OpenLAB CDS EZChrom Edition



Agilent 1200Infinity LC OpenLAB CDS EZChrom Edition 操作マニュアル スペクトル解析

はじめに

本取扱説明書は Agilent OpenLAB CDS EZChrom Edition ソフトウェアのスペクトル解 析の操作の概要を説明したものです。本書に記述されていないソフトウェアおよび装置の詳細 な説明についてはオンラインヘルプ、リファレンスガイド、ユーザーガイド等を参照してください。

スペクトル解析機能

ダイオードアレイ検出器が接続され、スペクトル採取パラメータを"すべて"に設定している場合は、純度確認やスペクトルライブラリサーチのデータ解析が可能です。

y 😽 DAD 🚫 HiP t	ナンプラ 🔆 補助トレース 🍒 トリガー
	DAD (G4
	+ 詳細設定
リファレンス バンド幅	スペクトル (清存: すべて 🔷
100.0 + nm	なし ゴバて nm
100.0 nm 100.0 nm	ステップ: 2.0 🛟 nm

1.スペクトルの表示

表示タスクに切り替え、ナビゲーションパネルの PDA 表示から [ミックスビュー] を選択します。









ナビゲーションパネルで表示させる情報内容の切り替え(スペクト ル、クロマト、マックスプロット)可能です。

2.複数波長のクロマトグラム表示

1. メソッドタクスに入り、ナビゲーションパネルから PDA オプションを選択します。



2. マルチクロマトグラム タグをクリックします。

PDA 7	フジョン イブラリ く 新	炖度 🛛 😽 スペクトル	📾 ব্যার্চচার্বাস্ট	54 [15] 比]			
	有効	波長	バント幅		┌─□ ベースライン・	クロマトグラムの減	算 一
1	☑	200.0	4.0		· 本臣·		10 M
2		210	4.0]	NX32	1	11111
3					バンド幅:		nm

- 3. 抽出するクロマトグラムの波長とバンド幅を入力し、□有効 をチェックします。
- 4. 画面下の適用ボタンをクリックします。
- 5. 表示タスクに入り、ナビゲーションパネルの [マルチクロマトグラム] を選択します。入力した波 長の多波長クロマトグラムが表示されます。



5. 画面左上の表示メニューか らも表示内容を変更すること ができます。

💳 DAD: スペクトル - マルチク	
🔜 हर 💐 同期	
ミックスビュー⊗	F
スペクトル(<u>S</u>)	ľ
クロマトグラム(<u>G</u>) マックスプロット(<u>P</u>)	ľ
 マルチクロマトグラム(M) ブロット比(R) 	ľ
3D(<u>D</u>) 等高線(<u>C</u>)	
3D & 等高線(<u>D</u>)	

3.スペクトル検索

- 1. スペクトルライブラリを作成します。
- 2. 既知サンプルのスペクトルを採取したクロマトグラムデータを読み込んでおきます。
- 3. メニューから[ファイル]-[新規]-[スペクトルライブラリ]タブを開きます。
- 4. 空白 lib をクリックし、OK ボタンを押します。

新規ファイルテンプレート	×
メソッド シーケンス サンプルプレップ スペクトルライブラリ レポート	
 OK キャンセル ヘルブ	

- 5. ミックスビュー画面の等高線表示またはクロマトグラム表示画面で、スペクトル登録したいピーク 位置にカーソルを移動し、スペクトルを表示します。
- 6. ミックスビュー(等高線表示)メニューの[操作]-[スペクトルをスペクトル ライブラリに追加]を 選択します。

đ	AD: スペ	クトルーミ	ックスビュー				
	表示		同期		整列	🌽 操作 🔚 オブション	
	200 -	: 39.2915 i	min, 波县: 283	i nm		ライブラリ検索 重複スペクトル 類似度 / 純度表示にピークを表示 マルチクロマトグラム テーブルに追加 スペクトルをスペクトル ライブラリに追加 1\	•

7. 追加ボタンを押し、閉じるボタンで画面を閉じます。

スペクトルをライ	(ブラリに追加			x
スペクトル:	39.29	min	進加	
ビント: 等高線ま カーソルをドラック	またはクロマトグラ ブしてスペクトル・	シム表示 を選択し	のスペクトル ます。	
	開じる			

- 8. スペクトルがライブラルに追加されます。この作業を繰り返し、必要なピークのスペクトルをライブ ラリファイルに追加します。
- 9. 下記のようにスペクトルライブラリ定義にスペクトルが追加されます。
- 10. コンポーネント名に成分名を入力します。

<u>ג ב</u>	ペクトルライブラリ定義						_ 🗆 🗵
	スペクトル データソース	コンポーネント名	波長元 (nm)	波長先 (nm)	種大波長 (nm)	時間 (min)	אלאב
1	D:\LC\Result\TIK\mobilephase	test1	190	400	252.0、300.0、	39.29	
2	D:\LC\Result\TIK\mobilephase	test2	190	400	392.0、290.0、	27.41	
3	D:\LC\Result\TIK\mobilephase	スペクトル @ 18.97 min	190	400	290.0、338.0、	18.97	
4							
							•

11. [ファイル]-[名前を付けて保存]-[スペクトルライブラリ]をクリックし、ファイル名を入力し、ファイ ルを保存します。

クイック検索

- 1. スペクトルライブラリを実施したいクロマトグラムデータを読み込みます。
- 2. ミックスビュー画面で、検索したいピークのスペクトルを選択し表示させます。
- 3. メニューから [操作] →[ライブラリ検索] を選択します。

 	検索: 	0イック <u></u> メソッド イック	4.	検索で	[クイック]	を選択します。	
パラメータ ブリフィルタ 波長範囲: 波長ステップ:	200.0 -	400.0 nm					
最大ヒット: 類似スレッショルド: ライブラ D:¥LO¥test.ii	3 D	B		5. フ; ブ [:]	ァイルアイコン ラリファイルを	ンをクリックし、保ィ 注読み込みます。	字したライ

メニューの [今すぐ検索] をクリックすると、ライブラリ検索が実行され、結果が表示されます。
 [結果の印刷]をクリックし出力先プリンタ等選択をするとライブラリ結果を印刷することができます。

パラメータやプリフィルタで波長範囲や検索時間範囲等の詳細設定が可能です。

4.純度

1. メソッドタスクに入り、ナビゲーションパネルから PDA オプションを選択します。純度タグをクリック

しま	す。			
- [■ PDA オプジョン			
	🗕 ライブラリ < 純度	📙 😽 געארא אין 📾 אוד	チクロマトグラム 🚾 比	
	─ 純度計算 ─────		ピークごとスペクトル計算	
	波長範囲:	2000 - 400.0	nm マトータル純度	
	波長ステップ:	1.0 nm	■3ポイントピーク純度	
	純度スレッショルド	0.990000		
	吸収スレッショルド	5.00 %		
	□ バックグラウンド補償			

- 2. 波長範囲や純度スレッショルド、純度チェックに利用する吸収の閾値(吸収スレッショルド) 等を設定します。
- 3. 表示タスクに入り、ナビゲーションパネルからミックスビューを選択します。
- 4. メニューのオプションをクリックし、ピーク純度プロットの表示を選択します。
- 5. 画面に右下に純度プロットが表示されます。
- 6. 画面左の等高線表示またはクロマトグラム表示で、純度確認をしたいピークにカーソルを合わせ、Ctrl キーを押しながらクリックします。純度結果が画面右下に表示されます。



 標準レポートを使用して、[レポートの挿入]-[純度レポート]を追加、またはインテリジェントレ ポート機能を利用し、[ピーク純度の結果]を追加したレポートテンプレート作成すると、そのテ ンプレートを使用してデータ採取と純度レポート作成を自動で行う事が可能です。

5.プロット比の表示

- 1. メソッドタスクに入り、ナビゲーションパネルから PDA オプションを選択します。比タグをクリックしま す。
- 2. 比を表示したい2波長を入力します。

ー PDA オプション			
📓 ライブラリ <	純度 😽 スペク	トル 🗠 マルチクロマトグラム 🗔 比	1
	波長	バント幅	
チャンネル 1:	260.0 nm	8.0 nm	
チャンネル 2:	280.0 nm	8.0 nm	
スレッショルド	1 mAU		

- 3. 表示タスクに入り、ナビゲーションパネルからプロット比を選択します。
- 4. 比クロマトグラムのプロットが表示されます。

6.標準レポートテンプレートの作成

3Dデータ(または等高線表示)を追加する。

- 1. メニューから[ファイル]-[開く]-[標準レポート]から標準レポートテンプレートを開きます。
- 3Dデータ(等高線表示)を追加したい場所をクリックし、[右クリック]-[図の挿入]-[3Dデ ータグラフ(等高線表示)]をクリックします。



マルチクロマトグラムで選択したクロマトグラムを追加する。

- 1. メニューから[ファイル]-[開く]-[標準レポート]から標準レポートテンプレートを開きます。
- 2. マルチクロマトグラムを追加したい場所をクリックし、[右クリック]-[図の挿入]-[クロマトグラム]を クリックします。
- 追加されたクロマトグラムをダブルクリックし、下記設定を行います。
 [データソース]:現在のデータ、[トレース]:マルチクロマトグラム xxx nm
- 4. [OK]をクリックします。

クロマトグラムのプロ	パティ ×
トレースの設定 軸の	設定 デザイン
# 表示 凡例	データソーストレース
	(現在のデータ)▶マルチクロマトグラム 1 (1: 200.0▶)ノーマラ
	N N
┃ □□□□ □ ┌─トレース1 詳細	2
データソース:	(現在のデータ) 😂
チャンネル(T):	マルチクロマトグラム 1 (1: 200.0 nm, 4.0 nm) 🔍
スケール(C):	ノーマライズ
Y最小(N):	0 Y最大(M): 0
単位(U):	mAU
Xオフセット(0):	0 X比(X): 1
Yオフセット(F):	0 Y比(Y): 1 注釈(N)
	詳細の非表示(H) スケールリセット(R)
	OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

※プロット比を追加する場合は、[トレース]:プロット比を選択してください。