の有 効レベル()

@TTEST2EV(*R1*, *R2*) -集団分散が等しい範囲 *R1* および *R2* の 2 面の 2 重母集 団 *T*-Test の有効レベル()

@TTEST2UV(R1, R2) -母集団分散が等しくない範囲 R1 および R2 の 2 面 2 重 母集団 T-Test の有効レベル()

@VAR(...) - その引数の試料分散(N重み付け)

@VARS(...) - その引数の試料分散(N-1 重み付け)

@VSUM(...) - フォーマットしたセル数値の精度および丸めを用いたその引数の [視和]

3.3 条件統計関数

@CAVG(..., C) - 条件付き平均

@CCOUNT(..., C) - 条件付きカウント

@CMAX(..., C) - 条件付き最大

@CMIN(..., C) - 条件付き最小

@CSTD(..., C) - 条件付き試料標準偏差(N 重み付け)

@CSTDS(..., C) - 条件付き試料標準偏差(N-1 重み付け)

@CSUM(..., C) - 条件付き和

@CVAR(..., C) - 条件付き母集団分散(N 重み付け)

@CVARS(..., C) - 条件付き母集団分散(N-1 重み付け)

3.4 文字列関数

@CHAR(*N***)** - コード *N* で表される文字

@CLEAN(S) - 文字列 S から印刷されない文字をすべて取り除くことにより形成 される文字列

@CODE(S) - 文字列 S 内の最初の文字の ASCII コード

@EXACT(*S1, S2*) -文字列 *S1* が文字列 *S2* と完全に一致する場合には真(1)を返します。そうでなければ偽(0)を返します。.

@FIND(S1, S2, N) -文字列 S1 内での文字列 S2 の最初の発生のインデックス

@HEXTONUM(S) - 文字列 S の 16 進解釈の数値

@LEFT(S,N) - 文字列 S 内の左側 N 文字より構成される文字列

@LENGTH(S) - 文字列 S 内の文字数

@LOWER(S) - 小文字に変換した文字列 S

@MID(S, N1, N2) - 文字列 S 内の位置 N1 から始まる長さ N2 の文字列

@NUMTOHEX(X) - X の整数部分の 16 進表現

@PROPER(S) - 各々の語の最初を大文字にした文字列 S

@REGEX(*S1, S2*) -文字列 *S1* が文字列 *S2* と完全に一致する場合には真(1)を返します。そうでなければ偽(0)を返します。*S1* を正規の式と解釈することにより [ワイルドカード]比較を行うことができます。

@REPEAT(S,N) - 文字列S を N 回繰り返します

@REPLACE(S1, N1, N2, S2) - 文字列 S1 内の位置 N1 から始まる N2 文字を文字列と入れ替えることにより形成される文字列.

@RIGHT(S,N) - 文字列 S 内の右側 N 文字より構成される文字列

@STRCAT(...) - そのすべての引数の連結

@STRING(X, N) - X の小数点以下 N 桁までの数値を示す文字列

@STRLEN(...) - その引数内のすべての文字列の合計長さ

@TRIM(S) - 文字列 S からスペースを除くことにより形成される文字列

@UPPER(S) - 大文字に変換した文字列S

@VALUE(*S*) - 文字列*S* で表される数値。*S* が数値を表さない場合には 0。

3.5 論理関数

@FALSE - 論理值 0

@FILEEXISTS(*S*) - *S*を読むために開くことができれば 1。 そうでなければ 0。
 @IF(*X*, *T*, *F*) -*X* がゼロでないと評価されれば *T* の値。 *X* がゼロと評価されれば *F*。

@ISERROR(X) - X がエラー[を含んでいる]ならば1、そうでなければ0。

@ISNUMBER(*X*) - *X* が数値ならば 1、そうでなければ 0。

@ISSTRING(*X*) - *X* が文字列ならば 1、そうでなければ 0。

@TRUE - 論理值1

デジタル論理関数

@AND(...)-いずれかの引数が**0**ならば**0**。 すべての引数が**1**ならば**1**。 それ 以外の場合は-1。

@NAND(...) - 引数がすべて 1 ならば 0。 いずれかの引数が 0 ならば 1。 それ 以外の場合は-1。

@NOR(...) - 引数のいずれかが1ならば0。 引数がすべて0ならば1。 それ以外の場合は-1。

@NOT(X) - X =1 ならば 0。 X=0 ならば 1。 それ以外の場合は-1。

@OR(...) - 引数がすべて 0 ならば 0。引数のいずれかが 1 ならば 1。 それ以外の場合は-1。

@XOR(...) - 引数のいずれかが 0 でないか 1 ならば 1。 それ以外の場合は、値
 1 を持つ引数の合計個数が偶数ならば 0、値 1 を持つ引数の合計個数が奇数ならば
 1。

3.6 財務関数

@ACCRINT(I, Ft, S, R, P, F[, B]) - 定期的に利子を払う証券の発生利子

@ACCRINTM(I, S, R, P[, B]) - 満期に利子を払う証券の発生利子

@COUPDAYBS(S, M, F[, B]) - 利札期間の初めから決算日までの日数

@COUPDAYS(S, M, F[, B]) - 決算日が入っている利札期間内の日数

@COUPDAYSNC(S, M, F[, B]) - 決算日から次の利札日付までの日数

@COUPNCD(S, M, F[, B]) - 決算日後の次の利札日

@COUPNUM(S, M, F[, B]) - 決算日と満期日との間の利札支払い回数

@COUPPCD(S, M, F[, B]) - 決算日前の前回(最近)利札日

@CTERM(R, FV, PV) - 投資のための複利計算期間数

@CUMIPMT(R, NP, PV, S, E, T) - 開始時期 S と終了時期 E 間の貸付金に掛かる 累積利子

@CUMPRINC(R, NP, PV, S, E, T) - 開始時期 S と終了時期 E 間の貸付に対して 払う累積元金

@DB(C, S, L, P[, M]) - 定額償却分

@DDB(C, S, L, N) - 2 段階下降償却分

@DISC(S, M, P, R[, B]) - 証券に対する割引率

@DOLLARDE(FD, F) - 分数で表したドル額を小数に変換

@DOLLARFR(DD, F) - 小数で表したドル額を分数に変換

@DURATION(S, M, R, Y, F[, B]) -

額面\$100 と仮定した場合の証券のマコーレー期間

@EFFECT(NR, NP)-実効年利率を返します。

@FV(P, R, N) -年賦金の将来額

@FVSCHEDULE(P, S) -一連の利率を複利にした後の当初投資の将来額

@INTRATE(S, M, I, R[, B]) - 丸々投資した証券に対する利率

@IPMT(*R, P, NP, PV, FV[, T]*)-定期的、一定支払いおよび一定利率に基づく投資の特定期間の利子支払い

@IRR(G, F) - 投資に対する還付の内部率。(@XIRR および@MIRR も参照)

@MDURATION(S, M, R, Y, F[, B]) - 額面\$100 と仮定した場合の証券の修正 マコーレー期間 @MIRR(CF, FR, RR) - 一連の定期的キャッシュフローに対する修正内部還付率

@NOMINAL(ER, NP) - 名目年利率

@ODDFPRICE(*S, M, I, FC, R, Y, RD, F[, B]*) -1 期目の日数が半端な証券 に対して、額面 \$100 あたりの価格

@ODDFYIELD(*S*, *M*, *I*, *FC*, *R*, *PR*, *RD*, *F*[, *B*]) -1 期目の日数が半端な証券の利回り.

@PMT(PV, R, N) - 貸付金の定期的支払い

@PPMT(*R, P, NP, PV, FV, T***)**-定期的、一定支払いおよび一定利率に基づく 投資に対する特定期間の元金への支払い

@PRICE(S, M, R, Y, RD, F[, B]) -定期利子を払う証券の額面\$100 当たりの 価格

@PRICEDISC(S, M, D, RD[, B]) -割り引きした証券の額面\$100 当たりの価格

@PRICEMAT(S, M, I, R, Y[, B]) -満期日に利子を払う証券の額面\$100 当たりの価格

@PV(P, R, N) -年賦金の現在額

@RATE(FV, PV, N) - 将来額 FV に達するに必要な利率

@RECEIVED(*S*, *M*, *I*, *D*, *[*, *B]*) - 丸々帰属している証券に対して満期日に受け 取る額

@SLN(C, S, L) - 定額償却額

@SYD(C, S, L, N) - [年数字和] 償却額

@TBILLEQ(S, M, D) -米国財務省短期証券の債券に相当する利回り

@TBILLYIELD(S, M, D) - 米国財務省短期証券に対する利回り

@TERM(P, R, FV) - 投資に対する支払期間数

@VDB(C, S, L, S, E) -2 期間の間の定額償却

@XIRR(G, V, D) -間隔が変わる一連のキャッシュフローに対する還付の内部率

@XNPV(*R, V, D*) -間隔が変わる一連のキャッシュフローに対する正味現時点額 を返す

@YIELD(S, M, R, PR, RD, F[, B]) - 定期利子を払う証券の利回り

@YIELDMAT(*S, M, I, R, PR[, B]*) - 満期日に利子を払う証券の年間利回り 3.7 日付/時刻関数

@DATE(Y, M, D) - 年 Y、月 M、および日 D に対する日付の値

@DATEVALUE(S) - ある文字列 S に対する対応日付の値

@DAYS360(S, E) - 30/360 日計数方式に基づく 2 つの日付間の日数

@DAY(DT) - 日付/時間数値 DT 内の日付数

@EDATE(S, M) -開始日(M)前後の月数 (S)を示す日付/時間の値

@EOMONTH(*S*, *M*) -*M* が正ならば *S* よりも *M* ヶ月後、*M* が負ならば M ヶ月前の月の最後の日を示す日付/時間の値

@HOUR(DT) - 日付/時間の値DTの時間の値(0~23)

@MINUTE(DT) - 日付/時間の値DTの分の値(0~59)

@MONTH(DT) - 日付/時間の値 DT の月の値

@NETWORKDAYS(S, E[, H]) - 終末および祝日を除く S に始まり E までの労働
日数合計

@NOW - 現方式の日付および時間の日付/時間の値

@SECOND(DT) - 日付/時間の値DT 秒の値(0~59)

@TIME(H, M, S) -時間(H)、分(M)、および秒(S)に対する時間の値

@TIMEVALUE(S) - 任意の文字列(S)に対する対応時間値

@TODAY - 現方式の日付の日付値

@WEEKDAY(D) - 曜日 D を示す整数。1 は日曜、7 は土曜

@WORKDAY(S, D[, H]) - 範囲 H 内の日として指定した週末および祝日を除き、 D が正ならば S より D が負ならば S より前

@YEAR(DT) - 日付/時間の値 DT 年の値

@YEARFRAC(S, E[, B]) -開始日(S)と終了日(E)との間の日数により示す年の部分

3.8 その他の関数

@CELLREF(N1,N2) - 列 N1 および行 N2 内のセルへの参照

@CHOOSE(N, ...) - リストからの N 番目の引数

@COL(C) - C により参照されたセルの列アドレス

@COLS(R) - 指定した範囲 R 内の列数

@HLOOKUP(X, S, R) - X より R 行下の範囲 S 内セルの値

@INIT(X1,X2) - スプレッドシートが繰り返し計算をしているとき最初の再計算 内の最初の引数およびそれに引き続くすべての再計算内の2番目の引数

@INTERP2D(R1, R2, N) - 2 元ベクトルの内挿値

@INTERP3D(R, X, Y) - 3 元ベクトルの内挿値

@MATCH(V, R[, T]) - 位置決め基準Tに基づく値Vの範囲R内での相対位置

@N(R) - 範囲 R 内での最上部左のセルの数値

@RANGEREF(N1, N2, N3, N4) -座標 N1 から N4 で規定される範囲への参照

@ROW(C) - Cにより参照されるセルの行アドレス

@S(R) - 範囲 R 内の最上部左のセルの文字列値

@VLOOKUP(X, S, C) - 範囲 S 内で X の C 列右セルの値

注:セル参照の範囲という結果を返すスプレッドシート関数もあります。

スプレッドシートは再計算のパターンを決定するのにこのような間接的参照は含 みません。

これら関数を使う前には注意深く計画します。詳しくは本章最後の項、計算した セル参照を参照してください。

3.9 組み込みツール

@DFT(R) - 範囲 R の離散フーリエ変換

@EIGEN(M) - 行列 M の固有値

@FFT(R) - 高速フーリエアルゴリズムを使う範囲 R の離散フーリエ変換

(@FREOUENCY(*R*, *B*) - 値 *R* に 1 組の間隔 *B* を付けて回数分布を返します

@INVDFT(R) - 範囲 R の離散フーリエ変換の逆

@INVERT(*M*) - 行列 *M* の逆

@INVFFT(R) - 高速フーリエアルゴリズムを使う範囲 R の離散フーリエ変換の 逆

@LINFIT(X,Y) - 直線最小2 乗合わせ。この関数は@POLYFIT(X,Y,1)と同等です

@LLS(A, Y) -式 AX=Y の過剰測定システムへの1次最小2乗の解X.

@MMUL(M1, M2) - 行列 M2 と行列 M1 を掛け合わせた積

@PLS(X, Y, d) -最小2乗多項式モデルY=P(X)を分析する。 但しP は等級 d の 多項式 @POLYCOEF(X, Y, d) -多項式合わせ Y=P(X)の最小2 乗計数。 但しP は等級 d の多項式

@TRANSPOSE(M) - 行列 M の転換

@TREND(NX, KX, KY) - x と y の現在値があるとして、新しい x の値に対する y の値

注:

はめ込みツールは他の関数内、または単一公式内の算術演算に入れてはいけません。しかしはめ込みツールは他の関数と全く同じくコピー、移動およびフォーマットすることができます。

4. スプレッドシート組み込み関数の使用

幾つかの補足は有りますが、式や他の要素を入力するのと同じ方法で関数をセル に入力できます。

- ・関数名を入力してください。スプレッドシートは文字列を関数として認識します。
 関数名は関数の実行内容の省略形です。例えば、"ABS"は絶対値を計算します。

 "ROUND"は桁位置の丸めを行い、"AVG"は要素の平均を計算します。"@"を関数
 名の前に置く事ができますが、それは必須ではありません。
- ・関数名を入力した後、括弧で囲まれた引数を入力してください。ほとんどの関数は、実行のために1つまたはそれ以上の引数が必要です。例えば、"AVG"関数は2つまたはそれ以上の引数の平均を求めます。"LENGTH"関数は要素が文字列の場合にその文字列の長さを返します。
- 唯一の関数構文で指定された正確な順序で、関数に必要な引数を使用してください。もし他の引数や、間違った順序で入力した場合、スプレッドシートはそれらを誤って解釈するか、エラーメッセージを返します。
- この章のすべての関数名は大文字で入力されますが、エントリの大文字または小 文字で入力することができます。

4.1 引数

引数は関数が実行中に使用する値を指定します。引数の数や型、形式は関数ごと に異なります。引数は数値型、セルまたは範囲の参照、文字列の場合がほとんど です。大抵の関数は、少なくとも1つの引数を持ちます。

以下にスプレッドシート関数において使用される引数の型の違いを示します。

引数の例

数值 123

セル番号 A10

セルの選択範囲 F9..F99

文字列 "Quarterly Report"

4.2 関数に演算子を使用

関数の結果はスプレッドシートが計算を扱う順序に依存します。演算子の詳細や 優先順位は Calculations 章を参照してください。

4.3 計算済みセルの参照

"CELLREF"、"RANGERE"などの幾つかのスプレッドシート関数は、セルの参照 範囲、あるいは選択範囲そのものを結果として返します。これは強力な機能です が、スレッドシートは再計算順序の決定時にこれらの間接的参照を考慮に置く事 ができないため、使用には注意が必要です。同様の注意が条件付き統計関数に用 いられる constraint exclikions にも当てはまります。原則的に、関数によって間 接的参照されたセルは自動的には再計算されません。スプレッドシートは再計算 に対して明示的な従属を関連付けた特別な構造を提供します。

スプレッドシートは明示的な従属の変更が無い限りスプレッドシートを再計算し ないため、関数から間接的に参照されるセルの値を変更する場合は、強制的に再 計算を行う必要があります。

例えば、A1 と A2 セルで定義された制限に含まれる C3 から J100 の数値をカウ ントしたい場合、スプレッドシートの計算式は以下の通りです。

@CCOUNT(C3..J100,#A1 && #<A2)
この計算式は、C3 から J100 の範囲内の数値を正確にカウントします。しかし、 A1 セルの値を変更した場合、A1 は制約式に基づいて間接的にのみ参照されるため、スプレッドシートはこの結果を自動的に再計算しません。

- スプレッドシート全体を再計算するには、再計算() コマンドを呼び出す必要が あります。さらに再計算用のメニューを Recalc()コマンドを呼ぶアプリケーシ ョンに追加します。
- セルを変更し、空白を追加して"@CCOUNT"式が入力されたセル上で[Return]
 キーを押下します。
- フォームに以下の式を入力した場合には、明示的な依存関係を使用して上記制限
 を回避する必要があります。

@CCOUNT(C3..J100,#A1 && #<A2)\A1\A2

スプレッドシートは A1、A2 の従属関係を考慮し、期待通りにスプレッドシート を更新します。

もう一つのアプローチは、式を参照するセルと直接条件文字列を構築することです。例えば、

@CCOUNT(C3..J100, @STRCAT("#",A1,"&_明示的な従属については、明示的従 属の項で詳細に記載してあります。

5. スプレッドシートエラーメッセージ

スプレッドシートは様々なエラーをチェックします。エラーのタイプによって、 最近のエラーメッセージは影響を及ぼすセル内、メッセージライン、スプレッド シートのメッセージダイアログ内に表示されます。

5.1 エラーの種類

5.1.1 関数エラー

関数内で生じたエラーは、発生したエラーと共に関数名が表示されます。

5.1.2 構文エラー

参照

このエラーは、計算式の入力中にのみ生じます。計算式の入力を完了した時、ス プレッドシートは計算式を解読し、内部的表現に変換しようと試みます。もしこ れが不可能な場合、問題の式を表示しつつ"編集モード"に切り替わり、テキスト カーソルをテキストの問題箇所の先頭に置き、エラーメッセージを表示します。

問題点を修正しないとスプレッドシートは次へ進めません。

5.1.3 式の評価エラー

式の評価エラーは、スプレッドシートが式を解読して内部的表現に変換したもの の、式としては評価が不可能で、数値や文字列式を正しく生み出せない場合に生 じます。あるオペランドや括弧に間違いがある式にも間接的に起こりえます。浮 動少数点計算が正しく実行できなかった結果としても生じます。 計算式の関係と して参照されるセルや範囲内にエラーの要因が有る場合もあります。また、スプ レッドシート組込み関数の評価において発生する場合もあります。

5.2 エラーメッセージのサマリー

引数は整数でなければなりません

"@FACT"には整数型ではない引数が渡されています。

引数がセルでも範囲でもありません

"@@"にはセルでも範囲でもない引数が渡されています。

引数が範囲外です

関数への引数が、関数、その他の引数の正しい範囲内に有りません。

引数は数値でなければなりません

この関数は数値、数値型の値を戻り値とする式、数値型の値を含むセルの参照といった数値型の引数が必要です。

引数は正の値でなければなりません

この関数の引数は全て正の値です。

条件文を解析できません

スプレッドシートに不適切な条件式が存在します。

内挿が見当たりません

"@INTERP2D"または"@INTERP3D"は補間値を見つける事が出来ません。

キャッシュフローシリーズは範囲でなければなりません

"@NPV"及び"@MIRR"は、キャッシュフローシリーズを単一列、または単一行 を表す範囲で有る事を要求します。

キャッシュフローシリーズは単一の列または行でなければなりません

"@NPV"及び"@MIRR"は、キャッシュフローシリーズを単一列、または単一行 を表す範囲で有る事を要求します。

セルのオペランドがエラー状態を含んでいます

エラーが生じたセルから参照されたセルがエラー条件を含みます。

セル参照が範囲外です

A1 から FAN32767 を超えた範囲のセルの参照が行われました。

係数行列が1次的に従属した列を持っています

一次最小二乗("@LLS")問題 Ax=b の解が唯一であるためには、A 列が一次的 に独立している事が必要です。

列オフセットが範囲外です

"@VLOOKUP"関数に対する 3 番目の引数は、0 より小さいか、2 番目の引数に おいて指定される範囲より大きいオフセットを指定します。

"As Needed"では制約チェックがサポートされません

制約チェックは再計算が"As Needed"で設定された場合にはサポートされません。

エラー標識を含んでいます

グラフに対する1つ、またはそれ以上のセルにエラー標識が含まれます。スプレ ッドシートのグラフ描画の前にこのエラーを解決する必要があります。

実数根が見当たりませんでした

"@IRR"は実数根を見付ける事が出来ませんでした。この事は"@IRR"に渡され たデータが恐らく間違っている事を示します。

数はゼロ未満です

数を要求する関数に負の引数を渡しました。 例えば、"@LEFT"では、文字列の 左端から-2 文字は指定できません。

データセットサイズは3でなければなりません

"@LIMIT"及び"LINCOEF"はデータセットのサイズに3以上を要求します。

データセットサイズは多項式次数+2 でなければなりません

"@PLS"、"@POLYFIT"、"@POLYCOEF"はデータセットのサイズが多項次 数+2 以上を要求します。

日付シリーズは単一の列または行でなければなりません

"@XIRR"、"@XNPV"は引数 D(データシリーズ)が単一行、または単一列とな る事を要求します。

小数点位置が範囲外です

"@STRING"は引数の小数点位置に 0 から 15 の間のみを取ります。

自由度は 0 でなければなりません

"@F"及び"@T"は自由度を O より大として要求します。 自由度は数学的に O またはそれ以下には定義されません。

次元は2のべき乗でなければなりません

"@FFT"及び"@INVFFT"は行列の次元が2のべき乗で有る事を要求します。同 等の機能を持つが多少速度の遅い"@DFT"、"@INVDFT"では要求されません。 ゼロで除算を行おうとしています

これは **0** による除算を行おうとした場合に生じます。スプレッドシートは、空または文字列を含むセルは数値計算においてゼロとみなします。

引数を受付けません

"@PI"、"@TRUE"、"@FALSE"、"@RAND"、"@GRAND"など、幾つかの スプレッドシート組込み関数には引数は不要です。

ドメインは**-1**です < x < 1

"@ATANH"は引数として-1<x<1 の値のみを取ります。

ドメインは-1 です <= x <= 1

"@ACOS"、"@ASIN"は引数として-1<=x<=1の値のみを取ります。

ドメインは 0 です <= x <= 170

"@FACT"は引数として 0<=x<=170 の値のみを取ります。(大抵のプラット フォーム)

ドメインは 0 です <= x <= 33

"@FACT"は引数として 0<=x<=33 の値のみを取ります。(VAX プラットフォーム)

ドメインは × 0 です

"@LN"、"@LOG2"、"@LOG"、"@GAMMA"、"@LNGAMMA"では引数は **0**より大きい値のみを取ります。

ドメインは **x** = 1

"@ACOSH"では、引数は1より大きい値のみを取ります。

"End Period"は=1 でなければなりません

"@CUMIPMT"、"@CUMPRINC"は引数 E("end period")に 1 以上の値を 要求します。

"End Period"="Start Period"でなければなりません

"@CUMIPMT"、"@CUMPRINC"、"@VDB"は、引数 E("end period")が S("start period")より大きいか等しい事を要求します。

行の最後が\です

١

\はエスケープシーケンス記号であり、解釈するための他の文字が続いてなければ なりません。解釈のための文字がありません。

行の最後が上付き文字指令です

テキストを図形の意味において示す場合、へは上付き文字記号です。 **y**へ**2 y** の **2** 乗を意味します。このメッセージは文字列の最後が への場合に表示されます。

行の最後が下付文字指令です

テキストを図形の意味において示す場合、_は下付き文字記号です。y_2 は y と 下付き文字の 2 を意味します。このメッセージは文字列の最後が_の場合に表示 されます。

正規表記にエラーがあります

このエラーは検索や抽出操作において用いた正規表記の解析中、"@REGEX"または"@MATCH"の実行中に生じます。

この範囲の右側を期待しました

外側の範囲参照は出来ません。

ここに[何か]があると期待しました

これは文法的エラーです。カーソルは編集モードの編集ウィンドウに置かれます。 関数のマニュアルを参照し、エラー内容を修正して下さい。

関数が必要です

編集行に入力された計算式に何らかの間違いが有ります。カーソルによって示さ れた位置に、関数名が必要です。

オペランドが必要です

編集行に入力された計算式に何らかの間違いが有ります。カーソルによって示さ れた位置に、関数名が必要です。

演算子が必要です

編集行に入力された計算式に何らかの間違いが有ります。カーソルによって示さ れた位置に、関数名が必要です。

無関係なオペランドです

編集行に入力された計算式に何らかの間違いが有ります。カーソルによって示さ れた位置に、関数名が必要です。

FはOでなければなりません

"@F" の3番目の引数は0以上です。

第一引数は数値型でなければなりません

"@NPV"、"@CHOOSE"は第一引数が数値型である必要が有ります。

浮動小数点例外です

浮動小数点例外は関数または計算式の計算中に生じます。これはコンピュータが 使用可能な数値外の値が計算で算出された事を意味します。

ここで予期せぬことが起こりました

スプレッドシートは計算式において解釈できない内容を見つけました。

"Fraction"は1 でなければなりません

"@DOLLARDE"、"@DOLLARFR" は引数 F(fraction)に 1 以上の値を要求 します。

"Frequency"は1、2 または4 でなければなりません

財務関数の引数 Frequency(年毎のクーポン支払い回数)は、次の中から1つに 制限されています。1、2、または4

関数がインストールされていません

このエラーは、スプレッドシートが"@"から始まる関数名でそれを組込み関数ま たは接続プログラムによってインストールされた関数と認識できない場合に生じ ます。

関数スタックがオーバーフローしています

このエラーは関数が深いネスト構造の場合に生じます。スプレッドシートは関数 のネストを **50** レベルの深さまでサポートしています。

16 進数が 32 ビットより大きいです

16 進数が8文字より長い場合、スプレッドシートは 16 進数を数値に変換できず、 内部のバイナリ変換で 32 ビットに翻訳されます。

IEEE 浮動小数点例外(無限または NaN)

このエラーは、計算式で標準の IEEE 浮動小数点コンピュータでは計算できない 内容が生じた事を意味します。多くの場合、+/- 1.8e308 から外れた中間結果、 または最終結果が生じます。

セルまたは範囲参照が不当です

これはセルまたは範囲の参照のコピーや移動操作が A1 から FAN32767 を超える結果となった場合に生じます。

"演算子"のオペランドが不当です

これは"演算子"として指定したオペランドの1つあるいは両方が有効ではない場合に生じます。多くの場合、算術計算において範囲名がオペランドとして使用されています。

引数形式が不適当です

1 つまたはそれ以上の関数の引数が、要求される引数の型と一致していません。

係数形式が不適当です

多項式評価関数("@POLY")において、1 つまたはそれ以上の多項式係数が数値 型ではありません。

次元が不適当です

幾つかのスプレッドシートの行列関数や埋込みツールでは、行列引数の次元につ いて条件が有ります。この条件について不明な場合はマニュアルを確認してくだ さい。

行列の次元では互換性がありません

行列の乗算において("@MMUL")、第1行列の列数は第2行列の行数と等しい 必要が有ります。

範囲の次元では互換性がありません

スプレッドシートの"@DOT"は等しいサイズのベクトルが必要です。等しい次元 であれば、どの様な 2 つの範囲の積和も計算します。 インデックス列が空のセルを含んでいます

"@VLOOKUP" により参照されるルックアップテーブルの第1列に、空のセル を含むことは出来ません。

インデックスが範囲外です

"@FIND"において、第3引数が第2引数より小さい値の可能性が有ります。 "@MID"において、第2引数が第1引数より小さい値の可能性が有ります。

インデックス行が空のセルを含んでいます

"@HLOOKUP" により参照されるルックアップテーブルの第1行に、空のセル を含むことは出来ません。

整数型のパラメータが範囲外です

4294967296 より大きいか、-2147483649 より小さい整数型のパラメータ を入力しました。

利率>0 でなければなりません

"@EFFECT"、"@NOMINAL" は引数 R("interest rate")が 0 より大きい値 を要求します。

金利計画は単一列または行でなければなりません

"@FVSCHEDULE" の引数 R("interest rate"の配列)は、単一列または単一 行でなければなりません。

セル参照が不当です

負、ゼロ、あるいは 32767 より大きな行か、負、ゼロ、あるいは FAN か 4095 より大きな列のセルを参照しようとしています。

日付が不当です

スプレッドシートは日付のフォーマットを解釈できませんでした。日付の値は 1900年1月1日から2099年12月31日に対応する1~73,050の範囲で ある必要があります。このエラーは、"@DATE" 関数に渡された年月日の値が適 切な日付に変換できなかった場合にも生じます(例:1950年2月31日、2589 年1月1日)。

日カウントベースが不当です

財務関数の日付カウントのベースは、以下の選択肢から1つを選びます。 0(30/360)、1(actual/actual)、2(actual/360)、3(actual/365)

範囲参照が不当です

スプレッドシートの範囲以上のセルを参照する範囲の参照を行おうとしています。 即ち、負、ゼロ、または 32767 より大きな行か、負、ゼロ、または FAN か 4095 より大きな列の参照です。

テーブルが不当です

"@INTERP2D"、または"@INTERP3D"の参照位置のテーブルに、数値では ない値か、空のセルが含まれます。

時間が不当です

スプレッドシートはユーザが入力した時間を解釈できません。時間は 0 から 1 の 小数値で 24 時間に対応します。日付または時間として数値を解釈する場合、ス プレッドシートは数字の整数部を日付、小数部を時間と解釈します。負の値は無 効です。また、"@TIME"は時間を示す 0~23、分を示す 0~59、秒を示す 0~ 59 の範囲の引数でなければなりません。他のいかなる値も無効です。

"As Needed"では繰り返し計算はサポートされません

無限ループを避けるために、再計算方法が"As Needed"の場合は繰り返し計算 をサポートしません。繰り返し計算を使用するためには、手動による再計算を選 択する必要があります。

引数が1つ以下です

"@POLY"は 2 つ以上の引数を必要とします。

"Life"と"Period"は整数でなければなりません

"@DDB"は第3引数"Life"、第4引数"Period"において整数を要求します。

"Life"は 0 より大きな値でなければなりません

"@SLN"及び"@SYD"は、"Life"に 0 より大きな値を要求します。

検索で照合に失敗しました

"@HLOOKUP"、または"@VLOOKUP"が照合に失敗しました。これはアルフ ァベットの検索が伴う場合にのみ生じます。

"下限"は 0 でなければなりません

"@ERF"、"@ERFC"の引数 L(下限)は 0 以上です。

大きすぎます

"@NUMTOHEX"は 2147483646 以下-2147483647 以上の引数を要求し ます。

行列が単一です

単一行列の反転は数学的に不可能です。

行列は平方でなければなりません

固有値行列や平方ではない行列式を反転する事は不可能です。

一致させる文字列"Match Type"は 0 でなければなりません

"@MATCH"の引数 V(一致させる値)がテキストの場合、引数 T(一致のタイプ) は O でなければなりません。

対称行列でなければなりません

"@EIGEN"は対称行列を要求します。

modula0 除算です

Mod 0 は定義されていない操作です。

小数点位置は-15 から+15 まででなければなりません

"@ROUND"関数は小数点位置のどちら側も、15 桁より大きな丸めを行えません。

"Cost"="Salvage"=0 でなければなりません

"@DDB"、"@SLN"、"@SYD"、"@DB"、"@VDB"は、"Cost"の引数に "Salvage""の引数より大きいか等しく、かつ 0 以上の値を要求します。

最初のクーポン < 成熟度 < 問題を持っている必要があります

引数 I("issue date")、FC("first coupon date")、M("matunity date") は I<FC< FC < M

最初のクーポン < 成熟度 < 問題を持っている必要があります

引数 I("issue date")、FC("first coupon date")、M("matunity date") は I<FC< LC < M

"Life"="Period"=1 でなければなりません

引数"Life"が引数"Period"よりも大きいか等しく、かつ1以上である事を "@DDB"、"@DB"、"@VDB"は要求します。

NO、KO および N < K でなければなりません

"@PERMIT"の引数 N(選択する項目数)及び引数 K(選択される項目数)は、N
 が 0、K が 0 でか以下の条件に従う必要があります。NO, KO および N <K.

キャッシュフローの値は少なくとも2つ必要です

単独のデータポイントではキャッシュフローシリーズを作成できず、作成のため には2つの値を取ります。計算による内部率の値は、1つの値では不定です。

2 重数が見当たりません

全ての数が一度ずつ引数リストに出現したため、"@MODE"は最頻値を見つける ことができません。

一致する内容が見つかりませんでした

"@MATCH"は一致する内容を見つける事ができませんでした。

文字列内に 16 進数がありません

"@HEXTONUM"は引数に 16 進数のみを要求します。

オペランドが数字ではありません

ある種の計算式が、数値が要求されるオペランドに数値以外の値を持ち、計算式 の結果が不定です。

…内に数字でない値があります

アルファベットを含む計算は定義されていません

関数に必要なだけの引数がありません

関数の引数が不足しています。

"数値"が参照リストにありません

"@RANK"の参照リストにランク付けのための数値が有りません。

数値が"大|小"過ぎます

数値がコンピュータの表記能力限界を超えており、わずかに限界内にあるかの様 に扱われます。

複利期間の数は**1**でなければなりません

"@EFFECT"及び"NOMINAL"は引数 C("number of compounding periods")が 1 以上である事を要求します。

引数の1つはゼロであってはなりません

"@ATAN2"は自身の引数の1 つがゼロではない事を要求します。

オペランドにエラー状態を含んでいます

オペランドによるセルの参照にエラー条件が存在するか、エラー条件が存在する セルへの参照を含んでいます。 オペランドが0です

"@HMEAN"は、値が 0 である引数は受け付けません。

オペランドが 32 ビットを超えています

スプレッドシートでは、整数は 32bits より大きな値を受け付けません。整数は オベランドの正負によって 2137483647~-2147483648 か、 4294967295 からゼロまでの値に限られます。

オペランドが0以下です

"@GMEAN"は引数に 0 あるいは負の値を受け付けません。

オペランドが範囲外です

"@CHAR"は1~255の整数のみ受け付けます。

"&"のオペランドは同一形式でなければなりません

"&"演算子は2つの意味を持ちます。即ち、オペランドが数値の場合、ビット毎の AND 操作になります。 オペランドが文字列の場合、二つの文字列の連結になります。オペランドが数値でもなく、文字列が2つでも無い場合にこのエラーは 生じます。

".."のオペランドはセル参照でなければなりません

".."演算子は 2 つのセルの参照を結びつけて範囲参照を作成します。整数同士を 結びつけて整数範囲の作成は出来ません。

"Payment"および"FV"は同一符号を持っていなければなりません

"@TERM"は"Payment"及び**"Future**"の値が同一の符号を持つことを要求します。

"Payment"はゼロであってはなりません

"@TERM"は"Payment"がゼロではない事を要求します。

"Period"は 0 でなければなりません

"@SYD"は"Period"が 0 以上で有る事を要求します。

"Period"は整数 0 でなければなりません

"@FV"、"@PMT"、"@PV"、"@RATE はゼロより大きな整数を"Period"に 要求します。

多項式の次数は1と10の間になければなりません

"@PLS"、"@POLYFIT"、"@POLYCOEF"は多項式の次数が 1~10 の間であ る事を要求します。

プールされた"Sample"が3未満です

"@TTEST2EV"が数学的に定義されるためには、プールされた"Sample"のサイズが 2 より大きい事が必要です。

母集団が1未満です

"@CVAR"、"@CSTD"、"@SSE"、"@VAR"、"@STD"は母集団が**1**以上で 有る事を要求します。

"PV"および"FV"はゼロであってはなりません

"@CTERM"、"@RATE"は"Present Value"、"Future Value"が 0 ではな い事を要求します。

"PV"と"FV"の符号は同じでなければなりません

"@CTERM"、"@RATE"は"Present Value"、"Future Value"が同一符号 である事を要求します。

引数の範囲の次元は同じでなければなりません

"@PTTEST"及び"@CORR"は各々の範囲の値を組として動作するため、要求する引数の範囲の次元が同一である事を要求します。

"Rate"は-1 より大きくなければなりません

"@CTERM"、"@FV"、"@PMT"、"@PV"、"@TERM"、"@NPV"、 "@XNPV"、"@XIRR"は引数"Rate"が-1 より大きい事を要求します。

"Rate"はゼロであってはいけません

"@CTERM"は引数"Rate"に 0 ではない値を要求します。

求めた"Rate"が-1 より小さいです

"@IRR"は最大回数の繰り返し後、-1 より小さい"Rate"を求めました。

再帰が深すぎます

このエラーは、スプレッドシートが条件文に条件文が含まれている事を発見した 場合に生じます。例えば、条件付き統計式の条件文において、自身の条件文を含 む他の条件付き統計式をコールした場合に生じます。

式の結果は範囲です

"@CELLREF"や"@RANGEREF"などの幾つかのスプレッドシート関数は、結果としてセルの参照や範囲参照を返します。セル及び参照範囲は式の最終的な結果では有りません。

結果の文字列が長すぎます

式によって生成された文字列が長すぎます(512より大)。

行オフセットが範囲外です

"@HLOOKUP"の第3引数は、0より小さいか、第2引数に指定された範囲の 深さより大きい値をオフセットとして指定します。

対の片方のサンプルが見当たりません

"Paired-test(@PTTEST)"及びピアソンの積率相関係数(@CORR)に入力された2つの範囲は対となる値を含みます。1番目の範囲のある場所に値が出現する場合、2番目の範囲の一致する位置にも値がなければなりません。

"sample"のサイズが2未満です

"@CVARS"、"@CSTDS"、"@VARS"、"@STDS"、"@TTEST"、 "@PTEST"、"@TTEST2UV"、"@FTEST"は"sample"のサイズに1より大 きい値を要求します。

NULL リストを探索しています

Null のリストを検索しています。

セレクタが範囲外です

"@CHOOSE"の第1引数は0以上か、残りの引数の数-1以下でなければなりま せん。

決済日は < 満期日とする必要があります

財務関数において、"Settlement date"は"Maturity date"より早期である必要があります。

"Settlement date"="Issue date"でなければなりません

"Settlement date"は"Issue date"より早期では有りません。

NULL リストを参照しています

Null のリストを参照しています。

"Start Period"=1 でなければなりません

"@CUMIPMT"及び"@CUMPRINC"は引数 S("Start Period")が 1 以上である事を要求します。

"starting date"は"Dates"の最初でなければなりません

引数 D("Dates")の数は"@XIRR"、"@XNPV"における"starting date"より先行しません。

部分文字列が文字列より長いです

文字列をその文字列よりも短い文字列へ当てはめる事はできないため、 "@FIND"はパターン文字列を、それよりも短いターゲット文字列中に見つける ことは出来ません。

部分文字列が見当たりません

"@FIND"はターゲット文字列中にパターン文字列を見つける事が出来ませんでした。

トークンバッファがオーバーフローしています

このエラーは、スプレッドシートが許容するよりも複雑な式が入力された場合に 生じます。スプレッドシートは単一式に対して、どんな人でも適度に扱える範囲 以上である **200** までの演算子、数値、関数呼び出しを受付けます。

引数の個数が少なすぎます

この関数はより多くの引数が必要です。

関数の引数が多すぎます

関数が提供する以上の引数を定義しました。100以上の引数を取る関数は存在しません。

引数の個数が多すぎます

"@NOT"は他のデジタルな論理関数とは異なり、引数をただ1つ取ります。
"@ROW"、"@COL"は引数を1つ取り、"@ANNOTATE"は3~5の引数をとります。

"Treasury bill"は1年を超えて未払いとしてはなりません

"Treasury bill"の"settlement date"と"maturity date"の間隔は1年を 超える事は出来ません。

抽出フィルタを説明することができません

抽出操作中に、"#==/5"の様な不適切な boolean 型の演算を指定する場合に 生じます。 探索条件を説明できません

数値検索中に、"#==/5"の様な不適切な boolean 型の演算を指定する場合に 生じます。

記号名が不定です

このエラーは、スプレッドシートが定義されていないシンボリックな範囲参照ま たはセル参照を発見した場合に生じます。セルや範囲の参照にシンボリック名を 使用するためには、最初に"SetRangeName"コマンドを利用して定義しなけれ ばなりません。

期待してない疑問符が現れました

スプレッドシートは C 言語で用いる演算子"?"および":"と互換性の有る条件式を サポートします。片方の演算子のみが出現した場合にこのエラーは生じます。

式の中に未定の名前があります

不適切な名称の関数や範囲名が演算で使用されています。

"上限"は 0 でなければなりません

"@ERF"の引数 U(上限)は 0 以上です。

"数値"および"日付"シリーズの次元は同じでなければなりません

"@XIRR"及び"@XNPV"は、引数 V(キャッシュフローシリーズ)と引数 D("date series")が同一次元である事を要求します。

"数値"は少なくとも1つの収入と1つの支出しなければなりません

"@MIRR"は少なくとも1つの収入(正の値)と1つの支出(負の値)を含む値の範囲を要求します。

引数の個数が間違っています

関数へ渡した引数の個数が正しくありません。関数へ正しい個数の引数を渡すた めには、マニュアルを確認して下さい。

カスタムパラメータ公式

カスタムパラメータは、通常計算されない特殊な値を計算するために使用されます。こ の機能を使用することにより、すべての同定、検出ピークを データベースにアクセス することができます。カスタムパラメータプログラムは、他の解析がすべて終了した*後* に起動されます。

カスタムパラメータプログラムは、VB スクリプト、または、C++で作成された DLL である必要があります。また、DLLには、[EvaluateCustomParam]機能を組み込む 必要があります。カスタムパラメータプログラムを開発する際のドキュメント、サンプ ルについては、Elite CD を参照してください。

使用可能なカスタムパラメータ-

<u>6-シグマ ノ</u> イズテスト	<u>ベースライン</u> <u>チェック計算</u> <u>方法</u>	<u>ヨーロッパ薬</u> 局方のシグナ ル / ノイズ	<u>ノイズテスト</u> <u>(rms ノイ</u> <u>ズ)</u>	<u>Savitsky-</u> <u>Golay スム</u> ージング
<u>6-シグマ</u> <u>S/N</u>	<u>キャリブレー</u> ション重量	絶対検量線	<u>修正%レポー</u> <u>トの計算式</u>	スケール
<u>面積 % レポ</u> <u>ートの計算式</u>	<u>キャリブレー</u> ションの平均 <u>計算</u>	<u>絶対検量線レ</u> ポートの計算 <u>式</u>	<u>ピークの中心</u>	<u>シグナルの</u> 変換
<u>面積/濃度レ</u> <u>スポンスファ</u> クターの設定	<u>検量線の計算</u>	<u>内部標準物質</u> <u>量</u>	<u>ピーク谷比</u>	<u>USP(米国</u> <u>薬局方)の</u> <u>計算方法</u>
<u>面積/高さ法</u> の計算方法	検量線	<u>内部標準レポ</u> <u>ートの計算式</u>	<u>カラム性能計</u> <u>算</u>	<u>USP (米国</u> <u>薬局方) の</u> シグナル(

<u>ノイズ</u>

<u>ASTM LOD</u> <u>(検出限界)</u> <u>計算</u>	<u>キャパシティ</u> ファクタ (k')	<u>内部標準法</u> <u>VS 絶対検量</u> <u>線法とノーマ</u> ライズ	<u>理論段数/m</u>	<u>重み付けとス</u> <u>ケール</u>
<u>ASTM LOQ</u> (定量限界)	三次曲線近似	<u>内部標準</u>	<u>折れ線近似</u>	<u>重み付け</u> <u>(LSQ 重み付</u> <u>け)</u>
<u>ASTM ノイ</u> <u>ズ計算</u>	<u>DAB(</u> ドイツ 薬局方) の計 算方法	<u>日本薬局方</u> (JP)計算法	二次曲線近似	
<u>ASTM S/N</u> 比	<u>キャリブレー</u> <u>ションされて</u> いないピーク の濃度測定	直線検量線	<u>相対リテンシ</u> <u>ョンタイム</u> <u>(選択性)</u>	
<u>自動平均計算</u>	<u>ドリフトテス</u> <u>ト</u>	<u>行列演算</u>	<u>内部標準物質</u> <u>の濃度を「ゼ</u> <u>ロ」としてレ</u> ポート作成	
<u>平均 RF</u>	<u>EMG(指数修</u> <u>正ガウス分</u> <u>布)計算法</u>	<u>修正最小二乗</u> 法計算	<u>レスポンスフ</u> <u>ァクターの設</u> 定	

6-シグマ ノイズテスト

6-シグマノイズは、選択した時間範囲内の n 個の測定点から求めた標準偏差に **6** を乗じたものです。この公式では、ノイズ計算からドリフトを除去するために、 平均値の変わりに直線回帰線を使用します。



ここで **Ei** はデータポイントです。**f(E_i))** は全データポイントの直線回帰線上の データポイントです。

n は入力した時間範囲内の測定点数です。

6-シグマ S/N

S/N を計算するために、6-シグマノイズは直前のピークのペースライン(インテ グレーション[開始]時間)から戻って 30 秒間隔で計算されます。ノイズ計算は、 もう一つのピークのインテグレーション[終了]時間まで、30 秒間隔で計算を続行 します。ノイズ計算は、30 秒間隔の区間だけが使用されます。間隔が 30 秒未満 の場合は、計算に使用しません。

S/N 値は、対象ピークの高さを全てのノイズの平均値で除算して求めます。

面積 % レポートの計算式

Area% =
$$\frac{\text{Area of peak} * 100}{\text{Sum of all peak areas}}$$

面積/アマウント レスポンスファクターの設定

レスポンスファクターの設定で[面積/アマウント]を選択した場合、 検量線([検 量線表示]コマンドで表示できる)は、 y=アマウントおよび x=面積または高さで 定義されます。(内部標準校正については、y =量比 x =面積または高比)。レ スポンスファクターの設定で[面積/アマウント]を使用した検量線の一例を以下に 示します。



[面積/アマウント]レスポンスファクターの設定による検量線

レスポンスファクターの設定で[アマウント/面積]を選択した場合、 検量線([検 量線表示]コマンドで表示できる)は、 y=面積または高さおよび x=アマウントで 定義されます。(内部標準校正については、y=面積または高比 x=量比)。レ スポンスファクターの設定で[アマウント/面積]を使用した検量線の一例を以下に 示します。



[アマウント/面積]レスポンスファクターの設定による検量線 面積/高さ法の計算方法

理論段数

$$N = 16 \times \left[\frac{t}{W}\right]^2$$

ここで、

N = 理論段数

- t = 目的成分のリテンションタイム
- ₩ = 接線法による成分ピークのピーク幅

参照

$$w = 4 \times \sigma$$
$$\sigma = \frac{1}{2\pi} \times \left[\frac{A}{H}\right]$$
$$= 0.399 \times \left[\frac{A}{H}\right]$$

ここで、

シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)

$$T = \frac{W_{0.05}}{2f}$$

ここで、

 T = シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)
 Wo.os = ベースラインからピーク高さの 5%位置で測定された ピーク幅

f = ピーク高さの 5% 位置におけるピーク前部の幅

10%におけるシンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)については、Wとfの値はピーク高さの**10%**位置の値で計算します。

分解能

$$R = \frac{2(t_2 - t_1)}{W_2 + W_1}$$

ここで、

- R = 対象ピーク(ピーク 2)とその前に溶出したピーク(ピーク
 1)との分離度
- t2 = ピーク2の注入時点からのリテンションタイム
- t1 = ピーク1の注入時点からのリテンションタイム
- W2 = 成分ピーク2のベース幅
- ₩1 = 成分ピーク1のベース幅

ASTM LOD (検出限界) 計算

これはピーク毎の結果である。LOD パラメータは分析法において評価されるピー クが検出限界内であることを実験的に確定するために用いられる。

 $SN_M = H/N_D$

$$LOD = C * SN / SN_{M}$$

ここで、

SN: ピークテーブルで LOD に入力された S/N 比

SN_M:計算された S/N 比

H: ピーク高さ

N_D: 測定されたノイズレベル

C: 評価されたピークの濃度結果

注:ピークノイズは ピーク開始点に先立つベースラインセグメント を基に計算されます。ピーク後のベースラインはピークノイズの計算には利用されません。

ASTM LOQ (定量限界)

これはピーク毎の結果です。LOQ は分析法において評価されるピークが定量限界 内であることを実験的に確定するために用いられます。

$SN = H/N_D$

$LOQ = C * SN / SN_M$

ここで、

SN: ピークテーブルで LOQ に入力された S/N 比

SN_M:計算された S/N 比

H: 濃度 C におけるピーク高さ

N_D: 測定されたノイズレベル

C: 評価されたピークの濃度結果

注:ピークノイズは ピーク開始点に先立つベースラインセグメント を基に計算されます。ピーク後のベースラインはピークノイズの計算には利用されません。

ASTM ノイズ計算

6 シグマノイズの計算と同様に、近似直線最小二乗は選択された時間の範囲で計 算されます(30 秒の"ショート"ウィンドウまたは 60 秒の"ロング"ウィンド ウ)。以下に示すように、ノイズ値は実際のポイントと計算点間の最大の正と負 の差異を使用して計算されます:

ノイズ = $(E_i - f(E_i))_{\text{最大}} - (E_i - f(E_i))_{\text{最小}}$

ここで、

 $\mathbf{E}_{\mathbf{i}} = \mathcal{E}_{\mathbf{i}} \mathcal{E}_{\mathbf{i}}$

 $f(E_i) =$ 最小二乗法で算出されたデータポイント

注:スケール計算のために、結果は、µVよりむしろ検出器でスケールされた単位 で報告されます。

ASTM S/N 比

6 シグマノイズ計算により、30 秒ごとにノイズが計算され平均されます。ピーク 高さをノイズ値で割った値が S/N 比となります。

自動平均計算

メソッドのプロパティにおいて、[自動的に繰返し測定値を平均化する]を有効に すると、ピークテーブル内の重量平均で指定したすべてのピークに対して、平均 が計算されます。そのメソッドに対して、新しいレベルのキャリブレーションが 行われるまで、繰返し測定のメソッド内への保存が続けられます。新しいレベル が現れると、それまでのレベルの繰返し測定値はクリアされ、その時点で平均値 がメソッドの[最終面積]として保存されます。

新しいレベルが見つかるかどうかにかかわらず、繰返し測定の面積を続けてメソ ッドに保存したい場合は、[自動的に繰返し測定値を平均する]を無効にします。 次に、シーケンステーブル内の分析タイプに、[繰返し値を平均]を指定して、平 均計算を行いたい場所を指定する必要があります。

平均 RF

平均 RF の検量線を選択した場合は、各キャリブレーションポイントと原点を結 ぶ線の傾きを別々に計算します。これらの値(レスポンスファクター;RF)を平均 して平均 RF 値を求めます。平均 RF 値を使って、未知成分の未補正のアマウン トは次式によって計算されます。

Conc 未知=(平均 RF)*面積 未知

ここで、

ConcUnknown = 面積/RF(レスポンスファクターを[面積/アマウント]で定 義した場合)

ConcUnknown = 面積*RF(レスポンスファクターをアマウント/面積で定義 した場合)

各検量線の傾きは次式で計算されます。

$C_u = a Y$

絶対検量線法およびノーマライズの場合

C_u = 未補正のアマウント(スケールファクターが設定されている場合は、それを適用、即ち 1/x (適用可能な場合))

- a = 各ポイント間の検量線分の傾き
- Y = 目的成分の面積または高さ

内部標準法の場合:

C_u = 未補正のアマウント比

a = 各ポイント間の検量線分の傾き

 $Y = \frac{\text{Component Area or Height}}{\text{Internal Standard Area or Height}}$

ベースラインチェック計算方法

ベースラインドリフト値の計算は、以下の公式に基づいて計算します。

$$Drift = \left(\frac{N\sum xy - \sum x\sum y}{N\sum x^2 - (\sum x)^2}\right) * 60$$

- N = ポイント数
- x = X 值 (分)
- **y = Y** 値

ノイズ計算については、ASTM ノイズ計算 またはノイズテスト(rmsノイズ)を 参照してください。ベースラインチェックのために、ASTM ノイズは検出器の µV ではなく Y 軸単位を使ってスケールされます。

キャリブレーション重量

繰返し測定とメソッドの最終面積との平均を取るには、ピークテーブルで、繰返し 重みを指定します。なお、繰返し重みを 100 とすると最新面積値は無視されるこ とに注意してください。

EZChrom Elite では、重み付け平均値は次式で計算します。

$$A_{w} = (x_{c} * W) + [x_{0} * (1 - W)]$$

ここで、

Aw は重み付け平均結果です

Xc は、現在の測定面積(または高さ)と繰返し測定値との真の平均値です。

W 繰返し測定重み値/100

Xo メソッドからの[最新面積]

下記のメソッドに対して、重み付け平均値は、以下のように計算されます。

メソッドの[最新面積]	100
現在の測定の面積	101
Rep 1	104
Rep 2	100
Rep 3	102

繰返し重みの値を 60 とすると、重み付け平均値は次のように計算されます。

[(101 + 104 + 100 + 102)/4] * .6 + [100 * (1 - .6)]

最終面積の平均と新しいキャリブレーション繰返し測定に等しい重みを付けるに は、重み付け係数として **50** を入力します。

注:内部標準法の場合は、各繰返し測定値は、内部標準物質の面積(または高さ)に 対する目的成分面積(または高さ)の比を表します。

キャリブレーションの平均計算

ピークテーブル内の繰返しモード置換/重量平均使うと、キャリブレーション面積と前の繰返し測定(最新面積)との平均を取るか否かの選択ができます。一般的に、置換を選択した場合、既存のキャリブレーション面積またはメソッド中の平均面積が現在のキャリブレーション面積で置き換えられます。重量平均を選択した場合、繰返し測定の平均値が取られ、設定によっては、最終面積の値を使用して重み付けが行われます。

絶対検量線法の場合

重量平均 選択した場合は、現在のピーク面積(または高さ)と繰返し測定の結果と の平均が計算されます。置換 を選択した場合は、キャリブレーションの測定毎に メソッド中の古い値が書き換えられます。

内部標準法の場合

重量平均 を選択した場合は、個々の繰返し測定の比が先ず計算され、次いでその 比の平均が求められます。置換 を選択した場合は、キャリブレーションの測定毎 にメソッド中の古い値が書き換えられます。

例えば、キャリブレーション成分の面積 U, とその内部標準物質の面積 I について、3 つの繰返し測定の平均の比 Y が以下の通り計算されます。

内部標準物質の _{繰返し面積} (I)	目的成分の 繰返し面積 (U_n)
I1 = 100	U1 = 210
I2 = 99	U2 = 215
I3 = 104	U3 = 212

比 1 = 210 / 100 = 2.1 比 2 = 215 / 99 = 2.172 比 3 = 212 / 104 = 2.039 Y = 平均比 = 2.104 注:検量線ウィンドウにおいて、マウスを使って、ハイライトさせて、内部標準ピークの検量線から繰り返し測定を消去した場合、平均比を計算するときに、その 内部標準を使ったピークに関わる繰り返し測定値が無視されます。

平均した場合は、各ピークレベルに対する繰返し測定結果は、削除されるまでメ ソッド内に保存されます。Rep1 が最も新しい繰返し測定値となります。

検量線の計算

メソッドのキャリブレーションの結果として、キャリブレーションされた各成分 に対して "検量線" が作成されます。検量線の公式は、ピークテーブル内で選択 された検量線の種類、メソッドに対するレスポンスファクターの定義、内部標準 法か絶対検量線法、選択したスケールファクター、および選択した重み付けによ って決まります。

"未補正のアマウント"とは、ある面積または高さ(あるいはその比)で表示される 成分の濃度(あるいは濃度比)です。[未補正のアマウント]という言葉が使われる のは、サンプル量や補正係数などのファクターが適用されていないからです。

ある成分の "レスポンスファクター" は検量線から計算されます。これはアマウント/面積または面積/アマウントとして報告されます。これは メソッド/プロパティ タブの一部として選択されます。

注: キャリブレーションに繰返し測定が含まれる場合、繰返し測定の平均は検量線 を計算する前に計算されます。

検量線

検量線は、検出器の応答と成分の含有量(濃度)(内部標準法の場合は、濃度比に対 する面積または高さ比)の関係を示すものです。EZChrom Elite クライアント/ サーバーは、ユーザーが選択した検量線の種類、スケール設定および重み付け係 数にしたがって、キャリブレーションポイントに検量線を適合させます。そして、 得られた検量線は、未知試料に含まれる成分濃度を計算するために使用され、通 常、最小二乗法で定義されます。

 $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$

f = 折れ線

直線(強制的に原点を通過させる、またはさせない)

2次曲線(強制的に原点を通過させる、またはさせない)

3次曲線(強制的に原点を通過させる、またはさせない)

平均 RF 法

キャパシティファクタ(k')

$$k' = \frac{\mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_a} - 1$$

ここで、

k' = キャパシティファクタ

t₂ = 注入時点から検出されたリテンションタイム

t_a = メソッドオプションの[カラム性能]タブの[非保持時間] から採用され たカラムで保持されなかった成分の溶出時間

三次曲線近似

三次曲線による検量線は、最小二乗法により、一連のキャリブレーションポイントに最も良く適合する曲線を求めます。三次曲線の検量線を求めるには、最低4 点のキャリブレーションポイントが必要です。未補正の含有量は次式で計算されます。

$$Y = aX^3 + bX^2 + cX + d$$

絶対検量線法の場合

Y = 未補正のアマウント(スケールファクタが設定されている場合は、それを適用、 即ち 1/x (適用可能な場合))

- a = 検量線係数
- b = 検量線係数
- c = 検量線係数
- **d = Y**軸切片
- X = 目的成分の面積または高さ
- 内部標準法の場合:
- Y = 未補正の濃度比
- a = 検量線係数
- b = 検量線係数
- c = 検量線係数
- **d = Y** 軸切片

内部標準物質の面積または高さ

DAB(ドイツ薬局方)の計算方法

注:この計算式は、BP(英国薬局方)、EP(ヨーロッパ薬局方)および ASTM とも 呼ばれます。

理論段数
$$N = 5.54 \times \left[\frac{t}{W_{0.5}}\right]^2$$

ここで、

N = 理論段数

t = 目的成分のリテンションタイム
 W_{0.5} = ピーク高さの 50%位置でのピーク幅

シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)

$$T = \frac{W_{0.05}}{2f}$$

ここで、

T = シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)

W_{0.05} = ベースラインからピーク高さの **5%**の位置で測定した ピーク幅

f=ピーク高さの5%位置におけるピーク前部の幅

10%におけるシンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)については、Wとfの値はピーク高さの**10%**位置の値で計算します。

分解能

R =
$$1.18 \times \frac{(t_2 - t_1)}{W_{0.5 + W_{p05}}}$$

ここで、
R = 対象ピーク(ピーク 2)とその前に溶出したピーク(ピーク
1)との分離度
 $t_2 = ピーク 2$ の注入時点からのリテンションタイム
 $t_1 = ピーク 1$ の注入時点からのリテンションタイム
 $W_{0.5} = ピーク高さ 50% 位置の対象ピークの幅$
 $W_{p0.5} = ピーク高さ 50% 位置の前に溶出したピークの幅$

キャリブレーションされていないピークの濃度測定

キャリブレーションされていないピークの濃度レポートを得るには、マニュアル **RF** タイプのグループを作り、グループテーブル内のこの範囲にマニュアルレスポ ンスファクターを割り当てます。一度、この設定を行えば、この範囲内のキャリ ブレーションされていないすべてのピークに対して、このレスポンスファクター を使って濃度を計算することができ、未同定ピークを選択されている分析レポー トに含まれます。与えられたメソッドに対して、何通りものキャリブレーション されていない範囲を定義することができます。

ドリフトテスト

ドリフトテストは、指定した範囲にわたって電圧の変化を測定します。

$y_2 - y_1$

X2 - X1

ここで、

y₂ = 時間 X₂(ドリフト試験開始時間[min])における電圧(μV)
 y₁ = 時間 X₁(ドリフト試験終了時間[min])における電圧(μV)
 注:SS420x では、電圧の単位はμです。
 EMG(指数修正ガウス分布)計算法

理論段数

$$41.7 \times \frac{\left[\frac{t}{W_{0.1}}\right]^2}{\frac{b_{0.1}}{a_{0.1}} + 1.25}$$

ここで、

- N= 理論段数
- **t** = 目的成分のリテンションタイム
- W_{0.1}= ピーク高さの 10% 位置のピークの幅
- **a**_{0.1}= ピーク高さの **10%**位置のピーク前半部(開始点から最大 値まで)の幅
- **b**_{0.1}= ピーク高さの **10%**位置のピーク後半部(最大値から終了 点まで)の幅

シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)

$$T = \frac{W_{0.05}}{2 f}$$

ここで、

 T = シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)
 Wo.os = ベースラインからピーク高さの 5%位置で測定された ピーク幅

f = ピーク高さの 5% 位置におけるピーク前部の幅

10%におけるシンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)については、Wとfの値はピーク高さの**10%**位置の値で計算します。

分解能

$$R = 2.15 \times \frac{(t_2 - t_1)}{W_{0.1} + W_{p0.1}}$$

ここで、

- R = 対象ピーク(ピーク 2)とその前に溶出したピーク(ピーク 1)との分離度
- tz = ピーク2の注入時点からのリテンションタイム
- t1 = ピーク1の注入時点からのリテンションタイム
- W0.1 = ピーク高さ10%位置の対象ピークの幅
- Wp0.1= ピーク高さ 10% 位置の前に溶出したピークの幅

参照

ヨーロッパ薬局方のシグナル/ノイズ

定量の精度を左右するシグナル/ノイズ比は、以下の式で計算します。

 $S/N = \frac{2H}{h}$

- H 規定のリファレンス溶液で取り込まれたクロマトグラムのコンポーネント
- = に対応するピークの高さ。ピークの最大値から、半分の高さでの幅の 20 倍の距離にわたって測定されたシグナルの外挿されたベースラインまでが 測定されます。
- h 注入後またはブランク適用後に取り込まれたクロマトグラムでのバックグ
- = ラウンドノイズの範囲。これは、規定のリファレンス溶液で取り込まれた クロマトグラムのピークの半分の高さでの幅の 20 倍の距離にわたって測 定されます。可能な場合は、このピークが検出された場所から均等に位置 付けられます。

絶対検量線

以下の絶対検量線およびノーマライズによる検量線の例では、成分の面積は X 軸 に、成分のアマウントが Y 軸にプロットされます([アマウント/面積]でレスポン スファクターを定義した場合)。



外部標準法

絶対検量線法の検量線(アマウント/面積によるレスポンスファクターで定義した 場合)は次式により計算されます:

Amtcal = f (Areacal)

ここで、

f = 選択した検量線の種類(直線、二次曲線、折れ線など)によるキャリブレ ーションポイントの計算式)

Amtcal = キャリブレーション標準の濃度

Areacal = キャリブレーション標準の面積

したがって、未知成分は次式により計算されます。

Amtunk(u) = f (Area unk)

ここで、

Amtunk(u) = 未知成分の未補正のアマウント

f = 選択した検量線の種類によるキャリブレーションポイントの計算式

Areaunk = 未知成分の面積

未知試料の濃度は次式により計算されます。

$$Conc = \frac{Amt_{unk(u)}}{SampleAmt_{u}} \times MF$$

ここで、

Conc = 未知成分の濃度(キャリブレーションで使用した同じ単位)

Amtunk(u) = 未知成分の未補正のアマウント

Sample Amt_u= シーケンステーブルまたはシングルランダイアログから取 得した未知試料のサンプル量

 $MF = 未知試料に対して入力された補正係数または希釈係数 = <math>M_1 * M_2 * M_3 / D_1 * D_2 * D_3$

絶対検量線レポートの計算式

$$Conc = \frac{C_u}{Samp. Amt.} * MF$$

ここで、

Conc = 目的成分の補正済みアマウント

Cu= 未知の面積に対して、検量線から得られたアマウント

Samp.Amt = サンプル量

MF = 補正係数および希釈係数 = M₁*M₂*M₃/D₁*D₂*D₃

内部標準物質量

任意のキャリブレーション測定に対する内部標準物質量は、常にメソッドのピー クテーブルから選択されます。シーケンステーブル内、またはキャリブレーショ ン測定に対するシングルランダイアログ内の内部標準物質量の値は、すべて無視 されます。

未知試料の測定に対して、内部標準物質量が、シングルランダイアログボックス またはシーケンステーブル内に入力されます。これは、未知試料の濃度計算で乗 数として使われます。

内部標準レポートの計算式

Conc =
$$\frac{C_u}{(\text{Sample Amt.})}$$
* ISTD_u *MF

ここで、

Conc = 目的成分の補正済み濃度

ISTDu = 内部標準物質量

Samp.Amt = サンプル量

MF = 補正係数および希釈係数 = M₁*M₂*M₃/D₁*D₂*D₃

C_u = 与えられた面積または高さ比の検量線から得られたアマウント比

内部標準法 vs 絶対検量線法とノーマライズ

絶対検量線法およびノーマライズによる検量線は、内部標準法による検量線とは 異なります。それは、内部標準法におけるアマウントと応答が、キャリブレーシ ョンされた成分のアマウントとレスポンスに対する内部標準物質との比として表 されるためです。

内部標準

以下の内部標準法による検量線の例では、内部標準物質のアマウントに対する成分の濃度比が、Y軸に、内部標準物質の面積に対する成分の面積比がX軸にプロ ットされます(アマウント/面積でレスポンスファクターを定義した場合)。



内部標準法による検量線

検量線は次式の通り計算されます。

Amt RatioISCal = f (Area RatioISCal)

ここで、

Amt RatioISCal = キャリブレーション標準の濃度比

f = 選択した検量線の種類によるキャリブレーションポイントの計算式

Area RatioISCal = キャリブレーション標準の面積比

したがって、未知成分は次式により計算されます。

Amt Ratiounk(u) = f (Area Ratiounk)

ここで、

Amt Ratiounk(u) = 未知成分の未補正のアマウント比

f = 選択した検量線の種類によるキャリブレーションポイントの計算式

Area Ratiounk = 未知成分の面積比

未知試料の濃度は次式により計算されます。

$Concu = \frac{Amt_{IS}}{SampleAmt_{u}} \times MF \times AmtRatio_{unk}$

ここで、

Conc_u= 未知成分の濃度(キャリブレーションで使用した同じ単位)

Amt_{IS = 内部標準物質量}

SampleAmt_u = シーケンステーブルまたはシングルランダイアログから 取得した未知試料のサンプル量

 $MF = 未知試料に対して入力された補正係数または希釈係数 = <math>M_1^*M_2^*M_3/D_1^*D_2^*D_3$

AmtRatio_{Unk} = 未知試料の与えられた面積比に対して検量線から求めら れた濃度比

日本薬局方 (JP) 15 版の計算法

理論段数

$$N = 5.54 \times \left[\frac{t}{W_{0.5}}\right]^2$$

N = 理論段数

t = 目的成分のリテンションタイム

W_{0.5} = ピーク高さの 50%位置でのピーク幅

シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)

$$T = \frac{W_{0.05}}{2f}$$

ここで、

 T = シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)
 W_{0.05} = ベースラインからピーク高さの 5%位置で測定されたピ ーク幅

f = ピーク高さの 5% 位置におけるピーク前部の幅

10%におけるシンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)については、Wとfの値はピーク高さの**10%**位置の値で計算します。

分解能

R =
$$1.18 \times \frac{(t_2 - t_1)}{W_{0.5} + W_{p00}}$$

ここで、
R = 対象ピーク(ピーク 2)とその前に溶出したピーク(ピーク 1)
との分離度
 $t_2 = ピーク 2 の注入時点からのリテンションタイム$
 $t_1 = ピーク 1 の注入時点からのリテンションタイム$
Wo.5 = ピーク高さ 50%位置の対象ピークの幅

Wp0.5 = ピーク高さ 50% 位置の前に溶出したピークの幅

直線検量線

直線の検量線は、一連のキャリブレーションポイントに対して最も適合する直線 (直線回帰)を求めます。直線の検量線を求めるには、最低2つのキャリブレーションポイントが必要です。未補正の含有量は次式で計算されます。

$\mathbf{Y} = \mathbf{a} \mathbf{X} + \mathbf{b}$

[面積/アマウント]で定義されたレスポンスファクター

絶対検量線の場合

- Y = 目的成分の面積または高さ
- a = 検量線の傾き

X = 未補正のアマウント(スケールファクタが設定されている場合は、それを適用、 即ち 1/x (適用可能な場合))

b = 検量線のY軸切片

内部標準法の場合

- a = 検量線の傾き
- X = 未補正のアマウント比
- **b** = 検量線の Y 軸切片

[アマウント/面積]で定義されたレスポンスファクター

絶対検量線の場合

Y = 未補正の濃度(スケールファクタが設定されている場合は、それを適用、即ち 1/x (適用可能な場合))

- a = 検量線の傾き
- X = 目的成分の面積または高さ
- **b** = 検量線の Y 軸切片

内部標準法の場合

- Y = 未補正のアマウント比
- a = 検量線の傾き
- **b** = 検量線の**Y**軸切片

行列演算

以下の例は、二次曲線検量線の係数の計算に使用される行列演算です。

二次曲線の検量線の公式は、以下の通りとなります。

$Y = ax^{z} + bx + c$

キャリブレーションポイント(または平均キャリブレーションポイント)を表す濃度 と面積値のペア(x、y)の一連の組を考えます。

(x₁, y₁) (x₂, y₂) (x₃, y₃)....(xnyn)

これらの点は[n]個の2次式を作り、これは以下の通り行列式を書くことにより係数a、bおよびcに付いて求めることができます。

$\left[\mathcal{Y}_{1} \right]$		x_{1}^{2}	X_1	1		[م]
y_2	=	x_{2}^{2}	X_2	1	•	u L
:		:	:	•		
y_n		x_n^2	χ_n	1_		$\begin{bmatrix} c \end{bmatrix}$

または、

$Y = M \bullet Z$

正方行列を得るために、上式に を乗じて次式 M^T となります。

$M^T Y = M^T M Z$

 M^{T} は転置 M 行列です。

$$\begin{bmatrix} x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

これにより、

$$Z = (M^T M)^{-1} M^T Y$$

曲線はゼロを通過して押される場合 then c=0, また M は係数 a と b に解決される 2 行列の列となります。

修正最小二乗法計算

直線による検量線の係数は、次式の修正最小二乗法の公式を使用して計算されま す。

$$\begin{vmatrix} a \\ b \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Sigma WX & \Sigma W \\ \Sigma WX^2 & \Sigma WX \end{vmatrix}^{-1} \times \begin{vmatrix} \Sigma WY \\ \Sigma WXY \end{vmatrix}$$

ここで、

a = 検量線の傾き

b = 検量線がY軸切片

W は重さ = 1/X または 1/X²

X=レスポンスまたは量。選択はピークテーブルの[重み付け]で選択される。

内部標準法の計算の場合は、X はキャリブレーション試料中の目的成分の未補正の アマウント比 Cu となります。

Yは相対面積補正値=ピーク面積/最新の面積

外部標準法の計算の場合は、X はキャリブレーション試料中の目的成分の未補正の アマウント Cu となります。

Y は相対面積補正値=ピーク面積

修正最小二乗法による計算は、より高次の検量線にも拡張することができます。 例えば、重み付け二次曲線検量線の係数を決定するのに次式を使います。



一連の値に対して、R2 乗値を求めるために、次式が用いられます。

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (Y_{i} - \hat{Y}_{i})^{2}}{\sum_{i=1}^{n} (Y_{i} - \overline{Y})^{2}}$$

ここで、

Ŷは最小2乗線の縦座標です。

$$\overline{\mathbf{Y}} = \frac{\sum \mathbf{Y}}{n}$$

YiはYの実測値。

ノイズテスト(rms ノイズ)

rms ノイズは、n回の測定値から導いた標準偏差です。



rms noise = L

ここで、 **E**_I = 電圧表示値

E = n 回の測定の平均値

ノーマライズ レポートの計算式

 $Conc = \frac{C_u * 100}{Sum of C_u for named peaks + Sum_{CR}}$

ここで、

Conc = 目的成分の補正済みアマウント

Cu = 目的成分の未補正のアマウント

Sum_{CR} = グループキャリブレーションに指定したグループの和

ピークの中心

面積中心時間はピークの面積が50%となる位置(時間)です。この計算は、計算、 注釈、およびエクスポート可能です。

$$x_{C} = \frac{\int x \, dA}{A}$$

ピーク谷比

2 つのピーク間のベースライン分離が得られない場合は、ピーク谷比を使用して関 連する物質をテストできます。

$$p/v = \frac{Hp}{Hv}$$

H_p=小さいピークのベースラインからの高さ

 H_{v} = 小さいピークと大きいピークを分離する最小ポイントのベースラインからの 高さ

カラム性能計算

EZChrom Elite クライアント/サーバーは、システム全体の性能評価のために以下の値を計算することができます。

- 相対リテンションタイム
- 理論段数
- キャパシティファクタ
- 分解能
- ピーク対称性
- 理論段高さ(m)

これらの値はカスタムレポートに含めることができます。

2つのクロマトグラフィー成分を分離する上でのシステム性能を計算するために使われるパラメータを以下に示します。



2つのクロマトグラフィー成分の分離

注:適合性の値を正確に計算するには、目的成分のピークのうち、 最も狭いピーク に対して、少なくとも 20 点のデータポイントが得られるように、 サンプリング 間隔(機器条件で設定)を設定しなければなりません。

理論段数/m

$$N = \frac{n}{L}$$

ここで、

N = 1メートル当たりの理論段数

n = カラム内の理論段数

L = カラム長さのメートル値。この値は**カラム性能**タブ内から 採用されます。

折れ線近似

折れ線による検量線は、一連のキャリブレーションポイントを線で結ぶものです。 折れ線キャリブレーションの結果は、レスポンスファクターの定義に無関係で一 定となります。未補正の含有量は次式で計算されます。

Y = aX + b

絶対検量線法の場合:

Y = 未補正の濃度(スケールファクタが設定されている場合は、それを適用、即ち 1/x (適用可能な場合))

- a = 各ポイント間の検量線分の傾き
- X = 目的成分の面積または高さ

b = 各ポイント間の検量線分とY軸との切片

内部標準法の場合:

Y = 未補正のアマウント比

- **a** = 各ポイント間の検量線分の傾き
- X = 目的成分の面積または高さ、あるいは内部標準面積または高さ
- **b** = 各ポイント間の検量線分と **Y** 軸との切片

注:最後のキャリブレーションポイントを超えた範囲のポイントについては、 最後 の2つのキャリブレーションポイントを結ぶ線分を外挿します。もし、その値が 最も低いキャリブレーションポイントよりも低い場合は、 線分は最初のキャリブ レーションポイントを結んで引かれます。

二次曲線近似

二次曲線によるキャリブレーションは、一連のキャリブレーションポイントに対して最も適合する二次曲線を求めます。二次曲線の検量線を求めるには、最低3つのキャリブレーションポイントが必要です。未補正の含有量は次式で計算されます。

$Y = aX^2 + bX + c$

[面積/アマウント]で定義されたレスポンスファクター

絶対検量線法の場合

Y = 未補正のアマウント(スケールファクタが設定されている場合は、それを適用、 即ち 1/x (適用可能な場合))

a = 検量線係数

b = 検量線係数

c = Y軸切片

X = 目的成分の面積または高さ

内部標準法の場合

- Y = 未補正の濃度比
- a = 検量線係数
- b = 検量線係数
- **c = Y**軸切片

 $X = \frac{Component Area or Height}{Internal Standard Area or Height}$

[アマウント/面積]で定義されたレスポンスファクター

絶対検量線法の場合

- Y = 目的成分の面積または高さ
- a = 検量線係数
- b = 検量線係数
- **c = Y**軸切片
- X = 未補正のアマウント(スケールファクタが設定されている場合は、それを適用、 即ち 1/x (適用可能な場合))

内部標準法の場合

 $Y = \frac{Component Area or Height}{Internal Standard Area or Height}$

- a = 検量線係数
- b = 検量線係数
- **c = Y**軸切片
- X = 未補正のアマウント比

相対リテンションタイム

分離係数は、リファレンスピークをともなう同定ピークと、ファレンスピークが指定さ れている場合の、キャリブレーションされていない、またはキャリブレーションされた 範囲のグループ、検出された未同定ピークのピークについて計算されます。このグルー プで指定されるリファレンスピークは、同定ピークの場合と同じ方程式で、未同定ピー クに関する分離係数の計算に使用されます。

$$\alpha = \frac{t_2 - t_a}{t_1 - t_a}$$

ここで、

α = Relative retention.

t2 = 注入開始点から検出されたリテンションタイム

ta = 非保持ピークから取得したカラムにより、保持されない成分のリテンション タイム(非保持時間は、メソッドオプションの[パフォーマンスオプション]タブに 設定します。

t1 = リファレンスピークの注入開始点からのリテンションタイム(リファレンスピ ークはピークテーブルに定義されています。もし、リファレンスピークが検出され ない場合は、この数値はゼロとして扱われます。

相対リテンションタイム(選択性)

$$\alpha = \frac{t_2 - t_a}{t_1 - t_a}$$

ここで、

α = Relative retention.

t2 = 注入開始点から検出されたリテンションタイム

ta = 非保持ピークから取得したカラムにより、保持されない成分のリテンション タイム(非保持時間は、メソッドオプションの[パフォーマンスオプション]タブに 設定します。

t₁ = リファレンスピークの注入開始点からのリテンションタイム(リファレンスピ ークはピークテーブルに定義されています。もし、リファレンスピークが検出さ れない場合は、この数値はゼロとして扱われます。

注:このパラメータは、レポート内の相対 Rt のように表示されています。

内部標準物質の濃度を「ゼロ」としてレポート作成

内部標準物質の RF 値は常に 1.00 となります。通常、この RF 値を使用して、内 部標準物質に対する濃度が報告されます。

内部標準物質の濃度を強制的にゼロとして報告させる(したがって、成分濃度の合計には含めない)ためには、ピークテーブル内の内部標準物質に対して、マニュアル RF 値にゼロを入力します。

レスポンスファクターの設定

レスポンスファクターを **アマウント/面積** または 面積/アマウントのどちらで定 義するかを選択できます。この選択はメソッド/プロパティ/オプションタブで行 い、メソッドの全体に適用されます。検量線および x と y の値の割り当ては、レ スポンスファクターの設定の選択によって異なります。

Savitsky-Golay スムージング

データ点 a1 から a3 について例に示すとおり、9 点デジタルフィルタをスライディングフィルタとしてデータポイントとします。

a1f1 + a2f2 + ...a9f9 = a2f1 + a3f2 + ...a10f9 = a3f1 + a4f2 + ...a11f9

norm		norm	norm
	,		

ここで、a1...ax はデータポイント、f1...fx はフィルタリングファクター、norm はノーマライズファクター、フィルタリングファクターとノーマライズファクタ ーは以下に示すとおりとなります。

- f0: -21
- f1: 14
- f2: 39
- f3: 54

参照

f4: 59

f5: 54

f6: 39

f7: 14

f8: -21

ノーマライズファクターは 231.0

スケール

このパラメータは、検量線にスケールファクターを適用します。このファクター は検量線を計算する前に入力した濃度にかけられます。スケールファクターを使 う目的は、多項式で近似できる面積(または高さ)とアマウントとの関係を設定する ことです。スケールファクターはどの検量線の種類にも適用できます。使用可能 なスケール演算は以下の通りです。

なし

sqrt[レスポンス] レスポンス 2 Log (アマウント) 1/ log (アマウント) log (レスポンス) 1/ log (レスポンス) ln (アマウント)&ln(レスポンス)

log(アマウント)&log(レスポンス)

シグナルの変換

このカスタムパラメータは、レポートするシステムが作成した高さまたは面積値を、実際のピーク高さまたは面積に変換するために使用されます。

以下の式で計算します。

追加パラメータ 1:ピーク高さ/10⁹

追加パラメータ 2:ピーク面積/10⁹

USP(米国薬局方)の計算方法

理論段数

$$n = 16\left(\frac{t}{W}\right)^2$$

ここで、

- n = 理論段数
- t = 目的成分のリテンションタイム
- W = 接線法による成分のピーク幅

シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)

$$T = \frac{W_{0.05}}{2 f}$$

ここで、

T = シンメトリー係数(ピーク非対称性、テーリングファクター)
 ₩0.05 = ベースラインからピーク高さの 5%位置で測定されたピーク幅

f = ピーク高さの 5% 位置におけるピーク前部の幅

注: シンメトリー係数(10%)については、W と *f* の値は、ピーク高さの 10%位置の値で計算します。



非対称なピーク

分解能

$$R = \frac{2(t_2 - t_1)}{W_2 + W_1}$$

ここで、

- R = 対象ピーク(ピーク 2)とその前に溶出したピーク(ピーク 1) との分離度
- t2 = ピーク2の注入時点からのリテンションタイム
- t1 = ピーク1の注入時点からのリテンションタイム
- W2 = 成分ピーク2のベース幅
- W1 = 成分ピーク1のベース幅

USP (米国薬局方) のシグナル/ノイズ

定量の精度を左右するシグナル/ノイズ比は、以下の式で計算します。

$S/N = \frac{2H}{h_n}$

- H 目的成分に対応するピーク高さ。ピークの最大値から、半分の高さでの
 幅の 10 倍の距離にわたって測定されたシグナルの外挿されたベースラインまでが測定されます。
- h_n 目的成分注入後に取り込まれたクロマトグラムでのバックグラウンドノ
- イズの範囲。これは、規定のリファレンス溶液で取り込まれたクロマト グラムのピークの半分の高さでの幅の 10 倍の距離にわたって測定され ます。可能な場合は、このピークが検出された場所から均等に位置付け られます。

重み付けとスケール

様々な方法で、平均および重み付けが行えます。各方法の違いを下表に示します。

選択 保存場所 効果または用途	
-----------------	--

繰返しモード ピークテーブル置換を選択すると、新しいキャリブレーション面

- 置換/平均 積で、メソッドの古いキャリブレーション面積が 書き換えられます。平均を選択すると、繰返し測 定の平均値が計算されます。メソッドに最終面積 が含まれている場合、[繰返し重み]の値が計算され ます。自動平均機能が有効であれば、レベルの再 キャリブレーションを行うときにキャリブレーシ ョン繰返し測定がクリアされます。
- 繰返し重み ピークテーブルメソッドに含まれる最終面積と現在の繰返し測定
 (値) との重み付けキャリブレーション平均を計算する ために使われる重み付け係数です。
- **スケール** ピークテーブル 多項式により近似できる濃度と面積との関係を求める目的で、ピークの検量線を決定する前に濃度に対して適用されます。
- **重み付け** ピークテーブル最小二乗法による回帰計算に使用される LSQ 重み 付け法です。通常、小さな面積と濃度を表す点の 比重を大きくします。

重み付け(LSQ 重み付け)

最小二乗法の回帰計算に使用する LSQ 重み付け方法として、1/x または 1/ ×² を 選択すると、小さな濃度および面積値の比重が高くなります。LSQ 重み付けは、 直線、二次曲線および三次曲線の検量線に適用できます。以下に例を示します。



LSQ 重み付けなしの直線検量線



1/xのLSQ重み付け付きの直線検量線

644



Linear Fit with 1/ x²の LSQ 重み付け付きの直線検量線

www.agilent.com



© Agilent Technologies 2010, 2011

Printed in Germany



Agilent Technologies