

## ご注意

© Agilent Technologies, Inc. 2013

このマニュアルは米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc.の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形式や方法（電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む）においても、禁止されています。

### マニュアル番号

AT2B4A15

### エディション

第3版, 2013年3月

Printed in Japan

アジレント・テクノロジー株式会社

東京都八王子市高倉町9番1号

192-8510, Japan

### ソフトウェアリビジョン

このマニュアルは、  
Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition  
Rev.C.01.05 [36]  
HPLC用ChemStationに対応しています。

### 保証

このマニュアルに含まれる内容は「現状のまま」提供されるもので、将来のエディションにおいて予告なく変更されることがあります。また、Agilentは、適用される法律によって最大限に許可される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報の商品性および特定の目的に対する適合性に関する黙示の保障を含めて（ただしそれだけには限定されません）、いかなる明示的または黙示的な保障も行いません。Agilentは、このマニュアルまたはそれに含まれる情報の所有、使用、または実行に付随する過誤、または偶然的または間接的な損害に対する責任を一切負わないものとします。Agilentとお客様の間に書面による別の契約があり、本マニュアルの内容に対する保証条項が同文書の条項と矛盾する場合は、別の契約の保証条項が適用されます。

### 技術ライセンス

このマニュアルで説明されているハードウェアおよびソフトウェアはライセンスに基づいて提供され、そのライセンスの条項に従って使用またはコピーできます。

### 安全に関する注意

#### 注意

注意は、危険を表します。これは、正しく実行されない場合、または指示を順守されない場合に、製品の損害または重要なデータの損失にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起しています。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、注意を無視して先に進んではなりません。

#### 警告

警告は、危険を表します。これは、正しく実行されない場合、または指示が順守されない場合に、人身への傷害または死亡にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起しています。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。

# 目次

## 第1章 OpenLAB コントロールパネルの概要

1-1. OpenLAB CDS コントロールパネルの起動	1-2
1-2. OpenLAB CDS コントロールパネルの概要	1-2
1-2-1. OpenLAB CDS コントロールパネルの画面構成	1-2
1-2-2. 管理タブ	1-3
1-2-3. ライセンスについて	1-3
1-2-4. ライセンスファイルの登録	1-4
1-2-5. 機器タブ	1-5

## 第2章 システムの起動・終了と画面構成

2-1. HPLC 機器の電源投入	2-2
2-2. オンラインソフトウェアの起動	2-2
2-3. オンラインヘルプとマニュアル	2-2
2-4. 画面構成	2-2
2-5. プレファレンス設定でのパスの設定	2-5
2-6. システムの終了	2-5
2-6-1. 終了の準備	2-5
2-6-2. ソフトウェアの終了	2-5
2-6-3. 機器の電源オフ	2-5

## 第3章 マスターメソッドの作成

3. マスターメソッドの作成	3-2
3-1. マスターメソッドとは	3-2
3-2. メソッドの編集	3-2
3-2-1. 初期メソッドの読み込み	3-3
3-2-2. メソッド全体の編集 (メソッド&ランコントロール)	3-3
<メソッド編集項目>	3-3
<メソッド情報>	3-3
<注入ソースの選択>	3-4
<機器メソッド設定>	3-4
<バイナリポンプの設定>	3-5
<クォータナリポンプの設定>	3-7
<アイソクラティックポンプの設定>	3-9
<標準オートサンブラの設定>	3-10
<高性能オートサンブラ/ウェルプレートオートサンブラの設定>	3-11
<インジェクタプログラムの設定例>	3-13
<カラムコンパートメントの設定>	3-14
<UV-Vis 検出器の設定>	3-15
<ダイオードアレイ検出器の設定>	3-16
<プログラマブル 3D 蛍光検出器の設定>	3-17
<示差屈折率検出器の設定>	3-19
<ELSD の設定>	3-20
<バルブ類の設定>	3-21
<シグナルの詳細>	3-22
<積分イベント>	3-22
<レポート条件>	3-23
<モニターカーブ>	3-24
<ランタイムチェックリスト>	3-24

3-2-3. 機器パラメータの一部変更	3-25
3-3. マスターメソッドの保存	3-25
3-4. カスタムフィールドの概要	3-25
3-5. 監査証跡有効について	3-25

## 第4章 システムの準備

4-1. 移動相の準備	4-2
4-2. 機器の準備	4-2
4-2-1. ポンプのオン/オフ操作	4-2
4-2-2. デガッサ内の置換	4-2
4-2-3. ポンプのパージ	4-2
4-2-4. 流路の溶媒の置換	4-3
4-2-5. カラムの接続	4-3
4-3. システム全体のオン	4-3
4-4. サンプルの設置	4-3
4-5. マスターメソッドの読み込み	4-3
4-6. システムステータスの確認	4-4
4-7. オンラインシグナルの確認	4-5

## 第5章 シングルラン分析

5-1. サンプル情報の設定	5-2
5-1-1. ウェルプレートの割り当て	5-2
5-1-2. サンプル情報の設定	5-3
5-2. メソッドの実行	5-4

## 第6章 シーケンス

6-1. シーケンスとは	6-2
6-2. シーケンスと結果セット	6-2
6-2-1. プレファレンスの設定	6-3
6-3. シーケンステンプレートの作成	6-3
6-3-1. キャリブレーションを含むシーケンステーブルの作成	6-4
6-3-2. 挿入、項目ウィザードの使用法	6-5
6-3-3. シーケンスパラメータの設定	6-6
6-3-4. シーケンス出力の設定	6-7
6-3-5. カスタムフィールドを持つメソッドのシーケンス	6-7
6-3-6. シーケンステンプレートの保存	6-7
6-4. シーケンス分析の開始	6-8
6-4-1. ウェルプレートの割り当て	6-8
6-4-2. シーケンス開始	6-8
6-5. シーケンスの一時停止	6-9
6-6. シーケンスの選択分析	6-9
6-7. イージーシーケンスの概要	6-9

## 第7章 データ解析のワークフロー:再解析と再計算

7-1. データ解析のモード	7-2
7-2. 再解析モード	7-4
7-2-1. 再解析モード	7-4
7-2-2. 結果セットとは	7-4
7-2-3. 結果セットの再解析	7-5
7-3. 再計算モード (任意のメソッドでの再計算)	7-6
7-3-1. 再計算モードのワークフロー	7-6
7-4. 前回の結果モード (DA.M 使用)	7-7
7-4-1. 前回の結果モードのワークフロー	7-7
7-5. データ解析画面の概要	7-8
7-5-1. データ解析画面の構成	7-8

## 第8章 データの読み込み

8-1. 結果セットのデータの読み込み	8-2
8-2. シングルランデータの読み込み	8-2
8-3. データ取込メソッドの表示	8-2
8-4. グラフィックスメニューでのウィンドウ表示	8-3
8-5. クロマトグラム表示に注釈を追加	8-3

## 第9章 積分

9-1. 自動積分	9-2
9-2. 積分条件を変更して積分	9-3
9-3. マニュアル積分	9-3

## 第10章 キャリブレーションテーブルの作成と定量

10-1. キャリブレーションテーブル	10-2
10-2. スタANDARD (標準試料) データの読み込み	10-2
10-3. 新規キャリブレーションテーブルの作成	10-2
10-4. キャリブレーション設定	10-3
10-5. キャリブレーションテーブルの編集	10-4
10-6. レポート設定	10-4
10-7. 多点検量線の作成	10-6
10-8. メソッドの保存	10-6
10-9. サンプルデータのレポート出力	10-6
10-10. マスターメソッドの更新、新しいマスターメソッドとして保存	10-6
10-11. リキャリブレーション	10-7
10-12. ISTD 法の設定	10-7

## 第11章 再解析モードでの結果セットのシーケンス解析

11-1. 再解析モードの概念	11-2
11-2. 結果セット全体の連続再解析	11-2
11-2-1. シーケンスサマリレポート	11-2
11-2-2. シーケンスサマリレポート: クラシックレポート使用	11-3
11-2-3. シーケンスサマリレポート: インテリジェントレポート使用	11-4
11-2-4. 連続再解析の実行	11-5
11-3. 異なるメソッドでのシーケンス結果セットの解析	11-5
11-4. 新規結果セットの作成	11-5

## 第12章 再計算モード

- 12-1. 再計算モードでの解析 12-2
- 12-2. オートステップ機能 12-3
- 12-3. 指定のメソッドで再計算 12-3

## 第13章 前回の結果モード

- 13-1. 前回の結果モード (D.A.M) での解析 13-2
- 13-2. マスターメソッドの解析条件の更新 13-2

## 第14章 レポートの概要

- 14-1. クラシックレポートの概要 14-2
- 14-2. インテリジェントレポート概要 14-3
  - 14-2-1. インテリジェントレポートの編集の概要 14-5

## 第15章 レビュー画面

- 15-1. シングルランのレポート表示 15-2
- 15-2. 結果セットのレポート表示 15-3
- 15-3. 結果セットのサマリレポート表示 15-3

## 第16章 スペクトル解析

- 16-1. スペクトルオプション 16-2
- 16-2. スペクトルの表示 16-3
- 16-3. スペクトルの印刷 16-3
- 16-4. ピーク純度の計算 16-3
- 16-5. 3Dプロット 16-4
- 16-6. 等高線表示 16-5
  - 16-6-1. クロマトグラム抽出 16-5
- 16-7. スペクトルライブラリサーチ 16-6
  - 16-7-1. 新規ライブラリの作成 16-6
  - 16-7-2. サーチ条件の設定 16-7
  - 16-7-3. ライブラリサーチの実行 16-8
  - 16-7-4. ライブラリサーチ情報の編集 16-8
  - 16-7-5. 自動ライブラリサーチ 16-9

## 第17章 PC メンテナンス

- 17-1. バックアップについて 17-2
- 17-2. ディスクの最適化 17-3
- 17-3. 電源の管理 17-3
- 17-4. ライセンスの管理 17-3

## 付録A イージーシーケンス

- A-1-1. イージーシーケンスとは (Easy Sequence) A-2
- A-1-2. イージーシーケンスの制限事項 A-2
- A-1-3. イージーシーケンスの操作タブ A-2
- A-1-4. イージーシーケンスの操作の流れ A-3
- A-2. イージーシーケンスセットアップテンプレートを作成する A-4
- A-3. イージーシーケンスをキューに追加する A-7
- A-4. イージーシーケンス実行時の注意点 A-9
- A-5. キューの操作 A-12
- A-6. 同じ、または類似のイージーシーケンスを実行する A-13

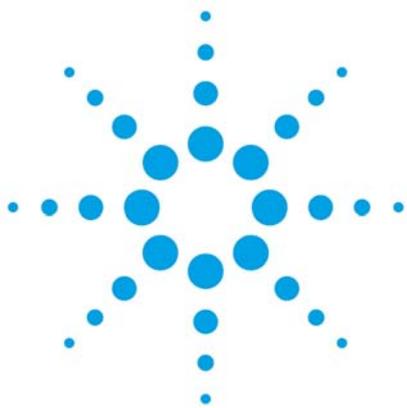
A-7. 周期的キャリブレーションのプランを作成する	A-14
A-8. イージーシーケンスの設定と操作のヒント	A-16

## 付録B 高性能オートサンプラのバルブ洗浄

B-1. 注入クリーニング（バルブクリーニング）の設定	B-2
B-2. インジェクタクリーニング(パーズキット)の設定	B-3

## 付録C ランキュー（待ち行列）の利用

C-1. ランキューのワークフローの概要	C-2
C-2. ランキューを使用する前の準備	C-3
C-3. シングルランをキューに追加する方法	C-4
C-4. シーケンスをキューに追加する方法	C-5
C-5. キューの操作	C-7
C-6. 分析を停止させるには	C-8



## 第1章 OpenLAB コントロールパネルの概要

1-1. OpenLAB CDS コントロールパネルの起動	1-2
1-2. OpenLAB CDS コントロールパネルの概要	1-2
1-2-1. OpenLAB CDS コントロールパネルの画面構成	1-2
1-2-2. 管理タブ	1-3
1-2-3. ライセンスについて	1-3
1-2-4. ライセンスファイルの登録	1-4
1-2-5. 機器タブ	1-5

1. OpenLAB コントロールパネルの概要

この章では OpenLAB コントロールパネルの概要について説明します。  
あらかじめ PC および周辺機器に電源を入れ、Windows にログオンしてください。  
OpenLAB コントロールパネルは機器のコンフィグレーション管理、ユーザー管理、権限管理、ライセンスの登録、各種ログの確認などシステム全体に関する管理を行います。

1-1. OpenLAB CDS コントロールパネルの起動

画面上のショーとカットをダブルクリックするか、  
ウィンドウズのメニューから

**スタート>すべてのプログラム>Agilent Technologies>OpenLAB>  
OpenLAB Control Panel** を選択します。



1-2. OpenLAB CDS コントロールパネルの概要

OpenLAB CDS コントロールパネルは、通常のセットアップが完了していれば  
日常特に変更するものではありません。  
ChemStation エディションでは、ユーザー管理、ロール（権限）等を管理できます。  
Agilent OpenLAB ECM を利用する場合に限り、21 CFR Part 11 に完全準拠することが可能になります。  
ECM が接続されていないシステムでは規制に対応しません。

1-2-1. OpenLAB CDS コントロールパネルの画面構成



画面左側は、機器と管理のナビゲーションです。  
画面上部のリボンは、ナビゲーションに応じたアクションボタンがあります。  
画面右上にはオンラインヘルプボタンがあります。  
なお、OpenLAB CDS コントロールパネルのマニュアルは、インストールメディアの  
ディスク 1 の ¥Docs¥jpn に収録されています。

## 1-2-2. 管理タブ

管理に関するナビゲーションでは、ライセンスの管理などができます。ナビゲーション上にシステムコンフィグレーションの項目があります。上部リボンで編集が可能ですが、据付初期の設定でご使用ください。ユーザー管理やロール（権限）管理をされない場合は、認証プロバイダーの設定は「なし」に設定して使用してください。そのほかの認証プロバイダを選択する場合は、OpenLAB CDS コントロールパネルの設定の前に、OS のユーザー設定やドメインサーバー等の設定が必要になります。



## 1-2-3. ライセンスについて

現在のライセンスは、**ナビゲーション>管理>ライセンス**を選択すると表示されます。ライセンスファイルは、

- ・ MAC アドレスと PC ホスト名にリンクして生成されたものを使用しています。
- ・ 他の PC では使用できません。
- ・ 他の PC で使用する場合や、PC 修理などで MAC アドレスが変更された場合は再度生成が必要になります。

インストール後に、PC のホスト名を変更しないでください。ライセンスサーバーおよび機器コントローラと通信ができなくなり、システムが使用不可となります。お客様がご購入されたライセンスファイルは、Agilent Subscribe Net サイトでオンライン管理されており、ライセンスファイルへは、据付時に登録されたお客様か、Agilent の許可されたエンジニアのみがアクセス可能です。

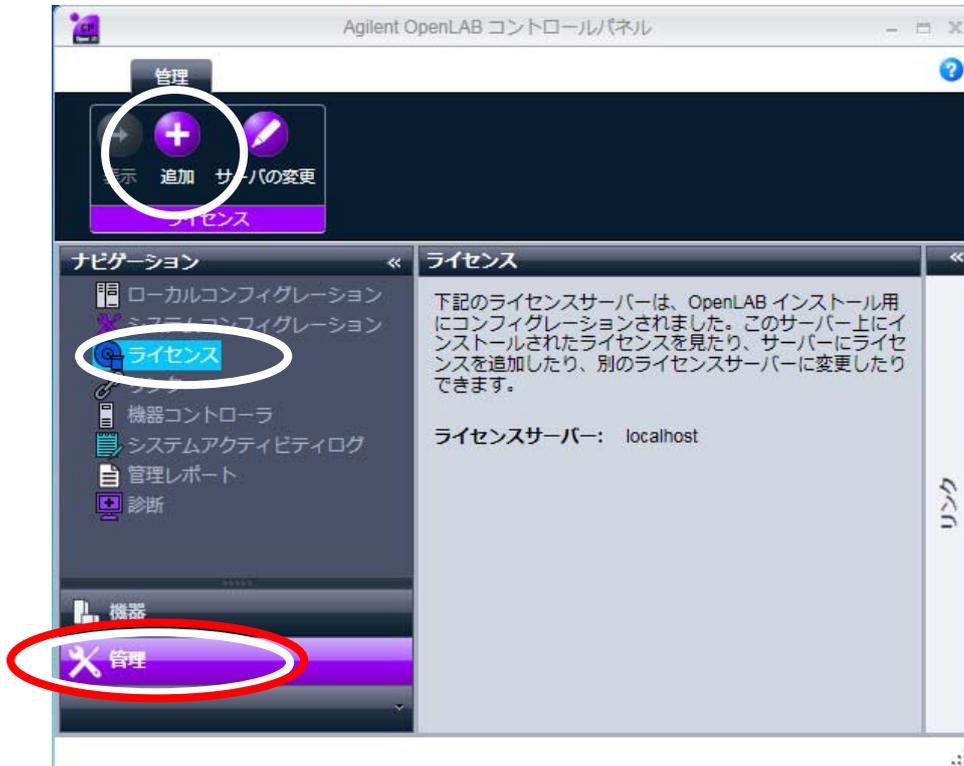
納入されたソフトウェアの Authorization Code は、ライセンスを再作成する際に必要となります。大切に保管をお願いします。

1-2-4. ライセンスファイルの登録

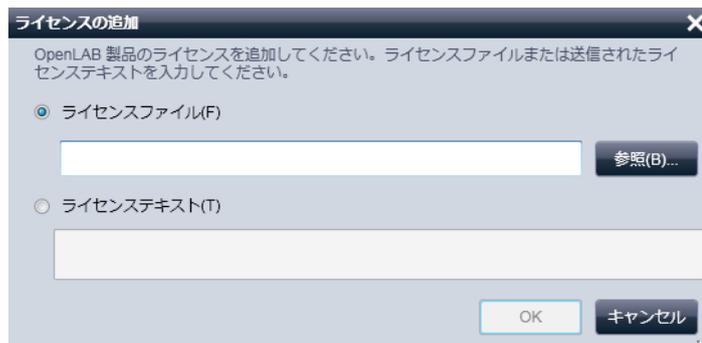
再度生成したライセンスファイルは、上部リボンの追加ボタンで登録することができます。

**管理タブ>ライセンスを選択>追加ボタン**を選択してください。

通常、この操作は据え付け時（または再インストール時）に、担当エンジニアが一度だけ実施します。



**参照** ボタンをクリックしてライセンスファイルを選択し登録してください。



## 1-2-5. 機器タブ

機器に関するナビゲーションでは、右画面に ChemStation ソフトウェアの起動ボタンや、機器の現在のステータスが表示されます。

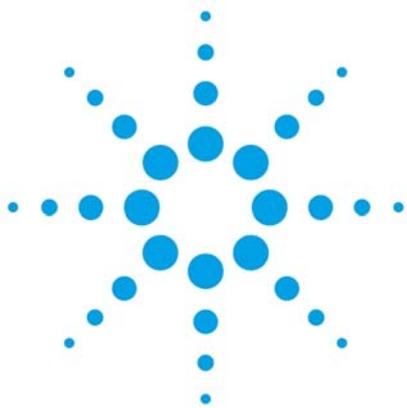


機器を構成するには、ロケーション（Lab\_01 など）を作成し、そのロケーションに機器を作成します。機器の名前（HPLC\_01 など）と機器タイプ（Agilent LC System）等を設定すると、ロケーションに機器が作成されます。この機器を選択して、上部リボンの機器コンフィグレーションで、機器の構成を選択します。

機器を選択している状態では、ChemStation ソフトウェアのオンラインソフトウェアの開始とオフラインソフトウェアの起動が可能です。

（オンラインとオフラインを同時に使用する場合は、オンラインを先に起動してください。）  
 オンラインソフトウェアは、データ採取用で、オフラインソフトウェアはデータ解析用です。  
 また、上部リボンのショートカットの作成ボタンから、オンラインソフトウェア、オフラインソフトウェアのショートカットをデスクトップ上に作成することができます。  
 この画面では選択されている機器のステータス情報を確認することができます。





## 第2章 システムの起動・終了と画面構成

2-1. HPLC 機器の電源投入	2-2
2-2. オンラインソフトウェアの起動	2-2
2-3. オンラインヘルプとマニュアル	2-2
2-4. 画面構成	2-2
2-5. プレファレンス設定でのパスの設定	2-5
2-6. システムの終了	2-5
2-6-1. 終了の準備	2-5
2-6-2. ソフトウェアの終了	2-5
2-6-3. 機器の電源オフ	2-5

## 2. システムの起動・終了と画面構成

この章では、電源投入とソフトウェア起動の順序、また、終了の順序の順序について説明します。

### 2-1. HPLC 機器の電源投入

- ①PC および周辺機器に電源を入れます。
- ②Windows にログオンします。
- ③HPLC 各機器の電源スイッチをオンにします。

### 2-2. オンラインソフトウェアの起動

OpenLAB コントロールパネルの機器のパネルから、起動をクリックするか、デスクトップ上の機器 1 オンラインショートカットをダブルクリックします。オンラインソフトウェアはデータ採取用で、オフラインソフトウェアはデータ解析用です。オンラインソフトとオフラインソフトを同時に使用する場合は、必ず、オンラインソフトを先に起動しておいてください。

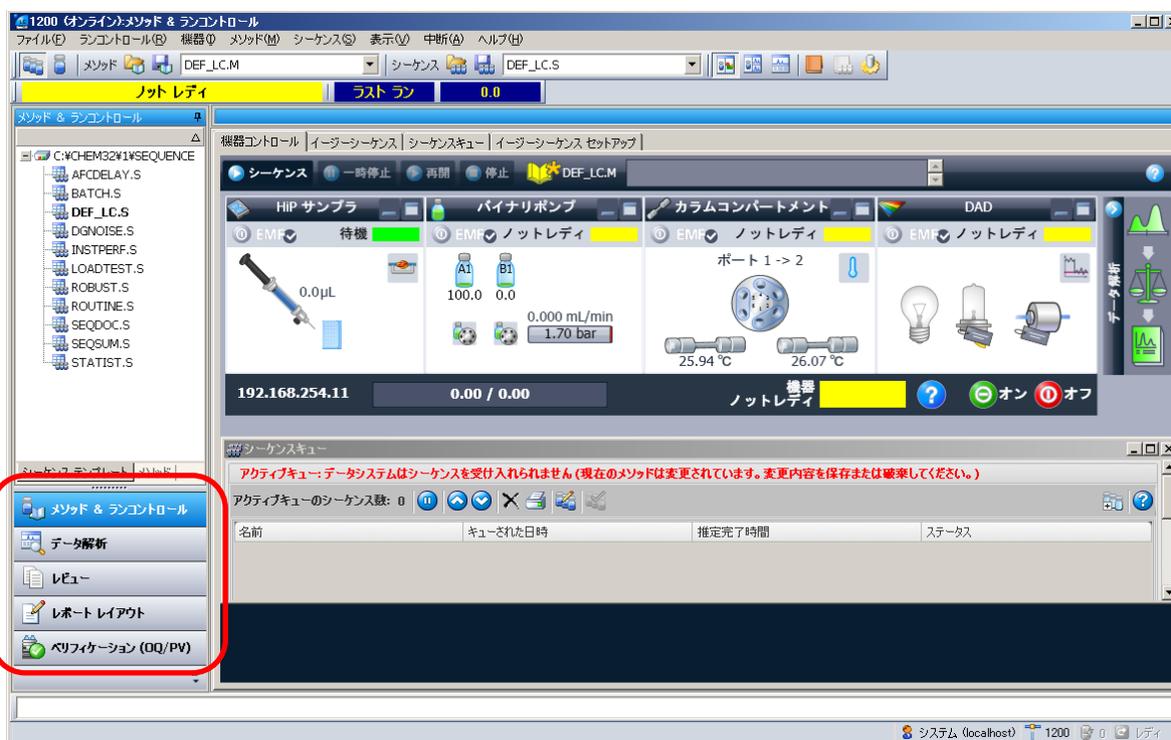


### 2-3. オンラインヘルプとマニュアル

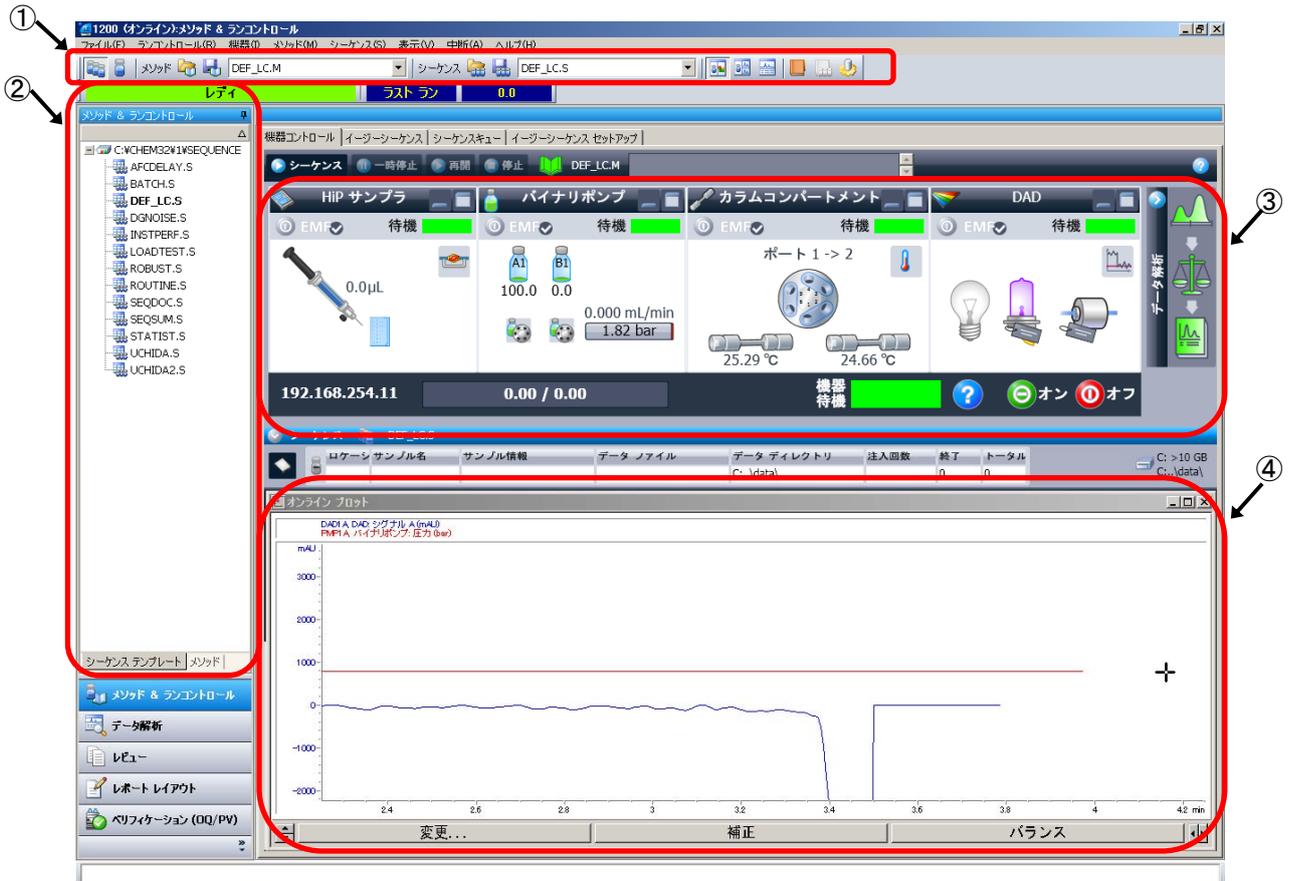
オンラインヘルプを呼び出すにはキーボードの F 1 キーを押してください。画面に応じたヘルプが表示されます。また、マニュアルは「操作原理」「コンセプトガイド」が、インストールディスク 2 の ¥Docs¥jpn に収録されています。

### 2-4. 画面構成

ソフトウェアは 5 つの画面から構成されています。メソッド&ランコントロール、データ解析、レビュー、レポートレイアウト、ベリフィケーションの 5 種類の画面の切り替えは左下の画面切り替え（ビュー切り替え）のボタンをクリックします。



メソッド&ランコントロール画面の概要を示します。



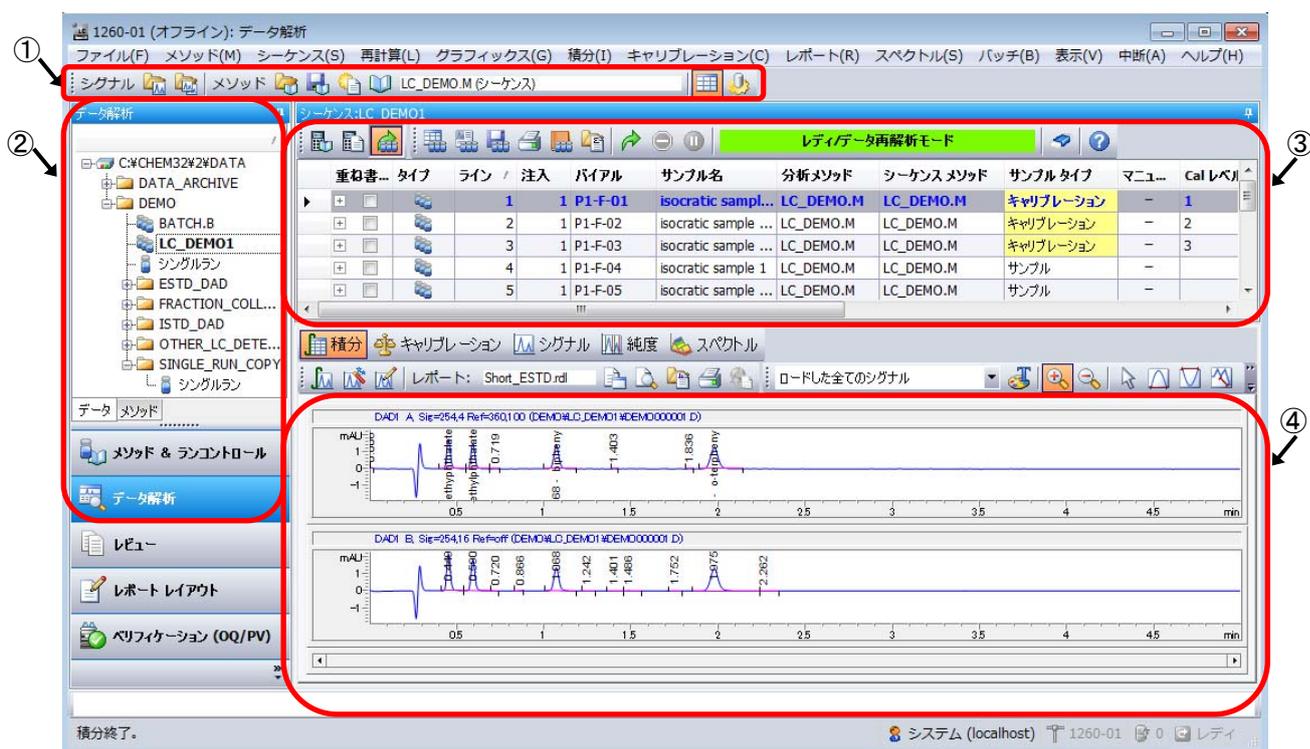
- ① ツールバー：現在のマスターメソッド、シーケンステンプレートを表示しています。
- ② ChemStation エクスプローラー：シーケンステンプレートとマスターメソッドを迅速に読み込ませることができます。右クリックで読み込みメニューなどが表示されます。
- ③ ステムダイアグラム：HPLC 機器のステータス表示と、各機器に右クリックメニューがあります。
- ④ オンラインプロット：検出器の出力をプロットします。

※必要に応じて現在のログブックを表示させることができます。

メニューから、**表示>ログブック>現在のログブック**を選択します。

ソフトウェアの基本操作は、メニューの中にあります。ツールバーのボタンは、頻繁に使用する項目へのショートカットボタンです。

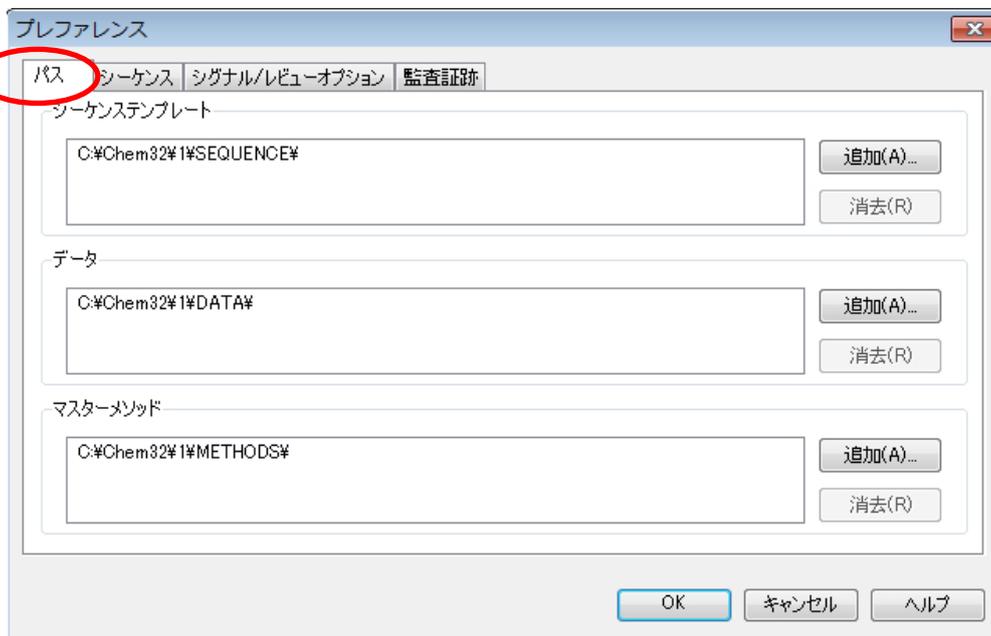
データ解析画面の概要を示します。



- ① ツールバー：現在の解析メソッドを表示しています。
- ② ChemStation エクスプローラー：データ群や解析メソッドを迅速に読み込ませることができます。右クリックで読み込みメニューなどが表示されます。
- ③ ナビゲーションテーブル：読み込まれた一連のデータを表示します。  
1行が1つの分析データを示します。
- ④ クロマトグラムウィンドウ：読み込まれたデータのクロマトグラムを表示します。  
ソフトウェアの基本操作は、メニューの中にあります。ツールバーのボタンは、頻繁に使用する項目へのショートカットボタンです。

## 2-5. プレファレンス設定でのパスの設定

メニューから、**表示>プレファレンス>パス**のタブを選択すると、これから使用するシーケンステンプレート、データ、マスターメソッドのパスを追加することができます。追加したパスは、ChemStation エクスプローラーのツリー図に現れるようになります。



## 2-6. システムの終了

## 2-6-1. 終了の準備

ソフトウェアの終了の前に、システムの洗浄、保管のための溶媒への置き換えなどを行なって各機器のステータスをスタンバイ状態にしてください。

(ポンプの操作などは後の章を参照してください)

システムをスタンバイにするには、メニューから、**機器>システムオフ**を選択します。

## 2-6-2. ソフトウェアの終了

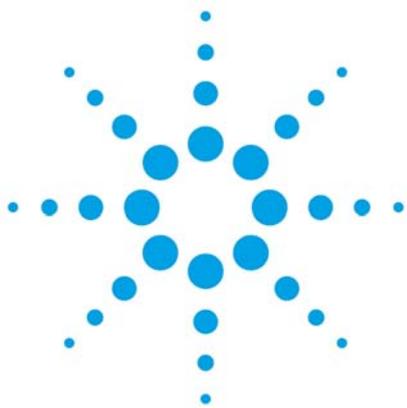
ソフトウェアは、右上隅の終了ボタンか、メニューから、**ファイル>終了**の操作で終了できます。編集後保存していないメソッド、シーケンス、テンプレートなどがある場合は、保存するか確認があります。必要に応じて保存してください。

## 2-6-3. 機器の電源オフ

ソフトウェアが終了したら、HPLC 機器の電源をオフにしてください。

Windows を終了させ PC の電源と周辺機器の電源をオフにしてください。





## 第3章 マスターメソッドの作成

3. マスターメソッドの作成	3-2
3-1. マスターメソッドとは	3-2
3-2. メソッドの編集	3-2
3-2-1. 初期メソッドの読み込み	3-3
3-2-2. メソッド全体の編集 (メソッド&ランコントロール)	3-3
<メソッド編集項目>	3-3
<メソッド情報>	3-3
<注入ソースの選択>	3-4
<機器メソッド設定>	3-4
<バイナリポンプの設定>	3-5
<クォータナリポンプの設定>	3-7
<アイソクラティックポンプの設定>	3-9
<標準オートサンブラの設定>	3-10
<高性能オートサンブラ/ウェルプレートオートサンブラの設定>	3-11
<インジェクタプログラムの設定例>	3-13
<カラムコンパートメントの設定>	3-14
<UV-Vis 検出器の設定>	3-15
<ダイオードアレイ検出器の設定>	3-16
<プログラマブル 3D 蛍光検出器の設定>	3-17
<示差屈折率検出器の設定>	3-19
<ELSD の設定>	3-20
<パルプ類の設定>	3-21
<シグナルの詳細>	3-22
<積分イベント>	3-22
<レポート条件>	3-23
<モニターカーブ>	3-24
<ランタイムチェックリスト>	3-24
3-2-3. 機器パラメータの一部変更	3-25
3-3. マスターメソッドの保存	3-25
3-4. カスタムフィールドの概要	3-25
3-5. 監査証跡有効について	3-26

3. マスターメソッドの作成

この章ではマスターメソッドの作成と保存について説明します。

3-1. マスターメソッドとは

マスターメソッドは、分析条件の指示書の役割をします。機器のデータ採取条件や解析の条件も含まれます。

3-2. メソッドの編集

ここでは例として、以下の条件のマスターメソッドを作成します。  
カラムの種類、検出器の種類により条件を変更することがあります。

条 件	
カラム	Poroshell 120 EC-C18 3.0 x 50 mm, 2.7 um (p/n 699 975-302)
サンプル	アイソクラティック標準試料 <sup>*1</sup>
	ジメチルフタレート      Dimethylphthalate :DMP      0.15wt%
	ジエチルフタレート      Diethylphthalate :DEP      0.15wt%
	ビフェニル      Biphenyl(Diphenyl)      0.01wt%
	o-ターフェニル      o-Terphenyl      0.03wt%
移動相	水 : アセトニトリル = 35:65(V/V)
流量	1 mL/min
ヒーターブロック温度	35°C または 室温
検出器	ダイオードアレイ検出器(DAD)
	測定波長/バンド幅      254/4 nm
	リファレンス波長/バンド幅      500/100 nm
	ピーク幅(レスポンスタイム)      >0.05 min(1 sec)
	スリット      2 nm
	UV-VIS検出器(VWD)
	測定波長      254 nm
	ピーク幅(レスポンスタイム)      >0.05 min(1 sec)
	プログラマブル3D蛍光検出器(FLD)
	励起波長      246 nm
	測定波長      317 nm
	PMTゲイン      10
	ピーク幅(レスポンスタイム)      >0.2 min(4 sec)
	示差屈折率検出器(RID)
	光学系温度制御      None
	ピーク幅(レスポンスタイム)      >0.2 min(4 sec)
注入量	1 μL (DAD, VWD, FLD) *1
	20 μL (RID)

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

## 3-2-1. 初期メソッドの読み込み

初期状態のメソッドから編集を始めるため、  
デフォルトメソッドを読み込みます。

(この操作でメソッドの内容をリセットできます。)

メソッド&ランコントロールの画面の

メニューから、**メソッド> 新規メソッド**

を選択します。画面上には初期メソッドの

DEF\_LC.M が読み込まれます。

あるいは、メソッド読み込みのアイコンをクリックします。

DEF\_LC.M を選択します。



## 3-2-2. メソッド全体の編集 (メソッド&amp;ランコントロール)

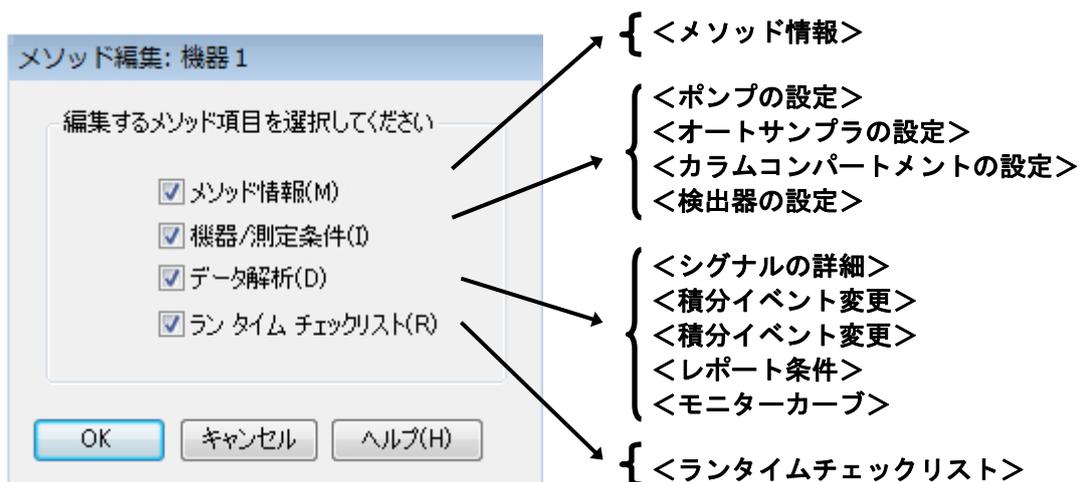
メソッドを初期状態から編集するには、設定画面を連続的に表示するメソッド全体の編集が  
便利です。メニューから、**メソッド>メソッド全体の編集**を選択します。

## &lt;メソッド編集項目&gt;

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

① データを取り込むため 装置/データ取り込みを中心に設定します。

ここでは全ての項目をクリックし、データ解析に関する画面も表示します。



②  をクリックします。

## &lt;メソッド情報&gt;

メソッド情報の画面が表示されます。

① 必要に応じてメソッドに関するコメントを入力して下さい。



② 入力後、 をクリックします。

### <注入ソースの選択>

- ① 注入装置を選択します。通常はオートサンブラを選択してください。オートサンブラを示す表記は、機種によって異なります。



- ② 入力後、**OK** をクリックします。

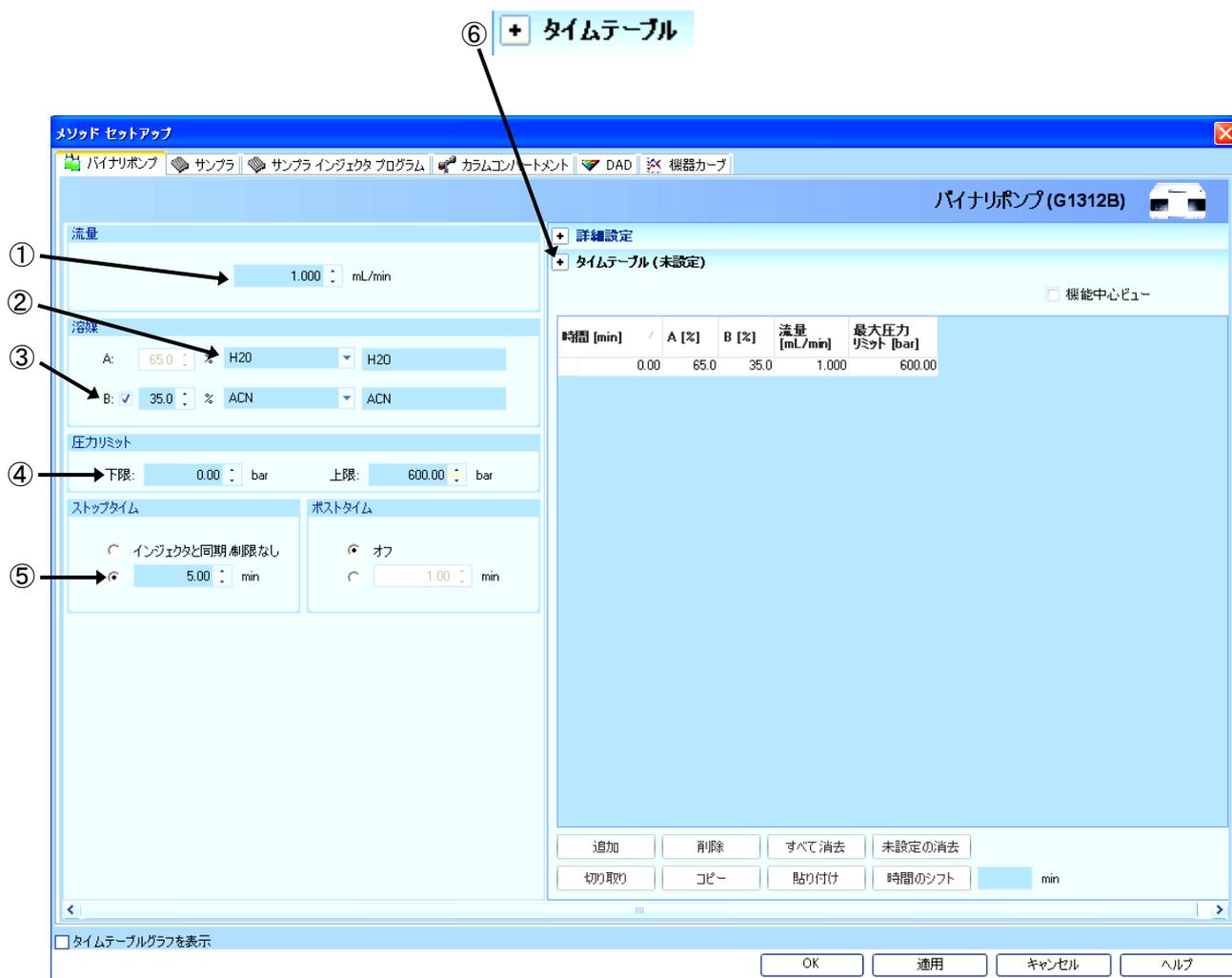
### <機器メソッド設定>

各機器の設定は、1つのダイアログボックスで設定します。(メソッドセットアップ画面)  
このダイアログボックスのタブをクリックすることで、ポンプ、オートサンブラ、検出器等、各モジュールの設定画面が出ます。  
図はバイナリポンプの設定画面の例です。



- OK** ボタンは、全ての機器の設定が済んでから、クリックします。

## ＜バイナリポンプの設定＞



- ①流量を設定します。
- ②移動相の種類を選択します。これは自動圧縮率補正に使用されます。\*1
- ③移動相の混合比はBのチェックボックスをクリックして、溶媒Bの割合を入力します。  
溶媒Aの割合が自動的に変更されます。必要に応じて移動相の名称を入力します。
- ④カラムの耐圧等に応じて圧カリミットを設定します。
- ⑤一検体あたりのストップタイムを設定します。

## ＜補足＞

- ⑥グラジエント分析などで、タイムテーブルを設定する場合、+タイムテーブル をクリックしてから編集します。

\*1 : G1312C(VL)の場合は詳細設定で溶媒の圧縮率を入力します

⑦タイムテーブルの入力例を示します。

**+ タイムテーブル (1/164 イベント)**  機能中心ビュー

時間 [min]	A [%]	B [%]	流量 [mL/min]	最大圧力 リミット [bar]
0.00	65.0	35.0	1.000	600.00
▶ 8.00	20.0	80.0	---	---

⑧ →      
     min

例：「8分後に」「B%が80%になるように」

- ⑧ 「追加」 ボタンをクリックします。
- ⑨ 「時間」の数値入力欄をクリックし、希望の時間を入力します。溶媒組成の変更の場合、目標の時間を入力します。
- ⑩ 「B%」の入力欄をクリックして、目標の溶媒比率を入力します。  
溶媒組成の変更の場合、設定時間の設定値に向かって直線的にグラジェントします。
- ⑪ グラジェントの場合は、「ポストタイム」の設定をしてください。  
分析終了後、初期移動相条件で送液する時間を設定します。

**ポストタイム**

オフ

min

## &lt;クォータナリポンプの設定&gt;

① 流量: 1.000 mL/min

② 溶媒: A: 35.0 % H2O, B:  65.0 % ACN, C: 0.0 %, D: 0.0 %

③ 圧カリミット: 下限: 0.00 bar, 上限: 600.00 bar

④ ストップタイム:  5.00 min

⑤ + タイムテーブル

①流量を設定します。

②移動相の混合比はBのチェックボックスをクリックして、溶媒Bの割合を入力します。  
溶媒Aの割合は自動的に変更されます。必要に応じて移動相の名称を右のボックスに入力します。

③カラムの耐圧等に応じて圧カリミットを設定します。

④一検体あたりのストップタイムを設定します。

## &lt;補足&gt;

⑤グラジエント分析などで、タイムテーブルを設定する場合、+タイムテーブル をクリックしてから編集します。

⑥タイムテーブルの入力例を示します。

+ タイムテーブル (1/184 イベント)  機能中心ビュー

時間 [min]	A [%]	B [%]	C [%]	D [%]	流量 [mL/min]	最大圧力 リミット [bar]
0.00	35.0	65.0	0.0	0.0	1.000	600.00
8.00	20.0	80.0	0.0	0.0	---	---

↑ ⑧
↑ ⑨

⑦ → 追加 削除 すべて消去 未設定の消去

切り取り コピー 貼り付け 時間のシフト min

例：「8分後に」「B%が80%になるように」

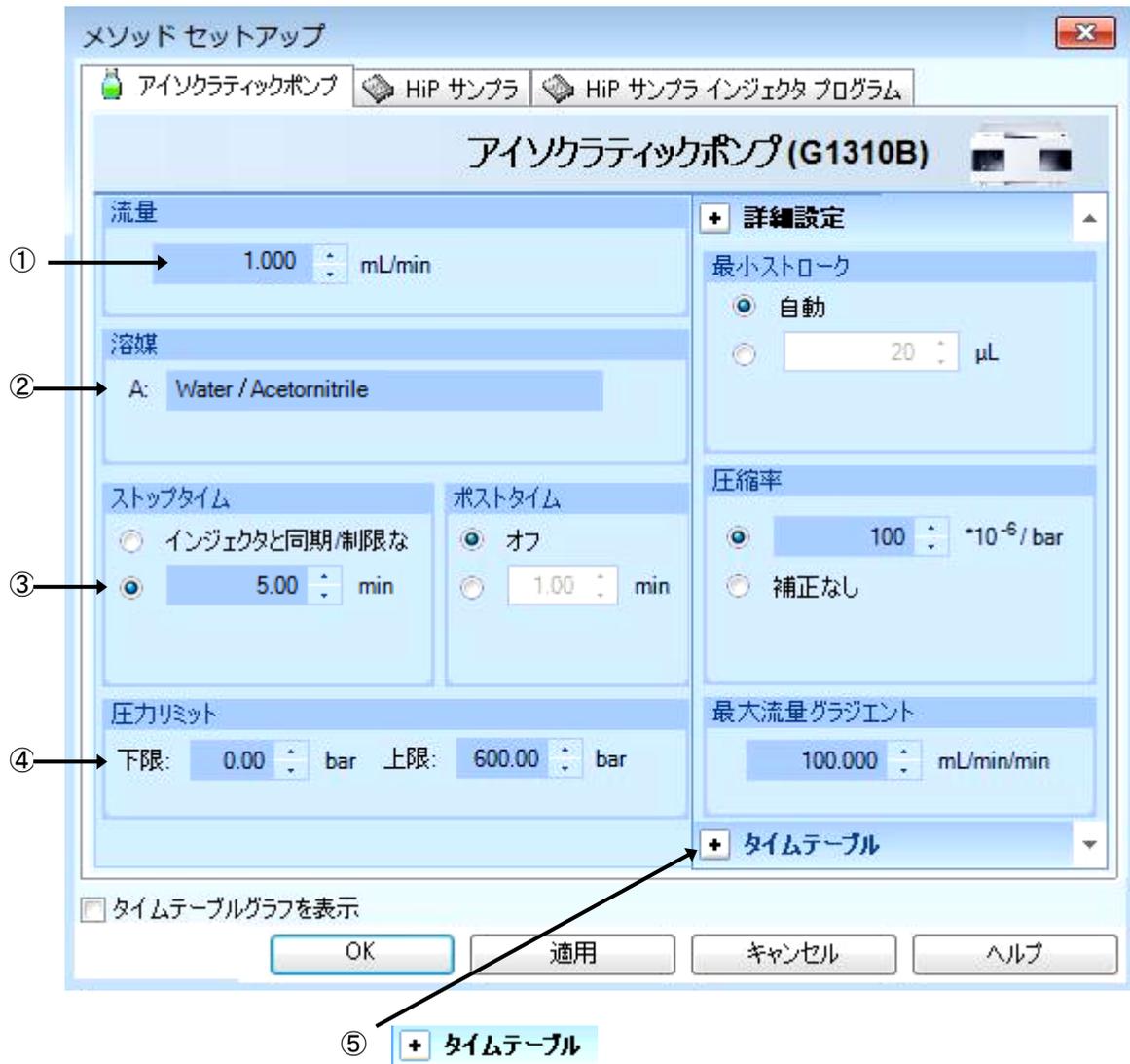
- ⑦「追加」ボタンをクリックします。
- ⑧「時間」の数値入力欄をクリックし、希望の時間を入力します。  
溶媒組成の変更の場合、目標の時間を入力します。
- ⑨「B%」の入力欄をクリックして、溶媒比率を入力します。  
溶媒組成の変更の場合、設定時間の設定値に向かって直線的にグラジェントします。
- ⑩グラジェントの場合は、「ポストタイム」の設定をしてください。  
分析終了後、初期移動相条件で送液する時間を設定します。

ポストタイム

オフ

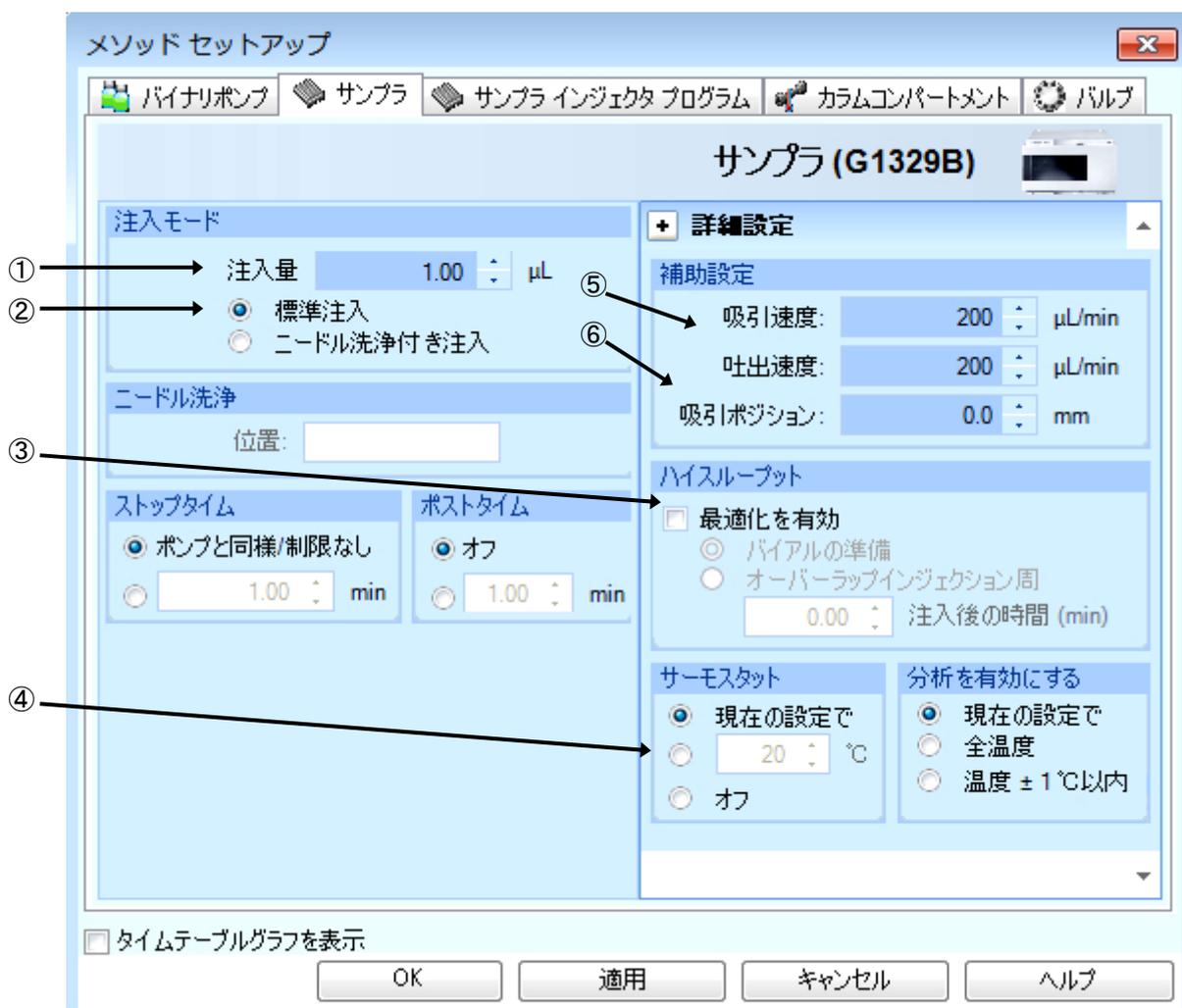
5.00 min

## ＜アイソクラティックポンプの設定＞



- ① 流量を設定します。
- ② 移動相の名称を入力します。
- ③ ストップタイムを設定します。
- ④ カラムの耐圧等に応じて圧カリミットを設定します。
- ⑤ 流量などで、タイムテーブルを設定する場合、+タイムテーブル をクリックしてから編集します。

<標準オートサンブラの設定>



- ① 注入量を設定します。
- ② 注入方法を次の3つから選択します。
  - ・標準注入
  - ・ニードル洗浄+注入 → 洗浄バイアルを「ニードル洗浄」欄で設定します。
  - ・インジェクタプログラム使用 → 隣の「インジェクタプログラム」タブで編集します。
 注意：インジェクタプログラム使用時は、「注入モード」項目は無視され、インジェクタプログラムタブの設定に従います。
- ③ 最適化の方法を選択します。
  - オーバーラップインジェクション
    - ：指定時間後にバルブを切り替え、次のサンプルを吸引します。
  - サンプルバイアルを準備
    - ：指定時間後にバイアルをインジェクションポートの近くに準備します。
- ④ サンプルサーモスタットの温度設定をします。
- ⑤ サンプル溶媒の粘性を考慮し、吸引スピード・吐出スピードを設定します。
- ⑥ サンプルを吸引する際のニードルの位置を設定します。

### <高性能オートサンプラ/ウェルプレートオートサンプラの設定>



- ① 注入量を設定します。
- ② 注入方法を次の3つから選択します。
  - ・標準注入
  - ・ニードル洗浄+注入 → 洗浄方法を「ニードル洗浄」欄で設定します。
  - ・インジェクタプログラム使用 → 隣の インジェクタプログラム タブで編集します。

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

- ③ ニードル洗浄を実施する場合に設定します。  
 「フラッシュポート」の場合は「洗浄時間」を  
 「バイアル」の場合は、洗浄バイアル位置と繰り返し回数を設定します。

注意： 洗浄にバイアルを使用する際には、バイアルにキャップはつけません。

注意： フラッシュポート用に使用できる溶液は、標準ペリスタリティックポンプ仕様の場合  
 水：メタノール = 50：50      または      水：アセトニトリル = 50：50 です。

詳細設定

- ④ ⑤ サンプルの粘性を考慮し、吸引速度  
吐出速度  
を設定します。
- ⑥ サンプルを吸引する際の  
ニードルの位置を設定します。
- ⑦ 平衡化時間（吸引動作直後の待ち時間）  
を設定します。

**+ 詳細設定**

補助設定

- ④ → 吸引速度: 100.0 μL/mir.
- ⑤ → 吐出速度: 100.0 μL/min
- ⑥ → 吸引ポジション: 0.0 mm
- ⑦ → 平衡時間: 2.0 sec
- ⑧ → サンプルフラッシュアウト係数: 5.0 × 注入量

バイアルウェル底部センサ

- ⑧ この項目は、オーバーラップ インジェクションを有効にし、“サンプルがフラッシュアウトされたとき”を選択した際に使われる倍数の設定です。  
注入量（+ニードルシートの容量）にサンプルフラッシュアウト係数を乗じた容量の移動相が送液された際に、バルブを切り替えます。

<補足>

- ⑨ **ハイスループットの項目**  
ハイスループット分析を目的とする場合のみ  
設定します。  
(図は例です)  
 自動ディレイボリューム低減  
 オーバーラップインジェクション  
バルブを切り替えるタイミングを、次の2つから  
選択します。  
・ サンプルがフラッシュアウトされたとき  
→ サンプルフラッシュアウト係数で  
計算された量の移動相が流れ出た後  
・ 注入後  min

ハイスループット

- 自動ディレイボリューム低減
- オーバーラップインジェクションの有効  
化
  - サンプルがフラッシュアウトされたとき
  - 注入後

0.00 min

- ⑩ サンプルサーモスタットの  
温度設定をします。

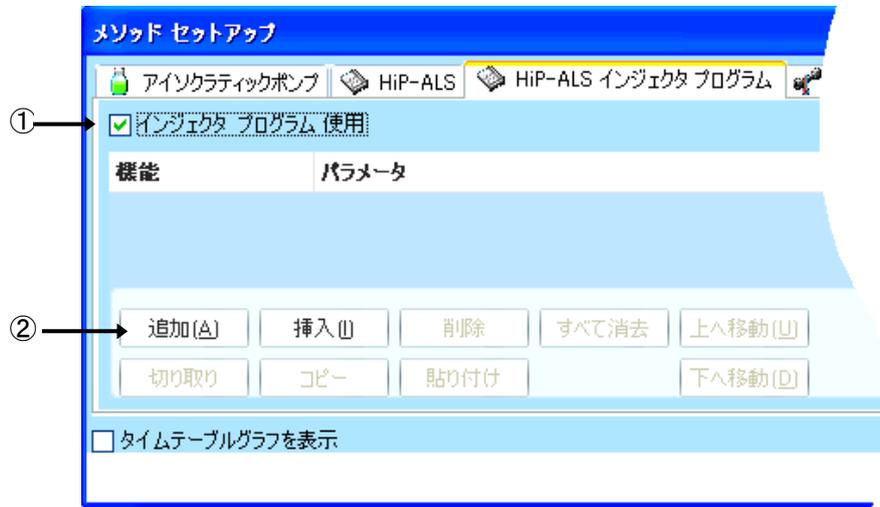
サーモスタット	分析を有効にする
<input type="radio"/> 現在の設定で <input checked="" type="radio"/> <input style="width: 50px;" type="text" value="10"/> °C <input type="radio"/> オフ	<input checked="" type="radio"/> 現在の設定で <input type="radio"/> 全温度 <input type="radio"/> 温度 ± 1 °C 以内

<インジェクタプログラムの設定例>

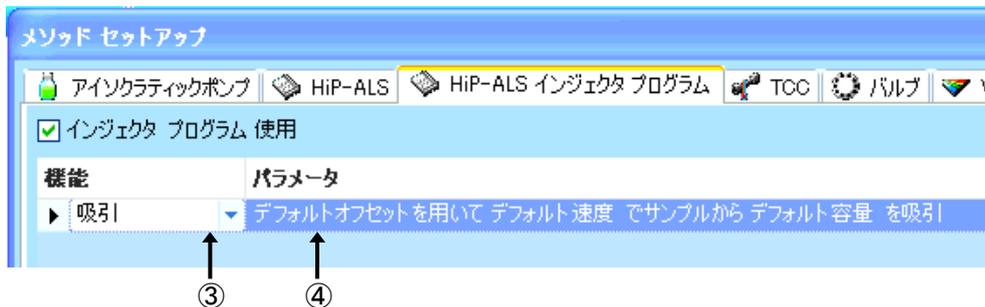
高性能オートサンプラ（G1367E）のインジェクタプログラムの入力方法の例を示します。

①インジェクタプログラム使用をチェックします。

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



②「追加」をクリックすると、「機能」と「パラメータ」行が増えます。



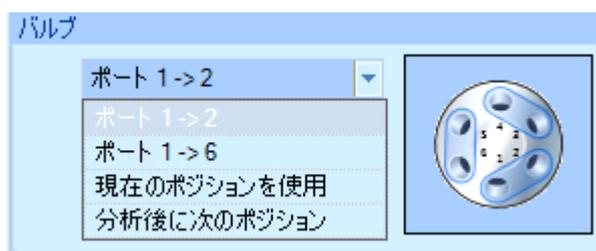
③選択した「機能」に応じて、④パラメータが表示されるので、ここをクリックしてパラメータ入力を行います。

機能	パラメータ								
▶ 吸引	デフォルトオフセットを用いて デフォルト速度 でサンプルから デフォルト容量 を吸引								
	<table border="0"> <tr> <td><b>吸引</b></td> <td><b>開始</b></td> <td><b>速度</b></td> <td><b>オフセットの使用</b></td> </tr> <tr> <td> <input checked="" type="radio"/> デフォルト  <input type="radio"/> 最大  <input type="radio"/> 100.00 μL                 </td> <td> <input checked="" type="radio"/> サンプル  <input type="radio"/> 位置  <input type="radio"/> シート  <input type="radio"/> 空気  <input type="radio"/> バイアル + 1                      トレイ プレート 行 列  <input type="radio"/> サンプル + 0 0 0 1                 </td> <td> <input checked="" type="radio"/> デフォルト  <input type="radio"/> 最大  <input type="radio"/> 200 μL/min                 </td> <td> <input checked="" type="radio"/> デフォルト  <input type="radio"/> 0.0 mm                 </td> </tr> </table>	<b>吸引</b>	<b>開始</b>	<b>速度</b>	<b>オフセットの使用</b>	<input checked="" type="radio"/> デフォルト <input type="radio"/> 最大 <input type="radio"/> 100.00 μL	<input checked="" type="radio"/> サンプル <input type="radio"/> 位置 <input type="radio"/> シート <input type="radio"/> 空気 <input type="radio"/> バイアル + 1 トレイ プレート 行 列 <input type="radio"/> サンプル + 0 0 0 1	<input checked="" type="radio"/> デフォルト <input type="radio"/> 最大 <input type="radio"/> 200 μL/min	<input checked="" type="radio"/> デフォルト <input type="radio"/> 0.0 mm
<b>吸引</b>	<b>開始</b>	<b>速度</b>	<b>オフセットの使用</b>						
<input checked="" type="radio"/> デフォルト <input type="radio"/> 最大 <input type="radio"/> 100.00 μL	<input checked="" type="radio"/> サンプル <input type="radio"/> 位置 <input type="radio"/> シート <input type="radio"/> 空気 <input type="radio"/> バイアル + 1 トレイ プレート 行 列 <input type="radio"/> サンプル + 0 0 0 1	<input checked="" type="radio"/> デフォルト <input type="radio"/> 最大 <input type="radio"/> 200 μL/min	<input checked="" type="radio"/> デフォルト <input type="radio"/> 0.0 mm						

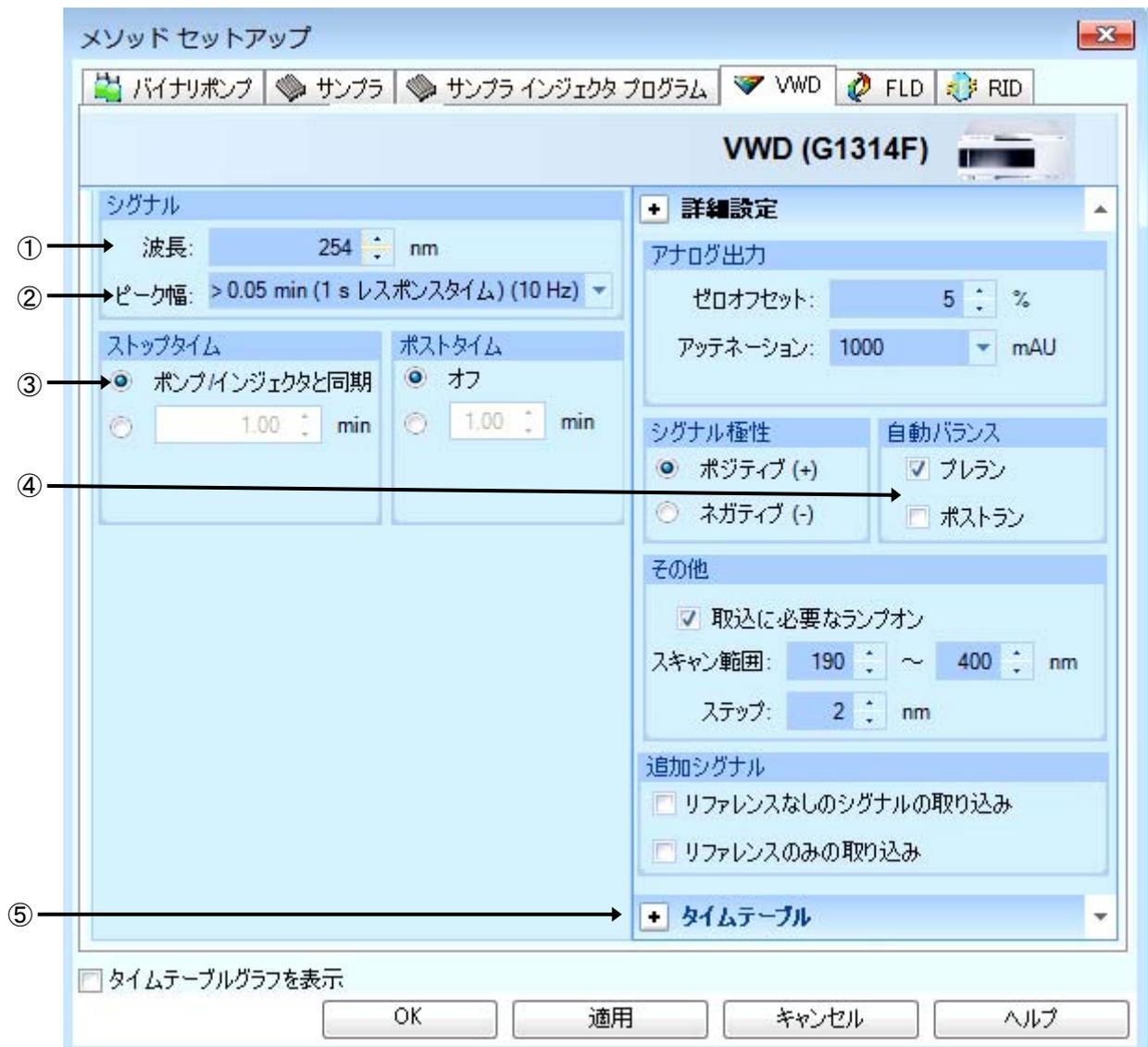
<カラムコンパートメントの設定>



- ①ボタンをクリックし、ヒーターブロックの温度を入力します。
- ②右のヒーターブロックの温度を設定します。左と同じ設定するには「組み合わせ」を選択します。
  - ・カラムコンパートメントと検出器の組み合わせで「検出器セルと同期」が選択できます。
  - ・モデルによっては、フロントドアの開閉を監視しています。この場合、「フロントドアが開いている場合」でも分析がスタートできる設定が可能です。
- ③カラムスイッチングバルブの位置を設定します。  
図は、6ポート2ポジションバルブの例ですが、分析終了後にポジションを変更する選択肢があります。



### <UV-Vis 検出器の設定>

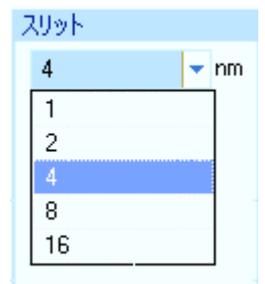
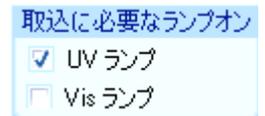


- ①波長を設定します。
- ②プルダウンからピーク幅を設定します。予想される最小ピーク幅と同等か、小さく設定します。  
(小さくしすぎるとノイズが大きくなるので注意してください。)
- ③分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイムはポンプ同様とします。
- ④オートサンブラ使用時に、測定直前に自動的にバランスをかけられます。  
プレランでバランスを実行する、を選択します。
- ⑤波長のタイムテーブルを設定する場合には、 +タイムテーブル をクリックして編集モードにします。

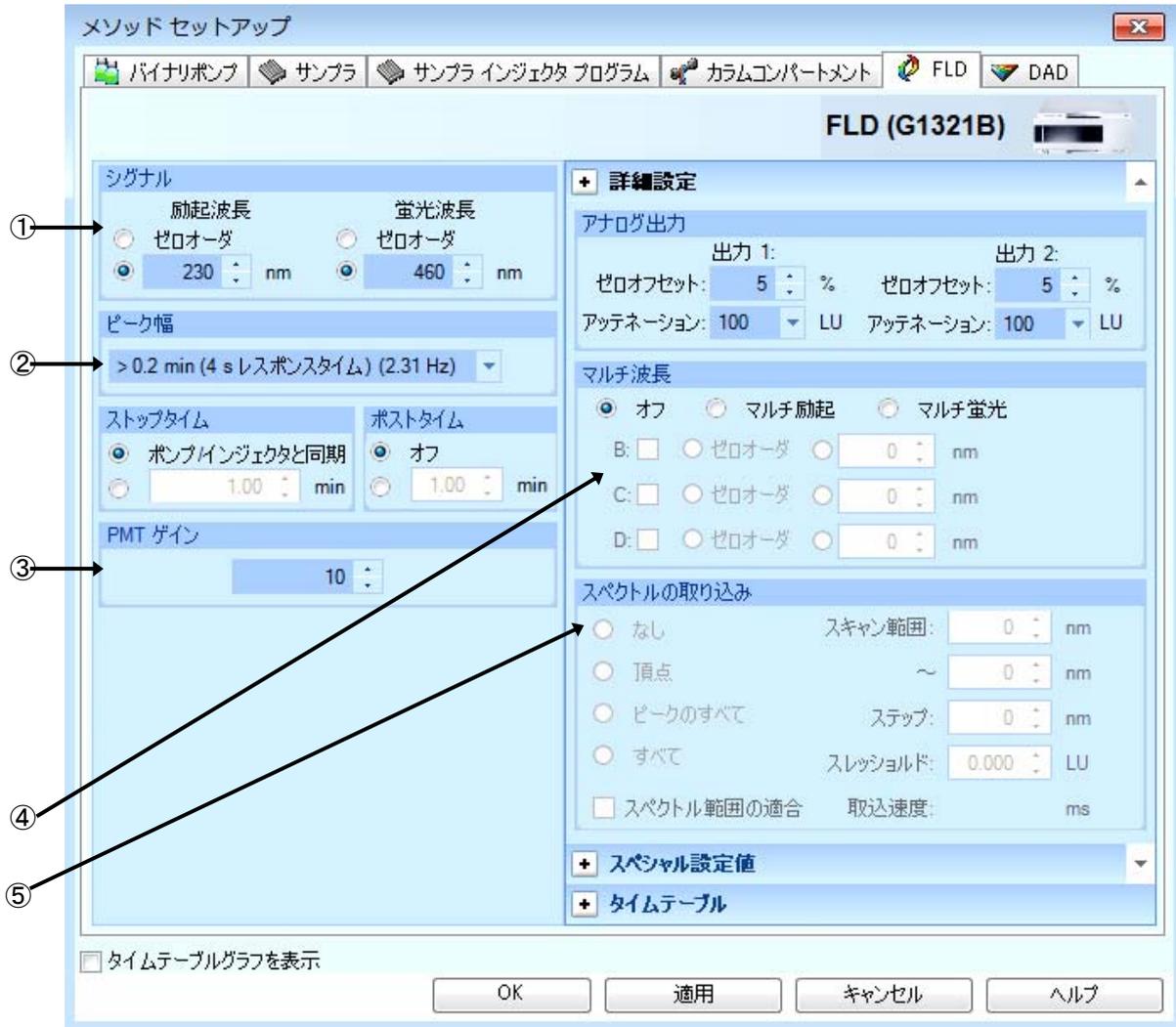
<ダイオードアレイ検出器の設定>



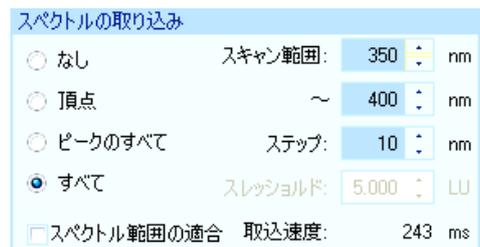
- ①シグナルは 8 波長まで採取できます。  
(機種により 5 波長まで)  
採取するシグナルのチェックボックスをクリック  
します。サンプルおよびリファレンス波長を設定します。
- ②プルダウンからピーク幅を選択します。  
予想される最少ピーク幅と同等か、小さく設定します。  
(小さくしすぎるとノイズが大きくなるので注意して  
ください。)
- ③分析時間をポンプと同期させるため、  
ストップタイムはポンプ同様とします。
- ④スペクトルの採取方法を選択します。  
また、スペクトルを取り込む波長範囲、  
ステップなどを 設定します。
- ⑤分析直前に自動的にバランスをかけるため、  
プレランを選択します。
- ⑥分析に必要なランプを選択します。  
DAD の機種によっては Vis ランプが存在します。  
必要な場合にはチェックを付けてください。
- ⑦DAD の機種によって、スリット幅 (Slit) を  
選択できるものがあります。  
する矢印をクリックし、選択します。



<プログラマブル 3D 蛍光検出器の設定>



- ① 励起波長、蛍光波長を設定します。
- ② プルダウンから、ピーク幅を選択します。
- ③ PMT-ゲイン(PMT-Gain)で信号の増幅を設定します。最大ピークが 100LU 程度になるよう調節してください。
- ④ マルチ Ex.またはマルチ Em.を選択すると、励起または蛍光波長について多波長検出やスペクトル採取を行うことができます。励起波長または蛍光波長について、測定波長を 3 波長まで追加することができます。(右図は設定例です)
- ⑤ スペクトルの採取方法を選択します。(右図は設定例です)

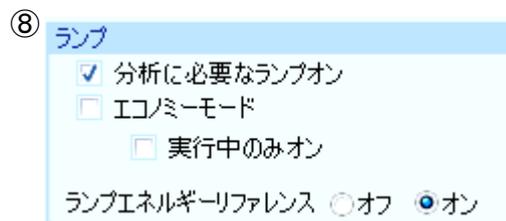


- ⑥ 波長のタイムテーブルを設定する場合には、**＋タイムテーブル**をクリックして編集モードにします。

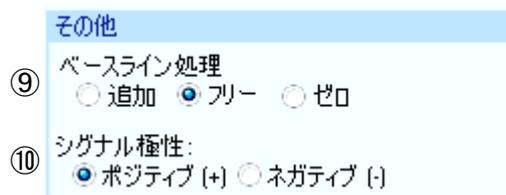
⑦さらに詳細な設定を行うためには、+ スペシャル設定値 を



- ⑧ランプ(Lamp)：ランプの点灯条件を設定します。
- ・分析に必要なランプオン（付けてください）  
分析中にランプを点灯します。
  - ・エコノミーモード： 低周波数でランプを点灯します。  
S/N 比は小さくなりますが、ランプの寿命が長くなります。
  - ・分析中のみ点灯：分析中のみランプを点灯します。  
通常この条件を選択します。
  - ・ランプエネルギーリファレンス：リファレンスダイオードを使用して、シグナルを補正します。  
S/N 比が改善されます。



- ⑨ベースライン処理：  
波長または PMT ゲインを変更した時のベースラインの処理方法を設定します。
- ・追加：元のベースライン位置にベースラインを合わせます。
  - ・フリー：ベースラインを調整しません。  
(ベースラインがシフトします。)
  - ・ゼロ補正：ベースラインを 0 LU(Luminescence Units)にします。
- ⑩シグナル極性：シグナルの極性を設定します。

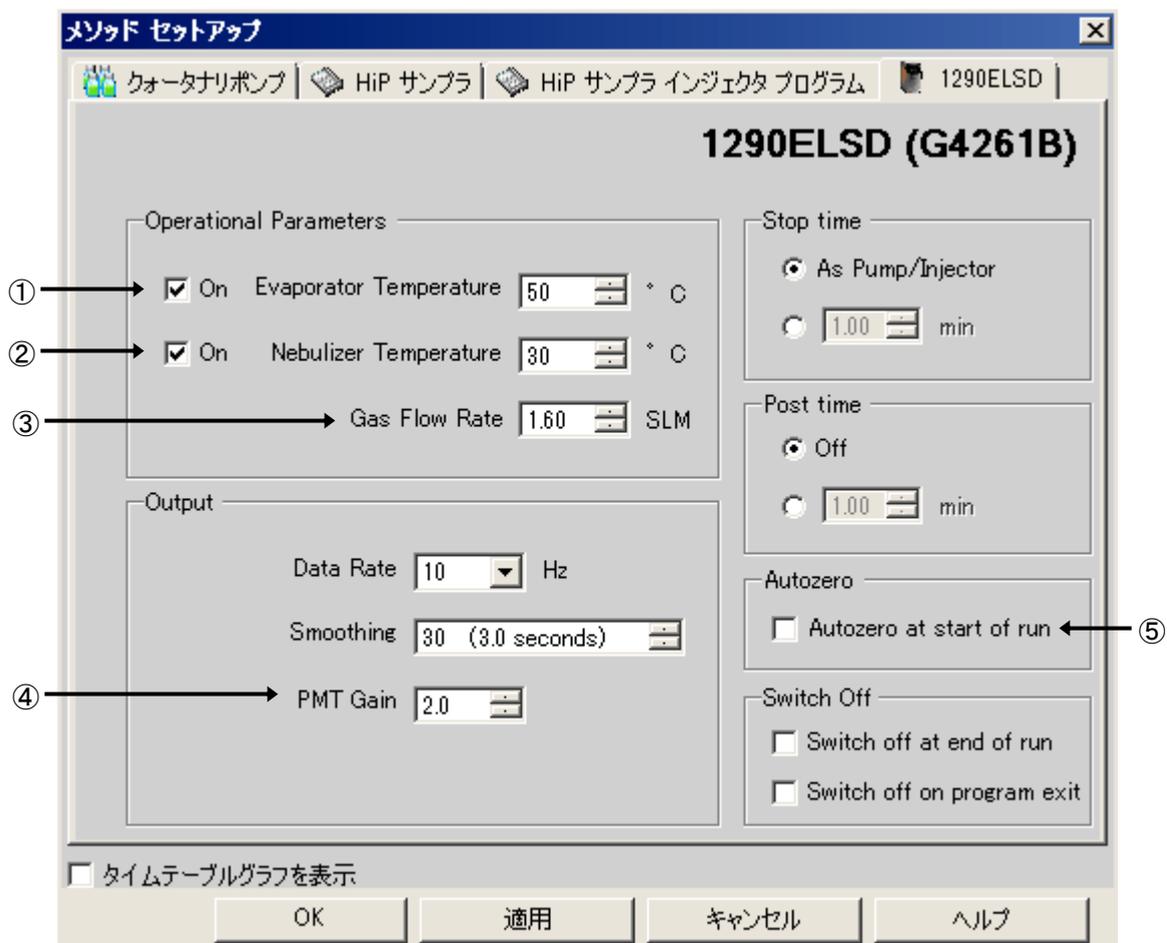


## &lt;示差屈折率検出器の設定&gt;



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

<ELSD の設定> (例:G4261B 型 ELSD)



- ① チェックボックスをオンにして、蒸発管の温度を設定します。
- ② チェックボックスをオンにして、ネブライザの温度を設定します。
- ③ ガスの流量を設定します。
- ④ ゲインを選択します。一番高いピークがフルスケール（1000mV）を超えないようにゲインを設定します。設定値が1 増えると、シグナル強度（スケール）は約2 倍になります。
- ⑤ 分析前の自動ゼロ機能は使用しません。

※高速分離 HPLC の場合は、必要に応じて Data Rate と Smoothing を調整します。

＜バルブ類の設定＞（例：G1158A 2PS/6PTバルブの例）



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

<シグナルの詳細>

ここからは「メソッド全体の編集」のデータ解析部分の設定になります。細かい条件設定はスタンダードサンプルの測定後に整えます。

シグナルの詳細リストは、計算に使用するシグナルを選択する画面です。



ここでは、**OK** をクリックします。

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

<積分イベント> データ解析の項に説明があります

- ①ここでは、このまま **OK** ボタンをクリックします。

**積分イベント変更**

メソッド マニュアル イベント

全てのシグナルの初期イベント:

積分イベント	値
タンジェント スキム モード	スタンダード
テール ピーク スキム 高さ	0.00
フロント ピーク スキム 高さ	0.00
スキム 谷比	20.00
ベースライン補正	アドバンスド
ピーク 谷比	500.00

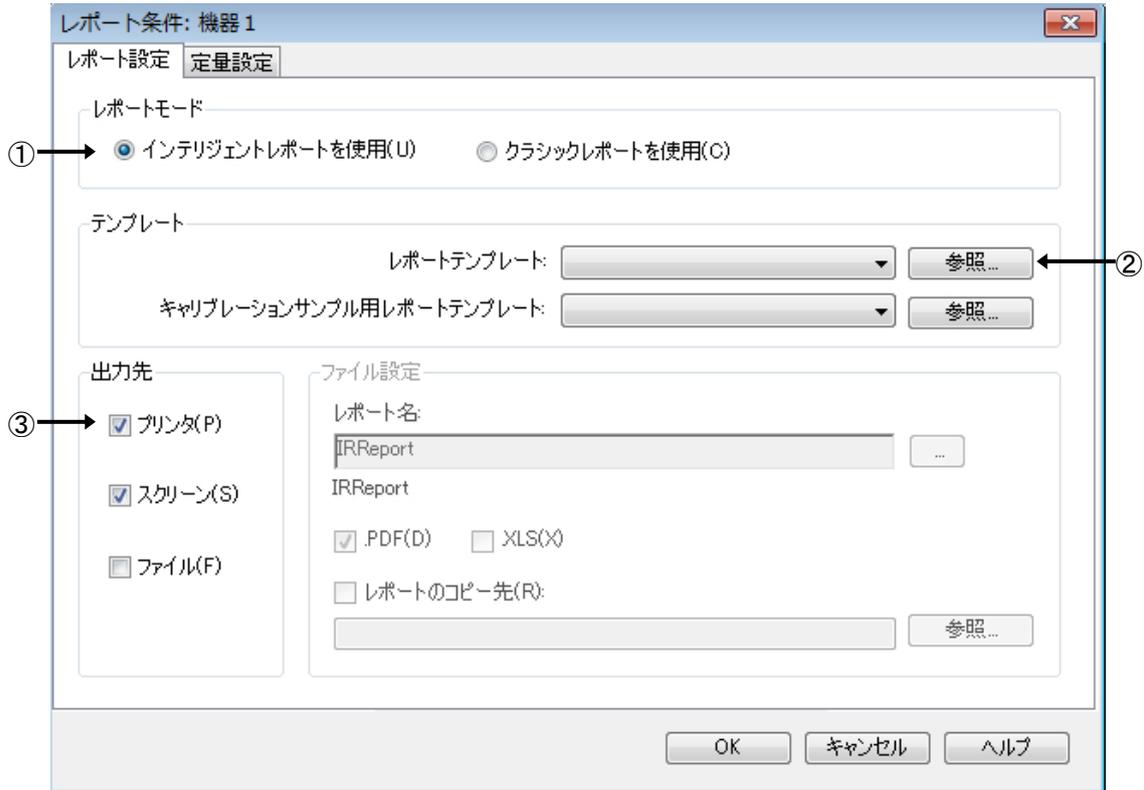
シグナルの特定のイベント:

MWD デフォルト

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	1
初期	ピーク幅	0.02
初期	面積リジェクト	1
初期	高さリジェクト	1.7
初期	ショルダー	オフ

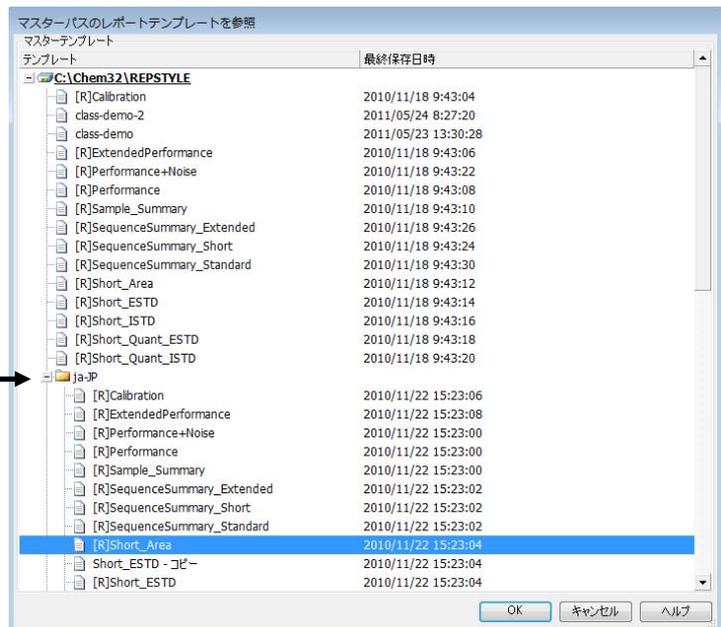
<レポート条件>

“レポート”とはシグナルやスペクトルの計算・解析結果をいいます。  
 レポート条件設定画面では、レポート報告の条件を設定します。



- ①ここでは、「インテリジェントレポートを使用」を選択します。
- ②インテリジェントレポートテンプレートを選択します。 **参照** ボタンをクリックしてレポートテンプレートを選択します。今回は、C:\¥Chem32¥REPSTYLE¥ja-JP の下にある「Short\_Area」を選択します。  
**OK** ボタンをクリックします。  
 ([R]は読み込み専用のマークです)
- ③レポートの出力先を指定します。ここでは例としてスクリーンとプリンタのチェックボックスをオンにします。  
**OK** ボタンをクリックします。

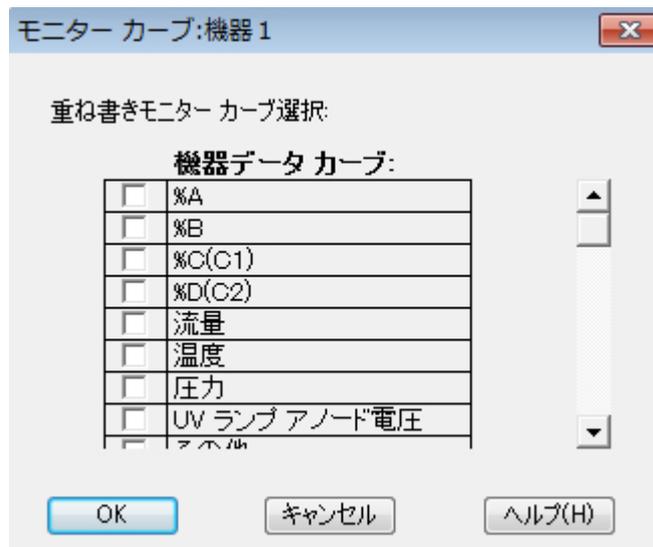
**クリックして展開** →



### <モニターカーブ>

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

- ① 表示したい項目をクリックします。
- ②  をクリックします。



### <ランタイムチェックリスト>

分析を実行する際、メソッドでどの項目を実行するか設定します。



- ① データ取込と、標準データ解析のチェックボックスをオンにします。  
これにより、分析はデータの取り込みと解析を連続して実施します。
- ②  をクリックします。

\* 以上でメソッド全体の編集によるメソッドの編集が終わりました。  
メソッドを保存する前に、再度メソッド全体の編集を実施し、メソッドパラメータを確認してみましょう。

## 3-2-3. 機器パラメータの一部変更

メソッドパラメータを一部変更する場合は、各モジュールの GUI で右クリックして、メニューからメソッドを選択してください。モジュールのメソッド設定画面が現れます。

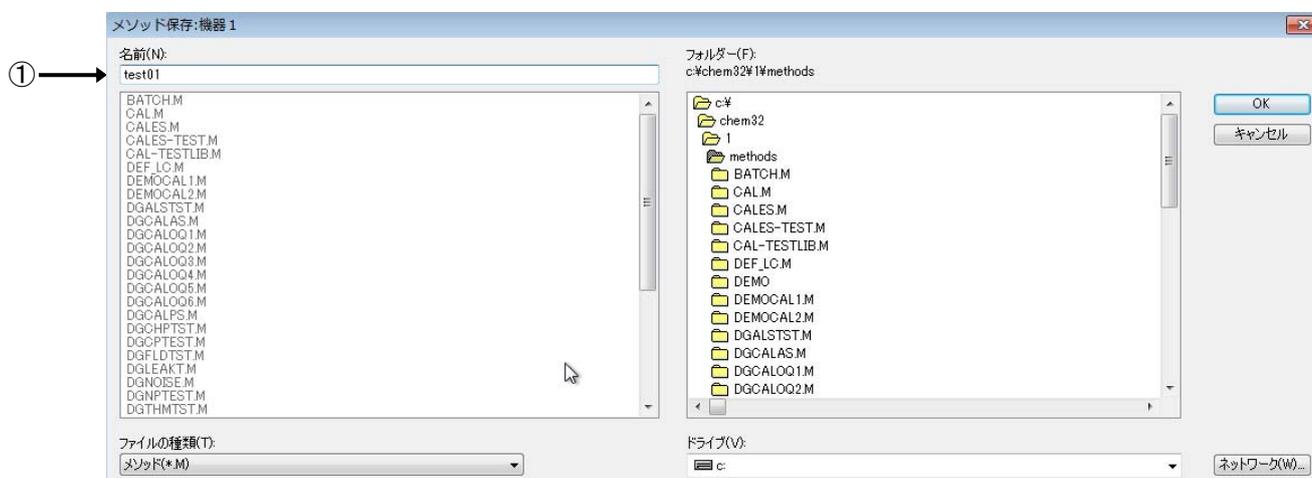
## 3-3. マスターメソッドの保存

編集したマスターメソッドを保存します。メソッドファイル名を変更して保存する場合は、メニューから、メソッド> 名前を付けてメソッド保存を選択します。(例: test.M)

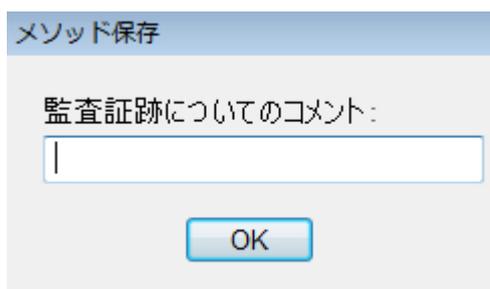
\* **DEF\_LC.M** の属性は上書き禁止になっています。  
必ずファイル名を変更することになります。

① ファイル名を入力します。半角英数字 40 文字以内です。

メソッドファイルの拡張子 (\*.M) は自動的に付けられます。  
以下の文字はファイルまたはディレクトリ名には使用できません。  
・ <>: "/¥| @ % \* ? ' & 空白 (スペース) など。



② **OK** をクリックします。



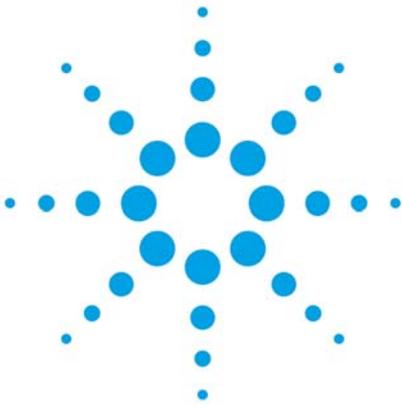
③ 監査証跡についてのコメントの入力を求められますので、変更点などを簡潔に入力して **OK** をクリックしてください。

## 3-4. カスタムフィールドの概要

メソッドには、サンプル情報のほかに、ユーザーが設定する文字列等を入力し、レポートに表示させる機能があります。この入力欄をカスタムフィールドと呼びます。カスタムフィールドには、入力を忘れると分析ができない設定をすることが可能です。

### 3-5. 監査証跡有効について

メソッドは、保存履歴を記録するために、メソッド保存の度に“監査証跡のためのコメント”の入力を求められます。監査証跡有効を設定すると、メソッドの変更点のより詳細な記録がメソッドに記録されます。しかし、監査証跡有効を設定すると、メソッド印刷をした時、監査証跡の部分が膨大になるので注意が必要です。



## 第4章 システムの準備

4-1. 移動相の準備	4-2
4-2. 機器の準備	4-2
4-2-1. ポンプのオン/オフ操作	4-2
4-2-2. デガッサ内の置換	4-2
4-2-3. ポンプのパージ	4-2
4-2-4. 流路の溶媒の置換	4-3
4-2-5. カラムの接続	4-3
4-3. システム全体のオン	4-3
4-4. サンプルの設置	4-3
4-5. マスターメソッドの読み込み	4-3
4-6. システムステータスの確認	4-4
4-7. オンラインシグナルの確認	4-5

## 4. システムの準備

### 4-1. 移動相の準備

HPLC 用溶媒をボトルに入れ、トレイにセットします。

※注意・使用する溶媒は液体クロマトグラフ用を使用してください。

特級等は、ベースラインの乱れや、ゴーストピークの原因になります。

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

### 4-2. 機器の準備

#### 4-2-1. ポンプのオン/オフ操作

ここではあらかじめポンプのオン/オフと流量設定の方法を説明します。

この後の準備でパージ等の操作がありますのでポンプをオンにする前にパージバルブを開けておくことをお勧めします。

注意：ポンプをオンにする前に現在の移動相と設定流量を確認してください。

①流量とチャンネルを設定します。システムダイアグラムのポンプ表示の GUI 上で **右クリック**して、メニューからメソッドを選択します。

②ポンプをオンにします。  
システムダイアグラムのポンプ表示の GUI 上のオン/オフボタンをクリックします。

③ポンプをオフにするには、  
システムダイアグラムのポンプ表示の GUI 上のオン/オフボタンをクリックします。



#### 4-2-2. デガッサ内の置換

オンラインデガッサを使用する場合は、デガッサ内部の溶媒を置換します。

標準デガッサ (G1322A) の場合は付属のシリンジを以下のように接続します。

- ・バイナリポンプ、アイソクラティックポンプ：アクティブインレットバルブに接続されているテフロンチューブを外し、シリンジアダプタに接続しシリンジで吸引します。
- ・バイナリポンプで溶媒切り替えバルブがある場合：溶媒切り替えバルブの手前でテフロンチューブを外し、シリンジアダプタに接続しシリンジで吸引します。
- ・クォータナリポンプ：マルチチャンネルグラジエントバルブ（4方バルブ）に接続されているテフロンチューブを外し、シリンジアダプタに接続しシリンジで吸引します。

各チャンネルごとに 30mL ほど置換します。

注意：マイクロデガッサ (G4225A、G1379A/B) の場合は、シリンジを使用せずにポンプの送液で置換を行ってください。

チューブ内のエアが多くポンプによる吸引が困難な場合は、デガッサの入口のチューブを外しシリンジで吸引してください。

#### 4-2-3. ポンプのパージ

ポンプヘッド内の気泡を取り除くためパージ（高流量で移動相を送液）します。

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

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

パージが終了したらポンプをオフにし、パージバルブを時計方向に回します。

※注意 パージバルブは締めすぎに注意して下さい。

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

## 4-2-4. 流路の溶媒の置換

カラムを保護するため、カラム入口のコネクタを外します。

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

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

## 4-2-5. カラムの接続

ポンプの送液が停止した状態でカラムを接続します。

※補足 カラムの種類によっては、カラムが温まるまでは低流量で送液することをおすすめします。カラムの取扱説明書などを参照してください。

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

## 4-3. システム全体のオン

移動相とカラムの準備ができたならシステムのオンを実行します。

システムダイアグラムの GUI からオンボタンをクリックします。



検出器など各モジュールのオン／オフ操作は、システムダイアグラム上の各モジュール表示の GUI 上のオン／オフボタンをクリックします。

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



## 4-4. サンプルの設置

サンプルバイアル／トレイを設置します。

## 4-5. マスターメソッドの読み込み

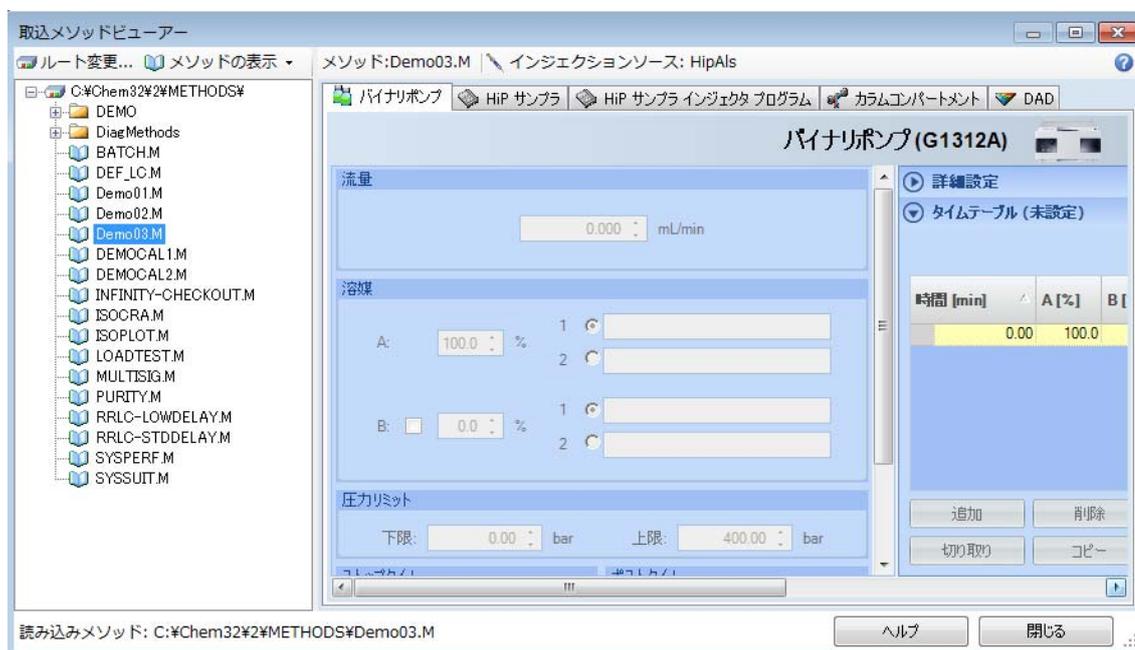
ポンプのパーズを行うなど設定変更した場合、現在のメソッドは、はじめに読み込んだものとはことなります。パーズなど設定変更を伴う準備をした場合は、使用するマスターメソッドを読み込みなおしてください。

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

補足：メソッドビューア機能を使用すると、読み込む前にメソッドの機器設定を確認することができます。

メソッドビューアを使用するには：

- ① メニューから、**機器>取り込みメソッドビューア**を選択します。
- ② 画面左側で表示したいメソッドをダブルクリックすると、画面右側に内容が表示されます。



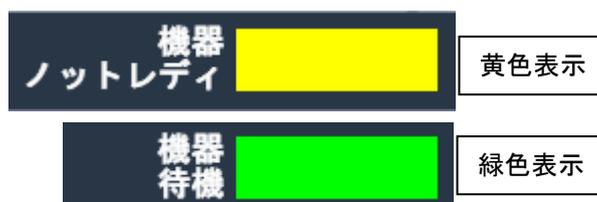
補足：以前のバージョンのメソッドは、表示できません。

補足：保存されているメソッドの機器構成が、現在の実際の機器構成と異なる場合には、双方を切り替えて表示することができます。

もともとの機器構成でのメソッドを表示には、**メソッドの表示>オリジナル構成**で表示を選択します。現在の実際の機器構成に変換して表示するには、**メソッドの表示>機器構成**で表示を選択します。

#### 4-6. システムステータスの確認

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



レディ(緑)：すべてのモジュールが設定値に達し、分析可能な状態。

ノットレディ(黄)：モジュールの中で設定値に達していないものがあり、分析を開始できない状態。

エラー(赤)：エラーが発生している状態。

ステータスがレディを示したら、分析をスタートすることができますが、システムが平衡に達するまで分析は開始しないでください。

## 4-7. オンラインシグナルの確認

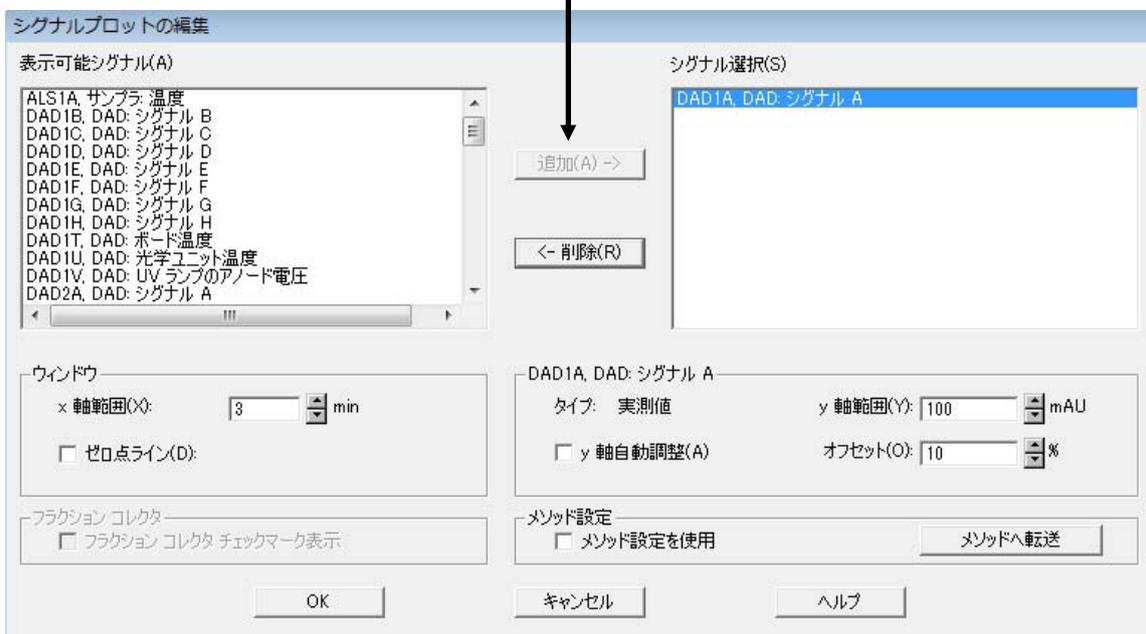
オンラインシグナルモニターでベースラインおよびシステム圧力を表示させ、システムが安定するのを確認します。

オンラインプロットが出ていない場合は、メニューから、  
**表示>オンラインプロット>シグナルウィンドウ1** を選びます。

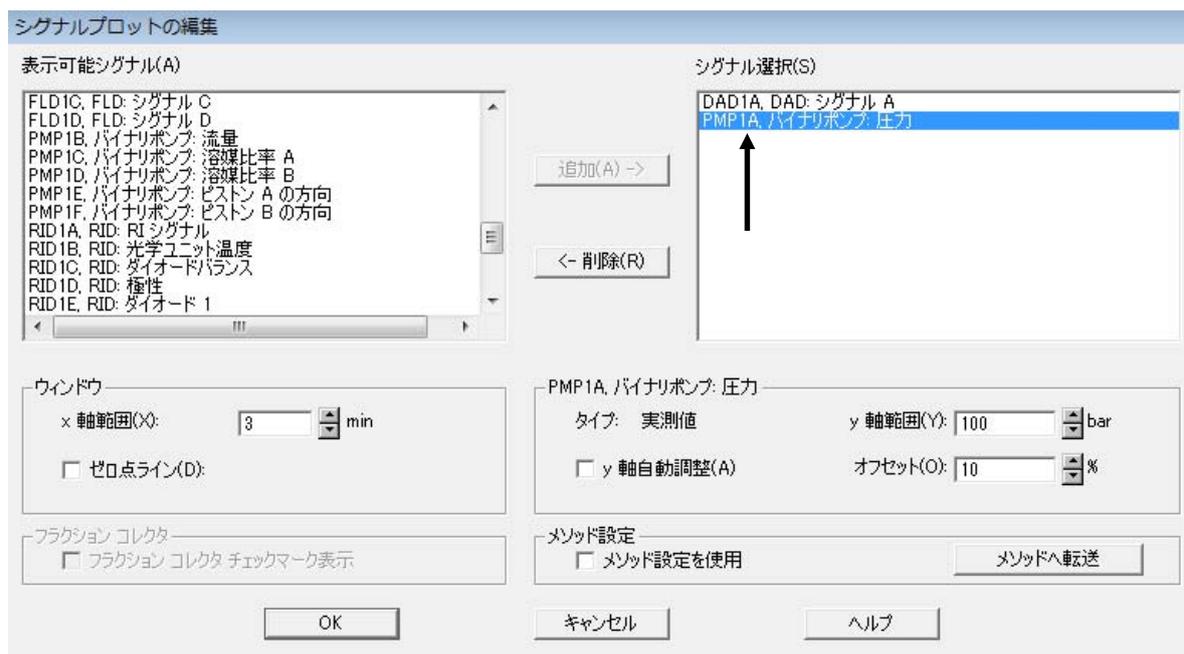


変更ボタンをクリックするとシグナルプロットの編集画面が表示されます。

ダイオードアレイ検出器の場合、表示可能シグナル欄から **DAD A:**を選択し、追加ボタンをクリックするとシグナル選択欄に加わります。

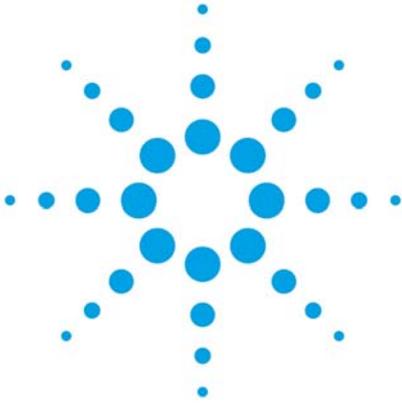


同様に バイナリポンプ圧力を追加すると以下の画面になります。



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

設定後 **OK** をクリックします。



## 第5章 シングルラン分析

5-1. サンプル情報の設定	5-2
5-1-1. ウェルプレートの割り当て	5-2
5-1-2. サンプル情報の設定	5-3
5-2. メソッドの実行	5-4

5. シングルラン分析

シングルラン（1サンプルのみ）のデータを採取する場合には、

- ・サンプルロケーション（バイアル番号）の設定
  - ・データの保存フォルダとデータファイル名の設定
- を行います。

5-1. サンプル情報の設定

5-1-1. ウェルプレートの割り当て

（現在の設定と使用するプレートが異なる場合に実施します）

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

メニューから、

**機器>続き HiP サンプラ(機種により表記が異なります)  
>ウェルプレートの割り当て**

右クリック

GUIからは、インジェクタアイコン上で

右クリックして、メニューから

「ウェルプレートの割り当て」

を選択します。

左クリック



ダイアログボックス中の「プレートのコンフィグレーション」欄を設定します。

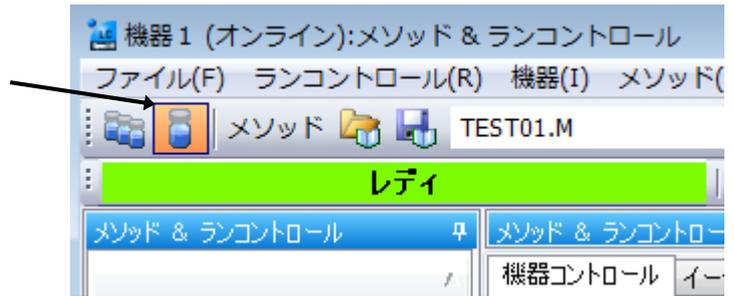
「上のプレート」は奥側です。

「下のプレート」は手前側です。

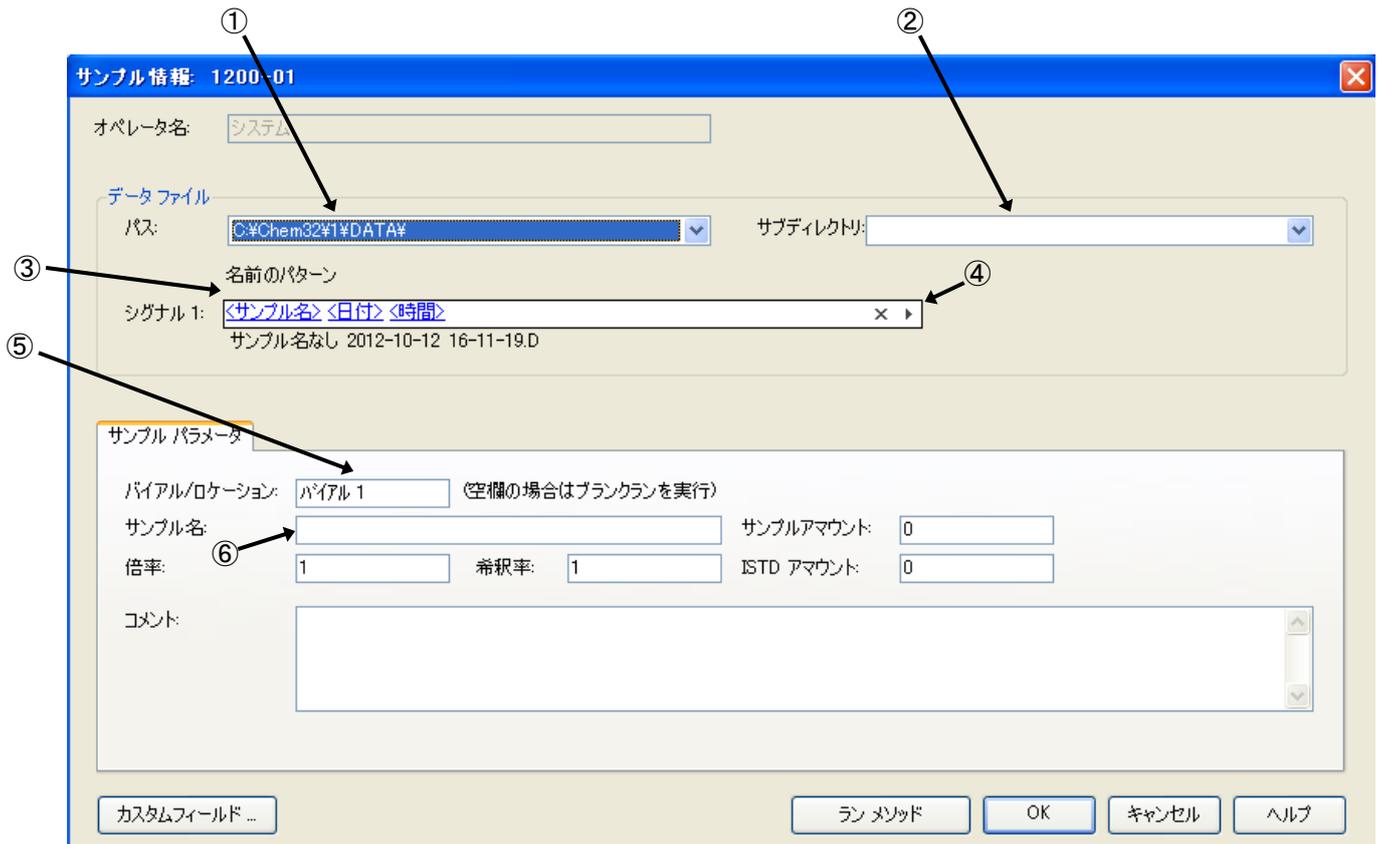
実際にセットしたプレート名を選んで、**OK** してください。

5-1-2. サンプル情報の設定

1本のバイアルのアイコンをクリックし、  
シングルランのモードにします。  
(サンプルが、ウェルプレートでも  
バイアルでも1本バイアルアイコンを  
クリックして下さい)



メニューからランコントロール>サンプル情報を選択します。



①データファイルの保存先のパスを選択します。

②データ管理をしやすくするため、必要に応じてサブディレクトリを設定します。

サブディレクトリ名は半角英数字で40文字以内です。入力後、入力したサブディレクトリが存在しない場合、下記のメッセージが表示されますので **OK** をクリックします。



③データファイルの命名法を入力します。データファイル名には、日付や時刻などを名前の要素にすることができます。

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

④命名法に、日付、時刻などの要素を追加するには、入力欄右の三角印をクリックして名前の要素を選択します。

⑤ロケーションを設定します。

・バイアルの場合

例) 1 と入力します。

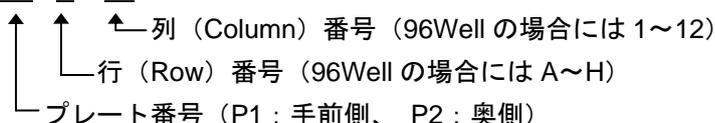
入力後次の項目に進むと、"バイアル 1"と表示が変更されます。

・ウェルプレート対応のオートサンプラの場合

例) p1a1 と入力します。

入力後次の項目に進むと、"P1-A-01"と表示が変更されます。

P1 - A - 01



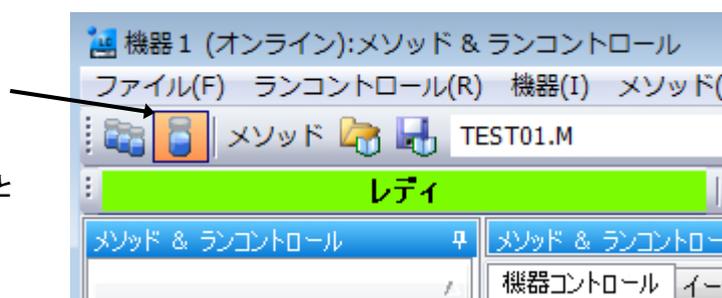
⑥サンプル名やコメントを必要に応じて入力します。

⑦ **OK** をクリックします。

## 5-2. メソッドの実行

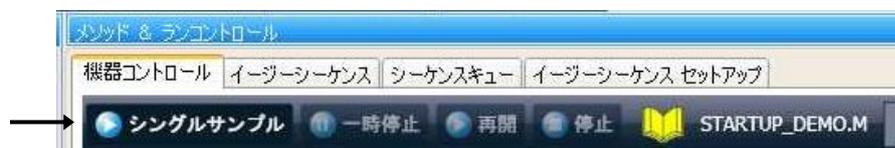
システムのステータスがレディとなり、ベースラインおよびシステム圧力が安定したら、データ採取を始めます。

1本のバイアルのアイコンをクリックするとGUI上のボタンセットがシングルランモードになります。



メニューから、**ラン コントロール > ラン メソッド**を選択すると、シングルランが実行されます。

GUI を利用する場合



「シングルサンプル」ボタンをクリックします。

\* メソッドを実行すると、検出器にバランスがかかり、それから注入動作を行います。

\* オンラインシグナルモニタには分析スタート時点に赤い縦線が表示されます。

\* 分析が正常に終了すると、レポートがスクリーンおよびプリンタに出力されます。

スタンダードサンプルは以下の4種類の成分で構成されています。

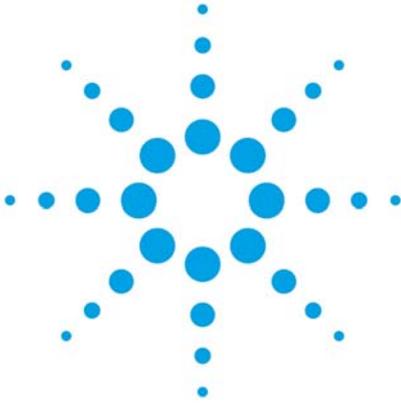
No.1	: ジメチルフタレート	Dimethylphthalate :DMP
No.2	: ジエチルフタレート	Diethylphthalate :DEP
No.3	: ビフェニル	Biphenyl(Diphenyl)
No.4	: o-ターフェニル	o-Terphenyl

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

\* プログラマブル 3D 蛍光検出器では、No.3 のピークを確認することができます。

ウインドウズエクスプローラでデータの保存されたフォルダを確認してください。  
採取データの内容のほか、ログブック、結果ファイル（ACAML）が作成されています。





## 第6章 シーケンス

6-1. シーケンスとは	6-2
6-2. シーケンスと結果セット	6-2
6-2-1. プレファレンスの設定	6-3
6-3. シーケンステンプレートの作成	6-3
6-3-1. キャリブレーションを含むシーケンステーブルの作成	6-4
6-3-2. 挿入、項目ウィザードの使用法	6-5
6-3-3. シーケンスパラメータの設定	6-6
6-3-4. シーケンス出力の設定	6-7
6-3-5. カスタムフィールドを持つメソッドのシーケンス	6-7
6-3-6. シーケンステンプレートの保存	6-7
6-4. シーケンス分析の開始	6-8
6-4-1. ウェルプレートの割り当て	6-8
6-4-2. シーケンス開始	6-8
6-5. シーケンスの一時停止	6-9
6-6. シーケンスの選択分析	6-9
6-7. イージーシーケンスの概要	6-9

6. シーケンス

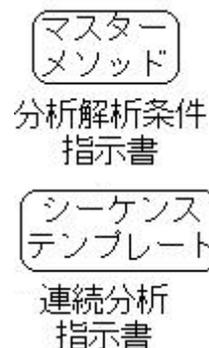
この章ではシーケンス分析（自動分析）と「結果セット」について説明します。

6-1. シーケンスとは

シーケンスとは、複数のサンプルを連続的に自動分析することです。シーケンスは、シーケンステンプレートの情報を参照して実行されます。シーケンステンプレートには、「何番のバイアルを」「どのメソッドで」「何回」分析するか等の情報があります。シーケンステンプレートには、使い方に応じたサンプル群を登録することになります。

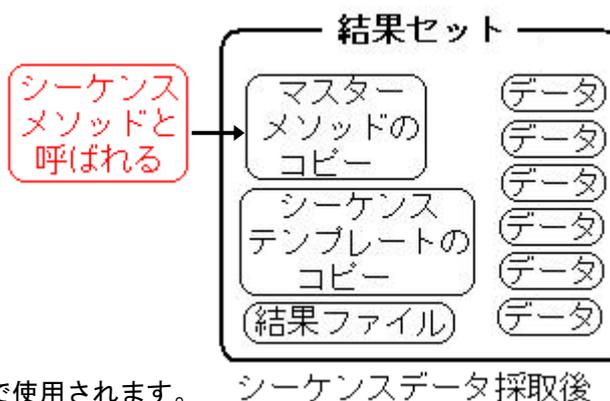
- ・ 定量用のスタンダードと未知サンプルのセット
- ・ システムスタビリティ試験のスタンダード

等です。



6-2. シーケンスと結果セット

ChemStation では、シーケンスで採取した一連のデータ、使用したメソッド、結果等を一つのセットとして保存する機能があります。これを「結果セット」と呼びます。結果セットには、採取したデータ、使用されたシーケンステンプレートのコピー、使用されたメソッドのコピーが保存されます。結果セット内の、分析に使用されたメソッドのコピーは「シーケンスメソッド」と呼ばれ、今後の結果セットの解析に使用されます。また、結果セット内には、解析の結果である「ACAML」ファイルが生成され、後のレビューで使用されます。結果セット内の再解析では、シーケンスの一貫性が保たれます。また、データの上書きを防止するためにシーケンス分析のたびに結果セットを生成するため、毎回ユニークな（フォルダ名が異なる）新しいフォルダを作成することになります。このことから結果セットを生成する機能のことを「ユニークなフォルダ作成」機能と呼びます。

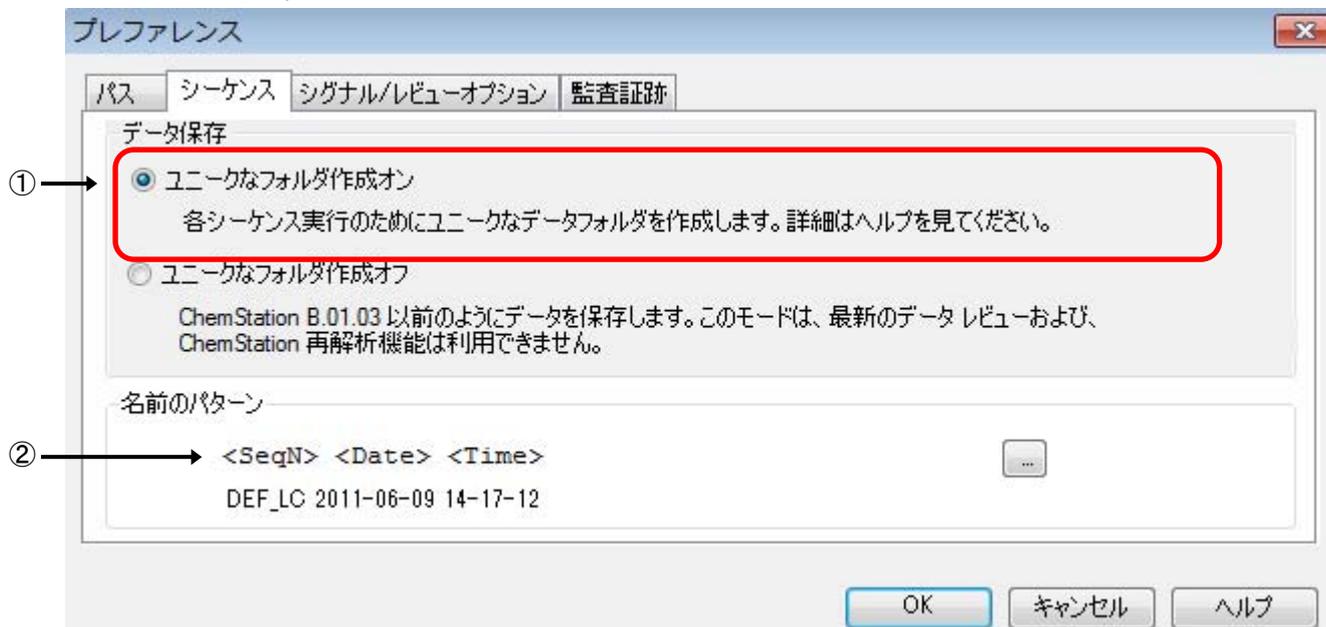


シーケンスファイルは、シーケンステンプレートとして結果セット内にコピーされるため、既存のデータが上書きされる事無く、シーケンスが変更されることもなく、任意のシーケンスを何度でも実行できます。

## 6-2-1. プレファレンスの設定

結果セットを使用したデータ採取と再解析を行うには、ユニークなフォルダ作成オンに設定する必要があります。

①メニューから、**表示>プレファレンス>シーケンスタブ**で、ユニークなフォルダ作成をオンにしてください。



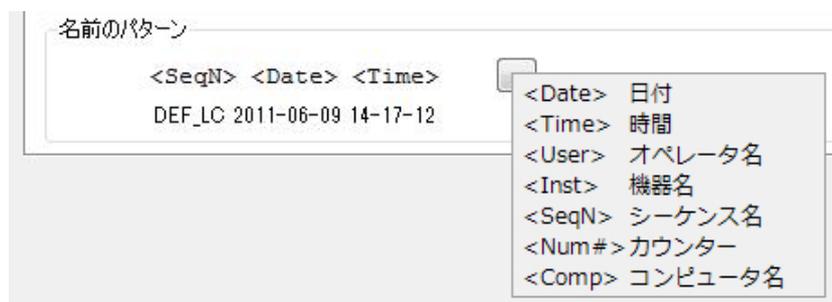
オフの設定の場合、データ群と解析に使用したメソッドを、ユーザが組み合わせて保管する必要があります。

データファイル毎のメソッド (DA.M) を使用すると、別のデータどうしの比較に注意が必要になります。

注意：もし、この設定を日常的に切り替える場合には、運用する上で、必ず「ユニークなフォルダ作成」のオン/オフを確認してください。  
意図しないフォルダへデータが保存されます。

②結果セットの名前のパターンを設定します。

右端の「…」をクリックすると項目選択メニューが表示されるので、その中から項目をクリックします。



## 6-3. シーケンステンプレートの作成

ここではシーケンスの作成例を紹介します。

シーケンステンプレートの作成に必要な設定は、

- ・シーケンスパラメータの設定
- ・シーケンステーブルの設定
- ・シーケンス出力の設定 (オプション)

です。

6-3-1. キャリブレーションを含むシーケンステーブルの作成

メニューから、シーケンス>新規シーケンスプレートを選び新規に作成します。

メニューから、シーケンス>シーケンステーブルを選択します。

最低必要な項目は、ロケーション、メソッド名、注入回数、サンプルタイプです。

シーケンステーブルは↓キーで増やすことができます。

(解析のデモに、デモ用結果セット LC\_DEMO01 を使用する場合は、説明を参考に図のようなテーブルを作成してみましょう。)

\*キャリブレーションについては後の章で説明があります。

ここでは、テーブル上のサンプルが、キャリブレーションサンプルである事だけ指定しておきます。

(再解析モードで後から変更もできます)

シーケンステーブル:機器 1

現在実行中  
 ライン:  メソッド:  バイアル:  注入:

P1-F-01のサンプル情報:  
 isocratic check out sample, calibration mixture 1

ライン	バイアル	サンプル名	メソッド名	注入回数	サンプルタイプ	Calレベル	RF 更新	RT 更新
1	1	isocratic sample STD	LC_DEMO	1	キャリブレーション	1	置き換え	置き換え
2	2	isocratic sample STD	LC_DEMO	1	キャリブレーション	2	置き換え	置き換え
3	3	isocratic sample STD	LC_DEMO	1	キャリブレーション	3	置き換え	置き換え
4	4	isocratic sample 1	LC_DEMO	1	サンプル			
5	5	isocratic sample CS	LC_DEMO	1	サンプル			
6	6	isocratic sample 2	LC_DEMO	1	サンプル			
7	5	isocratic sample CS	LC_DEMO	1	サンプル			
8	7	isocratic sample 3	LC_DEMO	1	サンプル			
9	1	isocratic sample	LC_DEMO	1	サンプル			
10	2	isocratic sample	LC_DEMO	1	サンプル			
11	3	isocratic sample	LC_DEMO	1	サンプル			

① 挿入(I) ② 切り取り(T) ③ コピー(C) ④ 貼り付け(P) ⑤ 行追加(A) ⑥ 全て取消(U) ⑦ シーケンス実行(R)

⑧ 挿入/項目ウィザード(W) ⑨ ウィザード取消(Z) ⑩ カスタム フィールド(F) ⑪ OK(O) ⑫ キャンセル ⑬ ヘルプ(H)

サンプル ロケーション(blankで未注入分析) テーブルコンフィグレーション

- ①ライン：シーケンスライン番号で自動的に付きます。
- ②ロケーション番号：バイアル番号またはロケーションを入力します。
- ③サンプル名：サンプル名。入力しなくても分析できます。
- ④メソッド名：欄をクリックすると、マスターメソッドが表示されます。  
使用するマスターメソッドファイルを選択します。
- ⑤注入回数：1 ロケーション毎の注入回数を入力します。
- ⑥サンプルタイプ：検量線作成用のキャリブレーションスタンダードの場合、  
キャリブレーションに設定します。  
濃度未知の測定対象サンプルの場合：サンプルを選択します。
- ⑦Cal レベル：サンプルタイプがスタンダードの場合検量線の何点目か（レベル）を入力します。
- ⑧RF 更新：サンプルタイプがキャリブレーションの場合、レスポンスファクタ（検量線の傾きの逆数）  
の更新方法を指定します。
- ⑨RT 更新：サンプルタイプがキャリブレーションの場合、RT（リテンションタイムウインドウ）の  
更新方法を指定します。
- ⑩注入量：この設定を行ったラインのサンプルのみ、メソッドで設定した注入量以外の注入が  
可能です。通常は設定不要です。（この画面には表示されていません）
- ⑪挿入/項目ウィザードを使用して、行数の多いシーケンステーブルを作成できます。
- ⑫OKをクリックします。

## 6-3-2. 挿入、項目ウィザードの使用法

連続したバイアルまたはウェルプレートの範囲の行を、シーケンステーブルに追加する機能です。  
ここではウェルプレートサンプラを例にします。

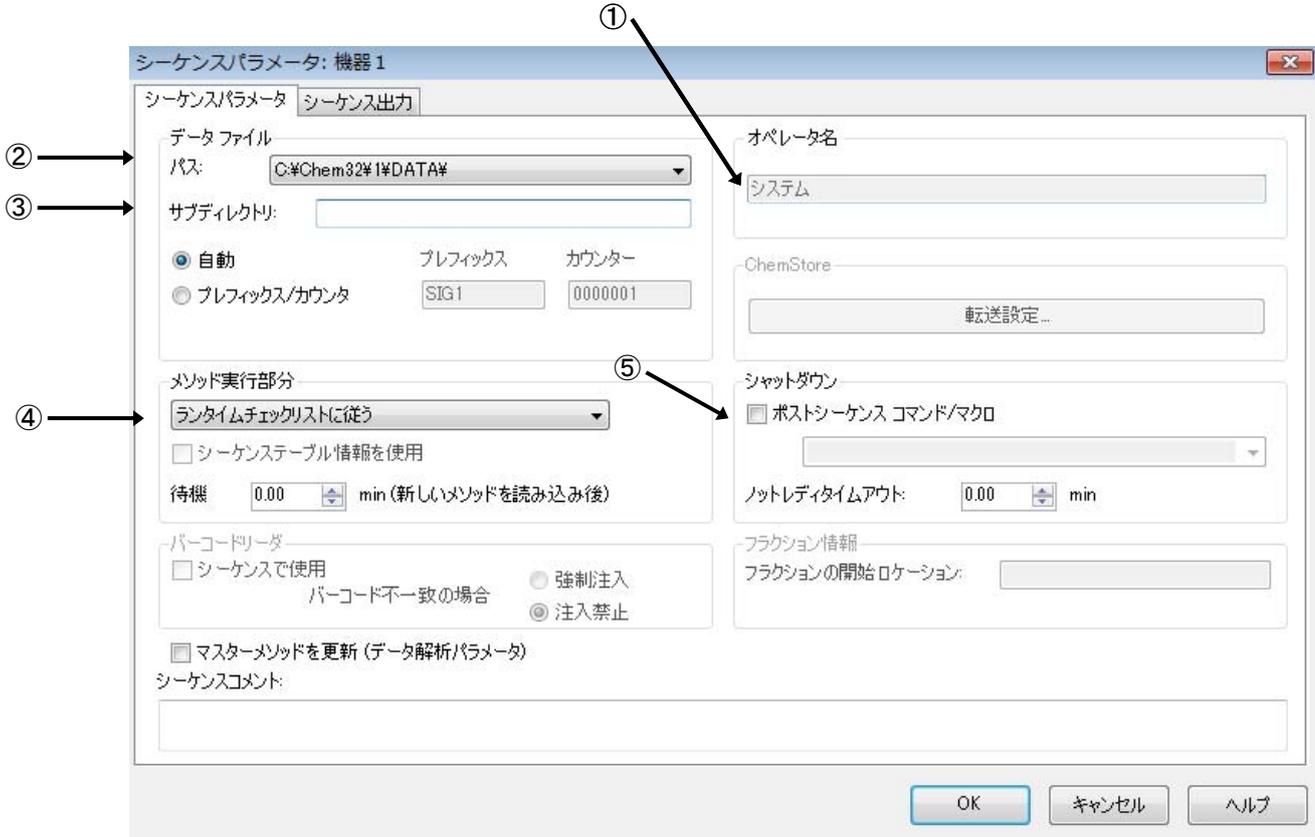
シーケンステーブル画面で、**挿入/項目ウィザード**をクリックします。

最低入力が必要なのは①②③⑥です。

- ①動作を選択します。新規作成の場合は、追加を選択します。
- ②追加するサンプル数を入力します。
- ③開始ロケーション指定を設定します。  
同じ条件、同じサンプルタイプ等を設定するサンプルセットの開始位置を入力します。  
開始位置と終了位置は同じプレート/トレイである必要があります。  
範囲指定（長方形）を選択するとドラッグで選択した範囲を設定できます。
- ④マスターメソッド名を選択します。
- ⑤サンプル名を入力します。
- ⑥1ロケーションあたりの注入回数を入力します。
- ⑦サンプルタイプを選択します。
- ⑧**OK**をクリックすると、シーケンステーブルに行が挿入されます。

6-3-3. シーケンスパラメータの設定

メニューから、シーケンス>シーケンスパラメータを選択します。  
シーケンスパラメータのタブを選択します。



- ①オペレータ名は入力できません。(認証プロバイダが無しのため)
- ②データファイル名：保存先サブディレクトリとデータファイル名を設定します。
  - ・自動：バイアル番号、シーケンスライン、注入回数から自動的に設定されます。  
 例： 001 - 02 03 .D  
 [バイアル番号] -[シーケンスライン] [注入回数]
  - ・プレフィックスカウンター  
 プレフィックス+カウンタ(数字) で構成されます。最大合計 15 文字で名前が付けられます。  
 例：プレフィックス部分+カウンタ部分(最大 6 桁) TEST 000001
- ③サブディレクトリ名を作成する場合、設定します。
- ④メソッド実行部分：メソッドのどの部分を実行するか設定します。
  - ・ランタイムチェックリストに従う：メソッドの中で指定したランタイムチェックリストどおりに実行します。通常はこれを選んでください。
  - ・データ取り込みのみ：データ取り込みのみを実行します。
  - ・(オフラインソフトで、旧 Rev 形式のデータ解析時のみ有効)  
 データ解析のみ：データ再解析のみを実行します。
- ⑤シャットダウン：マクロプログラム等によって、シーケンス終了後に装置を OFF にする設定等を行います。  
 ポストシーケンスコマンド / マクロにチェックし、プルダウンからマクロプログラムまたはコマンドを選択します。
- ⑥OKをクリックします。

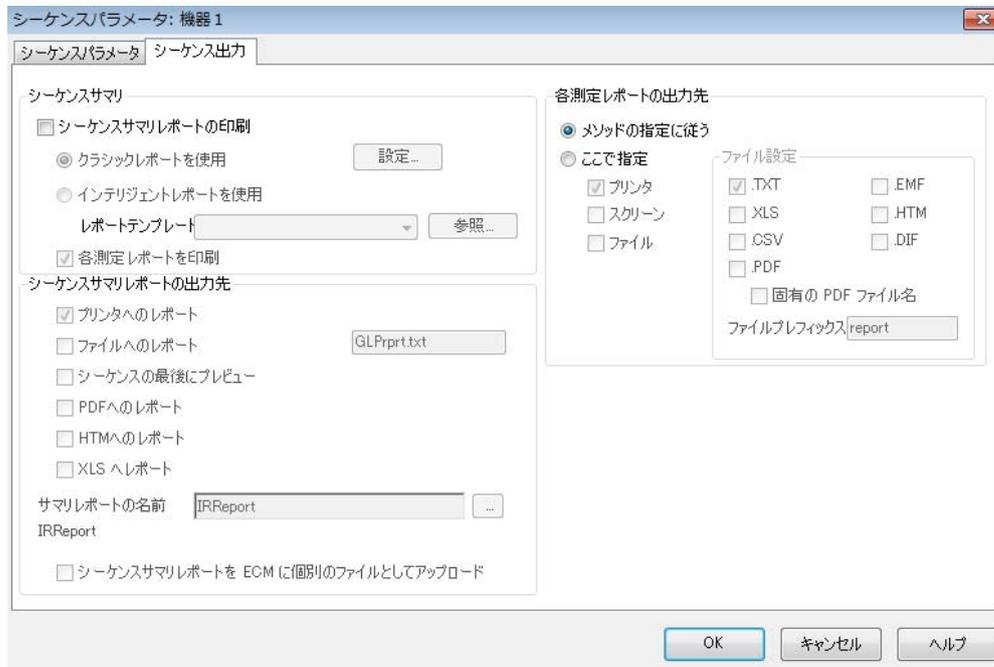
ヒント：シーケンス>シーケンスの選択分析を選択すると、シーケンスの実行順、データファイル名の命名法が確認できます。この画面はキャンセルしてください。

#### 6-3-4. シーケンス出力の設定

シーケンス出力では、シーケンスを通してのサマリレポートなどを印刷することができます。ここでは画面のみ紹介します。

メニューから、シーケンス>シーケンスパラメータを選択します。

シーケンス出力のタブを選択します。



各項目については、後の章を参照ください。  
解析条件などが整っていればここで設定してかまいません。

#### 6-3-5. カスタムフィールドを持つメソッドのシーケンス

シーケンスで使用するマスターメソッドにカスタムフィールドが設定されている場合、シーケンス実行前にカスタムフィールドの入力をしてください。

メニューから、シーケンス>カスタムフィールドの値>シーケンステーブル 1(1)を選択し、カスタムフィールドの入力をしてください。

#### 6-3-6. シーケンステンプレートの保存

作成したシーケンステンプレートを保存してください。

メニューから、シーケンス>名前をつけてシーケンステンプレート保存を選択して、名前をつけてシーケンステンプレートを保存してください。

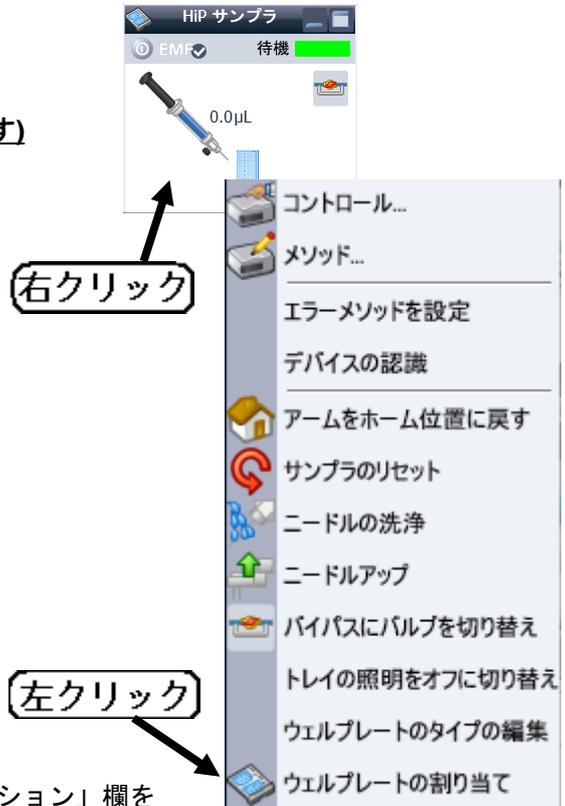
6-4. シーケンス分析の開始

シーケンス分析の実行前に、はじめに実行されるマスターメソッドを読み込んでカラムのコンディショニングや送液系の平衡化をしてください。  
 シーケンス開始後のメソッド読み込み時に、ポンプなどの条件の変化がありませんので、スムーズにシーケンスが開始できます

6-4-1. ウェルプレートの割り当て

サンプルがウェルプレートの場合は、  
 「トレイ上に実際に乗っているプレートの種類」  
 を設定してください。メニューから、  
**機器>続き HIP サンプラ(機種により表記が異なります)**  
**>ウェルプレートの割り当て**

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



ダイアログボックス中の「プレートのコンフィグレーション」欄を設定します。  
 「上のプレート」は奥側です。「下のプレート」は手前側です。  
 実際にセットしたプレート名を選んで、**OK** してください。

注意：ここではデモで作成したシーケンスを実行しないでください。  
 メソッド LC\_DEMO の内容を確認していません。

6-4-2. シーケンス開始

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



GUI 利用の場合「シーケンス開始」ボタンをクリックします。

または、メニューから、  
**ランコントロール>シーケンス開始**  
 を選択してください。



## 6-5. シーケンスの一時停止

実行中のシーケンスの一時停止／中止など操作は以下の通りです。

- 1) 現在のランを最後までデータを採取して、次のサンプルの分析の手前で一時停止させたい場合  
→メニューの **ランコントロール>シーケンス停止** を選択します。

ChemStation ソフトウェアのステータスは「シーケンス停止」になります。

機器のステータスはレディ状態になります。

移動相など機器の条件は、初期条件に戻ります。

再開するには、メニューの **ランコントロール>シーケンス再開** を選択します。

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

→メニューの **ランコントロール>シーケンス中止** を選択します。

現在のランが直ちに終わり、ここまでのデータは採取され解析まで進みます。

移動相は、すぐに初期条件に戻ります。（追い出しが必要な場合があります）

機器はレディ状態になります。

ChemStation ソフトウェアのステータスはレディになります。

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

→メニューの **中断>中断** を選びます。

現在のランが直ちに終わり、ここまでのデータは残りません。

移動相は、すぐに初期条件に戻ります。（注入したサンプルが送液系内に残ってしまうことがあるので、追い出しが必要な場合があります）

機器はレディ状態になります。

ChemStation ソフトウェアのステータスはレディになります。

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



## 6-6. シーケンスの選択分析

シーケンス分析は通常シーケンステーブルの実行順で分析されますが、シーケンステーブルの一部分のみを実行することができます。

注意：シーケンスの選択分析を開始する前に、機器、カラムの平衡化など分析開始の準備を整えておいてください。

メニューから、**シーケンス>シーケンスの選択分析** を選択します。

シーケンステーブルの実行順の表が現れます。実行したい行を、Ctrl キーを押しながらクリックして選択しハイライトさせます。

選択が終わったら、ランシーケンスをクリックします。

選択された行のみシーケンス分析が開始されます。

## 6-7. イージーシーケンスの概要

イージーシーケンス機能は、管理者が設定したイージーシーケンスプレートをもとに、複数のオペレータが最低限の入力項目のみでシーケンスを作成してキュー（待ち行列）に登録し、順次シーケンス分析を実行してゆく機能です。

イージーシーケンスでは

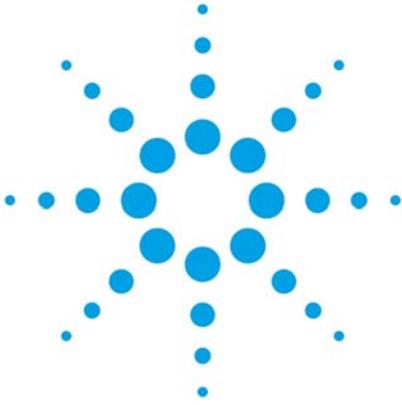
- ・1つのシーケンスの中に組み込めるのは1つのマスターメソッドのみです。
- ・バイアル順は、番号順に連続した順のみ設定可能です。
- ・ユニークなフォルダ作成の設定をオンにする必要があります。
- ・あらかじめマスターメソッド作成しておく必要があります。
- ・周期的キャリブレーションでは、更新方法が1つのみ使用可能です。

（設定できないケース：始めに「置き換え」2本目以降を「平均」）

これらの機能は、標準のシーケンス機能で実施できます。

詳細は付録を参照ください。





## 第7章

# データ解析のワークフロー:再解析と再計算

7-1. データ解析のモード	7-2
7-2. 再解析モード	7-4
7-2-1. 再解析モード	7-4
7-2-2. 結果セットとは	7-4
7-2-3. 結果セットの再解析	7-5
7-3. 再計算モード (任意のメソッドでの再計算)	7-6
7-3-1. 再計算モードのワークフロー	7-6
7-4. 前回の結果モード (DA. M 使用)	7-7
7-4-1. 前回の結果モードのワークフロー	7-7
7-5. データ解析画面の概要	7-8
7-5-1. データ解析画面の構成	7-8

## 7. データ解析のワークフロー:再解析と再計算

### 7-1. データ解析のモード

データ解析は、ChemStation のオフラインソフトウェアで実施します。  
データ解析はデータ採取の方法、ユニークなフォルダ作成のオン/オフ  
データ採取の目的などによってワークフローが異なります。

解析のモードは3つあります。

- ・再解析モード   
結果セットの一連のデータの解析を実行する
- ・再計算モード   
シングルラン、シーケンスデータ、結果セットなどの積分状態を  
迅速に確認できる。  
任意のマスターメソッドでの積分、計算が可能。
- ・前回の結果モード (DA.M 使用)   
データに包含されるメソッドを使用する。

再解析モードと再計算モードの違いを表で示します。

	再解析モード 	再計算モード 
解析対象	結果セット	シングルランのデータ ユニークなフォルダ 作成機能オフで採取した データ
特徴	解析は全て結果セットの中で 実施される。  マスターメソッドとは無関係	任意のマスターメソッドで 計算できる。  マスターメソッドが 変更されたら 影響を受ける可能性がある
主な用途	・連続再解析で、シーケンス サマリレポートが出力可能  ・シーケンス全体の 結果ファイルが作成できる。	順次積分結果を 確認できる。
解析に使用する メソッド	シーケンスメソッド (任意のマスターメソッドでも 再解析シーケンスが可能)	任意のマスターメソッド
連続再解析	可能	できない (設定により可能)
連続レポート印刷	可能	できない (設定により可能)
1データごとの レポート印刷	可能	可能
データの保管	結果セットごと保管	データ、 解析に使用したメソッド 使用したシーケンスを ユーザが管理して保存
結果ファイルの作成 (レビュー画面で使用)	連続再解析で生成	全てのデータの 印刷/プレビューが必要



7-2. 再解析モード

7-2-1. 再解析モード

再解析モードでは、結果セットの再解析をします。

ユニークなフォルダの作成をオンに設定して採取したシーケンスデータは、「結果セット」にまとめられます。

また、結果ファイル（ACAML）を生成するので、後にレビュー画面で結果をレビューできます。

結果ファイルは、最後のバージョンのみ保存されます。規制環境下での使用等で全ての結果のバージョンを保存する必要がある場合は、ECM との接続により規制に対応できます。

※ACAML=Agilent Common Analytical Markup Language

7-2-2. 結果セットとは

ユニークなフォルダの作成をオンに設定して採取したシーケンスデータは、「結果セット」にまとめられます。

結果セットには、

- ・採取したデータ
- ・使用したシーケンステンプレートのコピー
- ・使用したマスターメソッドのコピーで解析に使用するメソッド  
(シーケンスメソッドと呼びます)
- ・再解析された場合、再解析の結果ファイル (ACAML ファイル)
- ・レポートテンプレート (インテリジェントレポート使用の場合)

等が格納されます。レビュー画面でのレポートのレビューが可能になります。

**再解析モードでの結果セットの再解析は、結果セットの中だけで行われます。**

**解析に使用されるのは、シーケンスメソッドです。**

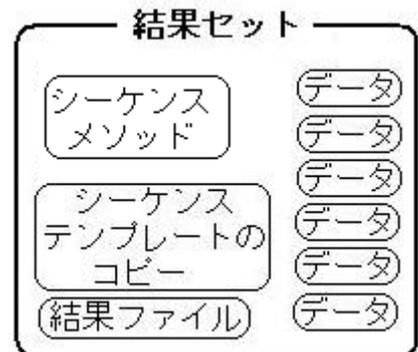
**マスターメソッド、シーケンステンプレートには影響を与えません。**

また、結果ファイル（ACAML）を生成するので、後にレビュー画面で結果をレビューできます。

シーケンスの採取データが

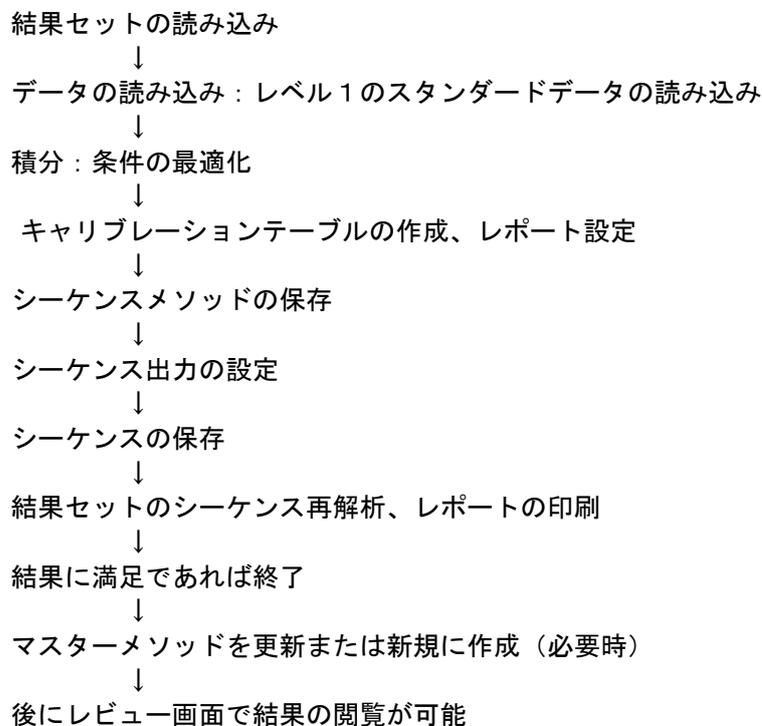
- ・定量用のスタンダードと未知サンプルのセット
- ・システムスーパビリティ試験のスタンダード

等、セットとして意味を持つ場合は再解析モードをお勧めします。



## 7-2-3. 結果セットの再解析

定量を目的とした結果セットはシーケンス分析を用いて、スタンダードのデータ、未知濃度のサンプルの順でデータを採取しています。  
シーケンスメソッドの解析条件を整えて、結果セット内のデータの再解析を一度に連続的に行います。  
再解析モードを使用した解析順は以下のとおりです。



- ・すべての取り込み、解析が結果セット内で行われます。キャリブレーション分析の場合には結果セット内のシーケンスメソッド(シーケンステンプレートではない)が更新され使用されます。
- ・今後の分析（データ取り込み）のために、シーケンスメソッドでの変更を次回の分析で使用するマスターメソッドに反映する必要がある場合は、「マスターメソッドの更新」により簡単に反映できます。
- ・再解析するたびに、DA.M が更新されます。

## &lt;備考&gt;

- ・再解析モードは、ChemStation B.02.01以降で作成された結果セット（シーケンスコンテナ）だけで使用できます。
- ・ChemStation B.02.01以降で作成されたシーケンス（ユニークなフォルダ作成オン）では、データ解析画面で、結果セットの再解析として実行する手順に統合されているため、メソッド&ランコントロール > シーケンスパラメータ > メソッド実行部分の“データ再解析のみ”は使用できません。



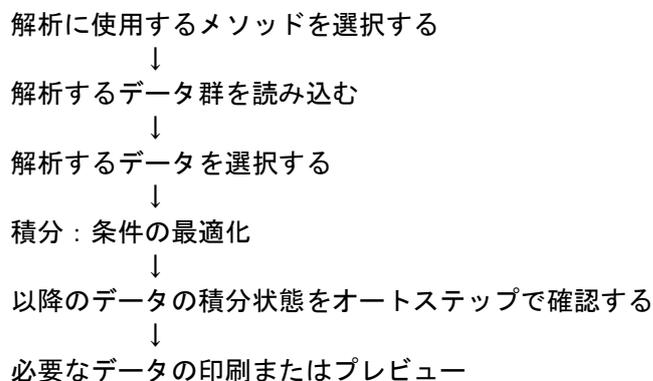
### 7-3. 再計算モード（任意のメソッドでの再計算）

シーケンスで採取したサンプル群やシングルランのデータなどを計算します。

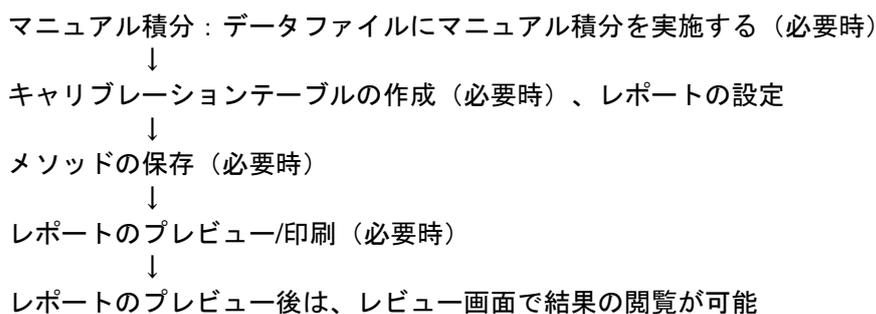
- ・ 任意のメソッドで再計算し、積分状態を迅速に簡単にレビューします。
- ・ 自動では結果ファイルは作成されません。各データファイルについてレポートの印刷を実行する必要があります。レビュー画面で結果をレビューする予定がある場合は、レポートのプレビューか印刷を実行してください。
- ・ オートステップを実行してもレポートは自動で出力されません。（プレファレンス設定で、読み込み後積分とレポート印刷を選択し、レポート条件で出力先をプリンタに設定すれば可能です。）
- ・ シーケンスにキャリブレーションが含まれていても、リキャリブレーションは実行されません。
- ・ マスターメソッドは日々の分析で変更を受ける場合があるので、データ群と解析に使用したマスターメソッドはセットで保存しておく必要があります。

#### 7-3-1. 再計算モードのワークフロー

再計算モードの場合のワークフローは以下のとおりです。



また、再計算モードでもマニュアル積分やキャリブレーションテーブルの作成も可能です。





#### 7-4. 前回の結果モード (DA.M 使用)

データファイルに付属している解析メソッド (DA.M) を使用して計算します。このメソッドは、このデータに対して前回 (取り込み、再解析、再計算で) 使用したメソッドです。

解析メソッドはデータ毎に異なります。毎回採取メソッドが異なり、ほかの分析とは直接比較しない場合などの場合に使用が考えられます。

シーケンスメソッドが変更された場合にも、前回の解析で使用したメソッド (DA.M) で再現することができます。

DA.M は通常は読み取り専用です。また前回の結果モードでのみ読み込まれ、マニュアルで読み込むことはできません。

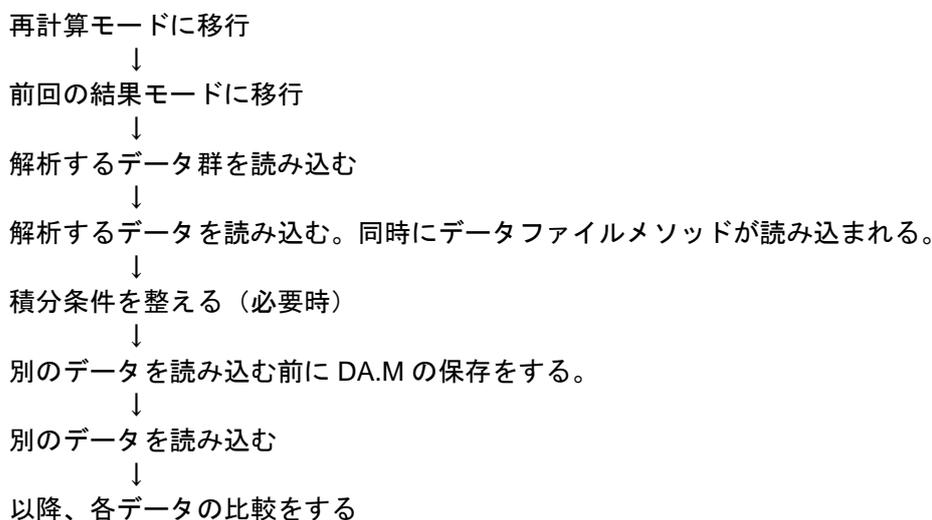
パラメータを変更することは可能ですが、保存することはできません。

ただし、レポートを生成する場合にはメソッドの変更を保存する必要があるため、レポートプレビュー等で新しい結果 (ACAML) が生成される際に警告メッセージが表示されます。

ここで、ユーザーが確認すると DA.M が更新 (保存) されます。

##### 7-4-1. 前回の結果モードのワークフロー

結果ファイルを作成するには、印刷プレビューか印刷を実行する必要があります。



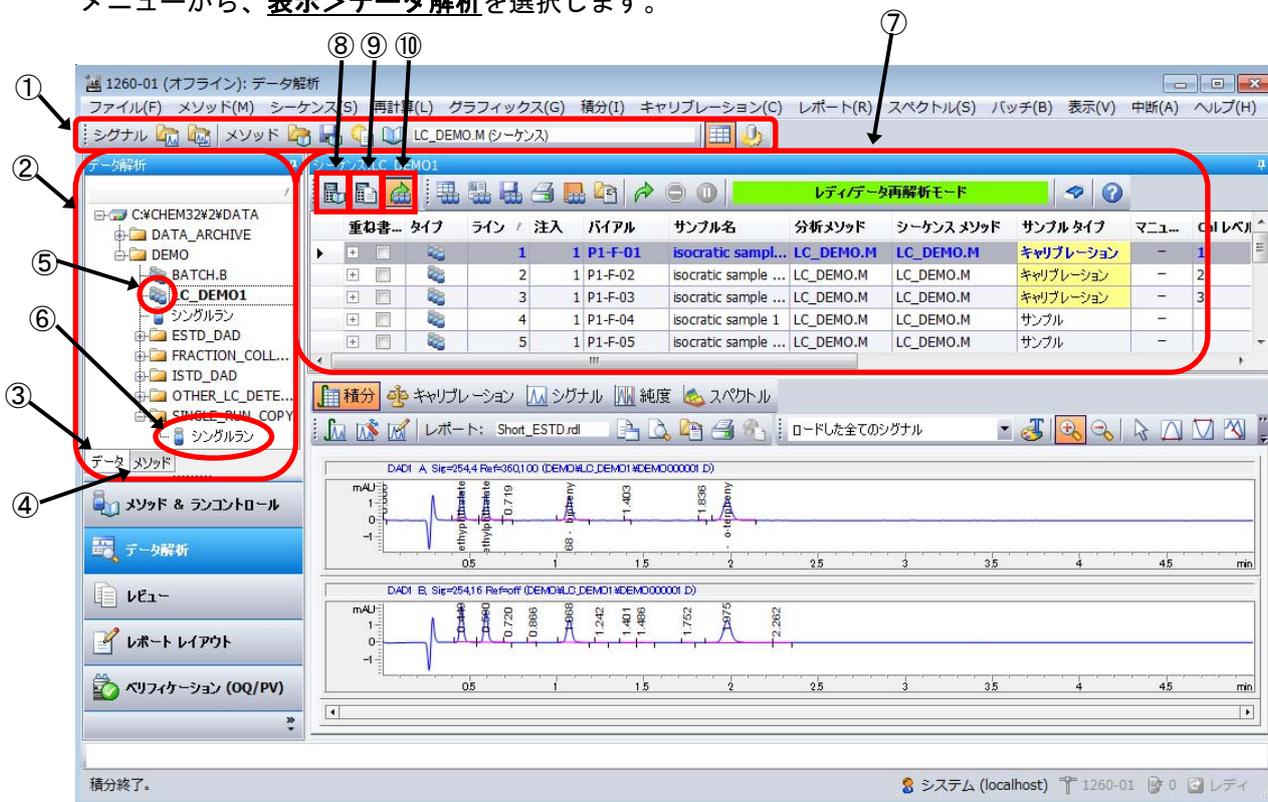
注意：DA.M は、ナビゲーションテーブル上で他データに移動する前に保存してください。自動では保存されません。

注意：DA.M は、他のモードでも、レポートのプレビュー、印刷を行った場合や、再解析モードで再解析を行った場合、変更を受けます。

7-5. データ解析画面の概要

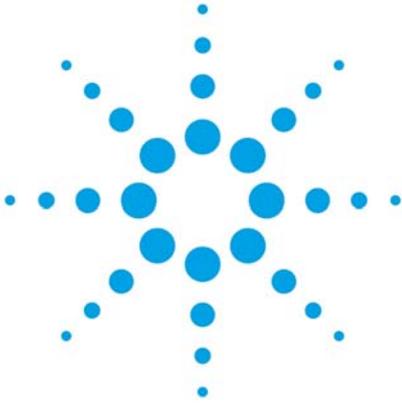
7-5-1. データ解析画面の構成

データ解析画面には、画面左下のボタンからデータ解析をクリックするか、メニューから、**表示>データ解析**を選択します。



- ① ツールバーのメソッド表示：現在使用しているメソッド名が表示されています。
- ② ChemStation エクスプローラー：データタブとメソッドのタブがあります。
- ③ データタブからは、結果セットのデータやシングルランのデータの読み込みができます。
- ④ メソッドタブからはメソッドを読み込むことができます。結果セットのデータを読み込んだ場合、上段がシーケンスメソッド、下段がマスターメソッドです。
- ⑤ 結果セットを示すアイコンです。ダブルクリックか右クリックメニューでデータをナビゲーションテーブルに読み込むことができます。
- ⑥ シングルランのデータを示すアイコンです。ダブルクリックか右クリックメニューでデータをナビゲーションテーブルに読み込むことができます。
- ⑦ ナビゲーションテーブル：結果セットを読み込んだ場合は、結果セットのデータをシングルランを読み込んだ場合はシングルランのリスト表示をします。

- ⑧ 再計算モードアイコン :  選択されている場合は再計算モードであることを示します。
- ⑨ 前回の結果モードアイコン :  選択されている場合は前回の結果モードであることを示します。
- ⑩ 再解析モードアイコン :  選択されている場合は再解析モードであることを示します。



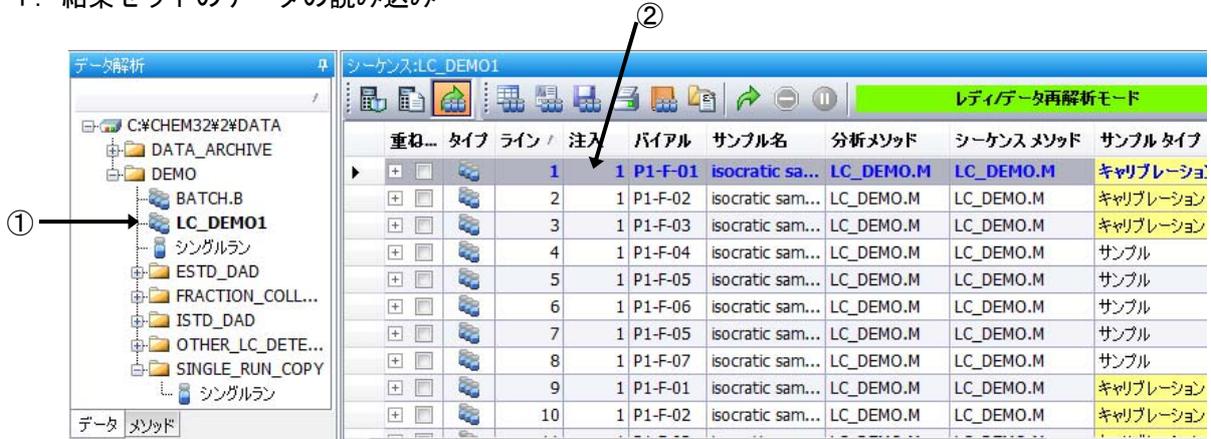
## 第8章 データの読み込み

8-1. 結果セットのデータの読み込み	8-2
8-2. シングルランデータの読み込み	8-2
8-3. データ取込メソッドの表示	8-2
8-4. グラフィックスメニューでのウインドウ表示	8-3
8-5. クロマトグラム表示に注釈を追加	8-3

8. データの読み込み

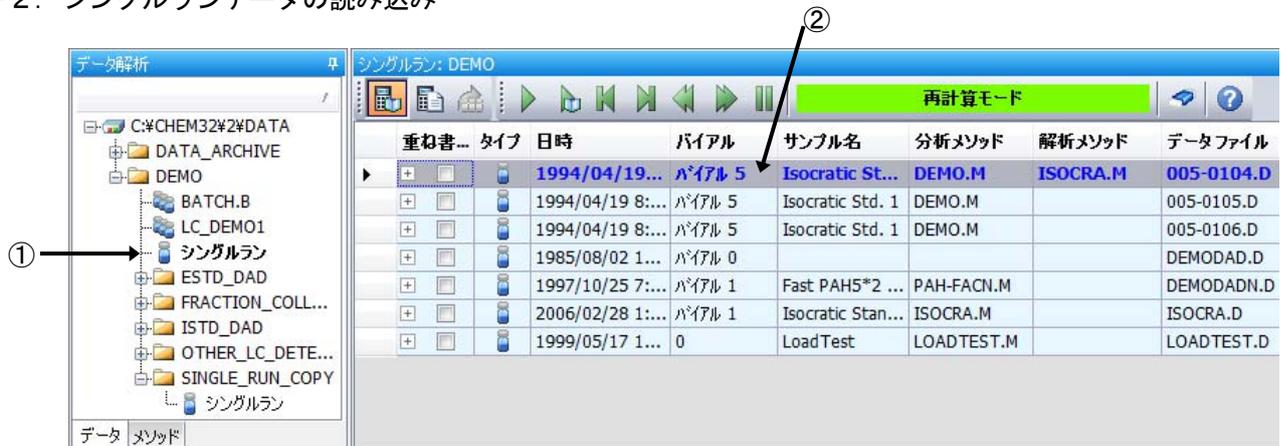
ここでは例として、結果セット LC\_DEMO1 のデータ DEMO000001.D を読み込み、表示スケールの変更と注釈を試してください。

8-1. 結果セットのデータの読み込み



- ①データ解析画面に移行し、ChemStation エクスプローラ上の目的の結果セットをダブルクリックして、ナビゲーションテーブルにリスト表示させます。
- ②ナビゲーションテーブル上から目的のデータの行をダブルクリックします。  
ワークスペースのクロマトグラム表示は目的の物になります。

8-2. シングルランデータの読み込み



- ①ChemStation エクスプローラ上のシングルランのアイコンをダブルクリックして、ナビゲーションテーブルにリスト表示させます。
- ②ナビゲーションテーブル上から目的のデータの行をダブルクリックします。  
ワークスペースのクロマトグラム表示は目的の物になります。

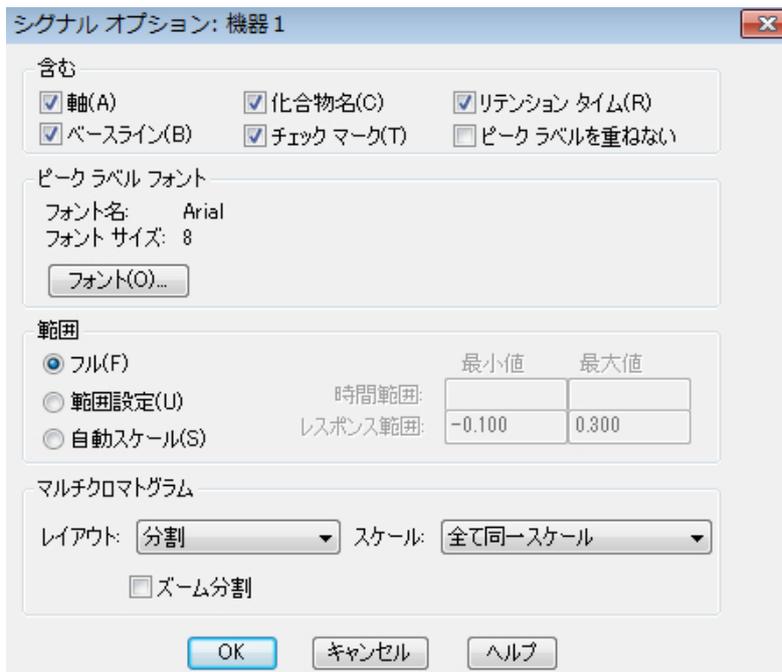
8-3. データ取込メソッドの表示

データが採取されたときのマスターメソッドを表示できます。(ACQ メソッド)メニューから、**メソッド>メソッド表示**を選択します。

この表示は、メソッドとして読み込んで使用することはできません。

## 8-4. グラフィックスメニューでのウインドウ表示

クロマトグラムの表示様式を設定します。メニューから、**グラフィックス>シグナルオプション**を選択します。ここで表示アイテム、スケールの範囲指定などの設定ができます。



範囲のセクションではクロマトグラムの表示範囲を指定できます。

- フル : 最も高いピークに合わせて、描画させる
- 範囲設定 : 指定範囲で、描画させる
- 自動スケール : 2番目に高いピークに合わせて、描画させる

マルチクロマトグラムのセクションでは、複数のクロマトグラムの重ねがきのレイアウトを設定できます。

レイアウト

- 分割 : 複数のクロマトを分割して、描画させる
- 重ねがき : 複数のクロマトを重ねがきして、描画させる

スケール

- すべてフルスケール : それぞれのクロマトにおいて、フルスケールで描画させる
- すべて同一スケール : 全てのクロマトを同じスケールで、描画させる

また、画面上のアイコンで、ズームイン、ズームアウトが可能です。



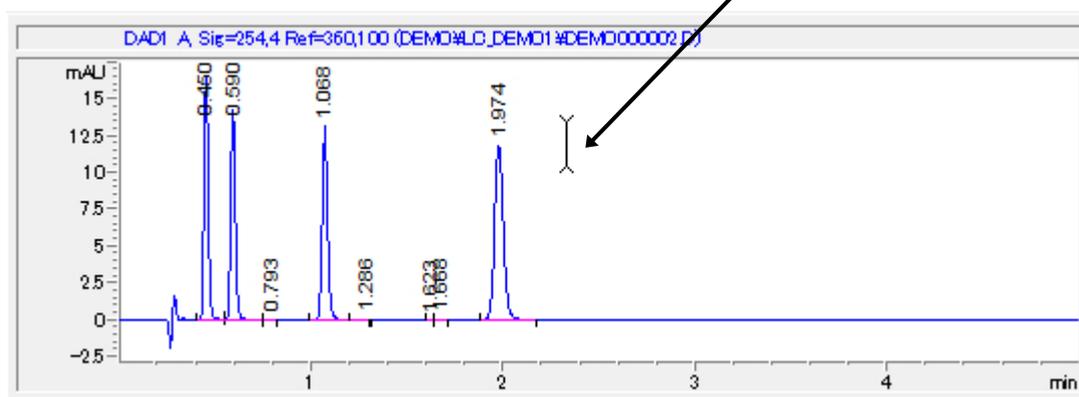
## 8-5. クロマトグラム表示に注釈を追加

クロマトグラム上に注釈をつけることができます。

グラフィックツールバーアイコン  をクリックして、追加のツールバーを表示させます。



注釈の編集アイコン  を選択しクロマトグラム上の注釈を書き入れたい場所でクリックします。

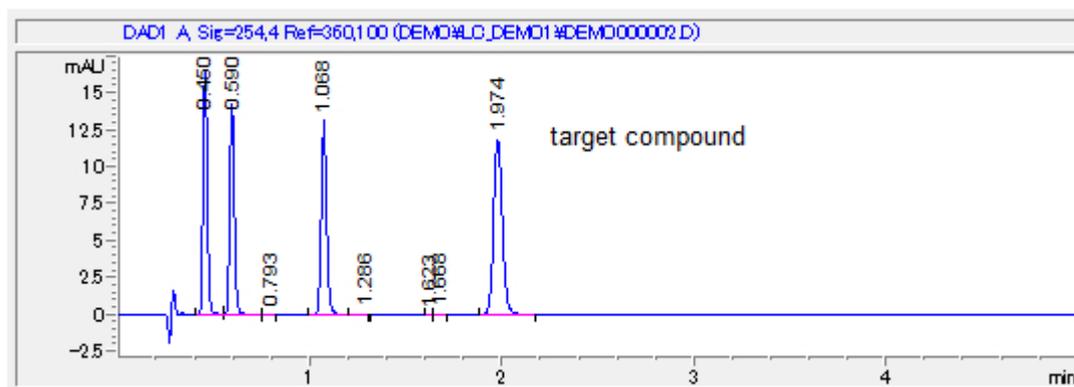


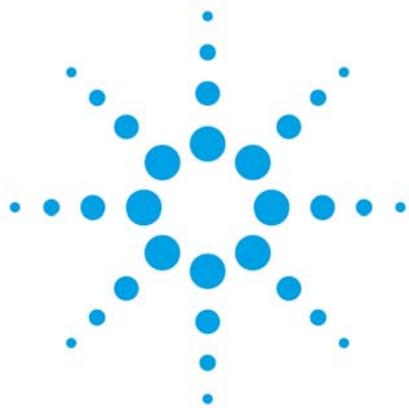
新しい注釈を入力してください

テキスト

表示 オプション OK キャンセル

テキストを入力し OK すると注釈が表示されます。





## 第9章 積分

9-1. 自動積分	9-2
9-2. 積分条件を変更して積分	9-3
9-3. マニュアル積分	9-3

## 9. 積分

積分はピークの面積を決定します。

(デモデータを使用する場合、ここでは例として、結果セット LC\_DEMO01 のデータ DEMO000001.D の、自動積分とタイムイベントの削除と追加を使用して適切に積分してください。

また、マニュアル積分を試してください。)

積分を行うためのツールバーに切り替えます。



積分には以下の3つの方法があります。

1. 自動積分。積分パラメータを決定する上で起点となるようなパラメータをソフトウェアに提示させる
2. ユーザが積分条件を変更して積分パラメータを最適化する
3. マニュアル積分。ユーザが手動でベースラインを引くなどして、方法1, 2では解析困難なピークを積分する。

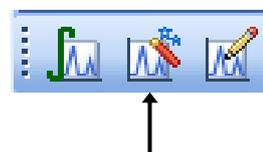
### 9-1. 自動積分

クロマトグラムに適した条件を ChemStation が自動的に計算し、後述の積分イベント欄に提示します。初回の積分パラメータ設定時など、適当な積分条件を決める時などに使用します。最適なパラメータが決まったら、次回以降は自動積分の必要はありません。

注意：マニュアル積分（後述）をした後に、自動積分をすると、マニュアル積分イベントが消去される場合があります。マニュアル積分の節を参照ください。

自動積分のアイコンをクリックします。

またはメニューから、**積分** > **自動積分** を選択します。



## 9-2. 積分条件を変更して積分

積分イベントの編集のアイコンをクリックします。  
積分条件変更の画面が表示されます。

ChemStation では、1つのデータファイルに複数のシグナルを保存できます。  
そのため、シグナル毎に積分イベントテーブルの設定が必要です。(例：波長違い、検出器違い)

① 積分したいシグナルを選びます。

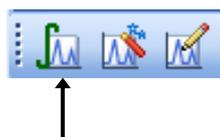
② シグナル名に対応するテーブルを表示させます。

③ ベースライン補正の方法や  
タンジェントスキムモード  
(重なったピークの処理方法)に  
関するパラメータ条件を設定します。  
各項目を適切な値に変更します。

④ その他の積分条件を設定します。  
各項目を適切な値に変更します。

⑤ 積分イベントを付け加えるには、  
行を追加するアイコンをクリックします。  
積分イベントの行の下に行が追加されます。  
矢印をクリックして、新しい積分  
イベントを選択し、値を入力します。  
時間欄に開始時間を入力すれば、  
特定の時間で、積分イベントを変更する  
ことができます。

⑥ トップツールバーにある積分の  
アイコンをクリックします。



変更した積分イベントで積分が実施されます。

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

## 9-3. マニュアル積分

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

OpenLAB CDS ChemStation では、各データファイル内にマニュアル積分条件を保存できます。  
(マニュアル積分の条件はメソッドに保存することも可能です。メソッドに保存したマニュアル  
積分条件を別のクロマトグラムに適用した場合は、積分結果を確認する必要があります。)

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



① 積分したいシグナルを選びます。

② シグナル名に対応するテーブルを表示させます。

③ ベースライン補正の方法や  
タンジェントスキムモード  
(重なったピークの処理方法)に  
関するパラメータ条件を設定します。  
各項目を適切な値に変更します。

④ その他の積分条件を設定します。  
各項目を適切な値に変更します。

⑤ 積分イベントを付け加えるには、  
行を追加するアイコンをクリックします。  
積分イベントの行の下に行が追加されます。  
矢印をクリックして、新しい積分  
イベントを選択し、値を入力します。  
時間欄に開始時間を入力すれば、  
特定の時間で、積分イベントを変更する  
ことができます。

⑥ トップツールバーにある積分の  
アイコンをクリックします。

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

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

シグナルの特定のイベント:

DAD1 A 指定

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

各アイコンをクリックすると、カーソルが変化します。



ベースラインを引く

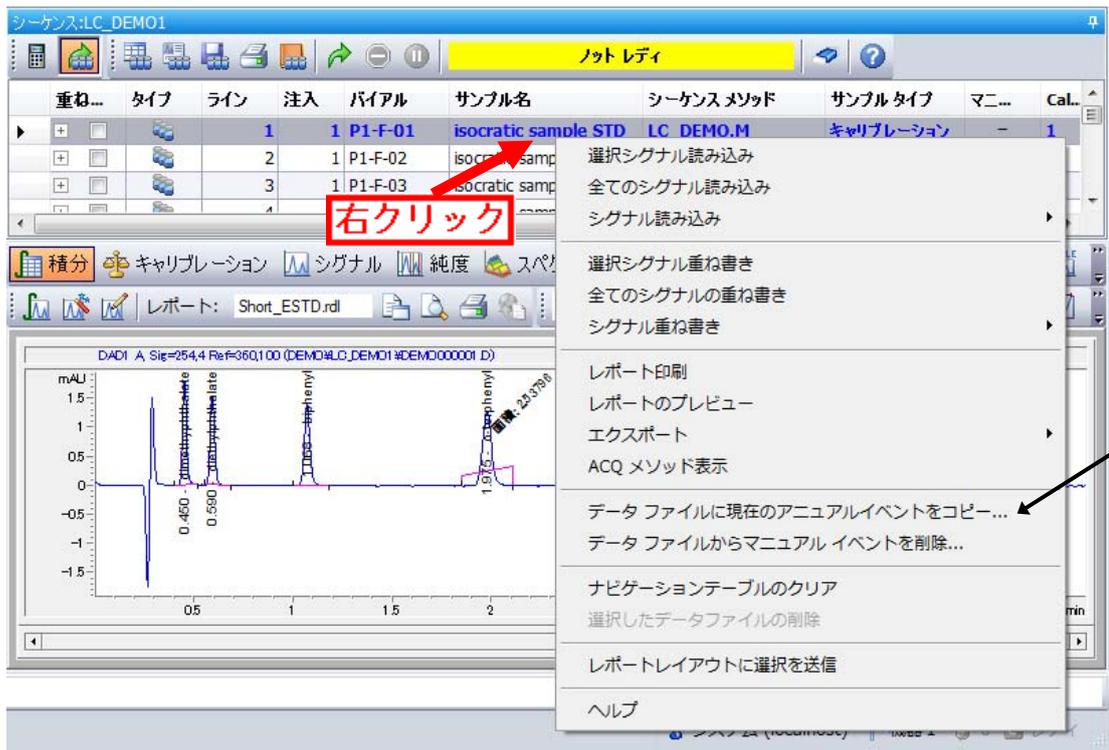
カーソルを積分開始点に移動し、積分終了点までドラッグします。ピークは自動的に積分され、引かれたベースラインとエリア値が表示されます。



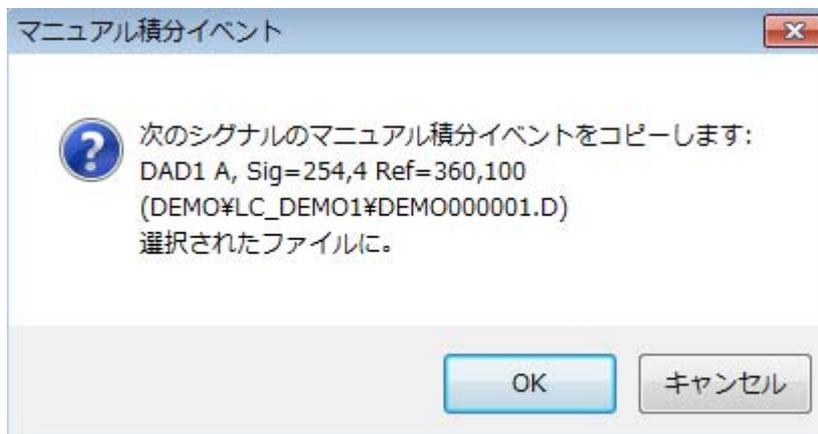
ピーク削除

ピークの積分を取り消します。

マニュアル積分が適切に設定できたら、データファイルにマニュアルイベントを保存します。画面上のナビゲーションテーブルで、現在解析中のデータ行を右クリックしてメニューを出します。



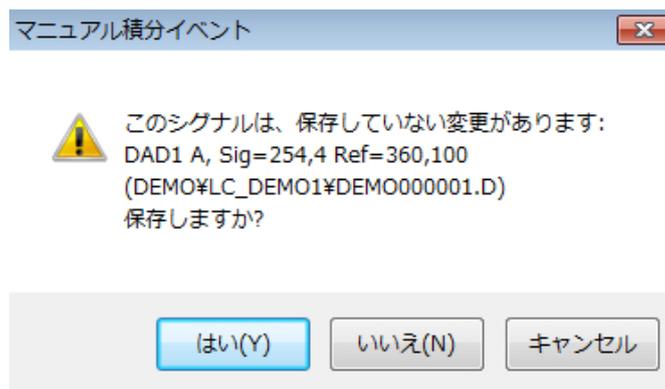
「データファイルに現在のマニュアルイベントをコピー」を選択します。  
問題なければ **OK** をクリックします。



重ね...	タイプ	ライン	注入	バイアル	サンプル名	シーケンスメソッド	サンプルタイプ	マニュアルイベント	Cal..
+		1	1	P1-F-01	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	キャリブレーション	M	2
+		2	1	P1-F-02	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	キャリブレーション		2
+		3	1	P1-F-03	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	キャリブレーション	-	3
+		4	1	P1-F-04	isocratic sample 1	LC_DEMO.M	サンプル	-	

データファイル内にマニュアルイベントが保存されました。

注意：マニュアル積分イベントのコピーをせずに、行を移るなどの動作をした時



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

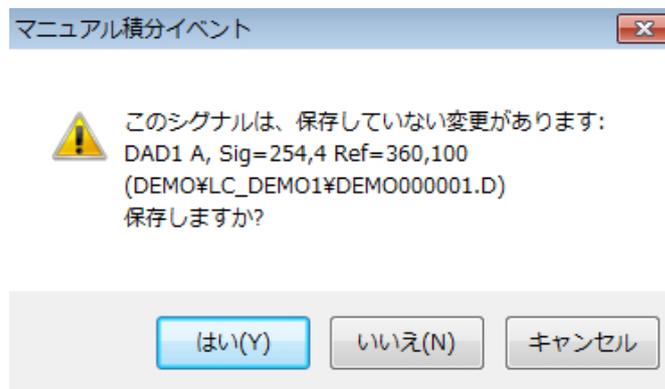
ここで「いいえ」とするとマニュアルイベントは保存されません。

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

詳細：ナビゲーションテーブルで、マニュアル積分イベントの存在する行を選択している時、(M マークのついた行が青色太字になってクロマトグラムが表示されている時)

重ね...	タイプ	ライン	注入	バイアル	サンプル名	シーケンスメソッド	サンプルタイプ	マニュアルイベント
+		1	1	P1-F-01	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	キャリブレーション	M

自動積分を実行した後、行を移るなどの動作をした時、問い合わせがあります。

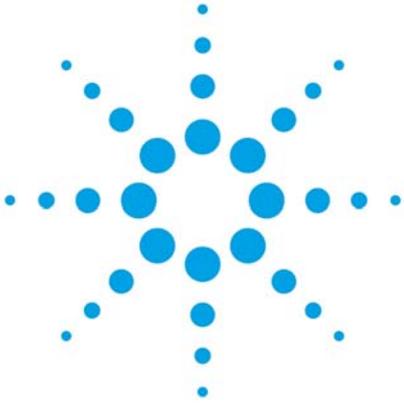


これは、自動積分したのでマニュアル積分を「消すか？」の問いです。(前出と逆)

ここで「はい」とすると自動積分イベントが反映されるため、マニュアルイベントは消去されます。(メソッドもまだ未保存です)

ここで「いいえ」とするとマニュアルイベントは保持されます。





## 第10章 キャリブレーションテーブルの作成と定量

10-1. キャリブレーションテーブル	10-2
10-2. スタンダード（標準試料）データの読み込み	10-2
10-3. 新規キャリブレーションテーブルの作成	10-2
10-4. キャリブレーション設定	10-3
10-5. キャリブレーションテーブルの編集	10-4
10-6. レポート設定	10-4
10-7. 多点検量線の作成	10-6
10-8. メソッドの保存	10-6
10-9. サンプルデータのレポート出力	10-6
10-10. マスターメソッドの更新、新しいマスターメソッドとして保存	10-6
10-11. リキャリブレーション	10-7
10-12. ISTD 法の設定	10-7

## 10. キャリブレーションテーブルの作成と定量

ここでは ChemStation で定量計算を行うための設定方法について説明します。  
 キャリブレーションテーブルを作成してメソッドに定量の条件を設定します。

(ここでは例として、デモ用の結果セット LC\_DEMO1 のシーケンスメソッド LC\_DEMO.M に 3 点の  
 キャリブレーションテーブルを作成することができます。)

スタンダードデータ DEMO000001.D、DEMO000002.D、DEMO000003.D はそれぞれ  
 1、10、100  $\mu\text{g/mL}$  の濃度です。(濃度は例題のための単位で、正確ではありません)  
 4 つのピークの成分は溶出順に、Dimethylphthalate(DMP)、Diethylphthalate(DEP)、  
 Biphenyl、o-Terphenyl です。計算は ESTD 法を使用します。)

### 10-1. キャリブレーションテーブル

キャリブレーションテーブルとは、定量計算に必要な情報、すなわち検量線の作成に必要な情報を入力した表のことです。ChemStation は、このキャリブレーションテーブルを元に、未知濃度サンプルの濃度を計算します。

実際に入力するのは「成分名」「スタンダードとしての濃度」です。

ChemStation はこれらの情報とシーケンス分析で得られた結果から自動的に計算を行います。

### 10-2. スタンダード (標準試料) データの読み込み

ナビゲーションテーブル上からスタンダードのデータ行をダブルクリックしてデータを読み込みます。(解析のデモでは「シーケンスメソッド」を使用します。キャリブレーションテーブルを作成する前に予めデータを積分してください。)

### 10-3. 新規キャリブレーションテーブルの作成

メニューから、キャリブレーション>新しいキャリブレーションテーブルを選択します。

既存のキャリブレーションテーブルがあるときは削除して新規に作成するかの問い合わせがあります。新規に作成してください。

ヒント：既存のキャリブレーションテーブルを更新するには、新規作成ではなく、リキャリブレーション (後述) を参照してください。

①レベルが 1 であることを確認します。

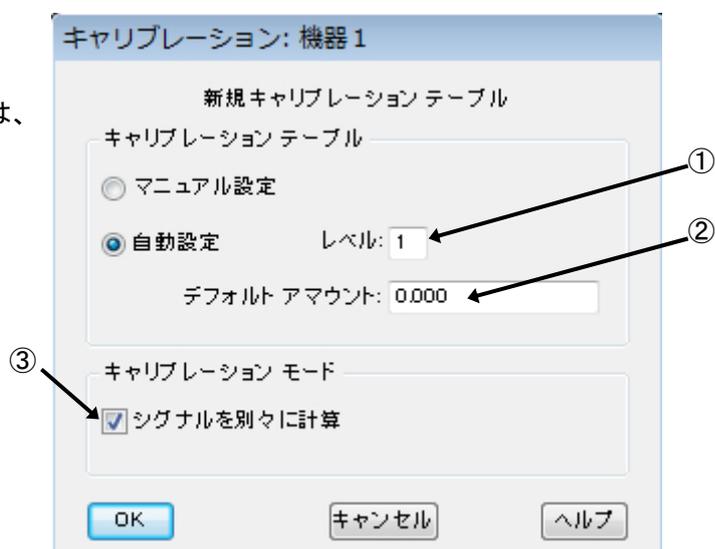
②目的とする化合物の濃度が全て同じ場合は、

デフォルトアマウントに数値を入れます。  
 個々に濃度が異なる場合は 0 のままに  
 します。

③ 2 波長、または 2 検出器以上の場合、  
 チェックを入れてください。

すると、多波長で測定した場合に、  
 波長別テーブルが作成されます。

④ **OK** をクリックします。



キャリブレーションテーブルが表示されます。積分されているピークが自動的にキャリブレーションテーブルに登録されています。

#	RT	シグナル	化合物名	レベル	アmount [ng/ul]
1	0.449	DAD1 B		1	0.000
2	0.450	DAD1 A		1	0.000
3	0.590	DAD1 A		1	0.000
4	0.590	DAD1 B		1	0.000
5	1.068	DAD1 A		1	0.000
6	1.068	DAD1 B		1	0.000
7	1.975	DAD1 A		1	0.000
8	1.975	DAD1 B		1	0.000

⑤化合物名を入力します。

⑥標準溶液の既知の濃度を入力します。

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

⑦ **OK** をクリックします。

#### 10-4. キャリブレーション設定

メニューから、**キャリブレーション>キャリブレーション設定**を選択します。

キャリブレーション設定: 機器 1

タイトル: Demo Calibration

デフォルト RT ウィンドウ: 分, %

リファレンス ピーク: 0.00 + 5.00

① その他のピーク: 0.00 5.00

② アマウント単位:

デフォルト検量線: ③

タイプ: 直線

原点: 含む

重付け: 均等

アンキャリブレーション ピークの計算

シグナル: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=360,100

いいえ

既存化合物使用: なし

レスポンス ファクタ固定: 0.000

ISTD 使用: なし

該当ピークがない場合

全ての RT 修正  部分キャリブレーション

OK キャンセル ヘルプ

①デフォルト RT ウィンドウ: ピークを同定する RT の範囲を設定します。この範囲に RT があるものの最大ピークが、テーブル上の成分と同定されます。「その他のピーク」の入力欄に入力します。

例: 0.00min + 5% (0.00±2.5%)

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

②アマウント単位: サンプル濃度の単位ラベルを入力します。

③デフォルト検量線: 検量線の種類と原点の処理法、検量線上のデータポイントの重み付けを指定します。

10-5. キャリブレーションテーブルの編集

メニューから、キャリブレーション>キャリブレーションテーブルを選択すると編集が可能です。

10-6. レポート設定

①定量計算の計算方法を設定します。

メニューから、レポート>レポート条件を選択するか、  
レポート条件アイコンをクリックします。



①

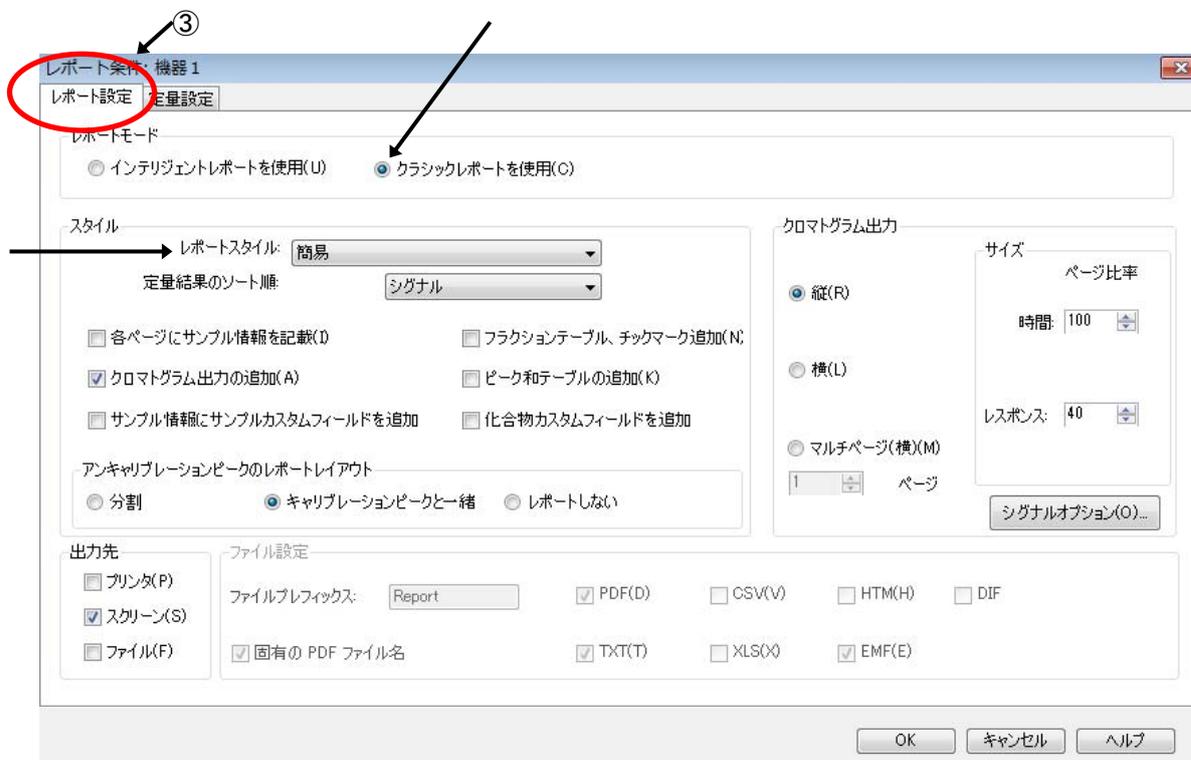
②定量設定タブでは、計算方法を **ESTD** に、カウント法を面積に設定します。



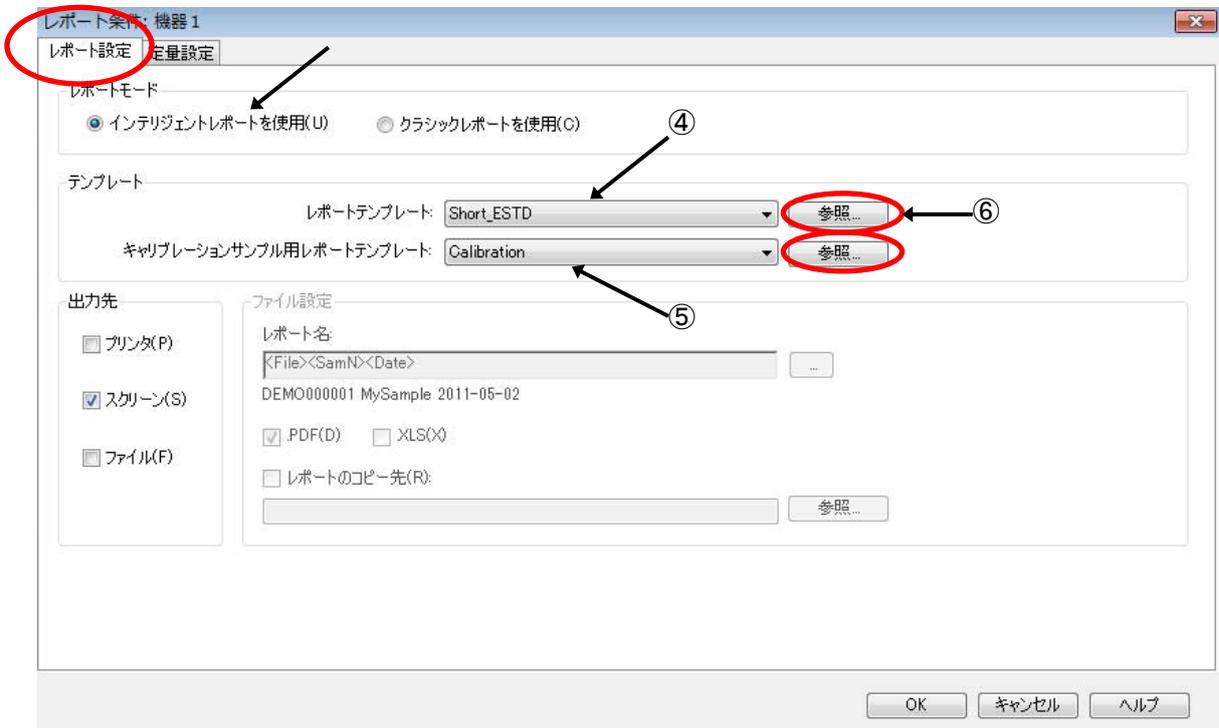
③レポートスタイルを選択します。レポート設定タブを選択してください。

レポート設定タブでは、インテリジェントレポートかクラシックレポートの  
どちらかを選択できます。

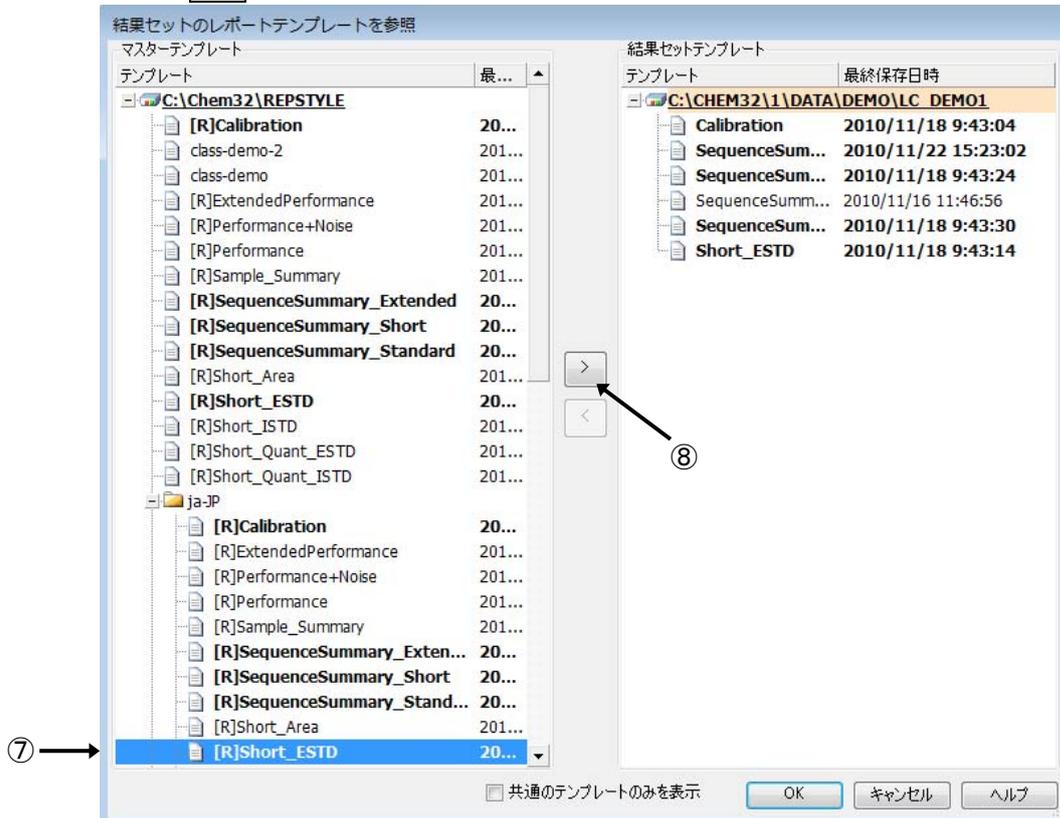
クラシックレポートの場合は、レポートスタイルを簡易または詳細を選択してください。



- ④インテリジェントレポート使用の場合は、レポートテンプレートに Short\_ESTD を選択してください。（手順⑥参照）
- ⑤キャリブレーションサンプル用レポートテンプレートは、Calibration を選択してください。（この項目は、シーケンスサマリストスタイルのレポートを出力するときに有効になります。）



- ⑥テンプレートを選択するには、参照ボタンをクリックし、フォルダ C:\Chem32\REPSTYLE\ja-JP の中からテンプレートを選択してください。（デモデータ使用の場合は参照ボタンをクリックし以下の手順を実施してください）
- テンプレートの参照ボタンをクリックすると以下の画面が現れます。



- ⑦画面左手のマスターテンプレートの一覧に、フォルダ ja-JP があるので、この中から Short-ESTD をクリックして選択します。
- ⑧中央の右矢印ボタン  をクリックして、結果セットテンプレートにコピーして  をクリックします。テンプレートの上書きの確認メッセージが出ますので、 をクリックします。レポート条件設定ダイアログボックスの  をクリックします。

#### 10-7. 多点検量線の作成

多点検量線を作成する場合は、以下のように行います。

- ①2点目のスタンダード（標準試料）データをナビゲーションテーブルから読み込みます。
- ②メニューから、**キャリブレーション>レベル追加**を選択します  
または、レベル追加アイコンをクリックします。



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



- ⑤  をクリックします。

- ⑥キャリブレーションテーブルに2点目用の行が追加されます。  
この2点目の行に、濃度を入力します。化合物名は必要ありません。
- ⑦  をクリックします。
- ⑧3点目以降は手順①から⑦を繰り返します。繰り返すたびに「レベル」に入力する数字は1つつ増やしてください。例えば3点目はレベルに3と入力します。

#### 10-8. メソッドの保存

定量のための条件が整ったのでメソッドを保存します。

メニューから、**メソッド>シーケンスメソッドを保存**を選択してください。

注意：結果セットを使用しないワークフローの場合は、解析用の適当なメソッドとして保存してください。

#### 10-9. サンプルデータのレポート出力

- ①定量したいサンプルデータをナビゲーションテーブルから **ダブルクリック**して読み込みます。
- ②レポートプレビューのアイコンか、レポート印刷のアイコンを選択します。  
プレビュー後に印刷も可能です。



#### 10-10. マスターメソッドの更新、新しいマスターメソッドとして保存

これまでに作成したキャリブレーションテーブルは、シーケンスメソッドに保存されています。

今作成したキャリブレーションテーブルを明日も使用するなどの場合、このシーケンスメソッドの元になったマスターメソッドを更新することができます。

メニューから、**メソッド>マスターメソッドを更新**を選択します。

または、新しいマスターメソッドとして保存することができます。

メニューから、**メソッド>新しいマスターメソッド**として保存を選択します。

## 10-11. リキャリブレーション

既存のキャリブレーションテーブルのキャリブレーションポイントを更新する場合に使用します。

- ①新しいスタンダードデータを読み込みます。定量対象ピークが RT ウィンドウ（ピークを同定するリテンションタイムの範囲）内に入っていることを確認します。  
入っていない場合は、キャリブレーションテーブルを編集する画面（メニューから、**キャリブレーション>キャリブレーションテーブル**）で、キャリブレーションテーブルの RT を改めて入力して RT ウィンドウに入るようにしてください。
- ②メニューから、キャリブレーション>リキャリブレーションを選択します。
- ③更新するレベルを選択します。
- ④更新方法を、置き換えか、平均から選択します。
- ⑤OK をクリックします。
- ⑥多点検量線の場合、他のレベルも同様に更新します。

## 10-12. ISTD 法の設定

計算に ISTD 法を使用する場合に必要な設定は、以下のとおりです。

- ・キャリブレーションテーブルに ISTD ピークを設定する
- ・レポート計算法を ISTD 法に設定する
- ・レポートスタイル/テンプレートに ISTD 用のものを設定する

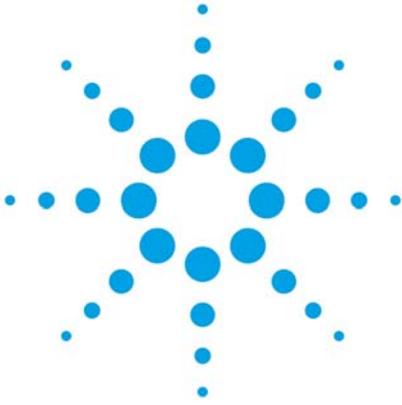
注意：キャリブレーションテーブルのアマウント（濃度）を先に入力してください。

絶対検量線法と同様にキャリブレーションテーブルを設定します。

#	化合物名	レベル	アマウント[ng/ul]	面積	リファレンス	ISTD	#
1	dimethylphthalate	1	10.000	2.741	いいえ	いいえ	
2	diethylphthalate	1	10.000	2.528	いいえ	いいえ	
3	biphenyl	1	8.000	2.874	いいえ	はい	
4	o-terphenyl	1	3.000	4.098	いいえ	いいえ	

- ① 内部標準ピークの、ISTD 欄で **はい** を選択します。  
ISTD 設定画面が表示されます。
- ② 内部標準の濃度を入力します。  
内部標準物質を 2 つ以上使用する場合、ISTD# に番号を入れてから濃度を入力します。
- ③ OK をクリックして、画面を閉じます。
- ④ キャリブレーションテーブル右端の # に、使用する ISTD の番号を入力します。
- ⑤ レポート条件の定量設定で、計算モードを ISTD に設定します。  
(メニューから、**レポート>レポート条件>定量設定タブ**)
- ⑥ レポート条件のレポート設定タブで、ISTD 用のレポートを選択します。





## 第11章 再解析モードでの結果セットのシーケンス解析

1 1-1. 再解析モードの概念	11-2
1 1-2. 結果セット全体の連続再解析	11-2
1 1-2-1. シーケンスサマリレポート	11-2
1 1-2-2. シーケンスサマリレポート：クラシックレポート使用	11-3
1 1-2-3. シーケンスサマリレポート：インテリジェントレポート使用	11-4
1 1-2-4. 連続再解析の実行	11-5
1 1-3. 異なるメソッドでのシーケンス結果セットの解析	11-5
1 1-4. 新規結果セットの作成	11-5

1 1. 再解析モードでの結果セットのシーケンス解析

ここでは例として、結果セット LC\_DEMO1 の連続再解析を実施します。  
 (デモのための準備：シーケンス>シーケンステーブルを開き、シーケンステーブルの  
 9, 10, 11 行目もサンプルタイプをサンプルとしてください)  
 この例では、シーケンスのはじめの 3 行で検量線を更新し、後に続く 8 つのサンプルの定量を  
 行います。

1 1-1. 再解析モードの概念

シーケンスでデータ採取した結果セットは、データの集合です。それは単なる寄せ集めの  
 データではなく、例えば、「キャリブレーション用のスタンダードサンプルと測定対象のサンプル」  
 など、ひとまとめとして扱うことに意味のあるデータの集合です。これらをまとめて解析する  
 ことで、結果に一貫性を持たせることができます。また、シーケンスで結果セットを全て解析する  
 と、結果ファイルが作成され、レビュー画面でのレビューが可能になります。

結果セットの解析には、シーケンスメソッドを使用します（再解析モード）。シーケンスメソッド  
 を編集して解析条件を整え、シーケンスメソッドを上書き保存します。結果セット内のデータは、こ  
 のシーケンスメソッドを使用して解析します。

シーケンスメソッドの条件が整い、もし次回以降の分析で使用したい場合は、「マスターメソッド  
 の更新」機能で簡単に反映させることができます。

<備考>

再解析により、バッチ (\*.b)、ログファイル (\*.log)、ナビゲーションテーブルが更新されます。  
 各データファイルの DA.M メソッドは、シーケンスメソッドにより更新されます。  
 これにより前回の結果モード時に、最後の解析結果を再生できます。

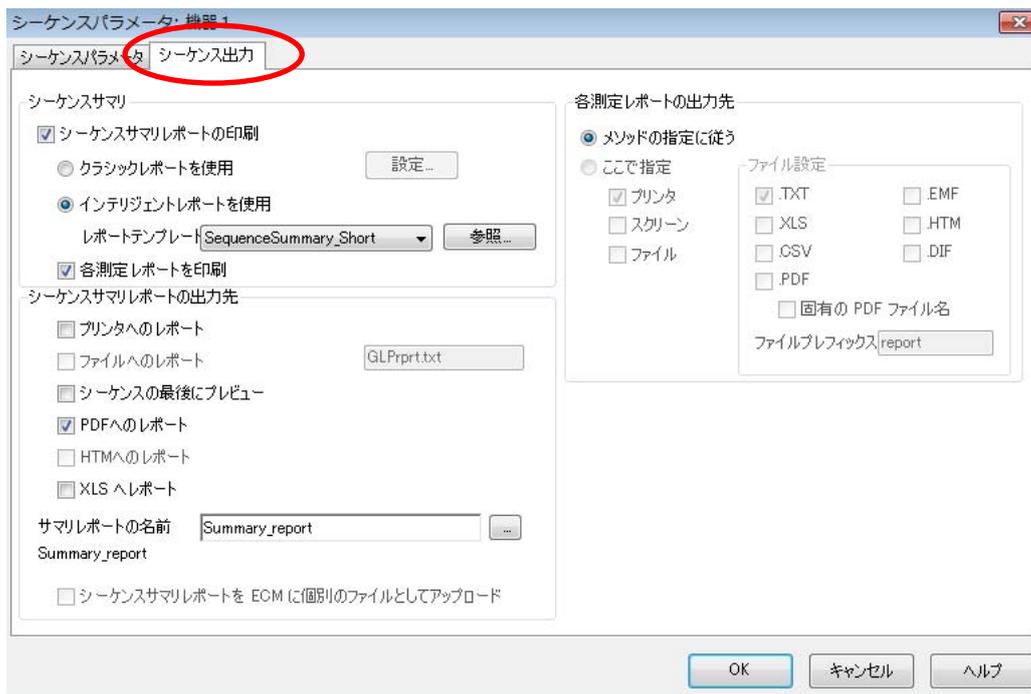
1 1-2. 結果セット全体の連続再解析

前の章まででシーケンスメソッドには定量のための設定ができています。  
 統計レポートを出力させるには、積分条件、定量条件が完成されていることが  
 必要です。  
 再解析モードになっていることを確認してください。

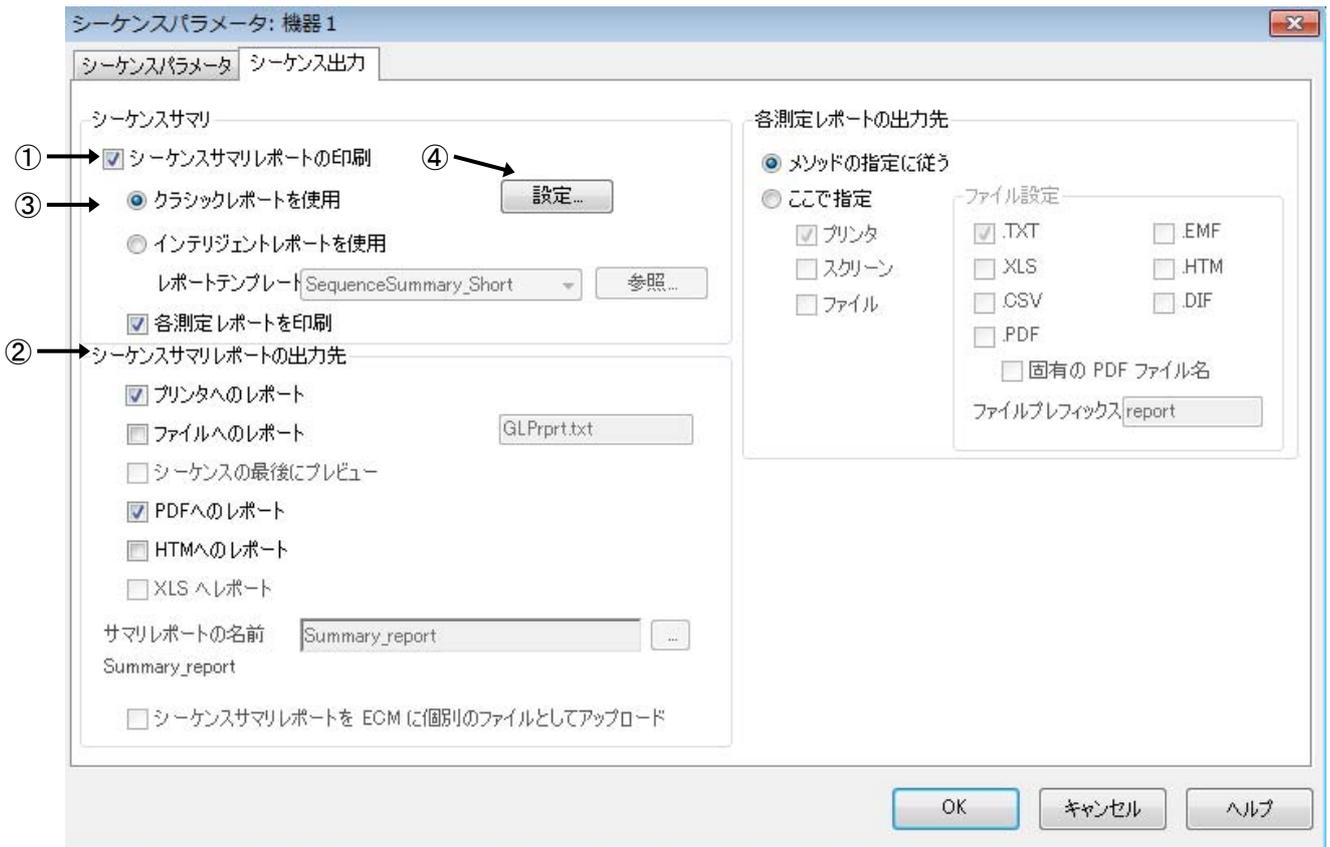


1 1-2-1. シーケンスサマリレポート

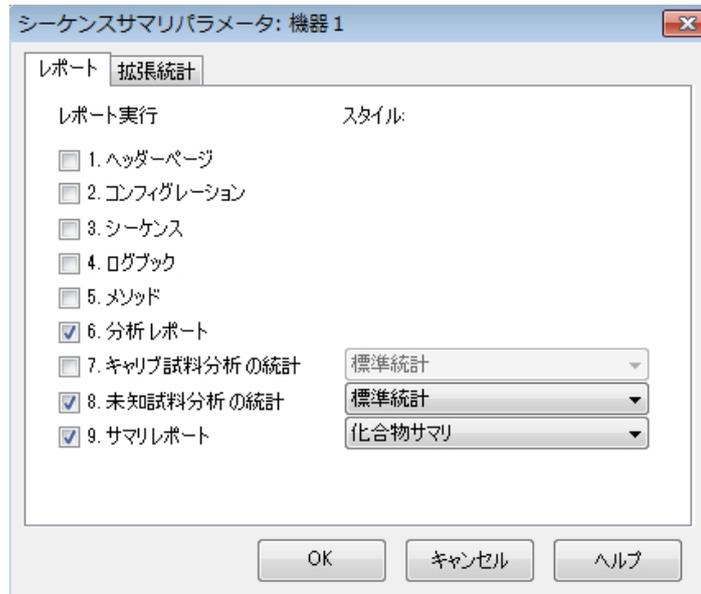
シーケンス再解析を実行するとシーケンスサマリレポートの出力が可能です。  
 シーケンスサマリレポートは、シーケンスを通じてのまとめのレポートです。  
 メニューから、シーケンス>シーケンスパラメータ>シーケンス出力タブを選択します。



11-2-2. シーケンスサマリレポート：クラシックレポート使用

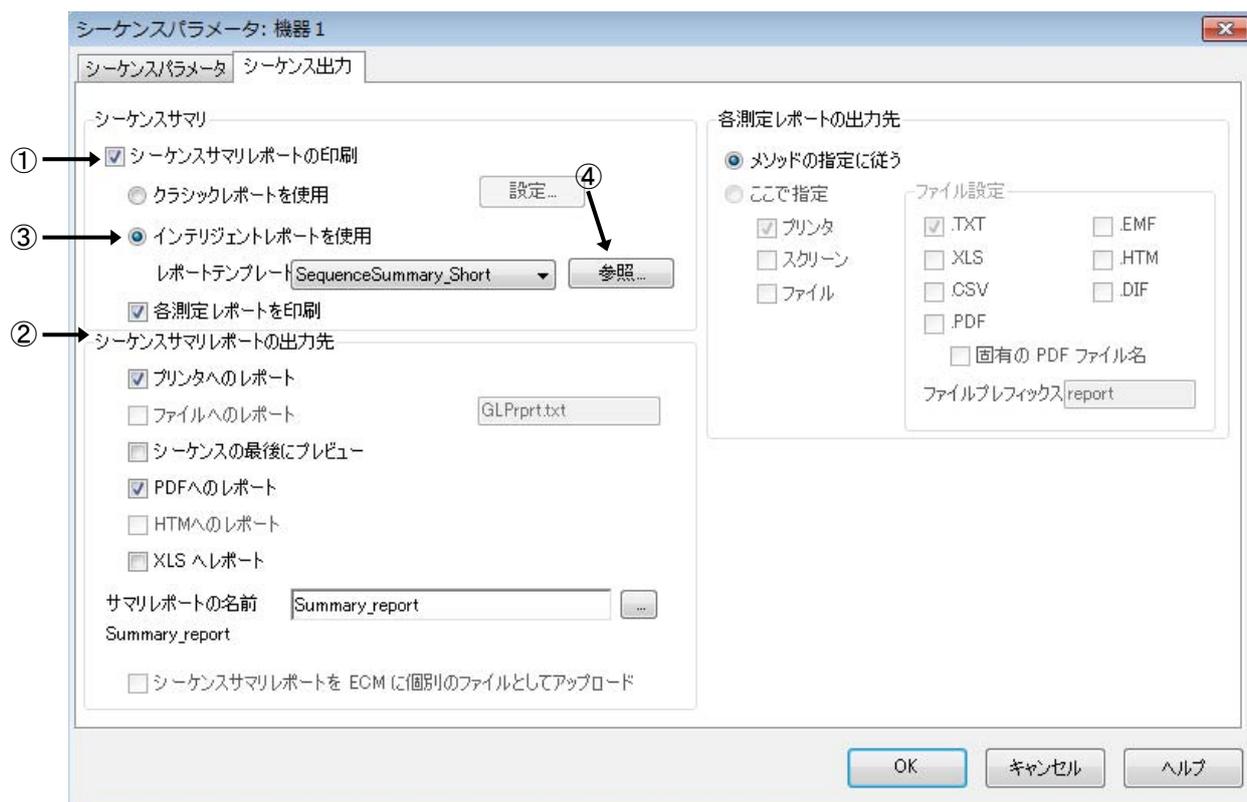


- ①シーケンスサマリレポートの印刷のチェックボックスをオンにします。
- ②出力先を設定します。（例：プリンタまたはPDF）
- ③レポートテンプレートはクラシックレポートを使用します。
- ④設定ボタンをクリックし、レポートする項目を選択します。

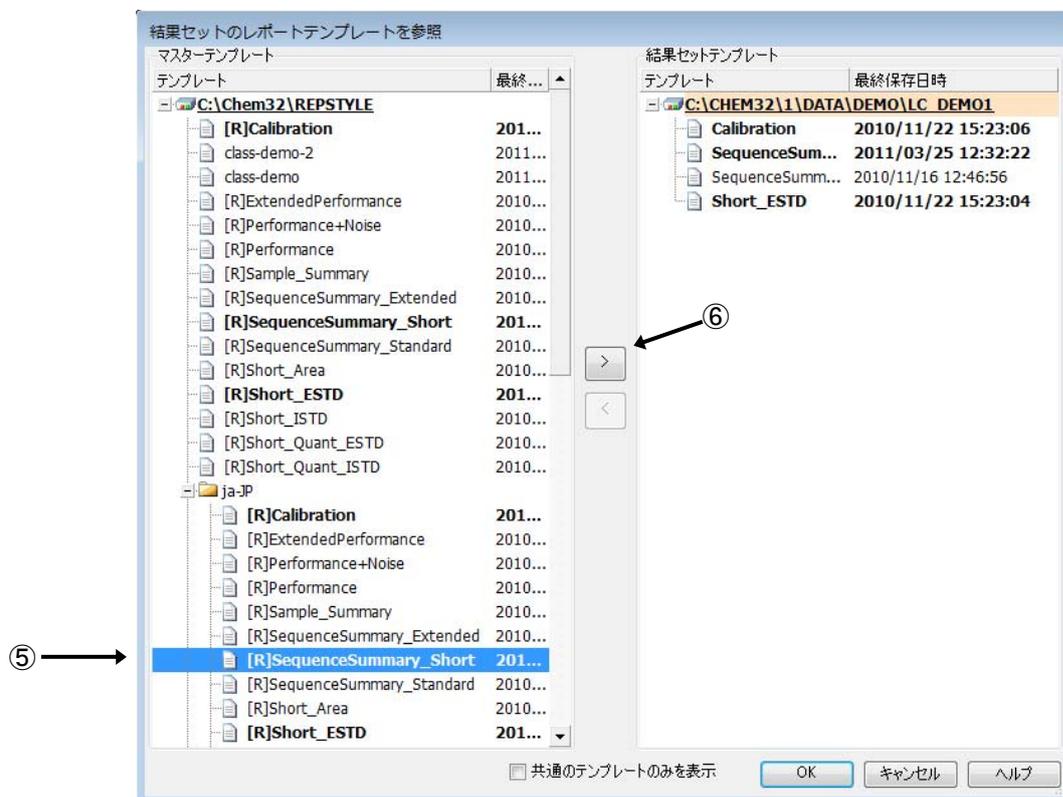


- ⑤例として、6、8、9番のチェックボックスをオンにします。9番のプルダウンの選択肢を化合物サマリに設定し OK をクリックします。
- ⑥シーケンス再解析実行後、各レポート、未知試料濃度の平均値、RSD、各データの化合物濃度のサマリなどが印刷されます。

11-2-3. シーケンスサマリレポート：インテリジェントレポート使用



- ①シーケンスサマリレポートの印刷のチェックボックスをオンにします。
- ②出力先を設定します。（例：プリンタまたはPDF）
- ③レポートテンプレートはインテリジェントレポートを使用します。
- ④参照ボタンをクリックします。



- ⑤画面左手のマスターテンプレートの一覧に、フォルダ ¥chem32¥REPSTYLE¥ja-JP があるので、この中から、[R] SequenceSummary\_Short など、シーケンスサマリタイプのレポートテンプレートを クリックして選択します。
- ⑥中央の右矢印ボタン  をクリックして、結果セットテンプレートにコピーします。テンプレートの上書きの 確認メッセージが出ますので、**OK** をクリックします。
- ⑦この画面の **OK** をクリックしてください。
- ⑧シーケンス再解析実行後、各レポート、サンプルの統計計算（平均値、RSD など）などが印刷されます。

#### 11-2-4. 連続再解析の実行

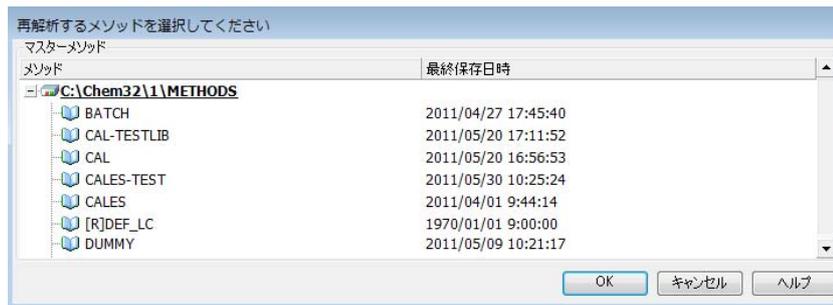
シーケンス再解析アイコンをクリックすると  
シーケンス再解析が始まります。  
使用されるのはシーケンスメソッドです。



この例ではシーケンスサマリのレポートテンプレートを使用したので、データの統計計算結果が  
付属しています。  
この結果セットは、結果ファイルが生成されたので、レビュー画面でレビューが可能です。

#### 11-3. 異なるメソッドでのシーケンス結果セットの解析

シーケンス再解析は、通常はシーケンスメソッドを使用して実行されますが、他のマスター  
メソッドを使用してシーケンス再解析が可能です。  
メニューから、**シーケンス>異なるメソッドで再解析** を選択します。



再解析に使用するマスターメソッドを選択します。**OK** をクリックするとすぐに  
シーケンス再解析が開始されます。

注意：これまで保たれていたデータとシーケンスメソッドの関連は解除されます。各データには  
選択したメソッドがシーケンスメソッドとして新たに関連付けされます。この関連付けは、  
シーケンステーブル上で設定されています。後から変更することも可能です。

選択したメソッドは結果セット内にコピーされ、そのメソッドで解析された結果ファイル (ACAML)  
が作成されます。

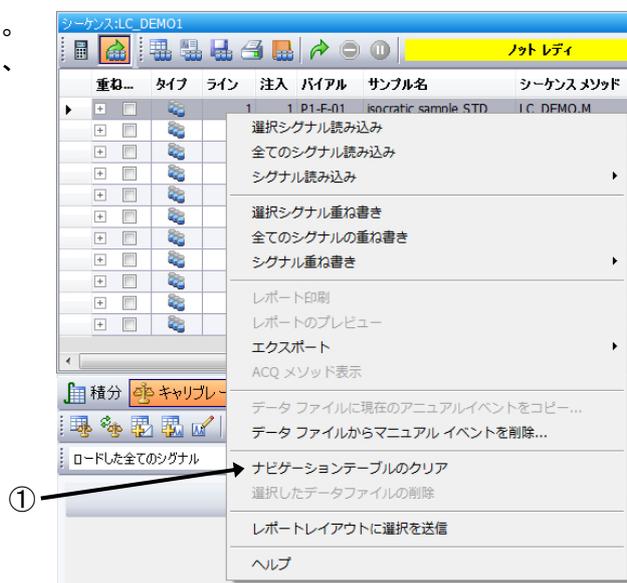
この手順では、シーケンスのすべてを、1つの異なるメソッドで再解析します。  
シーケンスライン (サンプル行) 毎に異なるメソッドで再解析する場合は、  
まず、ChemStation エクスプローラーのメソッドタブで、マスターメソッドから結果セットへ  
メソッドをコピーし、そのあとでシーケンステーブル上で目的のサンプル行でそのメソッドを  
選択します。  
シーケンステーブルでは、行の追加、削除はできません。

#### 11-4. 新規結果セットの作成

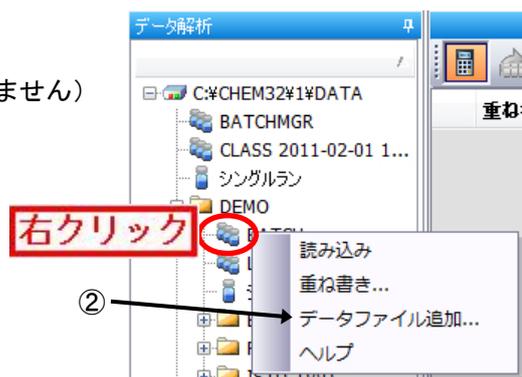
結果セットは、一連の関連付けされたデータとメソッドのセットです。  
ここでは、別々の結果セットからデータを取り出して、新しく結果セットを作成する方法を  
紹介します。

別の結果セットから集められたデータには、関連がないので、この結果セットには一貫性がありませんが、データの比較のために再計算、再解析モードでのシーケンス解析が可能です。新規結果セットの作成にはマスターメソッドが必要です。計算に使用するマスターメソッドを用意するか、ある結果セットから新しくマスターメソッドを作成しておいてください。

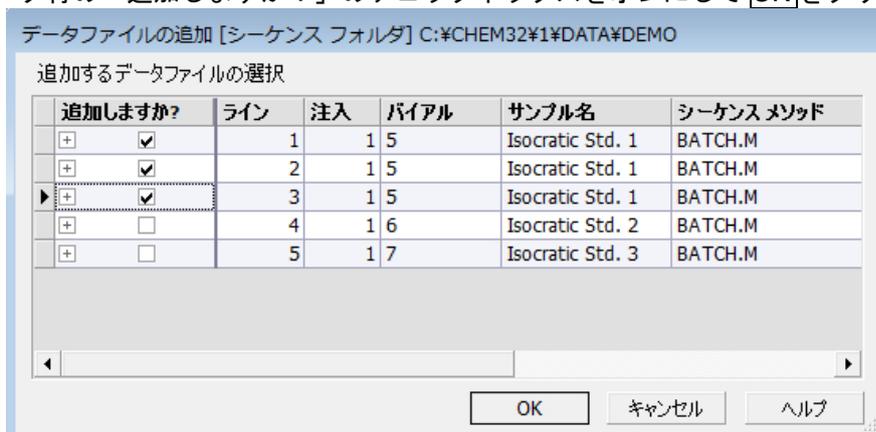
- ①ナビゲーションテーブルのクリアをします。ナビゲーションテーブル上で右クリックし、ナビゲーションテーブルのクリアを選択します。



- ②データを引き出したい結果セットのアイコンを右クリック（ダブルクリックではありません）して データファイル追加 を 選択します。

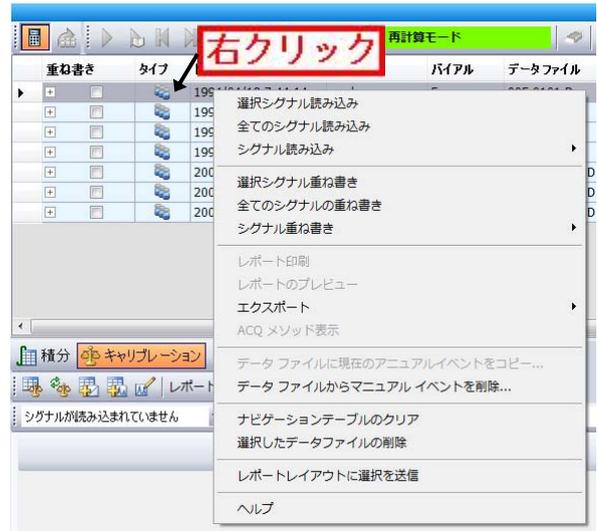


- ③必要なデータ行の「追加しますか?」のチェックボックスをオンにして **OK** をクリックします。



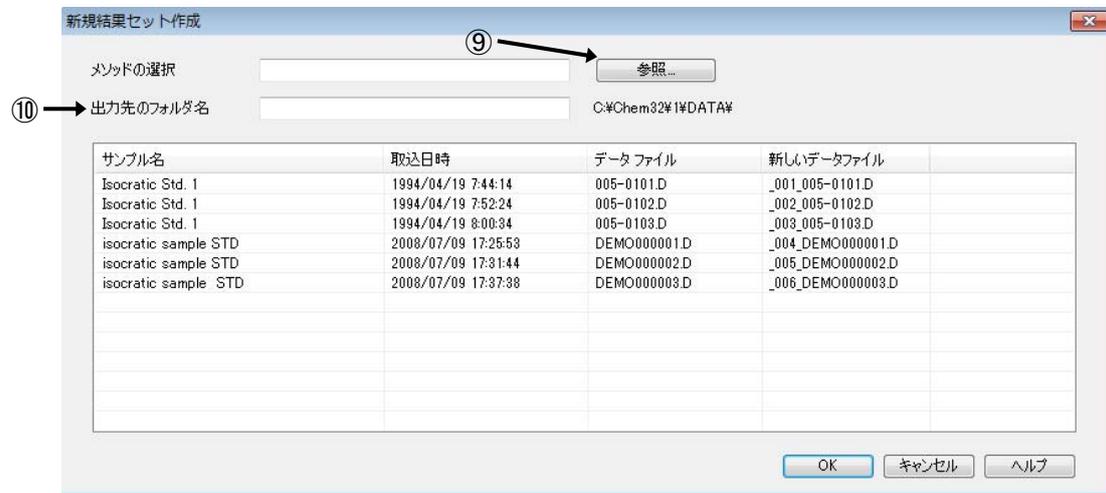
- ④データを引き出したい別の結果セットのアイコンを右クリック（ダブルクリックではありません）、データファイル追加を選択します。  
⑤同様に、必要なデータ行の「追加しますか?」のチェックボックスをオンにして **OK** をクリックします。

⑥ナビゲーションテーブル上には、追加したデータ行が表示されます。  
もし不要な行があれば、その行で右クリックして、選択したデータファイルの削除を選択し、ナビゲーションテーブルから削除します。



⑦最上行をクリックし、さらに Shift キーを押したまま最下行をクリックします。  
全ての行が選択状態になり、ハイライトされます。

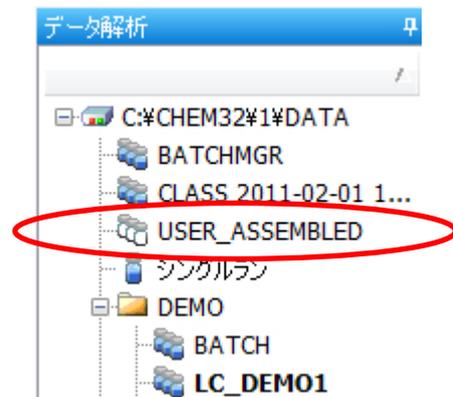
⑧メニューから、シーケンス>新規結果セット作成を選択します。



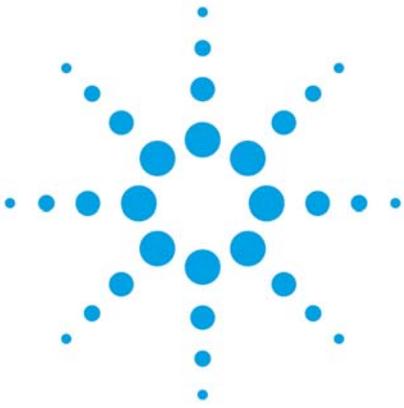
⑨新規結果セットにはシーケンスメソッドとなるメソッドが必要です。参照ボタンをクリックしてマスターメソッドの中から選択してください。

⑩出力先のフォルダ名を設定してください。これが結果セットの名前になります。

⑪作成された結果セットは、白いボトルのアイコンで表示されます。  
この結果セットは再計算、再解析が可能です。







## 第12章 再計算モード

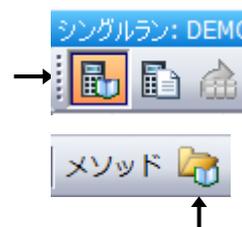
12-1. 再計算モードでの解析	12-2
12-2. オートステップ機能	12-3
12-3. 指定のメソッドで再計算	12-3

## 1 2. 再計算モード

再計算モードでは、解析に使用するマスターメソッドを指定します。  
 シングルランのデータは、再計算モードで解析します。結果セットのデータも再計算モードで解析が可能です。  
 オートステップ機能では、積分状態を迅速に確認できます。  
 任意のマスターメソッドで連続的に再計算し、計算結果をレポートに出力することができます。  
 (オートステップのデモには、Demo フォルダのデータセット BATCH と、デモ用マスターメソッド Batch.M を使用します。)

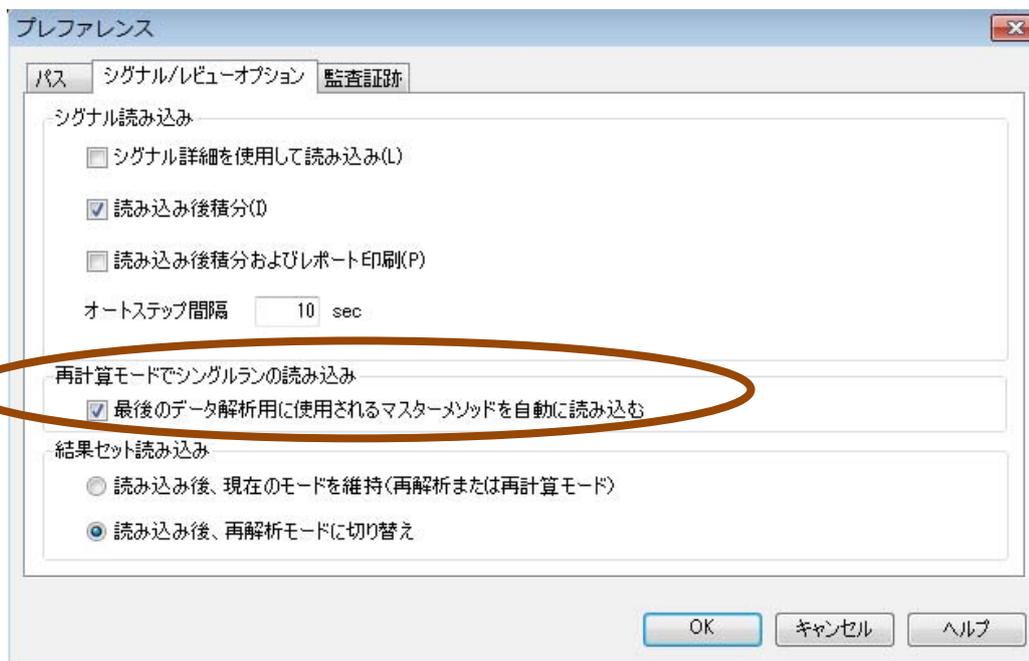
### 1 2 - 1. 再計算モードでの解析

①データ解析画面で、再計算モードに切り替えます。



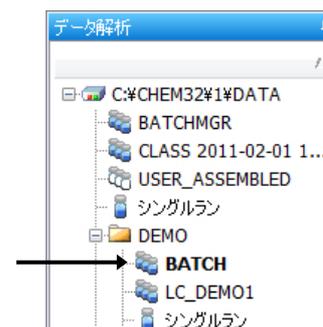
②解析に使用するメソッドを読み込みます。  
 メソッド読み込みアイコンか、  
 メニューから、メソッド>メソッド読み込みを選択します。

参考：シングルランのデータは、前回の解析で使用したマスターメソッド名を記録しています。  
 シングルランデータ読み込みの際に、前回の解析とおなじマスターメソッドを自動的に読み込む設定が可能です。この設定を有効にするには、メニューから、表示>プレファレンス>シグナル/レビューオプション タブを選び、最後のデータ解析用に使用されるマスターメソッドを自動的に読み込むを有効にします。



③シングルランのデータ、結果セット、  
 ユニークなフォルダ作成オフで採取したデータなどを、  
 ChemStation エクスプローラーで読み込みます。

④ナビゲーションテーブル上の解析したいデータ行をダブル  
 クリックすると、クロマトグラムの積分結果が表示されます。  
 この操作では、結果ファイルは作成されません。



- ⑤現在読み込まれているマスターメソッドの積分条件や定量条件などを編集します。  
必要に応じて、マスターメソッドを上書き保存します。
- ⑥マスターメソッドの条件を整えたら、レポートをプレビューできます。  
レポートプレビューのアイコンを使用してください。  
この操作で、結果ファイルが作成されます。



### 12-2. オートステップ機能

オートステップ機能では、現在読み込まれているマスターメソッドを利用して、各データの積分の結果のクロマトグラムを連続的に見ることができます。

ナビゲーションテーブルの最上行をクリックし、オートステップ開始のアイコンをクリックします。オートステップの間隔はプレファレンスの設定ダイアログボックスで変更できます。

(メニューから、**表示>プレファレンス>シグナルレビューオプションタブ>オートステップ間隔**)  
クロマトグラムウインドウの表示で、積分の状態を順次確認することができます。  
この操作では、結果ファイルは作成されません。

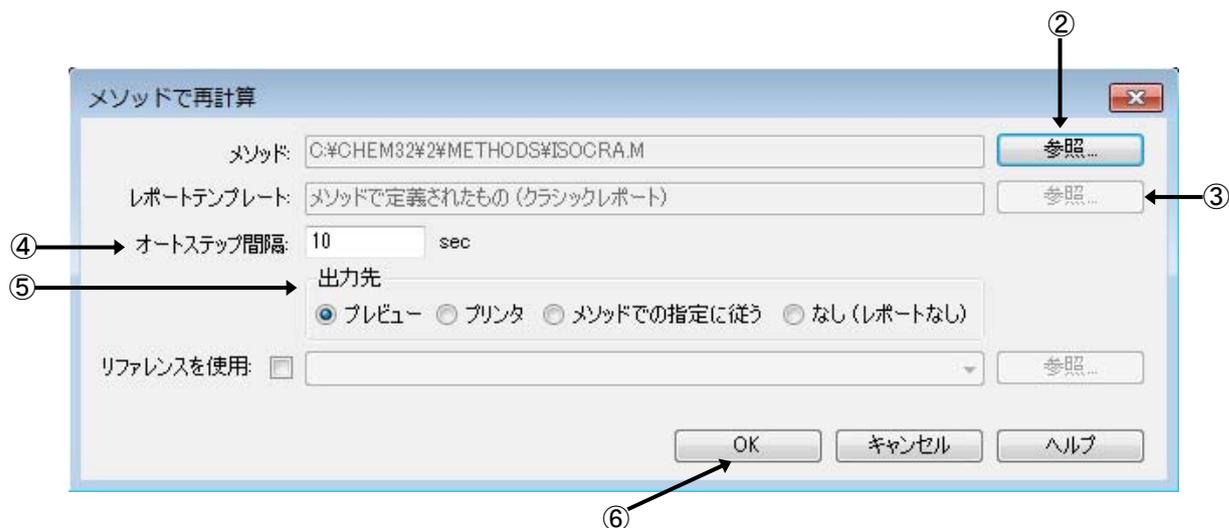
The screenshot displays the software's main window in '再計算モード' (Recalculation Mode). The top menu bar includes options like 'ファイル(F)', 'メソッド(M)', 'シーケンス(S)', '再計算(L)', 'グラフィックス(G)', '積分(I)', 'キャリブレーション(C)', 'レポート(R)', and 'スペクトル(S)'. The toolbar contains icons for file operations and a red circle highlights the 'Start' button (a play icon). Below the toolbar is a table with columns: '重ね書き', 'タイプ', 'ライン', '注入', 'バイアル', 'サンプル名', 'サンプルタイプ', and 'マニュアルイベント'. The table lists five samples, including 'Isocratic Std. 1' and 'Isocratic Std. 2'. Below the table are tabs for '積分', 'キャリブレーション', 'シグナル', '純度', and 'スペクトル'. The bottom section shows a chromatogram plot with peaks labeled 'Biphenyl' and 'o-Terphenyl'. The status bar at the bottom indicates 'Start=(0.0285,74.0447); End=(6.96208,-17.266)'.

注意：オートステップ機能では、自動リキャリブレーションは実行されません。  
参考：すべてのデータのレポートを出力するには、指定のメソッドで再計算機能が便利です。

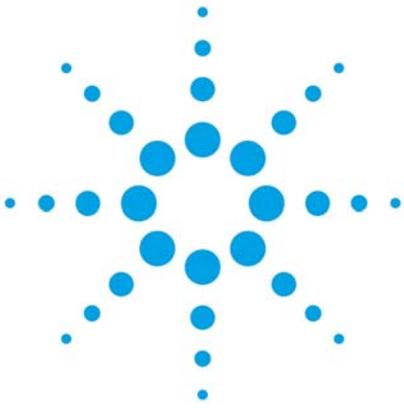
### 12-3. 指定のメソッドで再計算

再計算モードでは、マスターメソッドを指定して、ナビゲーションテーブル上のデータを連続的にレポート出力することができます。

- ① メニューから**再計算>メソッド**を選択します。



- ② 使用するマスターメソッドを指定します。**参照**ボタンをクリックしてマスターメソッドを指定します。
- ③ もし、使用するマスターメソッド内で、レポート様式の指定がインテリジェントレポート使用になっている場合は、ここでレポートテンプレートを指定します。
- ④ オートステップ間隔を設定します。0 秒の指定も可能です。
- ⑤ レポートの出力先を指定します。  
注意：レポートなしを選択した場合でも、結果ファイルが作成され、DA.M が更新されます。
- ⑥ OK をクリックすると、連続解析が始まります。



## 第13章 前回の結果モード

13-1. 前回の結果モード (DA.M) での解析	13-2
13-2. マスターメソッドの解析条件の更新	13-2

### 1 3. 前回の計算モード

#### 1 3-1. 前回の結果モード (DA.M) での解析

前回の結果モードとは、データファイルにとリンクされている解析メソッド (DA.M) を使用して計算します。DA.M は、再解析シーケンス、データの印刷プレビュー、または印刷したときに、そのときの解析メソッドで更新されます。従って、DA.M には常に最新の解析条件 (最後に印刷プレビュー、または印刷した時の条件) が残っています。このモードは、対象のデータを最後に解析した時の解析条件を再現します。結果ファイルを作成するには、印刷プレビューか印刷を実行する必要があります。

- ①前回の結果モードに移行します。メニューから、**表示>前回の結果モード**を選択します。
- ②ChemStation エクスプローラから解析するデータ群を読み込みます。
- ③ナビゲーションテーブルから解析するデータを読み込みます。  
これと同時にデータファイル内のメソッド DA.M が読み込まれます。
- ④積分条件を整えるなど、データ解析を行います。
- ⑤DA.M を更新するには、印刷/印刷プレビューを実行します。  
ここでダイアログボックスが表示されます。



**OK** をクリックすると DA.M が更新されます。

注意：別のデータ行に移動するだけでは、DA.M は保存されません。

- ⑥必要時、計算結果を印刷します。
- ⑦再度、解析済みデータ行を読み込むと、前回の DA.M が読み込まれます。

注意：DA.M は、他のモードで、レポートのプレビュー/印刷を行った場合や、再解析モードで再解析を行った場合、変更を受けます。

DA.M は通常は読み取り専用です。また前回の結果モードでのみ読み込まれ、マニュアルで読み込むことはできません。

パラメータを変更することは可能ですが、保存することはできません。

ただし、レポートを生成する場合にはメソッドの変更を保存する必要があるため、

レポートプレビュー等で新しい結果 (ACAML) が生成される際に警告メッセージが表示されます。

ここで、ユーザーが確認すると DA.M が更新 (保存) されます。

#### 1 3-2. マスターメソッドの解析条件の更新

前回の結果モードで使用した DA.M を用いて、マスターメソッドの**データ解析の項目のみ**、更新することができます。この機能は、**メソッドメニュー**にあります。

##### ・メソッド>マスターメソッドの更新

任意のマスターメソッドに、解析メソッドを反映させます。

(取り込みメソッドは変更されません)

##### ・メソッド>マスターメソッドを更新

このデータの採取に使用されたマスターメソッドに、解析メソッドを反映させます。

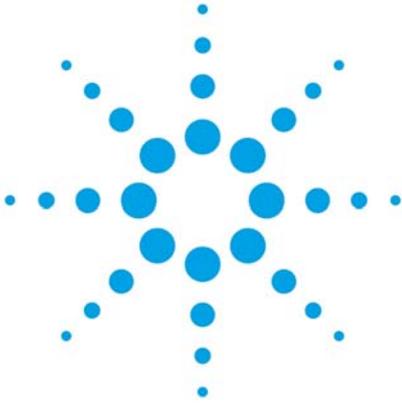
(取り込みメソッドは変更されません)

・ メソッド>新しいマスターメソッドとして保存

現在の解析条件を含むマスターメソッドを、新規に作成します。

新規作成時には、マスターメソッド名を命名します。また、機器条件は、いずれかのマスターメソッドを指定して参照します。





## 第14章 レポートの概要

14-1. クラシックレポートの概要	14-2
14-2. インテリジェントレポート概要	14-3
14-2-1. インテリジェントレポートの編集の概要	14-5

#### 1 4. レポートの概要

OpenLAB CDS ChemStation のレポートのスタイルには大別してクラシックレポートとインテリジェントレポートの 2 種類があります。

目的に応じて、シーケンスサマリレポートと、シングル注入レポートがあります。

シーケンスサマリレポートは、シーケンス>シーケンスパラメータ>シーケンス出力 (タブ) で設定します。クラシックレポートの場合は、項目を選択し、インテリジェントレポートの場合は、レポートテンプレートを選択します。

シングル注入レポートは、レポート>レポート条件 で設定します。このレポートは、シングル注入またはシーケンス取り込み/解析の実行時に各サンプルに関するレポートが作成されます。

各レポートは、下記の出力先を選択できます。

- ・ スクリーン
- ・ プリンタ
- ・ ファイル

##### 1 4-1. クラシックレポートの概要

クラシックレポートは、以前のバージョンと同様のレポートが出力できます。レポートを出力するには、レポートスタイルを選択して、印刷プレビューするか、レポート印刷ボタンを使用します。



出力先がファイルの場合は、メニューからの操作が必要になります。メニューから、レポート>レポート印刷と操作します。

シーケンスサマリレポートの場合は、レポートのメニューからではなく、シーケンス出力の設定で印刷オプションをオンにしてシーケンス再解析を実行します。

メニューからレポート>レポート条件と操作して、レポートの条件を設定します。

定量設定タブ：定量計算の方法を指定します。

レポート条件: 機器 1

レポート設定 | 定量設定

計算モード

計算: ESTD      カウント法: 面積

ISTD 補正

ISTD に対し倍率と希釈率ファクタを使用(U)

計算ファクタ

使用するサンプルデータ: データファイルから

アマウント: 0

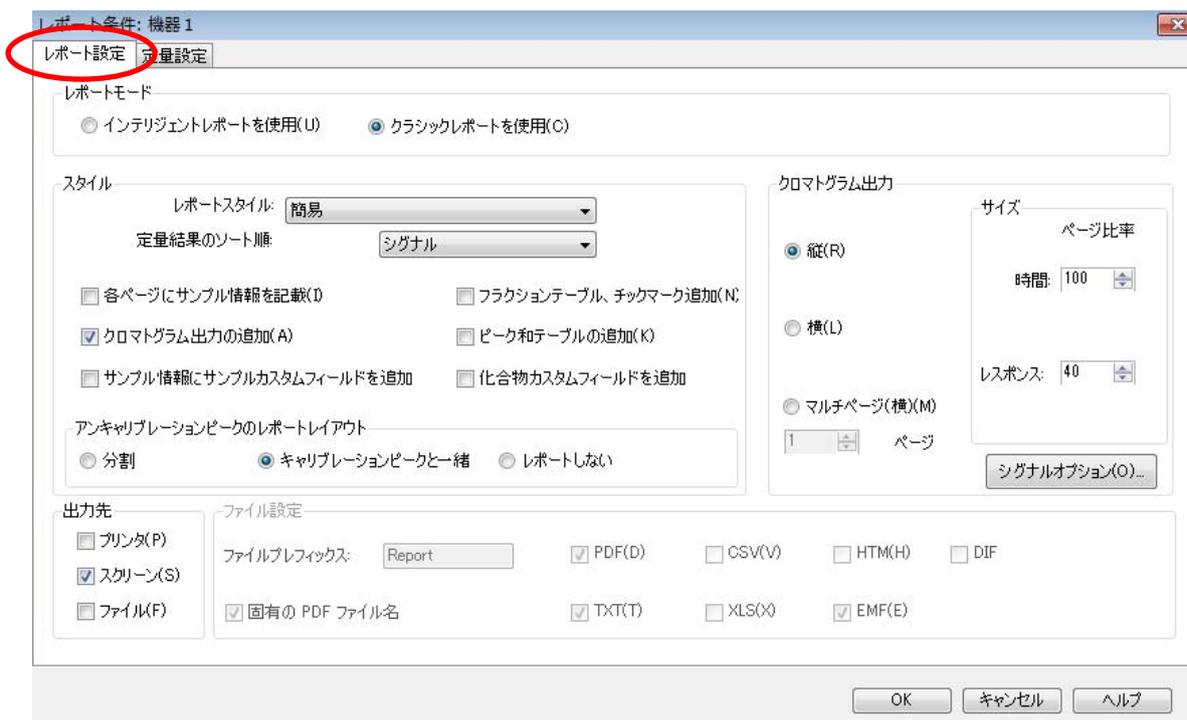
倍率: 1

希釈率: 1

#	化合物	ISTD アマウント

OK      キャンセル      ヘルプ

レポート設定タブ：クラシックレポート使用：レポートのスタイルを設定します。



#### 14-2. インテリジェントレポート概要

インテリジェントレポートは、OpenLAB CDS から採用された新しいレポートテンプレートです。レビュー画面を使用して、結果ファイルから再解析する事無くすばやくレポートを確認、出力できます。

目的に応じて、以下のレポートタイプが利用可能です。

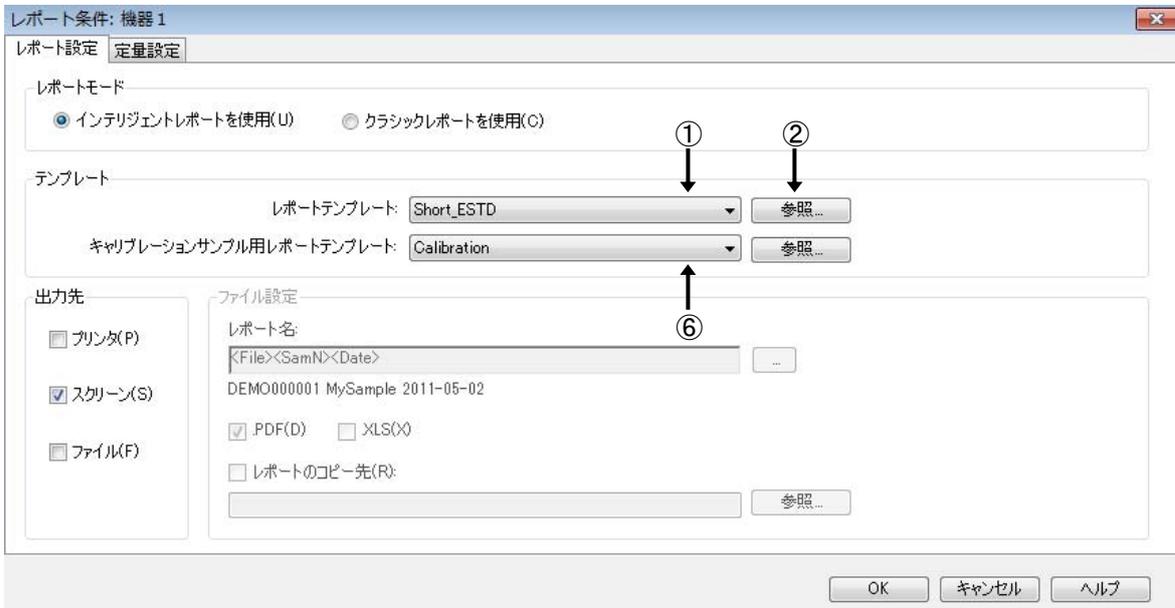
- ・シングル注入  
生成されるレポートは、各注入データの結果を表示します。異なる注入のデータと比較することはできません。
- ・シングルシーケンスサマリ  
生成されるレポートは、各シーケンスに対しデータの結果を表示します。異なるシーケンスのデータと比較することはできません。
- ・クロスシーケンスサマリ（ネットワークシステムのみ）  
異なるシーケンスを比較するレポートを作成することができます。データは自動的にグループ化されません。

#### <備考>

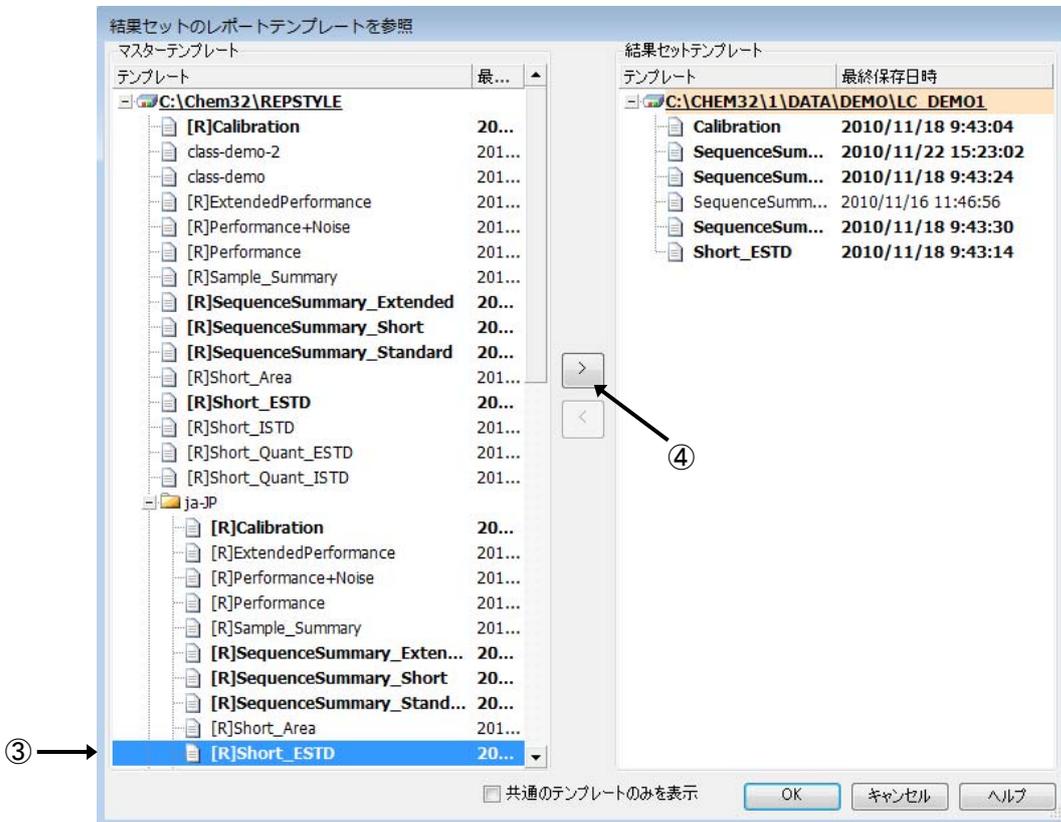
- ・レポートレイアウト画面を使用して、レポートテンプレートを作成、編集できます。
- ・レポートレイアウト、では
  - レポートテンプレートに対してユーザーが行った変更履歴が記録されます。
  - データやカスタムフィールドに対して計算を行うための、独自の式を作成できます。
  - Microsoft Visual Basic で記述された任意の式を使用できます
  - レポートテンプレートは、RDL（Microsoft Report Definition Language）で記述され、Microsoft SQL Server Business Intelligence Development Studio(BI Studio)で、より高度な編集ができます。

- 結果へのフラグ：結果の値に対して条件を設定し、その結果の判断結果や協調表示をするための式が設定できます。
- レポートの作成は、スニペット (snippet) と呼ばれるレポート項目のパーツをドラッグ&ドロップすることでテンプレートに挿入できます。

日本語版のソフトウェアには、日本語のテンプレートが用意されています。  
 レポートテンプレート選択で、フォルダ **ja-JP** にあるテンプレートを使用してください。



- ①プルダウンからレポートテンプレートを選択します。
- ②プルダウン以外のテンプレートを使用する場合、**参照**ボタンをクリックします。



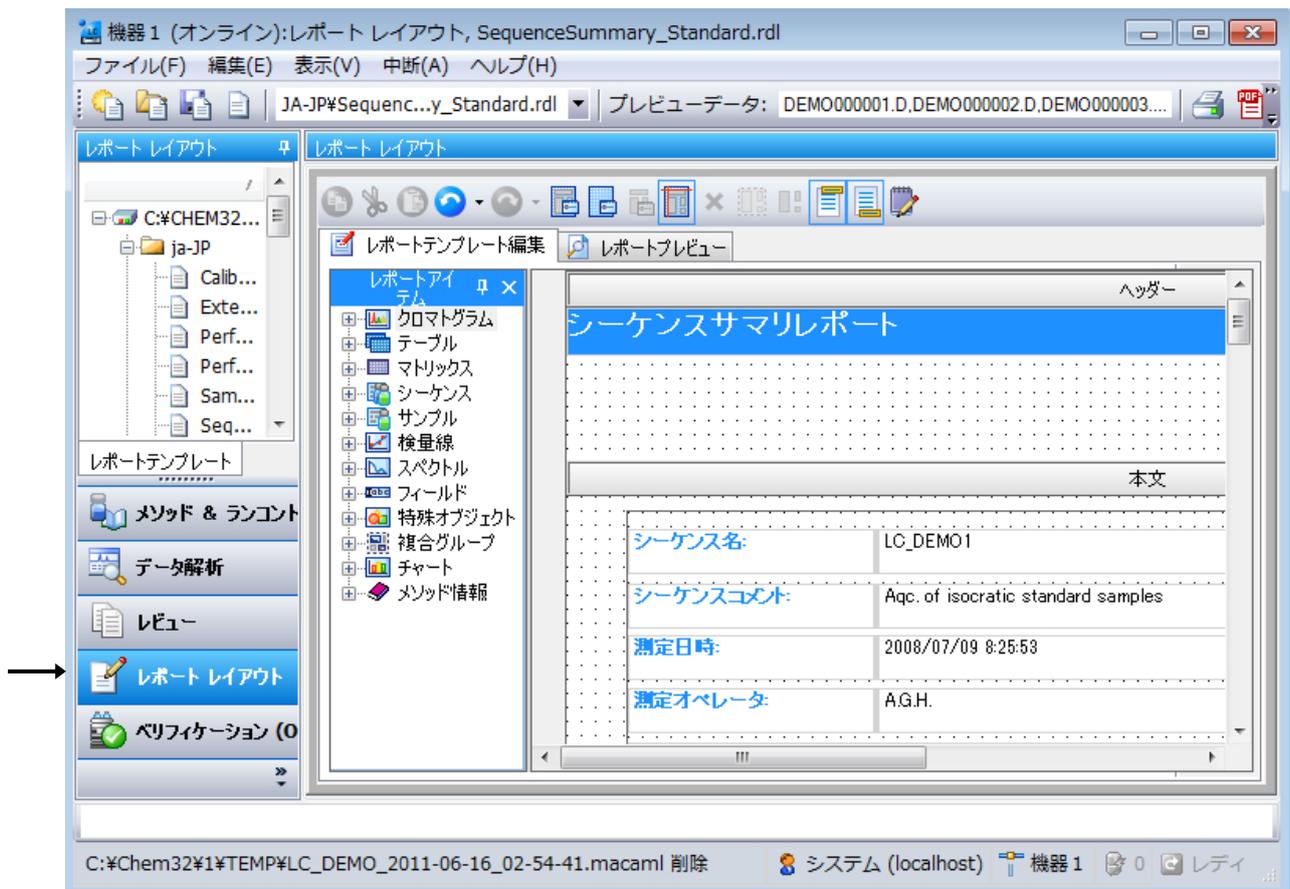
- ③ マスターテンプレートの¥chem32¥REPSTYLE¥ja-JP からテンプレートを選択してください。  
(例：Short\_ESTD)
- ④ 中央の右矢印ボタン  をクリックして、結果セットテンプレートにコピーして **OK** をクリックします。テンプレートの上書きの確認メッセージが出ますので、**OK** をクリックします。レポート条件設定ダイアログボックスの **OK** をクリックします。
- ⑥ シーケンス再解析でレポートを出力するときのみ有効になります。  
シーケンス中でキャリブレーションサンプルには別のテンプレートを指定できます。  
(例：マスターテンプレートの¥chem32¥REPSTYLE¥ja-JP の Calibration)
- ⑦ レポートを出力するには、ナビゲーションテーブルのデータ行を選択し、レポートプレビューボタンか、印刷ボタンを使用してください。
- ⑧ 出力先がファイルの場合、メニューから、**レポート>レポート印刷**の操作を行ってください。



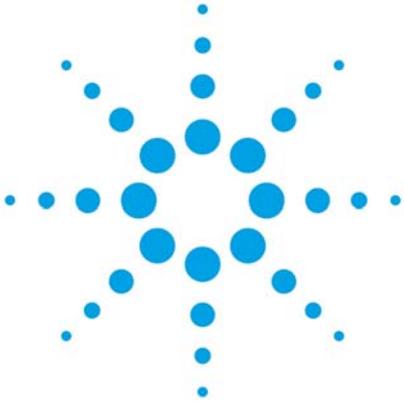
ナビゲーションテーブル上でデータを選択し右クリックメニューで、**レポートレイアウトに選択を送信**を選択し、プレビュータブから印刷することも可能です。このレポートレイアウトのビューではテンプレートの編集が可能です。  
(注意：現在のテンプレートを誤って変更してしまう場合もあるので注意してください)

#### 14-2-1. インテリジェントレポートの編集の概要

インテリジェントレポートテンプレートは、ユーザーが作成編集することができます。作成したテンプレートを使用してレポートの出力が可能です。ここでは、テンプレート編集画面の、レポートレイアウトの画面のみ紹介します。







## 第15章 レビュー画面

15-1. シングルランのレポート表示	15-2
15-2. 結果セットのレポート表示	15-3
15-3. 結果セットのサマリレポート表示	15-3

15. レビュー画面

レビュー画面では、各データ、結果セットに作成される結果ファイル（ACAML）から、再解析する事無く、素早くレポートの表示、印刷が可能です。

- ・レビュー画面では、メソッドの読み込みはできません。
- ・再計算、再解析の新規結果を作成することはできません。
- ・レビュー画面で生成するレポートは、すでに計算済みの結果を表示します。

結果ファイルは、各データに以下の操作を行った場合に生成（更新）されます。

- ・印刷プレビューされたとき
- ・印刷されたとき
- ・シーケンス解析を受けたとき

レポートをレビューするには、データが正しく解析されていることが前提となります。

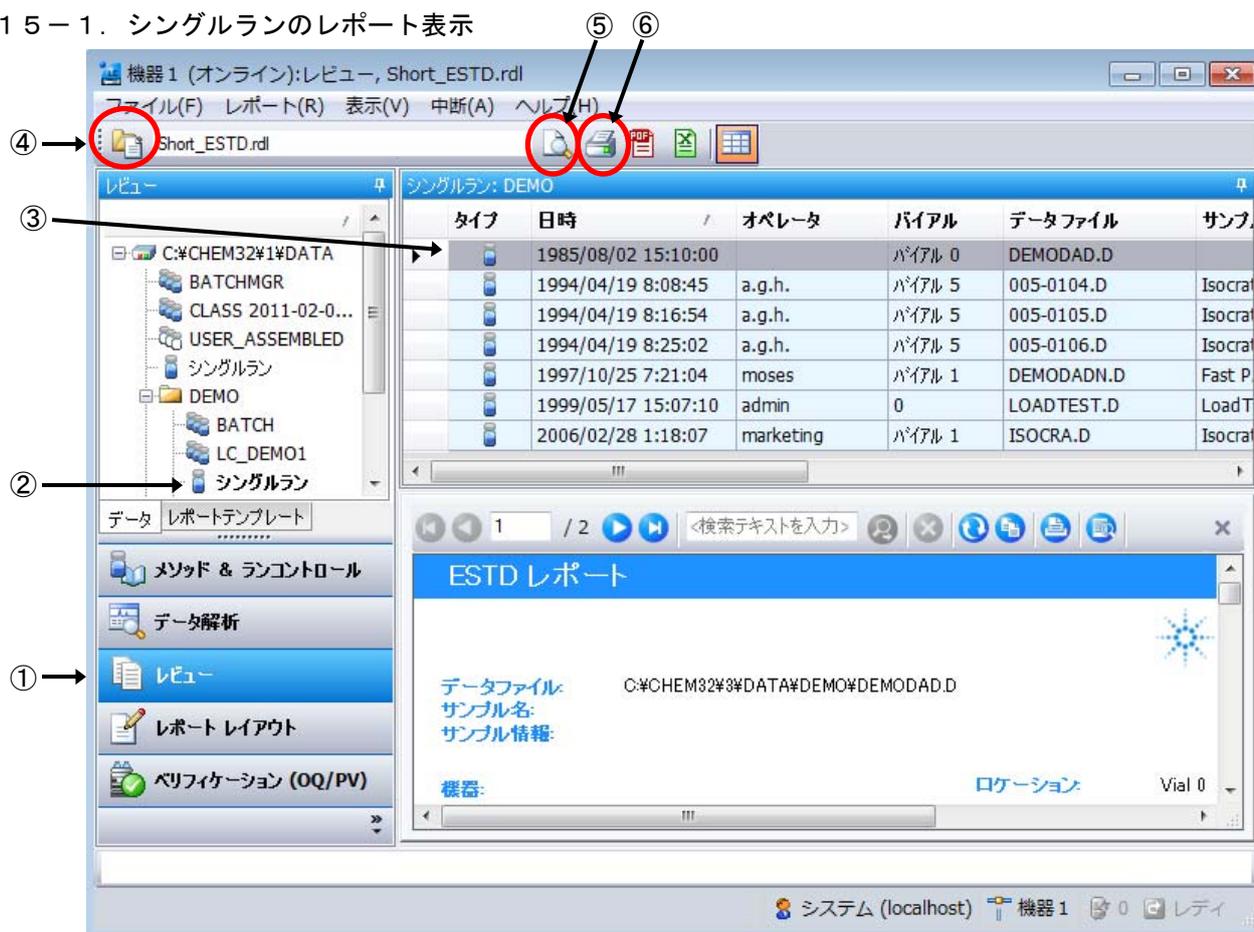
注意：積分実行のみ、再計算のみでは、結果ファイルは作成されません。

<備考>

ChemStation A または B バージョンで取り込んだデータは、結果ファイル（ACAML）を含んでいません。これらのデータからレビュー画面でレポートを生成しても、何もデータが表示されません。

その場合は、OpenLAB CDS ChemStation を使用して、データ解析画面で、シングル注入レポートを出力（プレビュー、印刷）し、結果ファイルを生成してください。

15-1. シングルランのレポート表示



①レビュー画面に移行します。

②ChemStation エクスプローラから、目的のフォルダのシングルランを選択します。

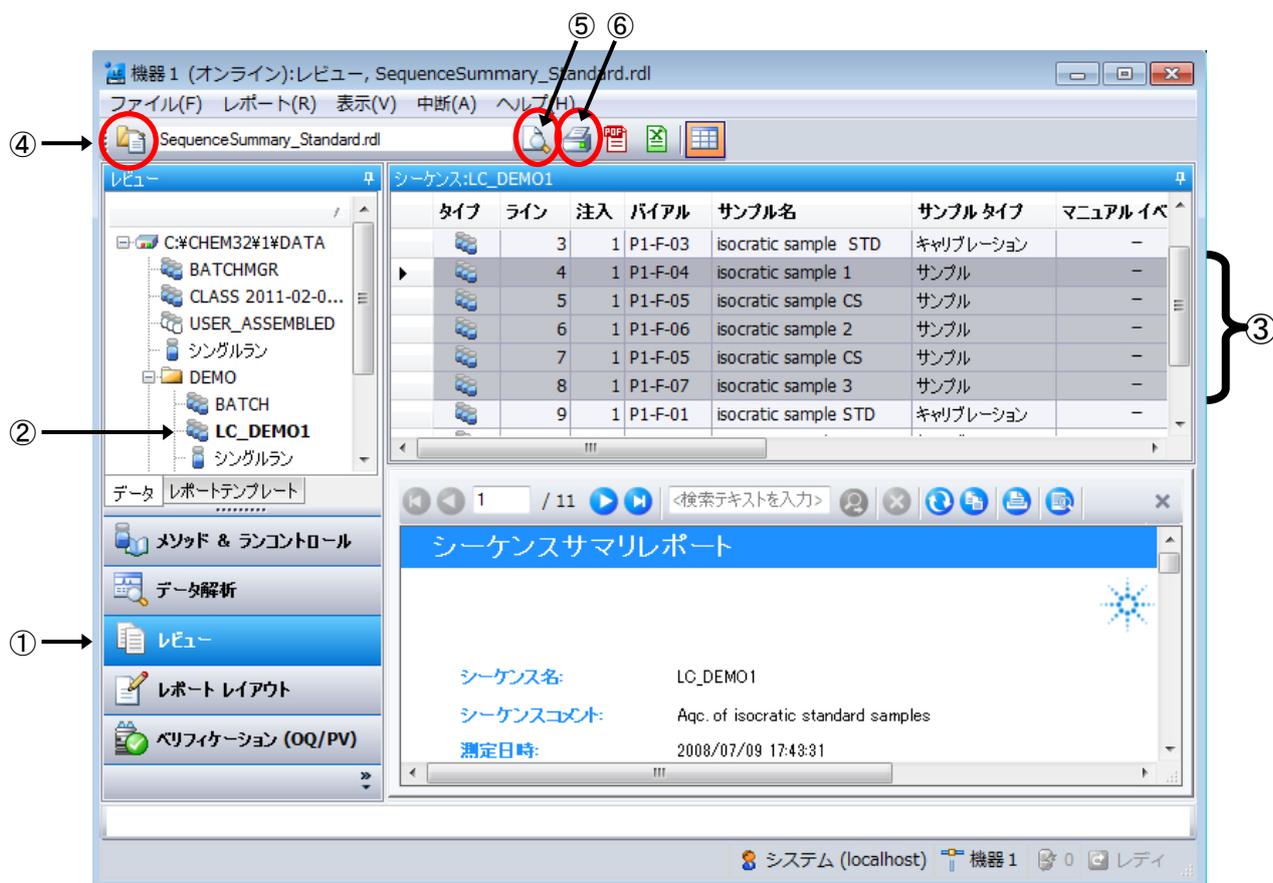
- ③ナビゲーションテーブル上で目的のデータ行を選択します。
- ④使用するレポートテンプレートを選択します。フォルダ **ja-JP** の中から選択してください。
- ⑤印刷プレビューボタンで、プレビューします。
- ⑥必要時、レポートを印刷します。

### 15-2. 結果セットのレポート表示

結果セット内の1つのランについてのレポートのプレビュー/印刷は、シングルランのデータと同様です。ChemStation エクスプローラからは、目的の結果セットを選択します。

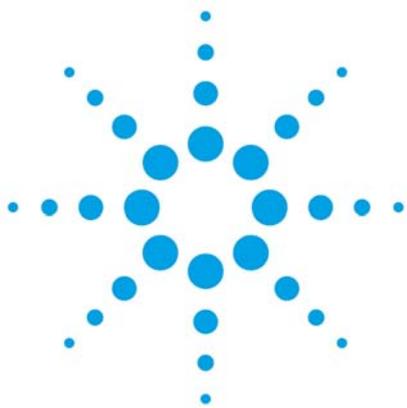
### 15-3. 結果セットのサマリレポート表示

結果セットからは、サマリレポートを生成することができます。



- ①レビューの画面に移行します。
- ②ChemStation エクスプローラから、目的の結果セットを選択します。
- ③ナビゲーションテーブル上で計算するデータの行を選択します。Ctrl キーを押しながら、目的の行をクリックします。また、右クリックメニューで全て選択することもできます。
- ④使用するレポートテンプレートを選択します。レポートの種類はシーケンスサマリスタイルのものを選択してください。
- ⑤印刷プレビューボタンで、プレビューします。
- ⑥必要時、レポートを印刷します。



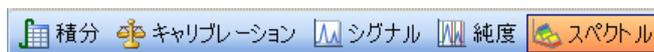


## 第16章 スペクトル解析

16-1. スペクトルオプション	16-2
16-2. スペクトルの表示	16-3
16-3. スペクトルの印刷	16-3
16-4. ピーク純度の計算	16-3
16-5. 3Dプロット	16-4
16-6. 等高線表示	16-5
16-6-1. クロマトグラムの抽出	16-5
16-7. スペクトルライブラリサーチ	16-6
16-7-1. 新規ライブラリの作成	16-6
16-7-2. サーチ条件の設定	16-7
16-7-3. ライブラリサーチの実行	16-8
16-7-4. ライブラリサーチ情報の編集	16-8
16-7-5. 自動ライブラリサーチ	16-9

### 16. スペクトル解析

スペクトル解析は有効な定性手段として利用することができます。  
 スペクトル解析を行うための  
 ツールバーに切り替えます。



#### 16-1. スペクトルオプション

スペクトル表示条件を設定します。  
 スペクトル設定のアイコンを選択します。  
 または、メニューバーより、  
**スペクトル>スペクトルオプション**を選択します。



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

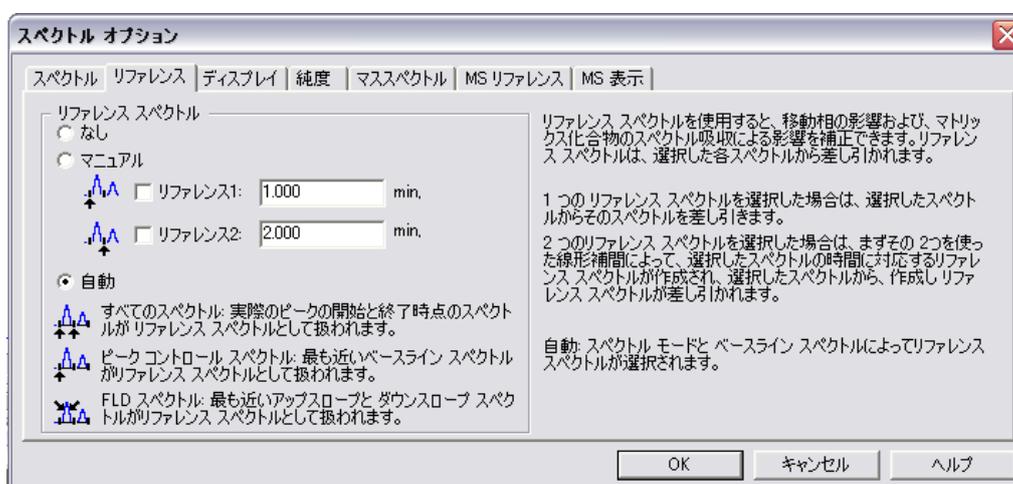
#### <スペクトルタブ>



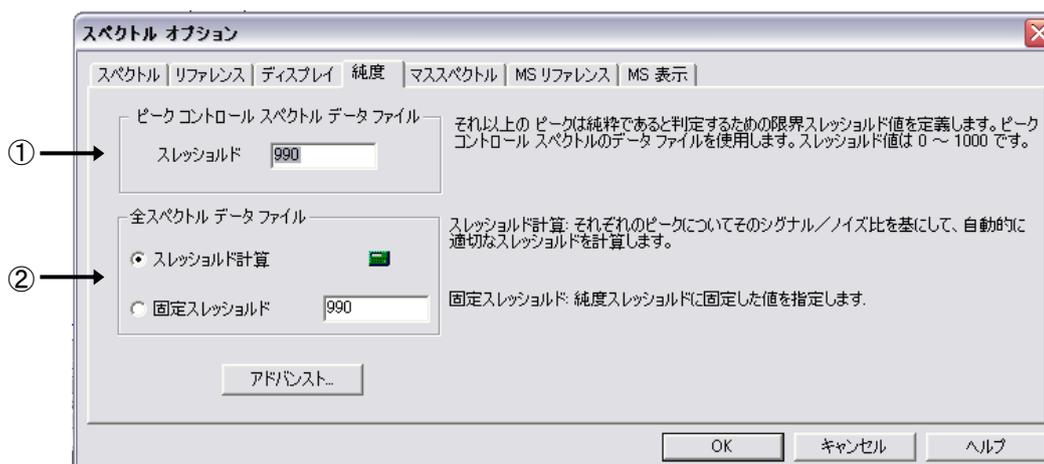
① 波長範囲：□にチェックし、表示するスペクトルの波長範囲を入力することで波長範囲を限定できます。

#### <リファレンスタブ>

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



## &lt;純度タブ&gt;



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

## ① ピークコントロールスペクトルデータファイル

“頂点+ベースライン”、“頂点+スロープ+ベースライン”、“ピーク内全て”などで採取したデータファイルに対しての純度判断の基準値を設定する欄です。

## ② 全スペクトルデータファイル

“全て”、“隔スペクトル毎”で採取したデータファイルに対しての純度判断の基準値を設定する欄です。

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

## 16-2. スペクトルの表示

- ① データファイルを読み込みます。
- ② スペクトルの表示方法を選択します。



クロマトグラム上で指定した点でのスペクトルを表示



指定したピークの頂点のスペクトルを表示



ドラッグした範囲のスペクトルを平均して表示

- ③ 目的のピークにカーソルを移動しクリック（平均の場合はドラッグ）します。

## 16-3. スペクトルの印刷

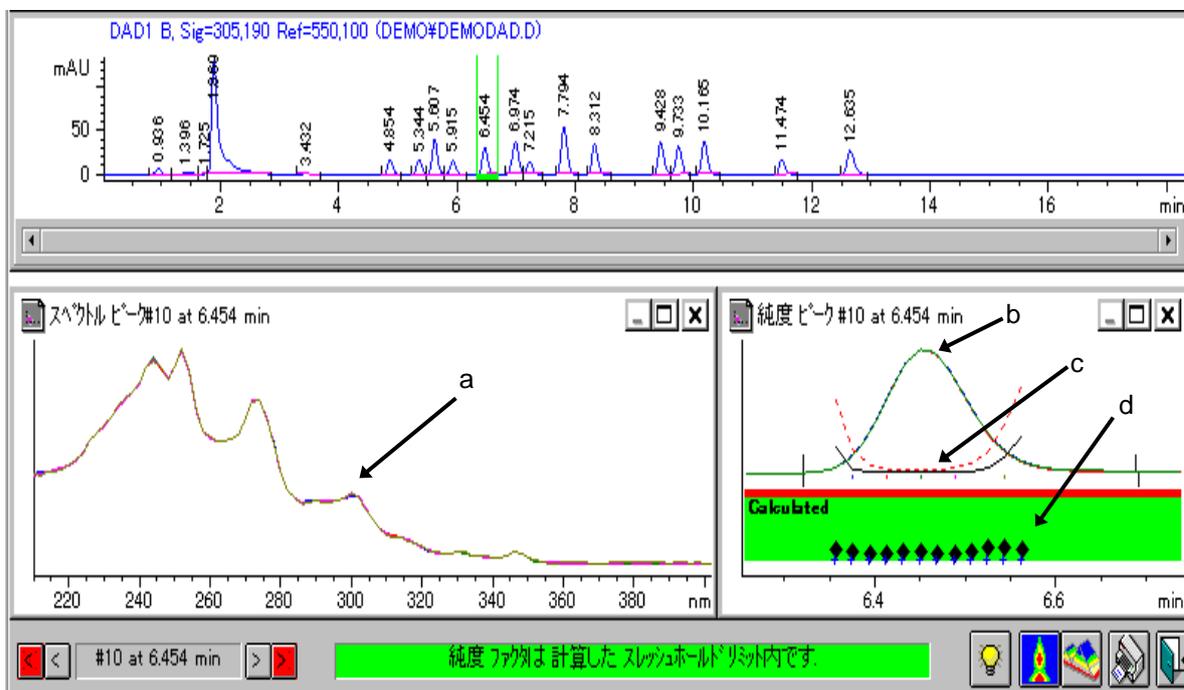
画面に表示されているスペクトルを印刷することができます。

- ① 印刷したいスペクトルが表示されているウインドウをクリックしアクティブにします。
- ② メニューバーから、**ファイル>印刷>選択ウインドウ**を選択します。
- ③ 全てのウインドウを印刷するには、**ファイル>印刷>全てのウインドウ**を選択します。

## 16-4. ピーク純度の計算

ピーク純度計算は、「単一の成分のみがピークとして溶出している場合、ピーク内のスペクトルを比較してもほぼ同じである」事を前提に、ピークが純粋であるかを計算します。ピーク内で代表のスペクトルを設定し（通常は平均スペクトル）、この代表と各測定点でのスペクトルの差が、統計的なノイズの範囲であるかどうかで、判定します。

- ① アイコン  をクリックします。
- ② 目的のピークをクリックすると、次の画面が表示されます。  
画面は、純粹と判断されたピークの例です。

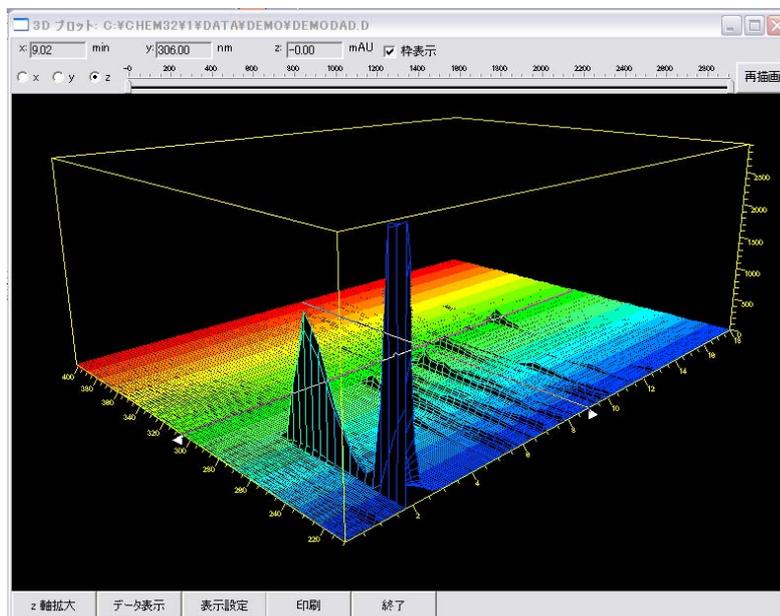


- a) スペクトルの重ね書き
- b) シグナルの重ね書き（複数波長で測定した場合）
- c) シミラリティ/スレッシュホールドカーブ
- d) 純度計算に使用されたポイント

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

### 16-5. 3Dプロット

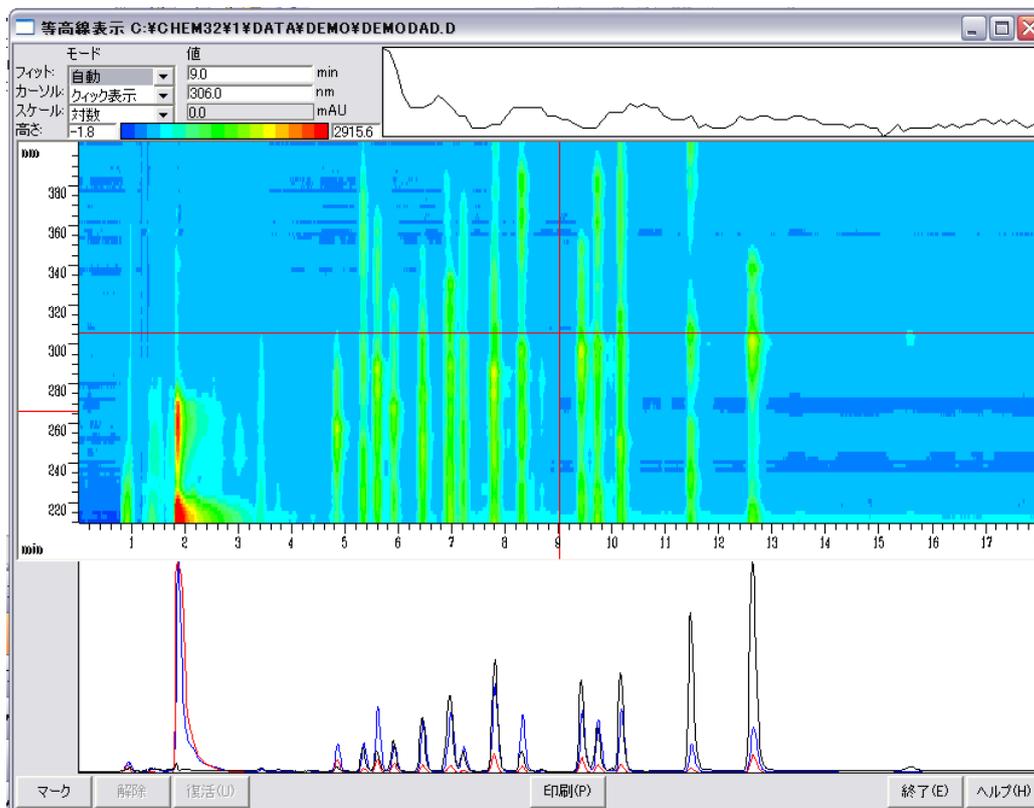
スペクトルを全て採取したデータから、スペクトルの3D表示ができます。  
メニューから、スペクトル>3Dプロットを選択します。



## 16-6. 等高線表示

スペクトルを“全て”、“隔スペクトル毎”で採取したデータを、等高線表示したり、クロマトグラムを抽出することができます。

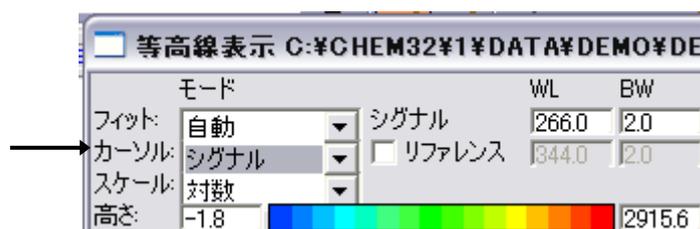
- ① データファイルを読み込みます。
- ② メニューから、**スペクトル>等高線表示**を選択します。等高線表示が現れます。



## 16-6-1. クロマトグラムの抽出

等高線表示から、実際には採取していないクロマトグラムを抽出し、データ解析画面に表示できます。特定のピークに対する DAD の取込波長の最適化に活用できます。

- ①カーソルの表示をシグナルにします。



- ②画面上の水平の線を抽出する波長にドラッグして移動します。
- ③Ctrl キーを押しながらドラッグすると、バンド幅を設定できます。
- ④リファレンスの左のチェックボックスをオンにするとリファレンス設定用の水平の線が現れるので、リファレンスの波長にあわせて。
- ⑤リファレンスの波長についても、Ctrl キーを押しながらドラッグする操作でバンド幅を設定できます。
- ⑥画面左下のコピーボタンをクリックします。  
抽出したクロマトグラムが解析画面にコピーされます。

16-7. スペクトルライブラリサーチ

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

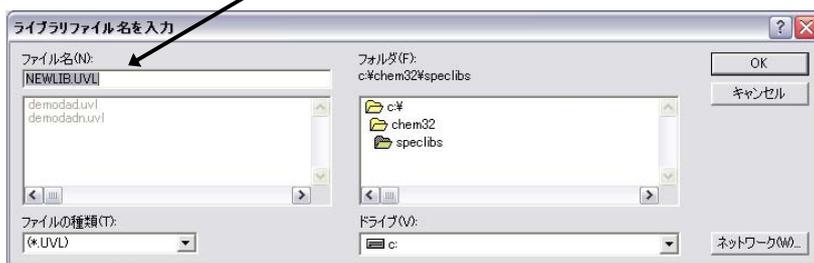
16-7-1. 新規ライブラリの作成

① 新しくライブラリファイルを作成します。

メニューバーから、**スペクトル>ライブラリ>新規ライブラリ**を選択し、新しく作成するライブラリにファイル名をつけます。

注意：ライブラリのファイルは **C:\chem32\speclibs** に保存されます。データやメソッドファイルのように装置番号の下(**C:\chem32\1**)ではないことに注意してください。

ファイル名を入力します。



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



ライブラリファイルの情報(ヘッダー)の表示、編集



登録されているスペクトルを表示、プリント



ライブラリの作業を終了



登録されているスペクトルを変更



ライブラリファイルにスペクトルを追加



ライブラリサーチを実行



ライブラリサーチの実行条件を設定

③ ライブラリファイル情報を入力します。



情報、ライブラリ名、作成者名等を入力してください。

ライブラリファイルが作成されます。

- ④ ライブラリに登録する成分を分析したデータファイルを読み込みます。
- ⑤ 登録したいスペクトルを画面に表示させます。  
(スペクトルの表示の項目を参照して登録したいピークの頂点スペクトルを表示させます。)
- ⑥ スペクトルを登録します。  
アイコンをクリックします。



名前の項目に成分名を入力します。

その他、ID 番号や、スペクトルを採取した際の移動相組成などを入力できます。  
追加ボタンをクリックすると、ライブラリファイルにスペクトルが登録されます。  
上記④～⑥の操作を繰り返してスペクトルをファイルに登録してください。

- ⑦ 作成したライブラリファイルを保存します。  
上書きの場合はこのアイコンをクリックします。



新しく名前をつけて保存する場合には  
メニューから、**スペクトル>ライブラリ>ライブラリを名前をつけて保存**を選択します。指定したファイル名で保存されます。

### 16-7-2. サーチ条件の設定

ライブラリサーチを実行する際のサーチ条件を設定します。  
ライブラリファイルに登録された成分のリテンションタイムや成分名等をサーチパラメータに加えることができます。  
サーチ条件アイコンをクリックします。



- ① 左/右ウィンドウ[%] :  
登録された成分の  
リテンションタイム幅を  
設定します。
- ② スレッシュホールド[mAU] :  
設定した吸光度以上の  
ピークのみ サーチします。



目的のピークをサーチできない場合、設定が不適切な場合があります。

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

### 16-7-3. ライブラリサーチの実行

- ① サーチするデータのファイルを読み込みます。
- ② サーチする目的のピークのスペクトルを表示させます。
- ③ スペクトルライブラリファイルを読み込みます。  
登録したライブラリファイルを選択します。
- ④ ライブラリサーチを実行します。



アイコンをクリックすると、サーチ結果画面が表示されます。

サンプルとサーチされたスペクトルの重ね書きが表示されます。  
ライブラリサーチ結果には、候補成分のリストが表示されます。



### 16-7-4. ライブラリサーチ情報の編集

登録したスペクトルの情報の修正などを行います。  
アイコンをクリックします。



成分名・ID 番号から表示を選択します。  
リストの中から目的の成分をクリックして、エントリ変更ボタンをクリックすると、登録内容変更ができます。



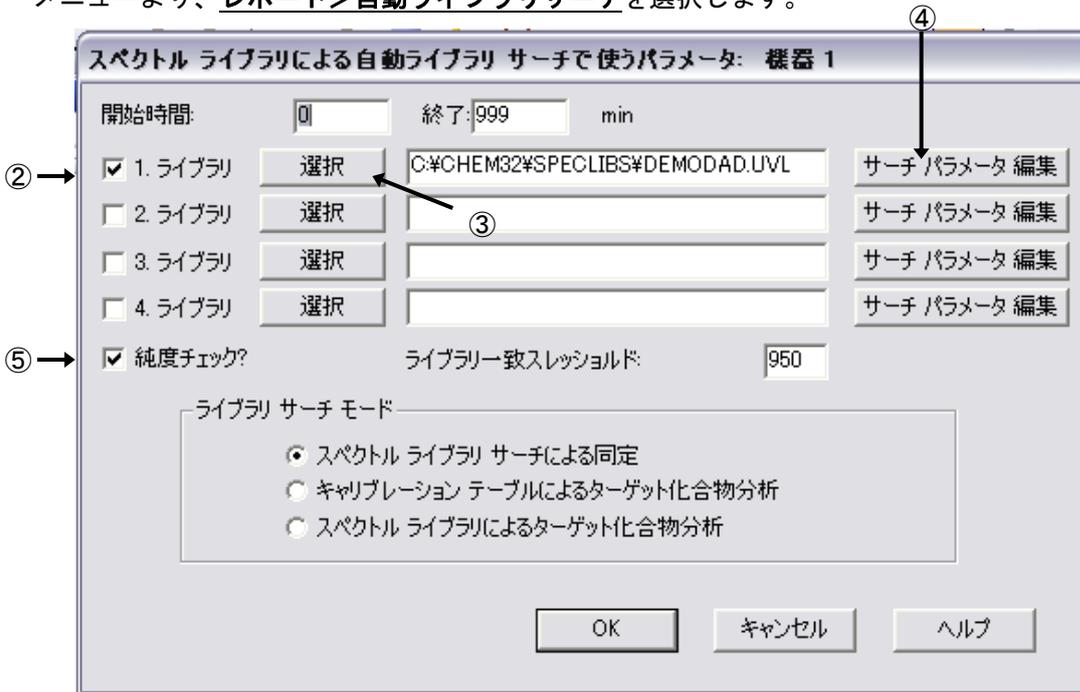
## 16-7-5. 自動ライブラリサーチ

クロマトグラム上の全ピークのライブラリサーチをまとめて行います。

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

① 自動ライブラリサーチの条件を設定します。

メニューより、**レポート>自動ライブラリサーチ**を選択します。



② 使用するライブラリにチェックします。

③ 選択ボタンをクリックし、ライブラリファイルを選択します。

④ ライブラリファイル毎にサーチ条件を設定します。

⑤ 自動ライブラリサーチと同時に純度チェックを行うかどうか選択します。

⑥ レポートの出力条件を設定します。

メニューより、**レポート>レポート条件**を選択します。

クラシックレポートスタイルの中から **ライブラリサーチ**を選択します。

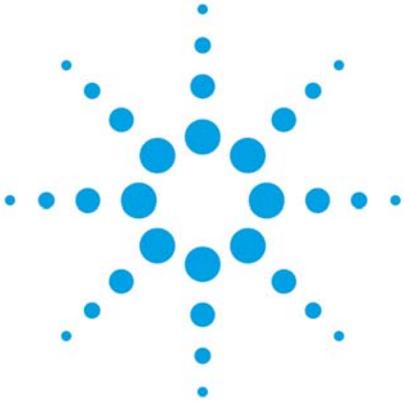
⑦ データファイルを読み込みます。

画面に読み込まれているデータのライブラリサーチを実行します。

メニューより、**レポート>レポート印刷**を選択します。

自動ライブラリサーチ結果が出力されます。





## 第17章 PC メンテナンス

17-1. バックアップについて	17-2
17-2. ディスクの最適化	17-3
17-3. 電源の管理	17-3
17-4. ライセンスの管理	17-3

17. PC メンテナンス

17-1. バックアップについて

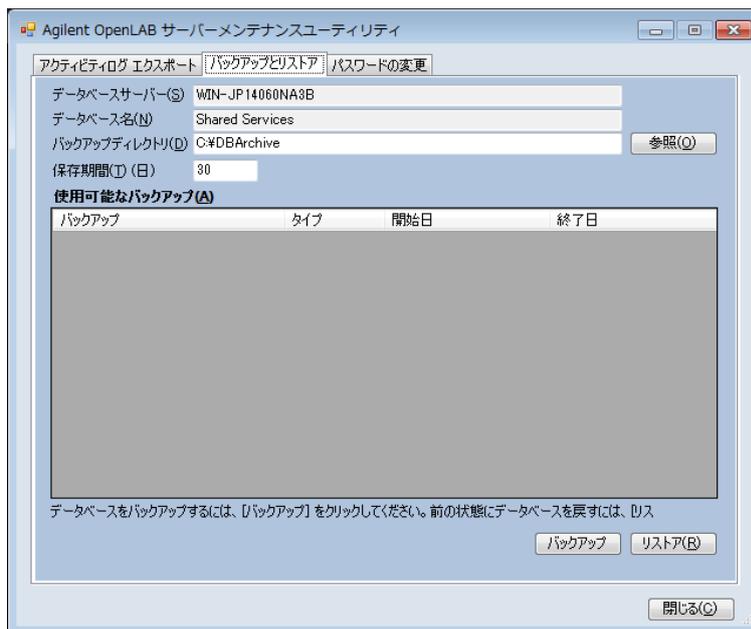
ユーザーが作成／生成したデータやファイルは、万一の障害に備えて、ユーザーが作成したデータ、メソッドや、ユーザー、権限設定、OS 等は、必ずバックアップを取得して PC 外部のメディアに保存することを強く推奨します。弊社は、PC の故障やソフトウェアの不具合等の如何なる理由によるお客様のデータ損失に関して、一切の保証をいたしません。

コピーが必要なファイル／フォルダは以下のとおりです。  
このリストは機器 1 の場合です。機器 2 以降は機器番号部分を読み替えてください。

- ・ マスターメソッドのフォルダ  
デフォルト：¥chem32¥1¥METHODS  
プレファレンスでユーザーが指定したフォルダ
- ・ シーケンステンプレートのフォルダ  
デフォルト：¥chem32¥1¥SEQUENCE  
プレファレンスでユーザーが指定したフォルダ
- ・ データ保存先のフォルダ  
デフォルト：¥chem32¥1¥DATA 以下  
プレファレンスでユーザーが指定したフォルダ
- ・ インテリジェントレポートテンプレートのフォルダ  
デフォルト：¥chem32¥REPSTYLE 以下
- ・ スペクトルライブラリのフォルダ  
デフォルト：¥chem32¥speclibs
- ・ その他、ユーザーが作成したフォルダやファイル

<ネットワークシステムなどの場合>

上記以外にもユーザー設定や、権限設定をされている場合や、機器のコンフィグレーションもバックアップされる場合は、OpenLAB サーバーメンテナンスユーティリティを使用します。このツールは、Shared Service (OpenLABコントロールパネル) 設定のユーザーやロールの設定等をバックアップします。定期的、または重要な変更をする際はバックアップされる事を強く推奨します。バックアップを定期的に取得し、別のメディアに保管する事で、PC不具合後の再インストール時でも、ユーザーやロールの設定をバックアップを取得した時点に戻すことが出来ます。



## 17-2. ディスクの最適化

PC のハードディスクは、パフォーマンス向上のため、時々ディスクの最適化を実行してください。

なお、オンラインソフト使用中、オフラインソフト使用中は、ディスクの最適化は実行しないでください。最適化スケジュールもソフトウェア使用時と同時に実施しないよう注意してください。

Windows7 では、標準の設定で、毎週、水曜の AM:1:00 にスケジュールが設定されていますので、深夜運転をされる際は、無効化することをお勧めします。

また、自動実行されるスケジュール時間帯は、PC が起動しており、かつ分析が実行されない時間である必要があります。

任意のタイミングでディスクの最適化を実行するには、以下の手順で操作します。

- ① ウィンドウズのスタートボタンをクリックし、右側メニューから、コンピュータを選択します。
- ② ローカルディスクを右クリックし、プロパティを選択します。
- ③ ツールのタブからディスクの最適化するボタンを選択してください。
- ④ ディスクの最適化ボタンをクリックしてください。

## 17-3. 電源の管理

ウィンドウズの電源オプションでは、PC がスリープ状態や休止状態にならないように設定してください。

## 17-4. ライセンスの管理

ライセンスファイルの作成などは、オンラインの Agilent subscribenet サイト上で実行します。  
(<https://agilent.subscribenet.com>)

納入された、ライセンスの Authorization code、据付時に Agilent subscribenet に登録したユーザーログイン ID (メールアドレス) とパスワードは大切に保管してください。

OpenLAB CDS のソフトウェアライセンスは、

- ・ MAC アドレスと PC ホスト名にリンクしてライセンスファイルが生成されます。
- ・ 他の PC では使用出来ません。
- ・ 他の PC で使用する場合や、PC 修理などで MAC アドレス変更された場合は、再度コンフィグが必要です。

**重要**

※お客様が購入されたライセンスは、Agilent Subscribe Netで管理されます。

納入時は、ライセンスのAuthorization Code（認証コード）のみが提供され、ライセンス認証、保管サイト（Agilent Subscribe Net）でAuthorization Codeによりライセンスを有効化する事で、ライセンスファイルを作成します。

お客様のライセンスを保管したサイト（Agilent Subscribe Net）では、お客様固有のグループ（Account）が作成され、Accountにライセンスが保管されています、

Account へは、ライセンス登録時に指定させて頂いたお客様ご本人と、Agilent据付担当エンジニアのみがアクセス可能です。

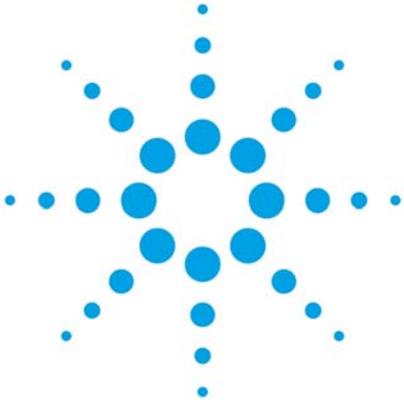
・システムの再インストールやアップグレードの際にスムーズなライセンス移行をさせて頂く為に、ライセンス管理用Agilent Subscribe Net登録情報は、お客様にて大切に保管をお願いします。

・納入時のAuthorization Code（認証コード）は絶対に紛失しないようにご注意ください。

※ライセンスファイルは、PCのハードウェア情報とOSの情報にリンクされています。

一旦作成した、ライセンスファイルを他のPCで使用する事はできません。またPC修理などでハードウェアが変更された場合は、再度ライセンスファイルの作成が必要になります。

（60日のインストールデモライセンスあり）



## 付録 A イージーシーケンス

A-1-1. イージーシーケンスとは (Easy Sequence)	A-2
A-1-2. イージーシーケンスの制限事項	A-2
A-1-3. イージーシーケンスの操作タブ	A-2
A-1-4. イージーシーケンスの操作の流れ	A-3
A-2. イージーシーケンスセットアップテンプレートを作成する	A-4
A-3. イージーシーケンスをキューに追加する	A-7
A-4. イージーシーケンス実行時の注意点	A-9
A-5. キューの操作	A-12
A-6. 同じ、または類似のイージーシーケンスを実行する	A-13
A-7. 周期的キャリブレーションのプランを作成する	A-14
A-8. イージーシーケンスの設定と操作のヒント	A-16

A-1-1. イージーシーケンスとは (Easy Sequence)

イージーシーケンス機能は、簡単なシーケンス分析について、繰り返しや、キュー（待ち行列）に溜めておくなどの簡単機能を追加したものです。

イージーシーケンスでは、

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

アクティブキュー: データシステムはシーケンス受け入れ可能です

アクティブキューのシーケンス数: 3

名前	キューされた日時	ステータス
reprod001	2009/12/14 9:38	保留中
reprod002	2009/12/14 9:38	保留中
reprod003	2009/12/14 9:38	保留中

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

イージーシーケンスでは、

- ・一つのシーケンスの中に組み込めるのは1つのメソッドのみです。
- ・バイアル順は、番号順に連続した順のみ設定可能です。
- ・ユニークなフォルダ作成の設定をオンにしてください。



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

**注意:** 分析中に新しくシーケンスのキュー追加を実施する場合は、オートサンブラが動作しないタイミングを確認の上で実施してください。

A-1-2. イージーシーケンスの制限事項

- ・1シーケンスで使用できるマスターメソッドは1つのみです。
  - ・周期的キャリブレーションでは、更新方法が1つのみ使用可能です。  
(設定できないケース: 始めに「置き換え」以降を「平均」)
- この機能は、標準のシーケンス機能で実施できます。

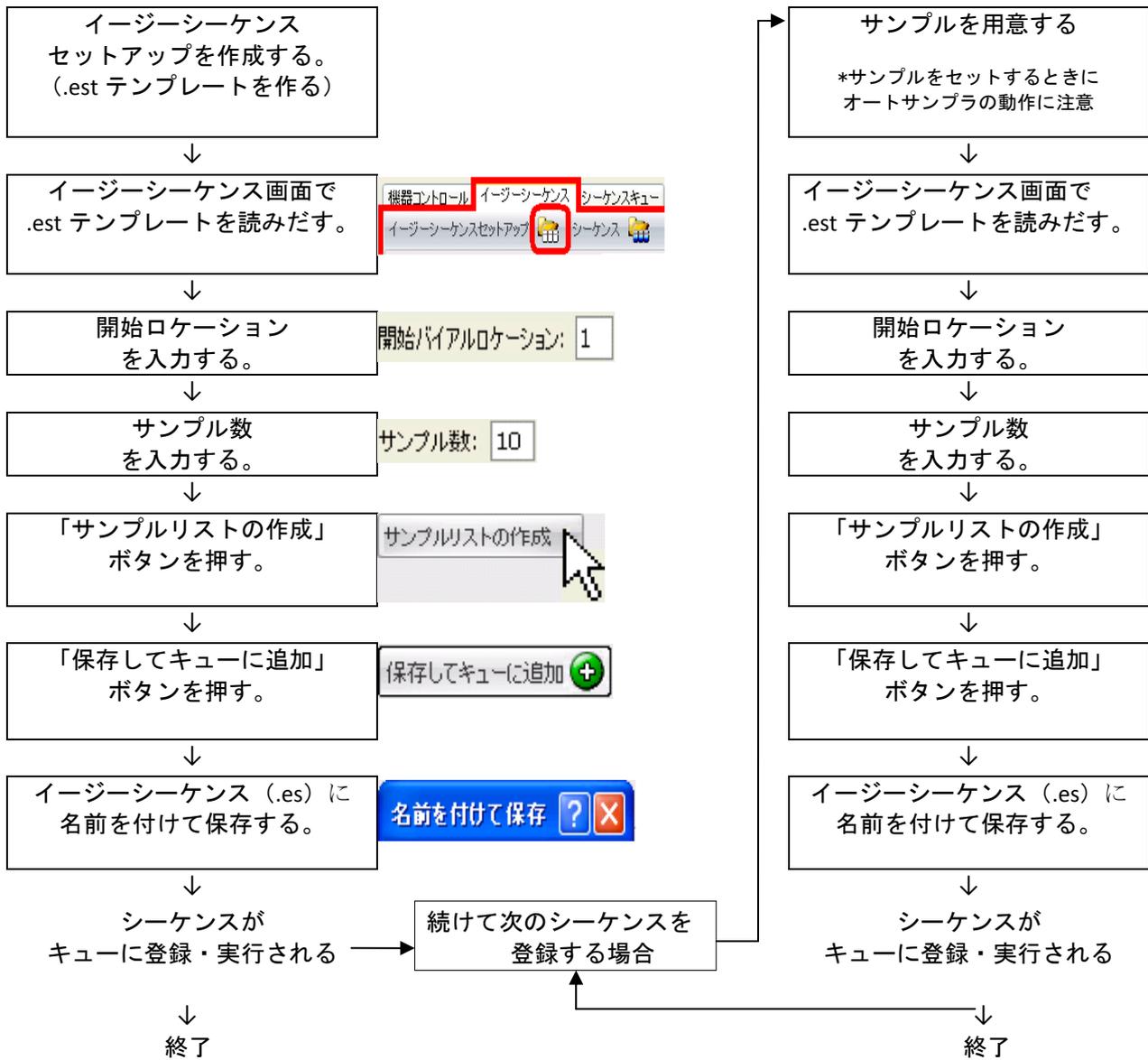
A-1-3. イージーシーケンスの操作タブ

- ①イージーシーケンスセットアップタブ  
イージーシーケンステンプレート (.est) を作成するためのタブです。  
サンプルカウンタ、データ命名法等を指定します。
- ②イージーシーケンスタブ  
イージーシーケンステンプレート (.est) を利用して、開始位置、サンプル数等を入れて、実際のサンプルリストを作成しキューに登録するタブです。
- ③シーケンスキュータブ  
現在キューに溜まっているシーケンス一覧を見ることができます。  
シーケンスの順を変更することもできます。



A-1-4. イージーシーケンスの操作の流れ

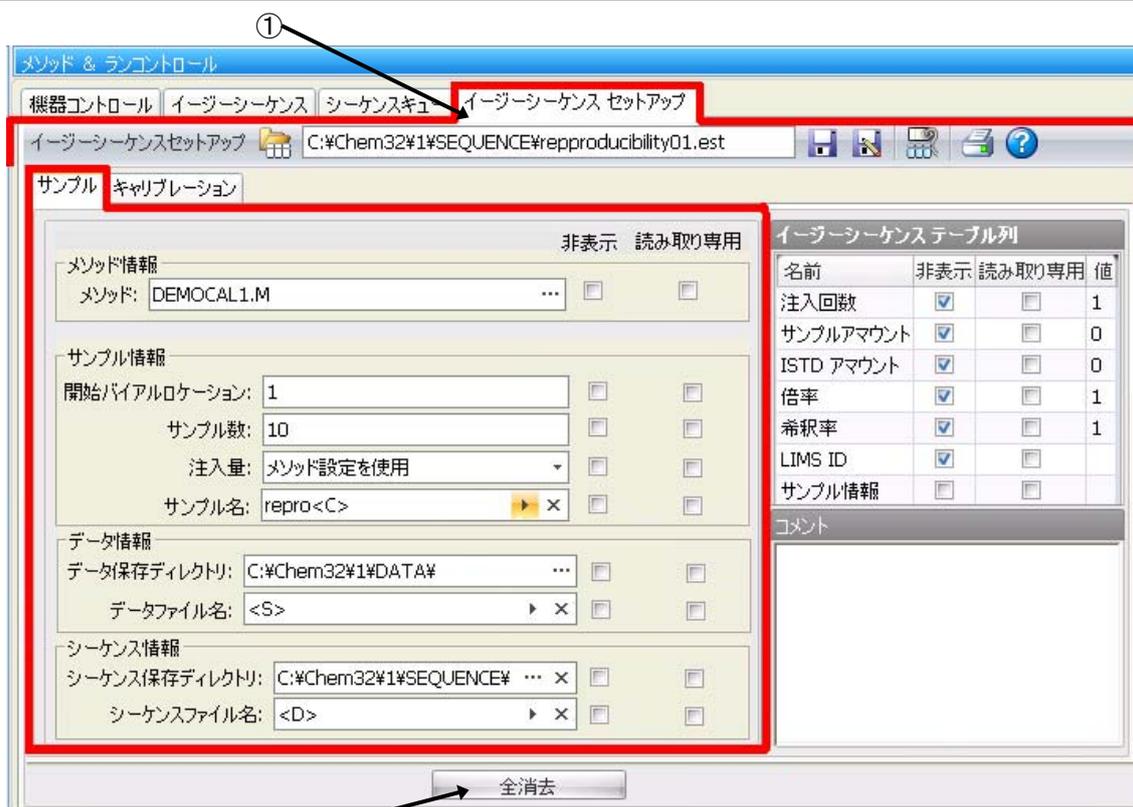
イージーシーケンス機能の基本操作は以下の通りです。



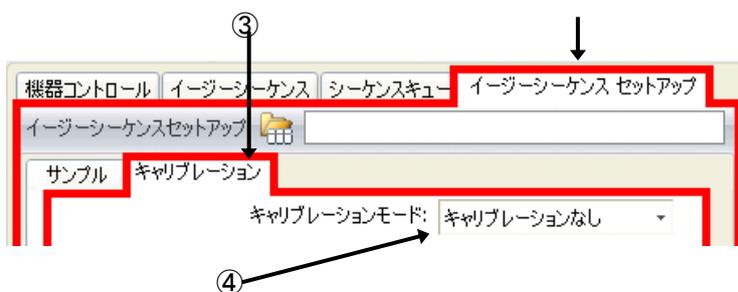
A-2. イージーシーケンスセットアップテンプレートを作成する

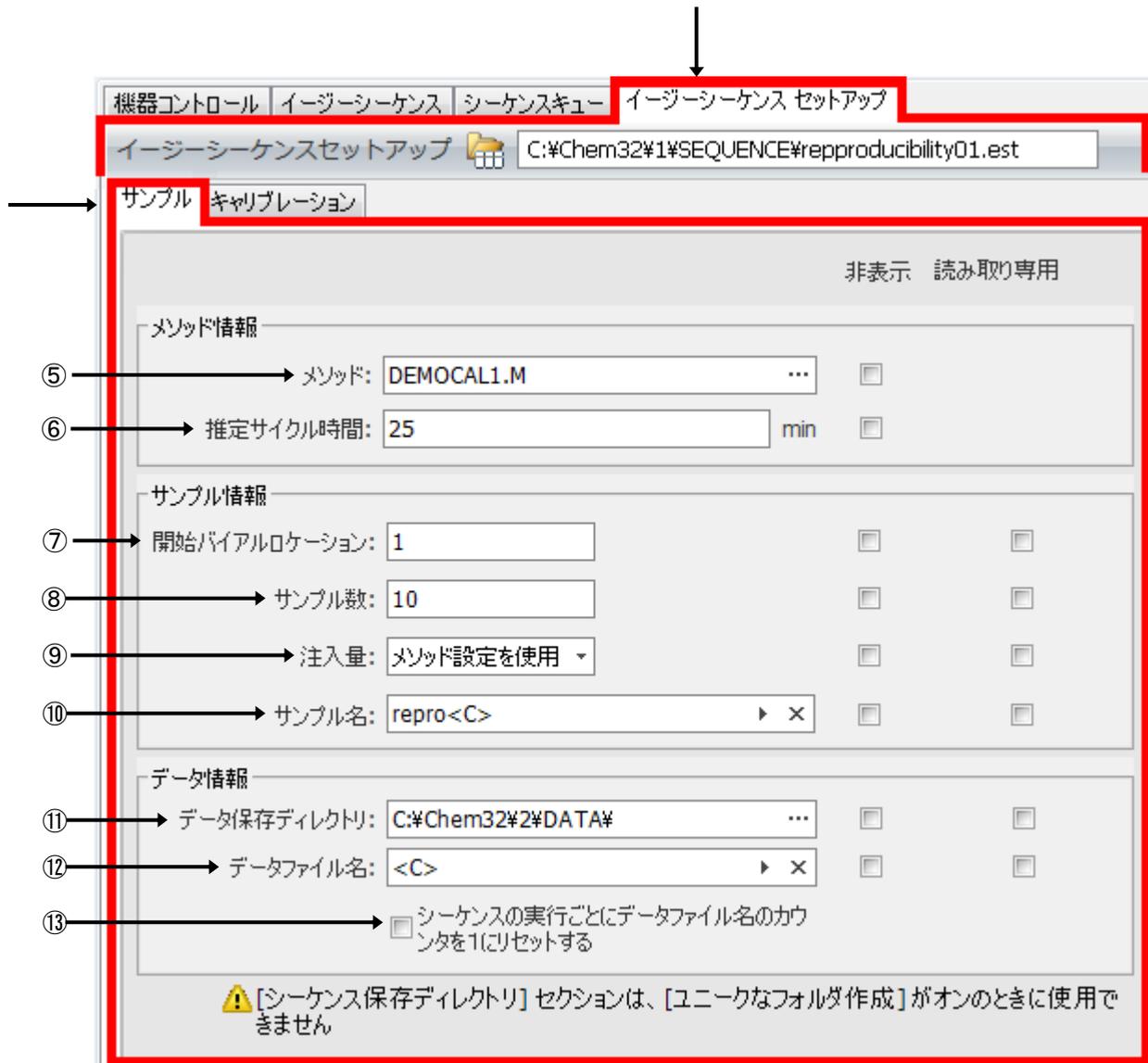
ここでは、以下の条件でイージーシーケンスセットアップテンプレート (.est) を作成する手順について説明します。

「周期的キャリブレーションなし」  
 「サンプル名は「repro0001」, 「repro0002」, 「repro0003」… カウントアップを使用」  
 「データ名は、「repro0001.D」, 「repro0002.D」, …カウントアップを使用」  
 「プレファレンス設定のシーケンスタブにあるデータ保存は、ユニークなフォルダ作成オンに設定」

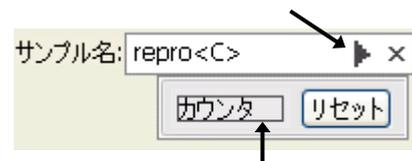


- ② 「イージーシーケンスセットアップ」タブをクリックします。
- ②新しいテンプレート (.est) を作成するときは、全消去 ボタンを押して設定を初期化します。
- ③④念のため、キャリブレーションタブの、キャリブレーションの設定が、「キャリブレーションなし」になっていることを確認して下さい。



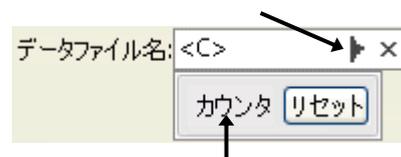


- ⑤使用するマスターメソッドを、一種類選んでください。「…」をクリックすると、選択のダイアログボックスが開きます。
- ⑥推定サイクル時間は、終了予定時間の算出に使用されます。必須入力項目ではありません。入力する場合は、オートサンプルなどの注入サイクルを含めた時間を入力してください。
- ⑦開始ロケーションを指定します。これは、後の、サンプルリスト作成時に変更できます。
- ⑧サンプル数を指定します。これは、後の、サンプルリスト作成時に変更できます。
- ⑨注入量を指定できます。通常はメソッド設定を使用します。
- ⑩サンプル名の名前の付け方を指定します。  
ここでサンプル名にカウントアップの指定をすると、後の手順のサンプルリスト作成時に、名前の一部がカウンタになります。入力欄中の三角マークをクリックすると、カウンタが選択できます。  
例の中の <C> は、カウンタ部分を示します。任意の文字列を追加できます。この場合、サンプル名は「repro0001」、「repro0002」、「repro0003」のように数字部分がカウントアップされます。



- ⑪データ保存ディレクトリを指定します。  
この直下に結果セットが作成されます。  
結果セットの命名法は、メニューから**表示>プレファレンス**の設定に準じます。
- ⑫データファイルの名前の付け方を指定してください。  
入力欄中の三角マークをクリックすると、「カウンタ」が選択できます。  
任意の文字列を追加することもできます。  
また、後のステップの「サンプルリストの作成」「保存してキューに追加」の操作の前にも変更することができます。
- ⑬データファイル名のカウンタ部分は、シーケンス実行ごとにリセットするオプションがあります。
- ⑭イージーシーケンステンプレート (.est) を保存してください。  
初回は、「名前を付けて保存」してください。拡張子の「.est」は、自動で付きます。

データ保存ディレクトリ: C:\%Chem32%1#DATA# ...



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

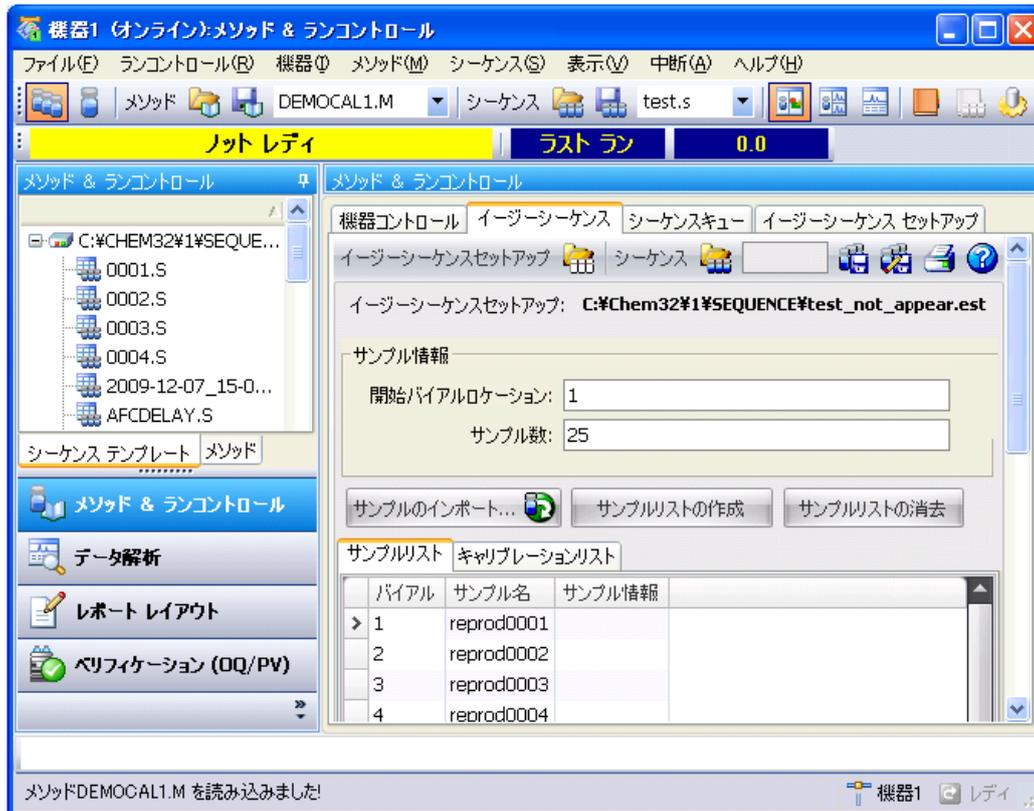
- 1) シーケンスが次に進み、別のメソッドが読み込まれて、  
移動相条件が変わった時の安定待ち時間  
**拡張パラメータのシーケンスパラメータの待機「0.00」min** に  
メソッドが変わった後に、何分待ってから分析を開始するかを入力してください。
- 2) ポストシーケンスコマンドの設定。  
**拡張パラメータのシーケンスパラメータのポストシーケンスコマンド/マクロ** に  
「STANDBY」など装置を停止させるコマンドが入っていないことを確認して下さい。  
実行中のシーケンスが終了した時点で、STANDBYになると機器はノットレディになるので次のキューのシーケンスが始められません。

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

補足：非表示チェックボックスについて

イージーシーケンスセットアップ画面で「非表示」のチェックボックスをオンにすると、その項目は、イージーシーケンス画面（サンプルリスト作成の画面）に表示されなくなります。サンプルリスト作成時の画面を簡易にできますが、.est ファイルの管理など、使用上の注意が必要です。

画面は、「開始ロケーション」「サンプル数」以外を非表示にした例です。



### A-3. イージーシーケンスをキューに追加する

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

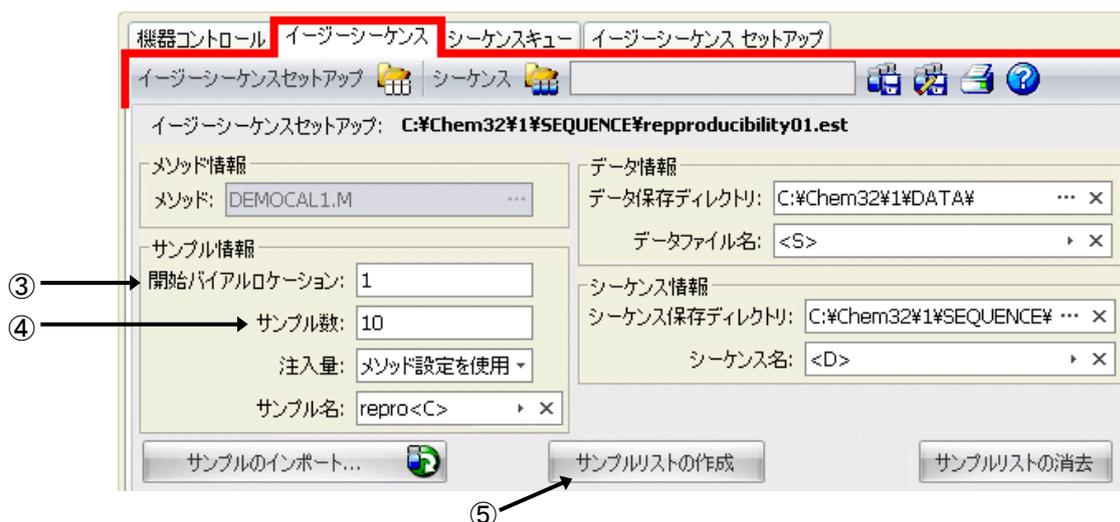
**注意：**分析中に新しくシーケンスのキュー追加を実施する場合は、オートサンプルが動作しないタイミングを確認の上で実施してください。

**注意：**分析が終了していないサンプルと同じ場所に、新たなサンプルを置くことはできません。

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



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



③開始ロケーション（実際にサンプルを並べる開始地点）を指定します。

補足：ウェルプレートサンプラの場合「p1a1」のように入力します。

④サンプラに並べる実際のサンプル数を入力します。

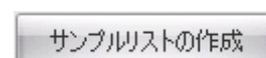
注意：ウェルプレートサンプラの場合、

- ・プレートをまたいでの設定はできません。  
また、プレートの最後を超えても、p1a1 など、初めの位置に戻る設定はできません。
- ・ニードル動作時は、前面カバーが開けられないようになっています。  
このときは無理に開けないでください。
- ・サンプルを並べる場合時に、トレーは外さないでください。  
取り出すときは、プレートのみ（54 バイアルプレートも含む）だけ取り出して、サンプルを追加してください。
- ・54 バイアルプレートを使用している場合、分析開始後にサンプルを追加しておきたい場合は「手前側のプレート（下側、プレート1）」のみ使用してください。（奥側はプレートを外すときアームに触れる場合があります）

注意：標準型(100 トレイタイプ)サンプラの場合、100 番を超えない範囲で設定してください。  
また、100 番の後に、1 番に戻る設定はできません。

⑤画面中央の「サンプルリストの作成」ボタンをクリックします。

画面の下方にサンプルリストが表示されます。



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

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

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

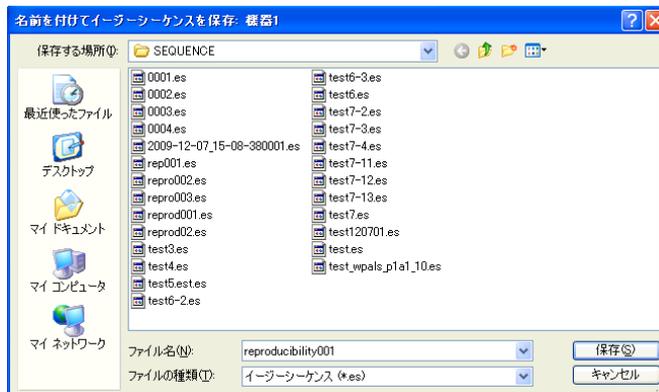
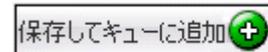
注意：次のステップで、シーケンスがすぐに始まる場合があります。このまますぐにシーケンスを開始する場合は、ここで「機器コントロール」タブに戻って、カラム等コンディショニングを実施してください。

⑧画面中央下部の、**保存してキューに追加** ボタンを

クリックします。この操作では、イージーシーケンス (.es) を保存してから、このシーケンスをキューに登録します。

画面にはイージーシーケンス (.es) の保存を促す画面が現れます。

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



適切な名前を付けて、イージーシーケンス(.es)を保存してください。装置が、レディ状態で、現在のメソッドが読み込み後の変更を受けていなければ、キューに溜まったシーケンスがすぐに実行されます。

#### A-4. イージーシーケンス実行時の注意点

ここでは、キューにあるシーケンスの実行する場合を例に解説します。初めのシーケンスがキューに送られた時、シーケンスがすぐにスタートするかどうかは、機器の状態により違います。

A) 機器がレディ状態で、

現在のメソッド（カレントメソッド）が、読み込み後、変更を受けていない場合。

→シーケンスキューはすぐにスタートします。

B) 機器が、スタンバイなどノットレディの場合。

機器がオンになってはいるが安定待ちの場合。現在のメソッド（カレントメソッド）が、読み込み後変更を受けている場合。

→シーケンスキューは一時停止します。

必要に応じてカラムのコンディショニング等の準備をします。

変更されている現在のメソッドを保存するか、次に分析予定のマスターメソッドを読み込みます。

機器が安定しておりステータスがレディになっていることを確認します。

レディ

アクティブキュー:シーケンス受け入れ可能です

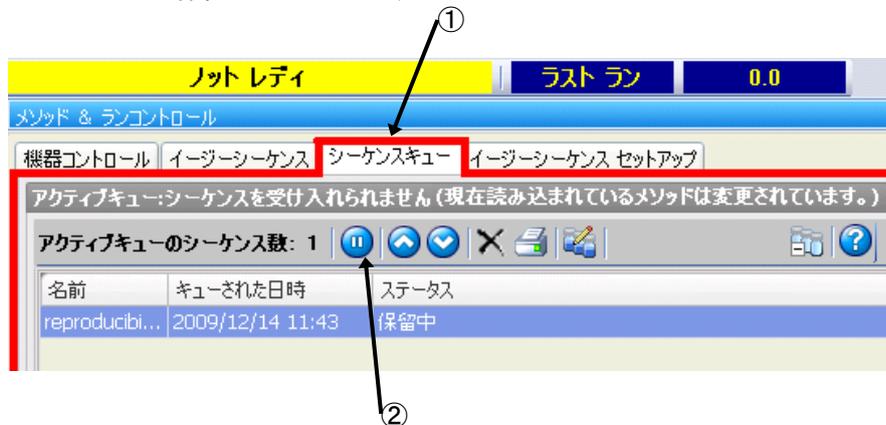
ノットレディ

(現在読み込まれているメソッドは変更されています。)

シーケンスキューの一時停止を解除します。

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

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



- ②シーケンスキューを一時停止させます。  
③機器コントロールタブをクリックして 画面を変えます。



変更フラグ (星印)  
メソッドが読み込まれてから、変更を受けていることを示します。

- ③必要に応じカラムのコンディショニング各機器のオン操作等の準備をします。  
④メソッドに変更フラグがある場合は、シーケンスキューの始めに使用されるマスターメソッドを読み込むか、現在のメソッドで問題ない場合は上書き保存をして変更フラグが消えたことを確認します。

メニューから、**メソッド>メソッド読み込み** でマスターメソッドを読み込み直すことができます

**レディ**

- ⑤機器が安定しておりステータスがレディになっていることを確認します。  
⑥シーケンスキュータブをクリックして、シーケンスキュー画面に移ります。  
(シーケンスキューは先ほど一時停止にした状態のままです。)



- ⑦クーデンスキューの一時停止を解除します。  
クーデンスが開始されます。

A-5. キューの操作

ここでは、シーケンスキューのアイコン操作を記します。



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



一時停止したキューを再開します。



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



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



現在のキューを、印刷します。



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

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

補足：シーケンスキューに、シーケンスが溜まっている時、  
シーケンスの停止、または中断をするときは、あらかじめ  
シーケンスキューを一時停止してください。  
キューを一時停止しないで、シーケンス停止、または中断すると、  
キューの次のシーケンスが始まってしまいます。

シーケンスキュー



(シーケンスが停止／中断したあと、機器とソフトウェアはレディになるため。)

シーケンスキューを使用していて、現在のシーケンスを一時停止する場合には、  
メニューから、ランコントロール > シーケンス停止と操作します。

再開するには、ランコントロール > シーケンス再開と操作します。

(シーケンス自身が一時停止しているため、キューも進みません)

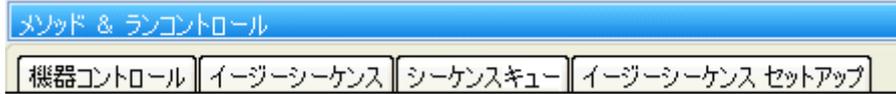
ヒント：イージーシーケンスキューが最後まで終わったら、機器をスタンバイにするには  
キューの最後のシーケンスの設定で、最後にスタンバイになるよう設定します。  
ポストシーケンスコマンドの設定で、拡張パラメータの シーケンスパラメータの  
ポストシーケンスコマンド/マクロにチェックを付けて、「STANDBY」  
を選択してください。

注意：もし後からシーケンスを追加した場合には、  
STANDBY 設定がされているシーケンスが一番最後になるように、  
順序を変更してください。

## A-6. 同じ、または類似のイージーシーケンスを実行する

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

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



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



補足：類似分析をする際には、

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

イージーシーケンス「.es」を読み出して使うとすると、前回保存した時と同じサンプルリストが出てきます。つまり、同じサンプル名、同じデータファイル名になります。しかし、イージーシーケンス機能を使用する上での推奨設定の「ユニークなフォルダ作成をオン」にしてフォルダの命名に「日付と時刻」を入れておけば、後から取ったデータは別フォルダに溜まるので、上書きの心配はありません。ただし、サンプル群を特定するために、フォルダ名やログブックなどの記録から実行された時刻を頼りにしなければいけません。

A-7. 周期的キャリブレーションのプランを作成する

ここでは、イージーシーケンスの機能の一つである、「周期的キャリブレーション」プランの設定について説明します。イージーシーケンスでは、「周期的キャリブレーション」「ブラケットキャリブレーション」「シンプルなキャリブレーション」の3種類のプランの作成ができます。

ここでは周期的キャリブレーションのプランの設定を例にあげます。

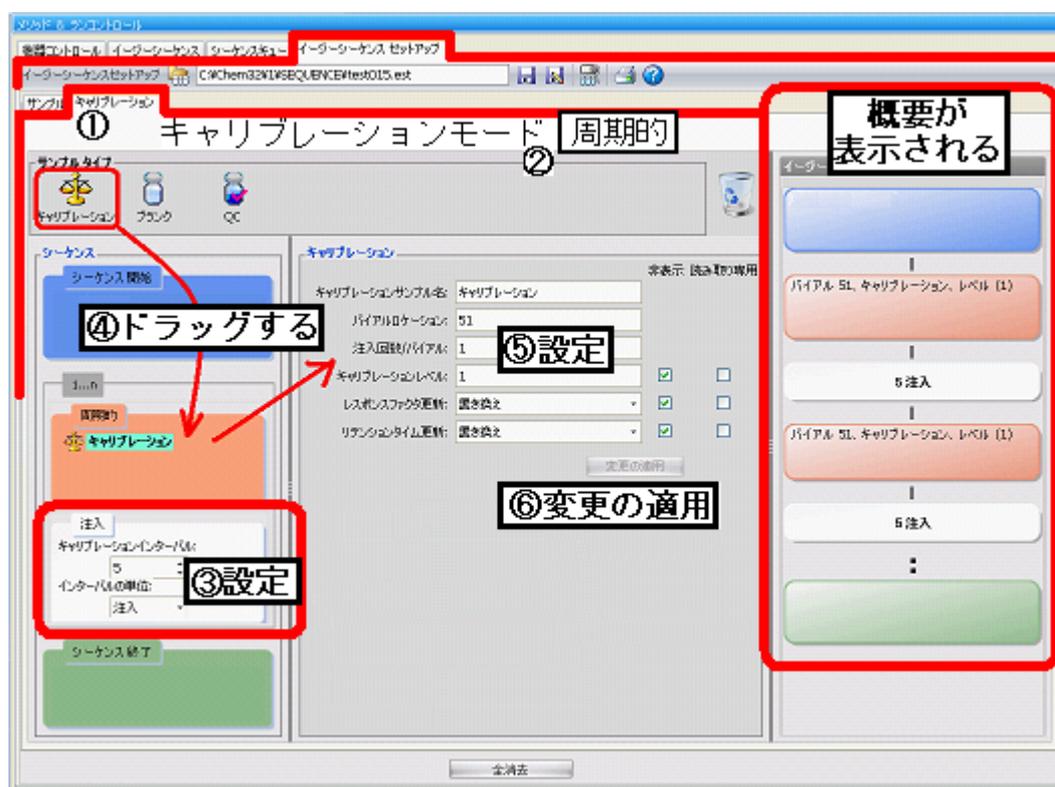
使用するメソッドの条件は、

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

です。ここでは例として、

「1点検量線」「5回に1回リキャリブレーションする」

のプランを作成します。



①イージーシーケンスセットアップタブの、キャリブレーションタブに入ります。

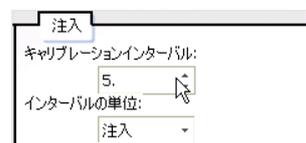
②キャリブレーションモードを「周期的」に設定します。

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

④キャリブレーションアイコンを、「周期的画面」にドラッグします。

⑤リキャリブレーションの設定をします。

- ・キャリブレーションサンプル名  
キャリブレーションサンプルの名前を設定します。
- ・バイアルロケーション  
キャリブレーションサンプルの位置を指定します。
- ・注入回数/バイアル  
注入回数を設定します。



- ・キャリブレーションレベル  
検量線の何点目であるかを指定します。
  - ・レスポンスファクタ更新  
このキャリブレーションサンプルの値で、レスポンスファクタをどのように変更するかを指定します。
  - ・リテンションタイム更新  
このキャリブレーションサンプルの測定結果のRTで、RTウインドウの位置の更新方法をどのようにするか指定します。
- ⑥入力したら 変更の適用 ボタンをクリックして下さい。  
多点検量線の場合は、各レベルについて、④⑤のステップを繰り返してください。

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

手順のガイドは、オンラインヘルプもご参照ください。



注意：イージーシーケンス機能では、「レスポンスファクタ (RF) 更新」「リテンションタイム (RT) 更新」の方法が、毎回同じ様に設定されます。  
(以下のような設定はできません：初回のキャリブレーションで、RF、RTを更新する。2回目以降は平均する)  
リキャリブレーション方法が同一でないシーケンスを作成するには、ChemStation のシーケンステーブルで作成してください。

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

これらのサンプルに対しては、  
別のサンプル名  
別のメソッド  
固有のロケーション  
さらに、ブランクに対しては、  
注入の有り/無し  
が別に設定できます。



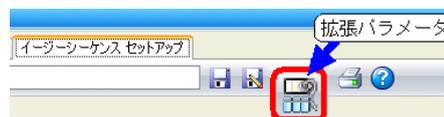
A-8. イージーシーケンスの設定と操作のヒント

ここではイージーシーケンスの設定と操作のヒントをいくつか紹介します。  
 詳細は、各節もしくはオンラインヘルプもご参照ください。



- ①データの上書きがされないようにするには、どのような設定が必要でしょうか？  
 ユニークフォルダを必ずオンにして、名前のパターンに<Date><Time>を入れてください。  
 操作は、メニューから、**表示>プレファレンス**です。

- ②シーケンスをキューに溜める時の注意点はなんですか？  
 拡張パラメータに注意してください。  
 「待機{xx}min 新しいメソッドを読み込み後」の項目に、カラム安定の時間を設定するようにしてください。



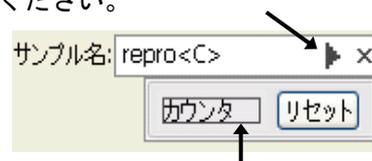
- ③カウンタをリセットするにはどのような操作をしますか？  
 イージーシーケンスセットアップ (.est)に戻って、カウンタをリセットしてください。  
 「サンプル名」欄の右矢印ボタンでダイアログボックスを出し、「リセット」を押してください。  
 .estを上書き保存しなくてもカウンタはリセットされます。



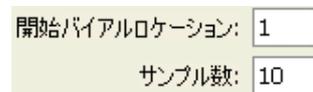
- ④いつも「mysample0001」～のようなサンプルリストを作成するにはどうすればいいでしょうか？  
 .estセットアップの「サンプル名」欄に、「mysample<C>」と入力後、右矢印ボタンでダイアログボックスを出し、「リセット」を押してください。（文字列部分を変更した場合、.estを、名前を付けて（または上書き）保存が必要です）



- ⑤サンプル名や、データ名の、プレフィックスを書き換えるにはどのような操作をしますか？  
 .estセットアップまで戻って、プレフィックス部分を書き換えてください。  
 .estを上書き保存し、サンプルリストを作成してください。  
 「サンプルリスト作成」後のリスト上での修正もできます。



- ⑥サンプル数がいつもと違う時はどのような操作をしますか？  
 イージーシーケンス画面の、「サンプル数」欄に数値を入力後、「サンプルリスト作成」ボタンを押してください。



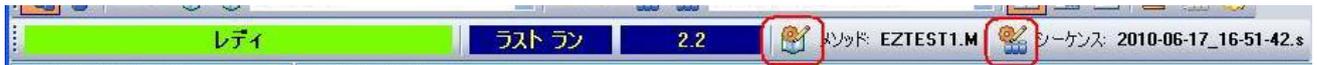
- ⑦開始ロケーションを変更したいときはどうすればいいでしょうか？  
 イージーシーケンス画面の、「開始バイパスロケーション」欄に数値を入力後、「サンプルリスト作成」ボタンを押してください。

- ⑧イージーシーケンスを使用して、キューにシーケンスが溜まっています。  
 シーケンスと一旦停止させるにはどうしたらよいでしょうか？  
 まず、シーケンスキューを一時停止してください。  
 そのあと、メニューから、**ランコントロール>シーケンス停止**を選択します。  
 再開するには、メニューの**ランコントロール>シーケンス再開**を選択します。

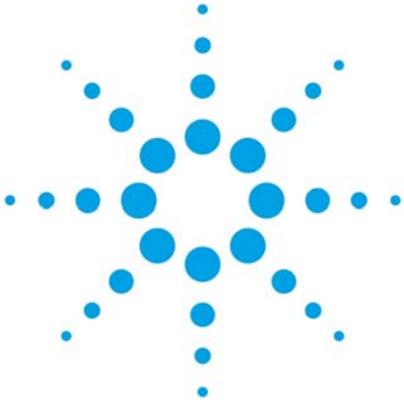
シーケンスキュー



- ⑨シーケンスをキューに追加したのですが実行されません。  
現在のメソッド、シーケンスファイルに変更がある場合は保存してください。  
変更フラグが立った状態では、イージーシーケンスは実行されません。







## 付録B 高性能オートサンプラのバルブ洗浄

B-1. 注入クリーニング（バルブクリーニング）の設定	B-2
B-2. インジェクタクリーニング（パージキット）の設定	B-3

高性能オートサンプラには、バルブをクリーニングする手法があります。  
 注入クリーニング（バルブクリーニング）と、別途オプションのパージキットを用いた  
 インジェクタクリーニングです。  
 いずれも、高性能オートサンプラの「詳細設定」の下の「注入クリーニング」項目で設定します

### B-1. 注入クリーニング（バルブクリーニング）の設定

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

#### + 注入クリーニング

##### 注入バルブクリーニング

**時間1**では、サンプルがすべて  
 流れ出た後、バルブをバイパスに  
 切り替えます。

**時間2**では、カラムからサンプルが  
 すべて溶出した後に設定します。  
 有機溶媒がリッチな条件なので、  
 バルブを切り替えて残ったサンプルを  
 溶出させます。

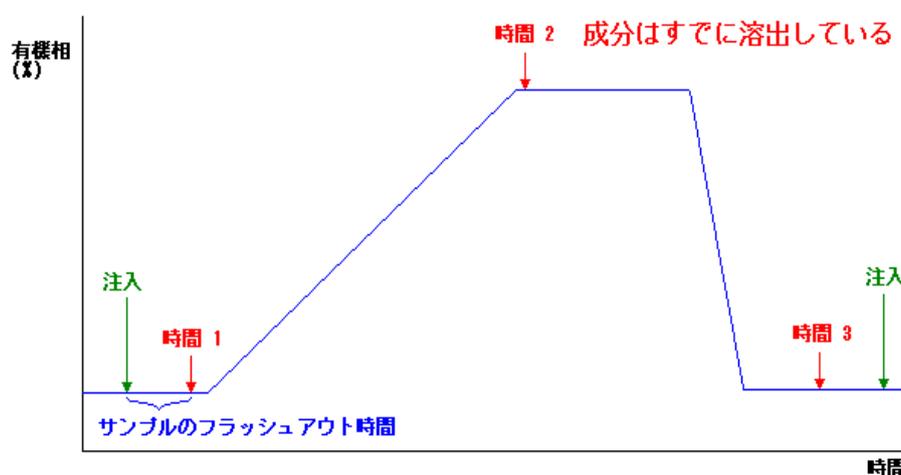
**時間3**では、移動相が初期条件に戻った  
 ところで、バルブを切り替えて、  
 有機溶媒を追い出します。

**時間4**は、追加でバルブ切り替えを  
 するときに使います。

**バルブ切り替え**では、**時間2** **時間3** **時間4** の時にバルブが切り替わる回数を指定します。

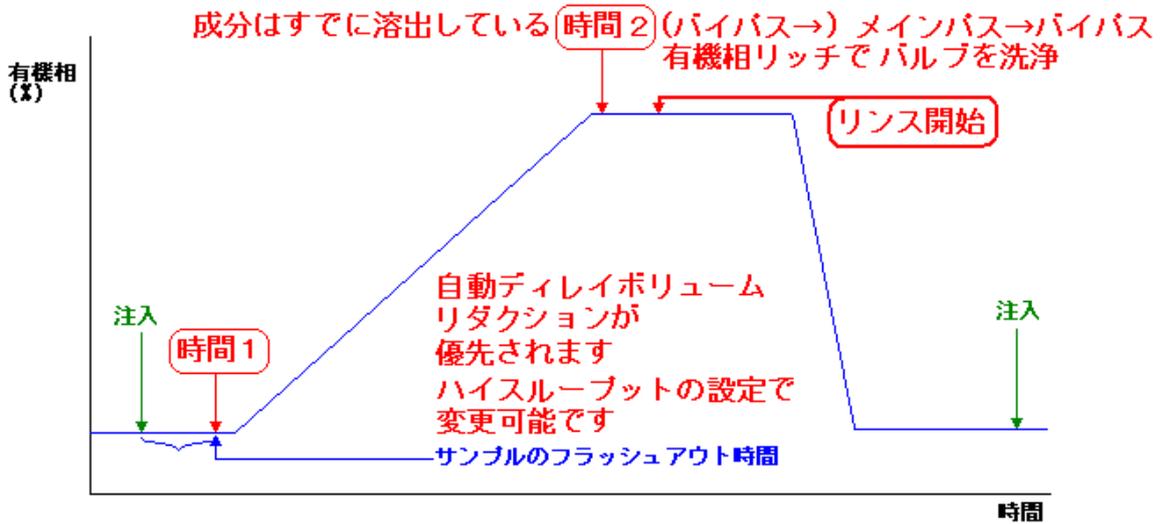
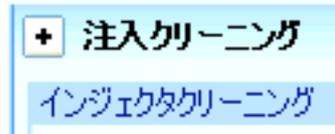
+ 注入クリーニング			
注入バルブクリーニング			
時間 1:	<input checked="" type="checkbox"/>	0.50	min (バイパス)
時間 2:	<input checked="" type="checkbox"/>	5.00	min (メインパス バイパス)
時間 3:	<input checked="" type="checkbox"/>	6.00	min (メインパス バイパス)
時間 4:	<input type="checkbox"/>	0.01	min (メインパス バイパス)
バルブ切り替え:		2	

概念図を示します。 詳細はオンラインヘルプを参照ください。



B-2. インジェクタクリーニング（パージキット）の設定

ここでは、オプションのパージキットを使用したインジェクタのクリーニングの典型的な設定例を示します。高性能オートサンプラの設定画面の右側で、注入クリーニングの項目を選択します。



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



## ⑥時間1は、サンプルがフラッシュ

アウトされた時間を設定します。  
注意：「詳細設定」の「ハイスループット」の自動ディレイボリュウム低減（ADVR）が有効になっていると、この設定が優先されます。  
バルブは、メインパスからバイパスに切り替わります。

⑦時間2は、サンプルがすでに溶出して、

有機溶媒リッチな状態の時間を設定します。  
バルブの溝が設定回数切り替わり、有機相で洗われます。バルブ切り替え回数は⑧で指定します。

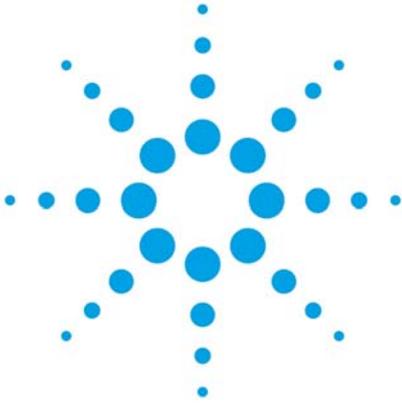


**時間2**の動作の後に、パージキットによるリンス動作が開始されます。

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

補足：ハイスルーブット分析を目指した設定をする時

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



## 付録C ランキュー（待ち行列）の利用

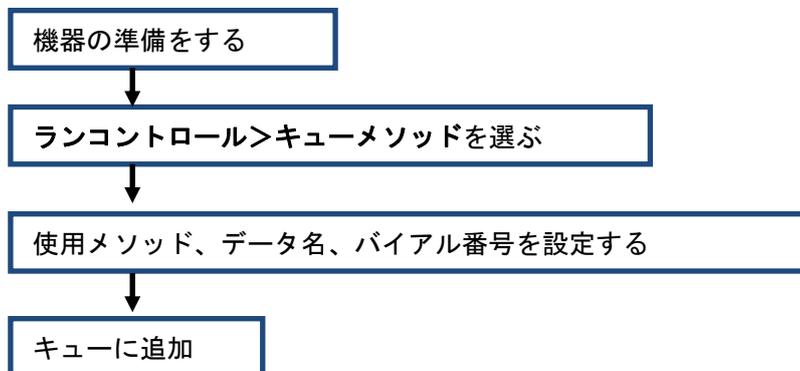
C-1. ランキューのワークフローの概要	C-2
C-2. ランキューを使用する前の準備	C-3
C-3. シングルランをキューに追加する方法	C-4
C-4. シーケンスをキューに追加する方法	C-5
C-5. キューの操作	C-7
C-6. 分析を停止させるには	C-8

OpenLAB Chemstation C.01.04 以降では、シングルランやシーケンス分析を「ランキュー（待ち行列）」に追加して、順次分析を実行する機能があります。

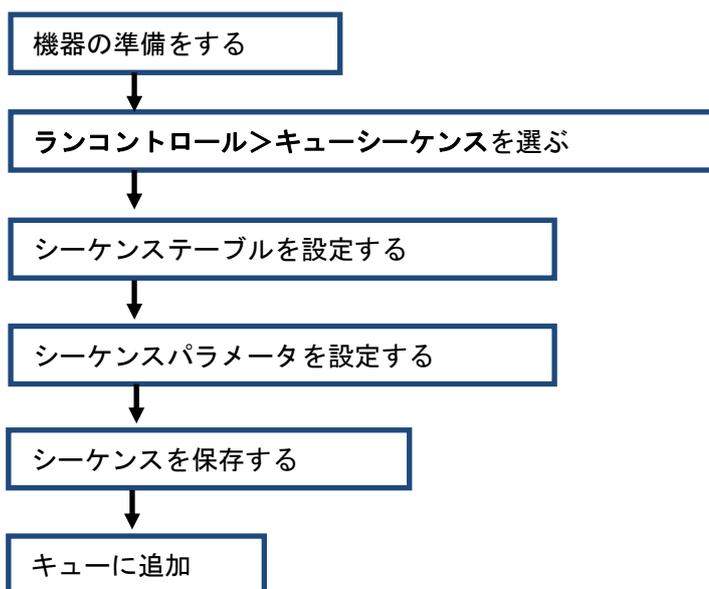
**警告** オートサンプラの動作中は、オートサンプラ動作部分に手を触れないでください。  
けがをする恐れがあります。

C-1. ランキューのワークフローの概要

- ・シングルランをキューに登録する。（C-2、C-3を参照してください）



- ・シーケンスをキューに登録する。（C-2、C-4を参照してください）



## C-2. ランキューを使用する前の準備

- 使用するメソッドをあらかじめ作成し、名前を付けて保存しておきます。  
（シーケンスはキューに登録するときには作成が可能です。）
- ランキューの初めに使用するメソッドを読み込んで安定を待ちます。
- 使用するシーケンス（またはデフォルトのシーケンス）を読み込んでおきます。

## 注意：

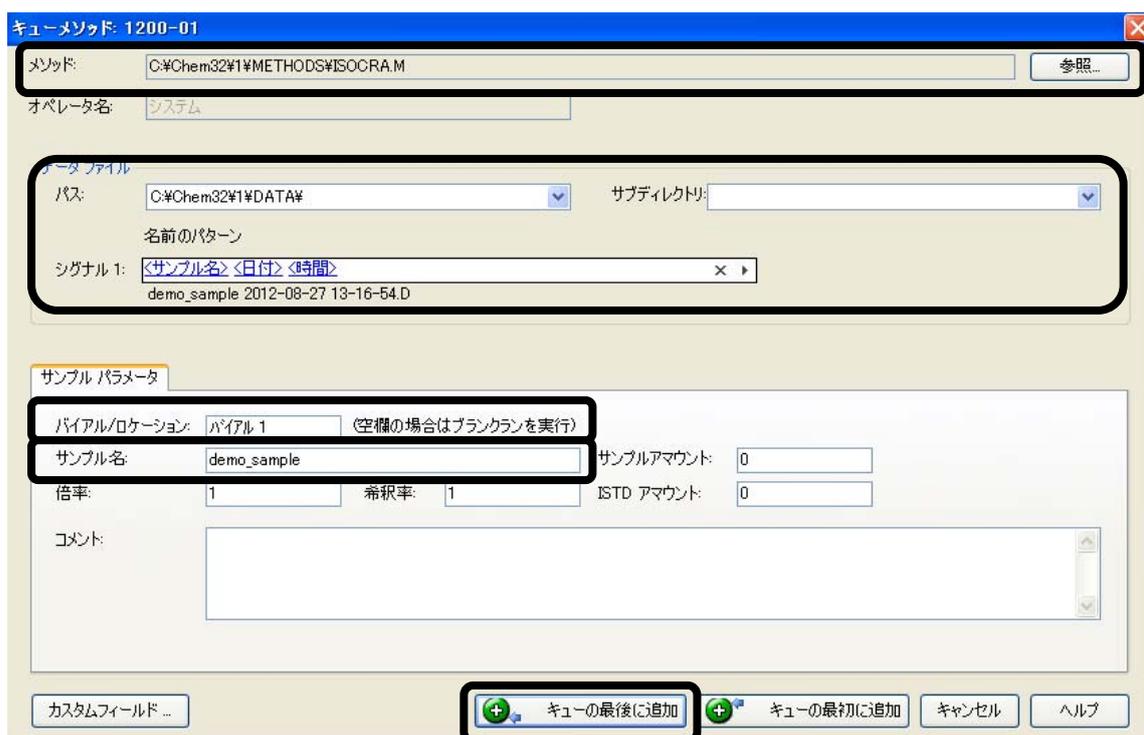
- ランキューを使用する予定がある場合は、あらかじめメソッドをディスクに保存してから“キューメソッド”か“キューシーケンス”で分析を開始してください。“ランメソッド”でシングルランを実行中は、キューへの追加はしないでください。
- 現在のメソッドに変更があって未保存の場合、または現在のシーケンスに変更があって未保存の場合、キューは進行しません。（保存の確認ダイアログボックスが表示され、進行しません。）
- HPLC の場合、グラジエント分析のメソッドには、必ずポストタイムの設定をしてください。
- HPLC の場合、初期移動相の組成が異なるメソッドを**キューメソッド機能**でキューに追加しないでください。分析前の安定化時間がとられません。このようなメソッドを実行するときは、**キューシーケンス機能**を使用してください。新しいメソッドを読み込んだ後の安定化時間の設定が可能です。
- HPLC の場合、キューの分析の途中でオートサンプリングのトレイの交換や、プレートの交換はしないでください。

C-3. シングルランをキューに追加する方法

この機能では、既存のメソッドを使用してシングルランをキューに追加できます。

1. メニューのランコントロール>キューメソッドを選択します。
2. 使用するメソッド、データファイル命名法、サンプルロケーション、サンプル名を設定します。

注意：データファイル名の命名要素にはカウンターや日付、時間等を組み合わせて同名のデータが作成されないように工夫してください。データ名が重複する場合、確認のダイアログボックスが表示され、分析が進みません。命名要素に日付、時間を指定した場合は、キューに追加された日付、時間で命名されず（データ採取開始日時ではありません）。

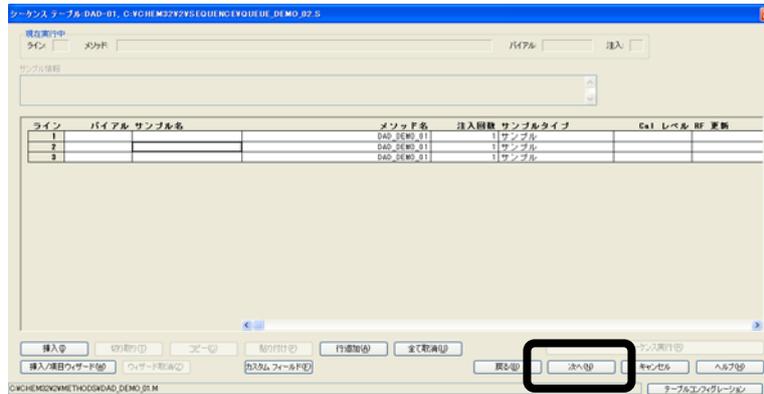


3. キューの最後に追加ボタンをクリックしてキューに追加します。  
（キューの最初に追加ボタンも使用可能です）

## C-4. シーケンスをキューに追加する方法

この機能では、既存のシーケンスを元に別のシーケンスを作成して保存し、キューに追加できます。また、新規のシーケンスを作成してから保存してキューに追加することもできます。

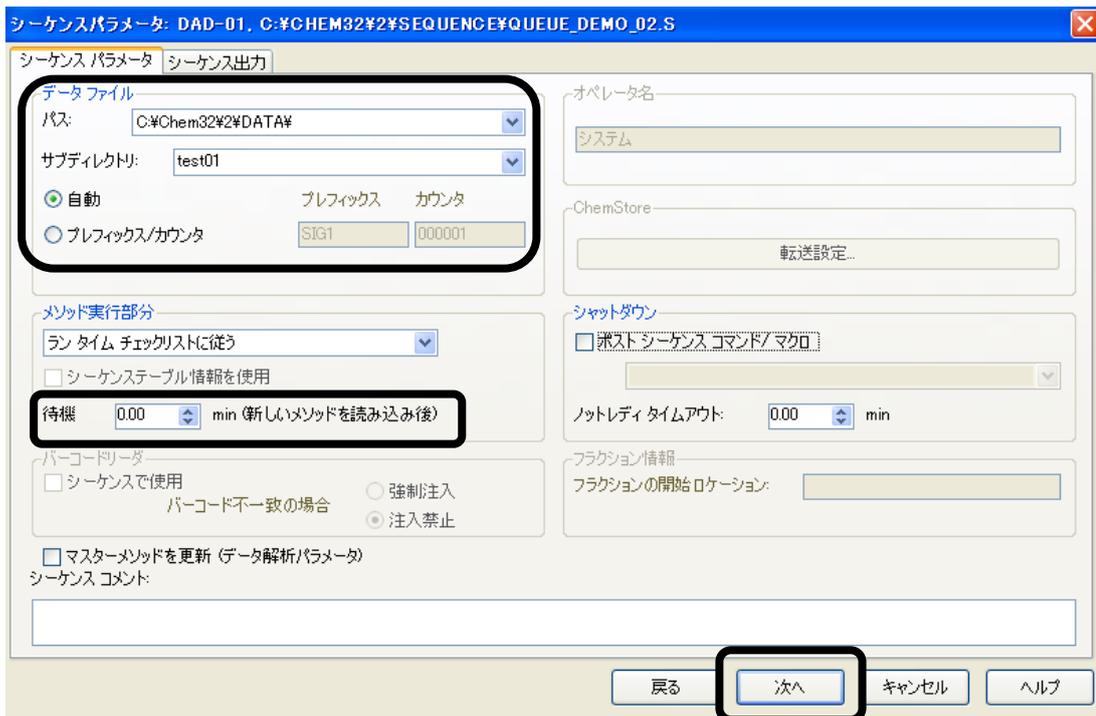
1. メニューのランコントロール>キューシーケンスを選択します。
2. 元になるシーケンスを選択します。新規シーケンスを作成する場合はここでデフォルトのシーケンス（def\_gc.s または def\_lc.s）を選択します。
3. シーケンステーブルを編集します。終了したら次へボタンをクリックします。



4. シーケンスパラメータを編集します。データファイルの命名法を設定します。設定できたら次へボタンをクリックします。

注意：

- ポストランコマンドで standby など機器を停止させるコマンドを指定しないでください。
- HPLC で初期条件が異なるメソッドを使用する場合は、“新しいメソッドを読み込み後”の待機時間にシステムの安定待ち時間を設定してください。
- もし、ユニークなフォルダ作成オフ（推奨しません）の場合は、サブディレクトリを替えるなどして、データ名が重複しないようにしてください。

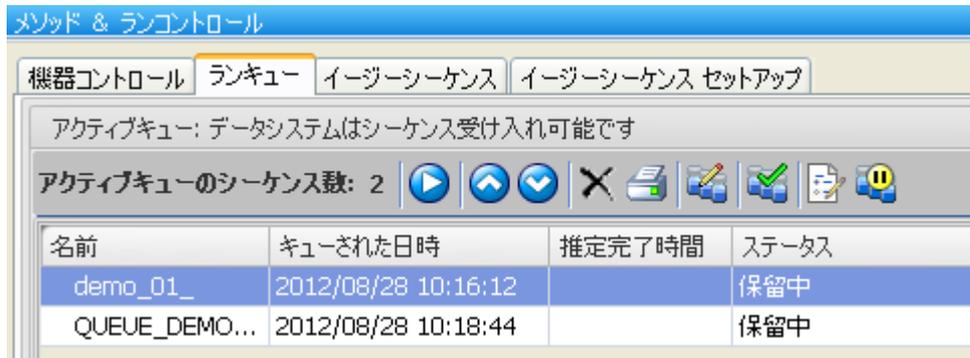


5. キューシーケンス完了の画面が現れます。新規シーケンステンプレートとして保存をクリックして、編集したシーケンスに名前を付けて保存します。保存できたら**キューの最後に追加**ボタンをクリックして、ランキューにシーケンスを追加します。（**キューの最初に追加**ボタンも利用できます）



## C-5. キューの操作

キューに登録したシングルランやシーケンスは、ランキュータブで順序の変更や設定変更をすることができます。



ボタンの説明：

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

 一時停止したキューを再開します。

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

 キューに一時停止を挿入します。

 キューのシングルランやシーケンスを削除できます。  
削除するには、行をクリックして、行の色が反転させてから、  
ボタンをクリックします。

 現在のキューを印刷します。

 キューにあるシングルランやシーケンスの設定を編集できます。

C-6. 分析を停止させるには

実行中の分析を停止するには、まずランキューを一時停止する必要があります。  
ランキューを一時停止するには**ランキュータブ**で**一時停止ボタン**をクリックします。

- A. 現在のランやシーケンスを直ちに終了させ、現在のランのデータを破棄する場合。
1. **ランキュータブ**で**一時停止ボタン**をクリックしてランキューを停止させます。
  2. メニューの**中断>中断**を選択します。  
現在実行されているシーケンスも終了します。
  3. ランキューを再開するには、**ランキュータブ**で**再開ボタン**をクリックします。  
注意：カラム内にサンプル成分が残留している可能性があります。
- B. 現在のランを直ちに終了させ、現在のランのデータを破棄しない場合。
1. **ランキュータブ**で**一時停止ボタン**をクリックしてランキューを停止させます。
  2. メニューの**ランコントロール>ラン/注入/シーケンス中止**を選択します。  
現在実行されているシーケンスも終了します。
  3. ランキューを再開するには、**ランキュータブ**で**再開ボタン**をクリックします。  
注意：カラム内にサンプル成分が残留している可能性があります。

C. 現在のランのデータは最後まで採取して、次の分析の前に一時停止させたい場合

C-1. 現在、シーケンスが実行されている場合

1. **ランキュータブ**で**一時停止ボタン**をクリックしてランキューを停止させます。
2. メニューの **ランコントロール>シーケンス停止**を選択します。
3. 再開するには、メニューの**ランコントロール>シーケンス再開**を選択します。
4. **ランキュータブ**で**再開ボタン**をクリックします。

C-2. 現在、シングルランが実行されている場合

1. **ランキュータブ**で**一時停止ボタン**をクリックしてランキューを停止させます。
2. 再開するには、**ランキュータブ**で**再開ボタン**をクリックします。

注意：**中断**、または、**ラン/注入/シーケンス中止**を使用して分析を停止した場合、カラム内にはサンプル成分が残っている可能性があります。必ず追い出しとコンディショニングを実施してください。実施後は、次に使うメソッドを読みだして安定を待ってから、ランキューを再開させてください。

## 改定履歴

版 (Rev.)	内容	日付	改訂者
初版 (Rev1)	第 1 版	2010/08/15	YI
第 2 版	C.01.04 に対応	2012/10/16	YI
第 3 版	C.01.05 に対応	2013/03/19	YI

本書の内容の一部または全部を無断で複写・転載することは禁止されています。

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

〒192-8510 東京都八王子市高倉町 9-1  
Tel: (フリーダイヤル) 0120-477-111  
受付時間 9:00~12:00、13:00~18:00  
(土、日、祝祭日、年末年始を除く)

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

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

