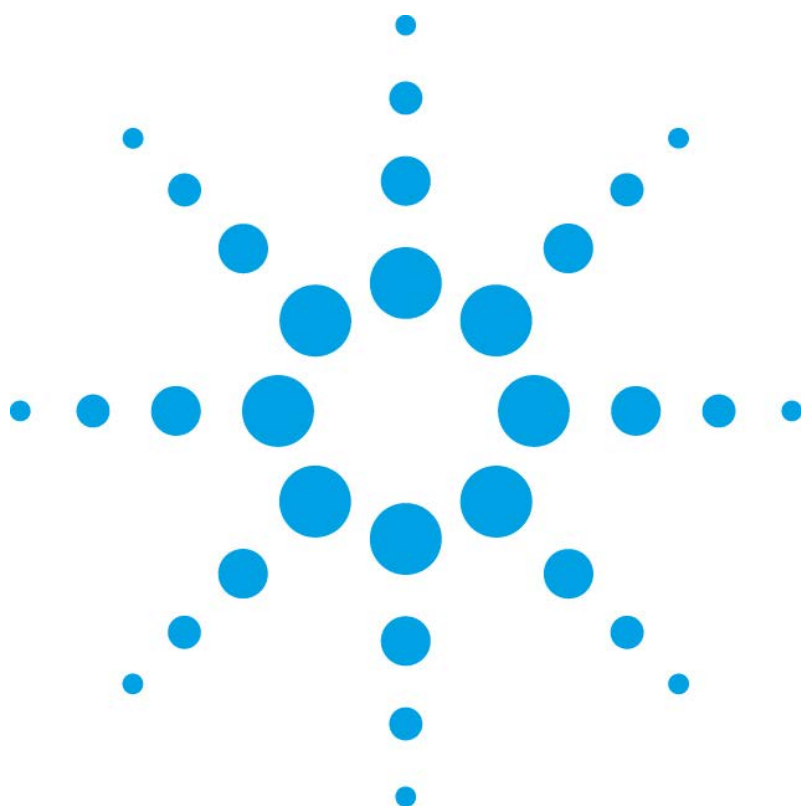


**Agilent OpenLAB CDS ChemStation GC版
基本操作マニュアル
(C.01.04対応)**



Agilent Technologies

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

AT2A4A14

エディション

第1版, 2013年2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.01.04 [35]

GC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 Open LAB コントロールパネルの概要

1-1. OpenLAB コントロールパネルの起動	1-2
1-2. OpenLAB コントロールパネルの画面構成	1-2
1-3. 管理タブ	1-3
1-4. ライセンス	1-3
1-5. 機器タブ	1-5
1-6. 機器コンフィグレーション	1-6

第 2 章 システムの起動・終了と画面構成

2-1. システム起動のフロー	2-2
2-2. 機器の電源投入	2-3
2-3. オンラインソフトウェアの起動	2-4
2-4. オンラインヘルプとマニュアル	2-6
2-5. 画面構成	2-6
2-6. メソッド&ランコントロール画面	2-7
2-6-1. GC 機器ダイアグラム	2-7
2-6-2. オンラインプロット	2-8
2-6-3. 機器の実測値	2-8
2-6-4. ケミステーションステータス	2-9
2-6-5. サンプルダイアグラム	2-10
2-6-6. メソッド&ランコントロール画面全体	2-10
2-7. データ解析画面	2-11
2-8. プレファレンス設定でのパスの設定	2-12
2-9. システム終了のフロー	2-13
2-10. 加熱部と検出器のオフ	2-14
2-11. クールダウンメソッドの作成	2-15
2-12. 機器の停止	2-16

第 3 章 マスターメソッドの作成

3-1. マスターメソッドの作成のフロー	3-2
3-2. GC コンフィグレーション	3-3
3-3. メソッド変換	3-4
3-4. 機器コンフィグレーションの編集	3-4
3-5. コンフィグレーション	3-6
3-5-1. カラムの設定	3-7
3-5-2. モジュールの設定	3-9
3-5-3. ALS の設定	3-9
3-5-4. その他の設定	3-10
3-6. メソッド編集の開始	3-11
3-6-1. メソッド情報の設定	3-11
3-6-2. 試料導入方法の設定	3-12
3-6-3. GC のパラメータ編集	3-12
3-6-4. オープン温度の設定	3-14
3-6-5. カラム流量の設定	3-15
3-6-6. 注入口の設定	3-16
3-6-7. 検出器の調整	3-17
3-6-8. シグナルの設定	3-18
3-6-9. オートサンプリングの設定	3-19
3-6-10. AUX の設定	3-23

3-6-11. READY 状態の確認	3-24
3-7. シグナルの詳細	3-24
3-8. 積分イベント	3-25
3-9. レポート条件	3-26
3-10. ランタイムチェックリスト	3-27
3-11. メソッドの保存	3-28
3-12. プレファレンスの設定	3-30
3-13. メソッドの印刷方法	3-32
3-14. eMethod (エクスポート)	3-33
3-15. eMethod (インポート)	3-35

第4章 測定の実行とログブック

4-1. 測定の実行のフロー	4-2
4-2. メソッドの実行 (ランメソッド)	4-3
4-2-1. メソッドの読み込み	4-3
4-2-2. サンプル情報の設定	4-4
4-2-3. メソッドの実行	4-5
4-3. シーケンスの実行	4-6
4-3-1. データフォルダの設定	4-7
4-3-2. シーケンステーブルの設定	4-9
4-3-3. シーケンスパラメータの設定	4-12
4-3-4. シーケンスファイルの保存	4-13
4-3-5. シーケンスの実行	4-14
4-3-6. カスタムフィールドの設定	4-15
4-4. ログブックの確認	4-21

第5章 データ解析

5-1. データ解析のフロー	5-2
5-2. オフラインソフトウェアの起動	5-3
5-3. データ解析画面の概要	5-3
5-4. データの読み込み	5-4
5-4-1. ナビゲーションパネルからの読み込み	5-4
5-4-2. メニューからの読み込み	5-5
5-5. データ取り込みメソッドの表示	5-7
5-6. グラフィックスメニューでのウィンドウ表示	5-7
5-7. クロマトグラム表示に注釈を追加	5-8
5-8. 積分	5-9
5-8-1. 自動積分	5-9
5-8-2. 積分条件を変更して積分	5-10
5-8-3. タイムプログラム/積分イベント追加の設定	5-12
5-8-4. 積分実行	5-13
5-8-5. 積分結果表示	5-14
5-9. マニュアル積分	5-14

第6章 定量

6-1. 定量計算のフロー	6-2
6-2. 検量線作成の準備	6-3
6-3. 新規検量線テーブルの作成	6-3
6-4. 検量線 (絶対検量線) の作成	6-3
6-5. 多点検量線の作成	6-5
6-6. 検量線の条件設定	6-7

6-7. 定量レポートの出力	6-8
6-8. メソッドの保存	6-11
6-8-1. マスターメソッドを編集した場合	6-11
6-8-2. シーケンスメソッドを編集した場合	6-11
6-9. レポートの印刷	6-11
6-10. リキャリブレーション	6-12
6-11. 内部標準法 (ISTD) による定量	6-13
6-12. 定量レポートの出力	6-15

第7章 データ解析のモード

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. 結果セット	7-4
7-2-2. 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
7-4. 前回の結果モード (DA.M を使用)	7-7

第8章 再解析モードにおける結果セットのシーケンス解析

8-1. 結果セットの再解析	8-2
8-2. シーケンスサマリレポート	8-2
8-3. シーケンス再解析の実行	8-4
8-4. 異なるメソッドでのシーケンス再解析	8-4
8-5. 結果セットの新規作成	8-5

第9章 再計算モードにおけるデータ解析

9-1. 再計算モードでの解析	9-2
9-2. 前回の結果モード (DA.M を使用) での再計算	9-3

第10章 レビュー画面

10-1. シングルランのレポート表示	10-2
10-2. 結果セットのレポート表示	10-3
10-3. 結果セットのサマリレポート表示	10-3

第11章 レポートの概要

11-1. クラシックレポートの概要	11-2
11-2. インテリジェントレポートの概要	11-3

付録A オートインジェクタの切り替え方法

付録B PC のメンテナンス



第1章

Open LAB コントロールパネルの概要

1-1. OpenLAB コントロールパネルの起動	1-2
1-2. OpenLAB コントロールパネルの画面構成	1-2
1-3. 管理タブ	1-3
1-4. ライセンス	1-3
1-5. 機器タブ	1-5
1-6. 機器コンフィグレーション	1-6

1. Open LAB 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では、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。

なお、詳細については、インストールメディアのディスク 1 の¥Docs¥JPN の中に保存されているマニュアルも参照してください。

1-1. OpenLAB コントロールパネルの起動

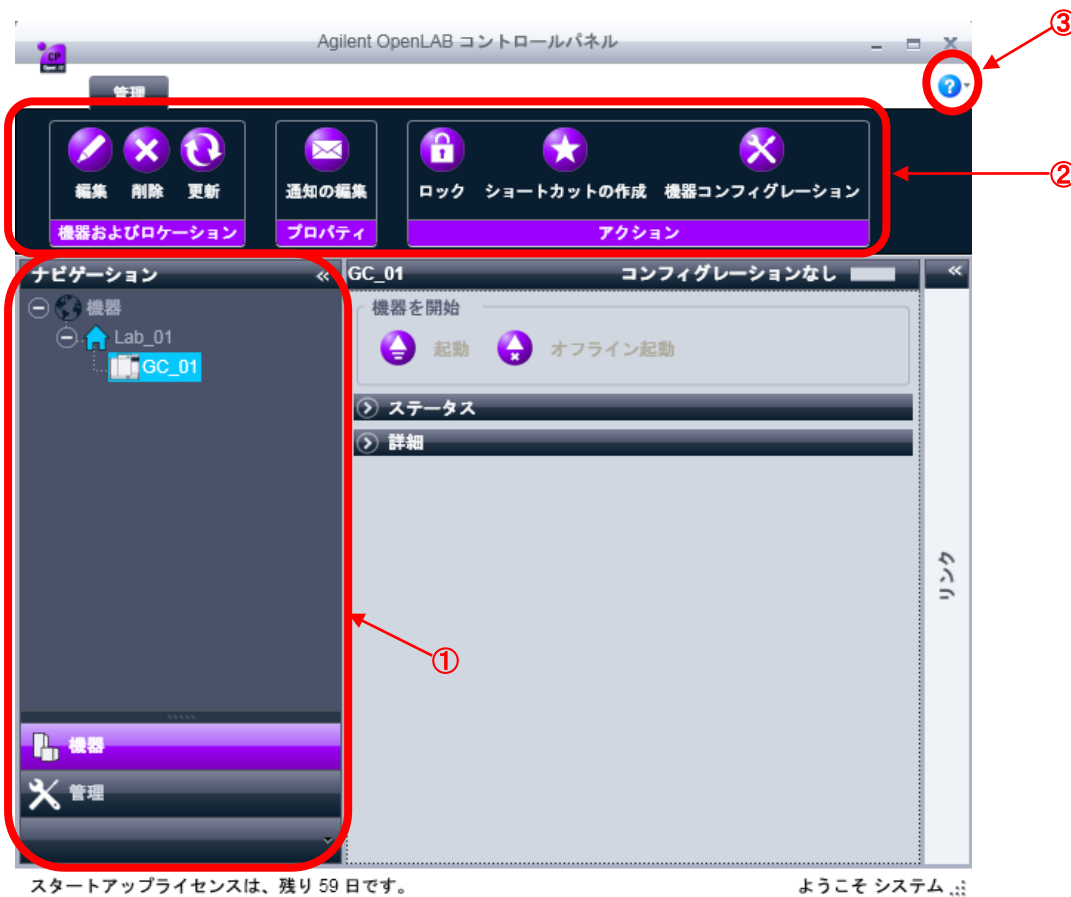
画面上のショートカットをダブルクリックするか、あるいは、Windows のメニューから[スタート]－[すべてのプログラム]－[Agilent Technologies]－[OpenLAB]－[OpenLAB Control Panel]を選択します。



1-2. OpenLAB コントロールパネルの画面構成

OpenLAB コントロールパネルは、据付時にセットアップが完了していれば、通常の手続きにおいて、特に変更するところはありません。

ここでは、ユーザー管理やロール（権限）などを管理できます。なお、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 ナビゲーション（機器タブと管理タブ）
- ② 上部リボン（ナビゲーションに応じたアクションボタン）
- ③ オンラインヘルプボタン

1-3. 管理タブ

管理タブをクリックして表示され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、上部リボンで編集が可能ですが、通常は据付時の設定のままで、ご使用ください。

なお、ユーザー管理やロール（権限）などの管理をされない場合は、認証プロバイダーを「なし」に設定して使用してください。その他の認証プロバイダを選択する場合は、あらかじめ OS のユーザー設定やドメインサーバーの設定などが必要になります。



1-4. ライセンス

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作成されており、他の PC で使用することはできません。

他の PC で使用する場合や、PC の修理などで MAC アドレスが変更された場合は、再度ライセンスファイルを取得する必要があります。

注意

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及び機器コントローラと通信ができなくなり、システムが使用できなくなります。

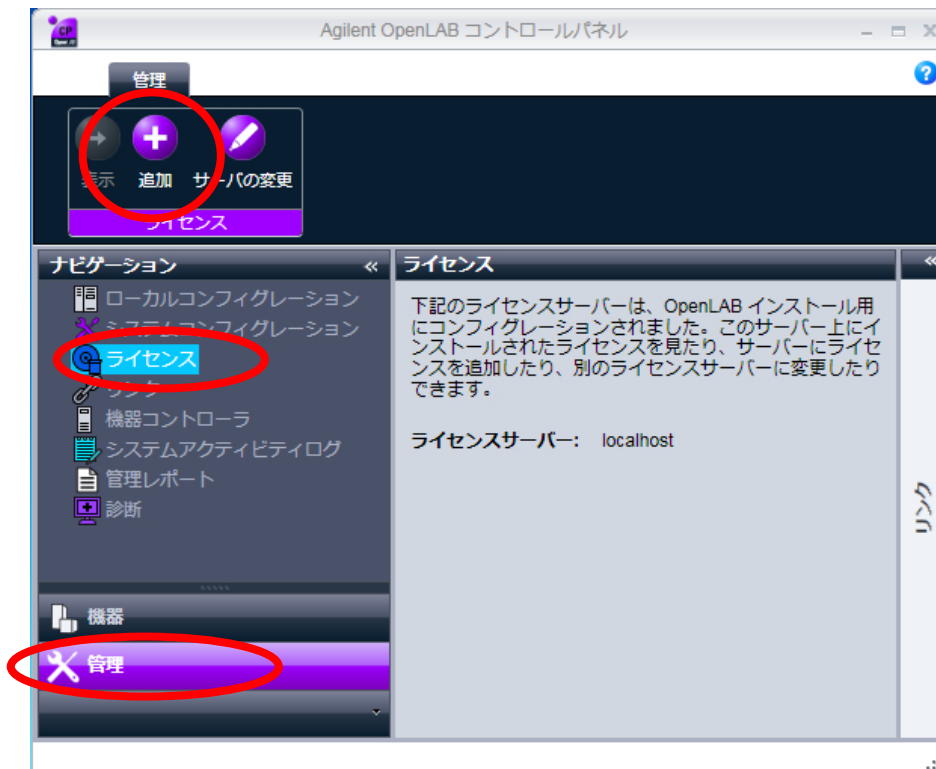
お客様がご購入されたライセンスファイルは、Agilent Subscribe Net サイトでオンライン管理されており、ライセンスファイルへのアクセスは、据付時に登録されたお客様か、Agilent の許可されたエンジニアのみが可能となっております。

納入されたソフトウェアの Authorization Code は、ライセンスを再度取得する際に必要となりますので、大切に保管しておいて下さい。

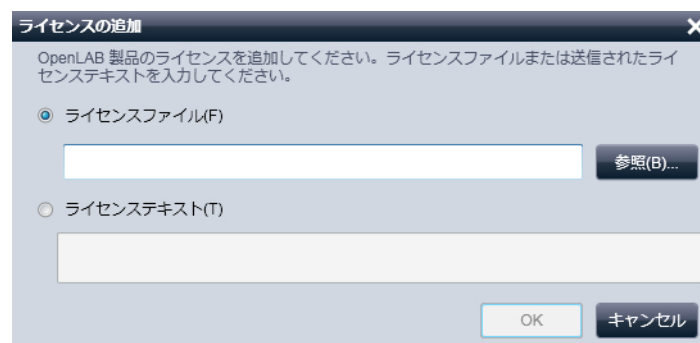
ライセンスファイルは、上部リボンの追加ボタンで登録することができます。[管理タブ] - [ライセンスを選択] - [追加ボタン] を選択してください。

注意

通常は、この操作を行う必要はありません。この操作は、据付時に実施します。



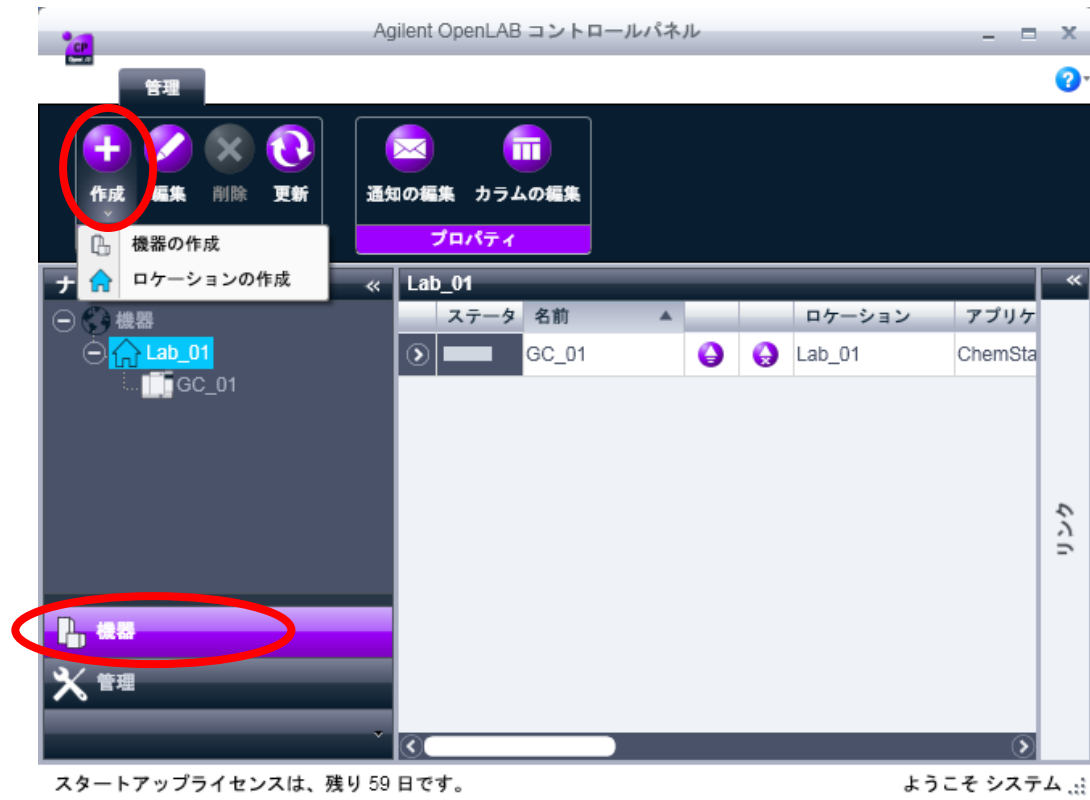
参照 ボタンをクリックしてライセンスファイルを選択し、登録することができます。



1-5. 機器タブ

機器タブをクリックして表示されるナビゲーションでは、右画面にケミステーションの起動ボタンや、機器のステータスなどが表示されます。

機器を構成するには、ロケーション（例：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（例：GC_01 など）と機器タイプ（Agilent 7890 GC System）を設定すると、ロケーションに機器が作成されます。



編集 GC_01

名前: GC_01

説明: Agilent 7890A GC

アプリケーション: ChemStation

機器コントローラ: XPJSP3

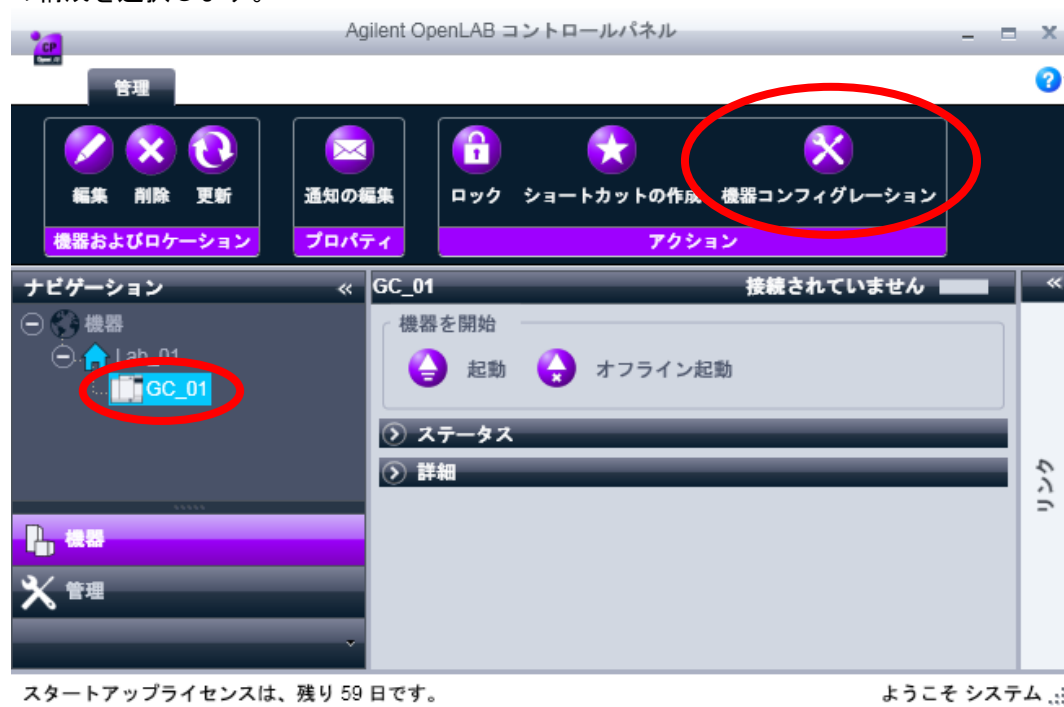
機器タイプ: Agilent 7890 GC System

連絡先:

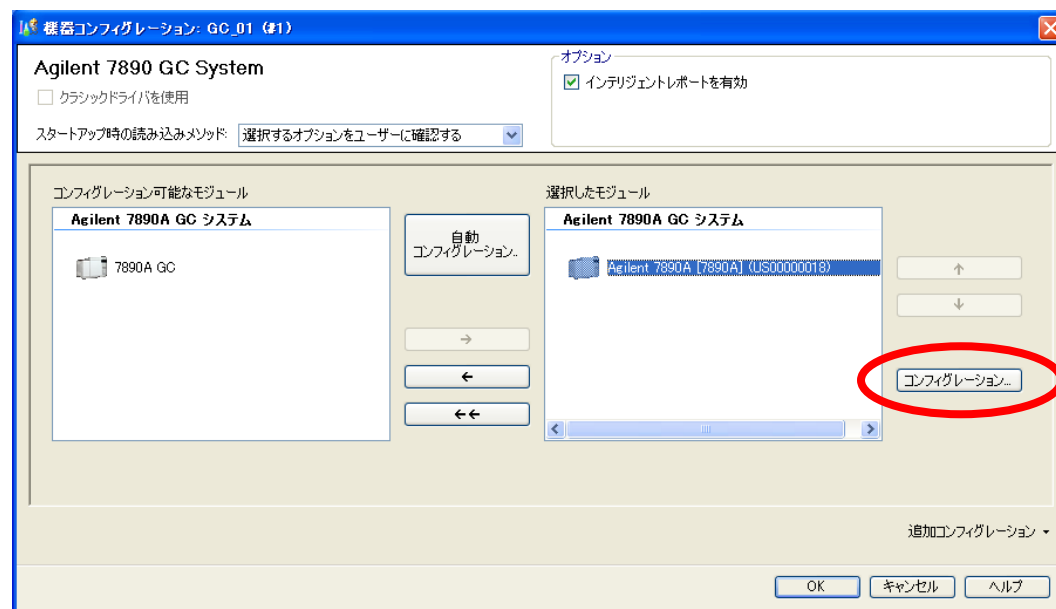
OK キャンセル

1-6. 機器コンフィグレーション

1-5. で作成した機器を選択して、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。



機器のコンフィグレーション（IP アドレスの設定など）は、[コンフィグレーション] をクリックと設定することができます。





注意

機器のコンフィグレーションについては、2－3. 及び 3－4. を参照してください。

機器のコンフィグレーションが完了している状態では、ケミステーションのオンラインソフトウェアとオフラインソフトウェアの起動が可能です。ただし、オンラインソフトウェアとオフラインソフトウェアを同時に使用する場合、オンラインソフトウェアを先に起動してください。

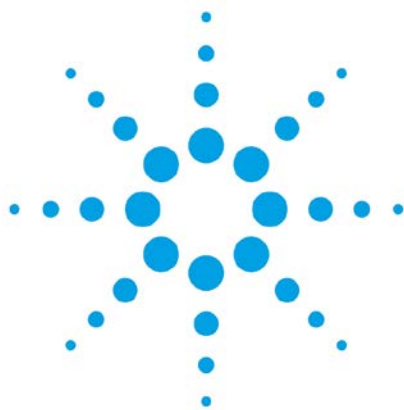
注意

オンラインソフトウェアは機器コントロール用で、オフラインソフトウェアはデータ解析用です。

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及び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。







第2章 システムの起動・終了と画面構成

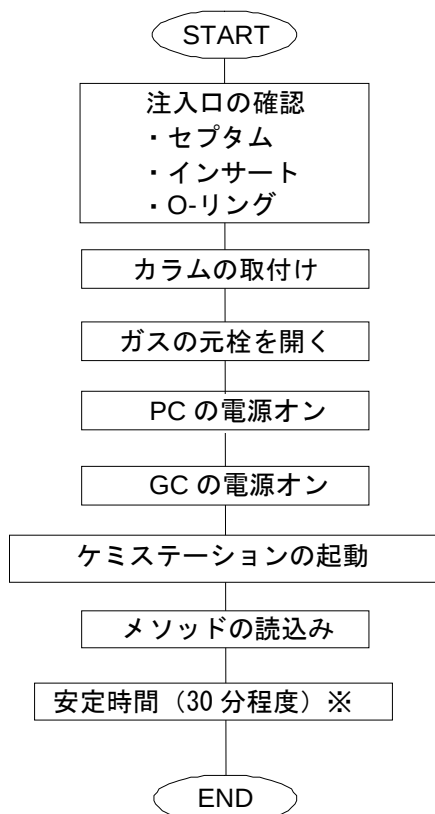
2-1. システム起動のフロー	2-2
2-2. 機器の電源投入	2-3
2-3. オンラインソフトウェアの起動	2-4
2-4. オンラインヘルプとマニュアル	2-6
2-5. 画面構成	2-6
2-6. メソッド&ランコントロール画面	2-7
2-6-1. GC 機器ダイアグラム	2-7
2-6-2. オンラインプロット	2-8
2-6-3. 機器の実測値	2-8
2-6-4. ケミステーションステータス	2-9
2-6-5. サンプルダイアグラム	2-10
2-6-6. メソッド&ランコントロール画面全体	2-10
2-7. データ解析画面	2-11
2-8. プレファレンス設定でのパスの設定	2-12
2-9. システム終了のフロー	2-13
2-10. 加熱部と検出器のオフ	2-14
2-11. クールダウンメソッドの作成	2-15
2-12. 機器の停止	2-16

2. システムの起動・終了と画面構成

この章では、システムを起動する時と終了する時の手順について説明します。

詳細については「GC and GC/MS Hardware User Information& Utilities」や、ケミステーションに付属している「入門ガイド」などを参照してください。

2-1. システムの起動のフロー



※ 検出器の種類によっては、さらに安定時間の必要な場合があります。

2-2. 機器の電源投入

PC と周辺機器（モニタ及びプリンタなど）の電源を下記の順序で入れます。

```

    プリンタおよびモニター
      ↓      インシャライズを確認する
    コンピュータ
      ↓      インシャライズを確認する
  Windows の起動
  
```

Windows の起動時にログオンするための画面が表示されますので、ユーザー名とパスワードを入力します。ユーザー名とパスワードは下表のとおりです。

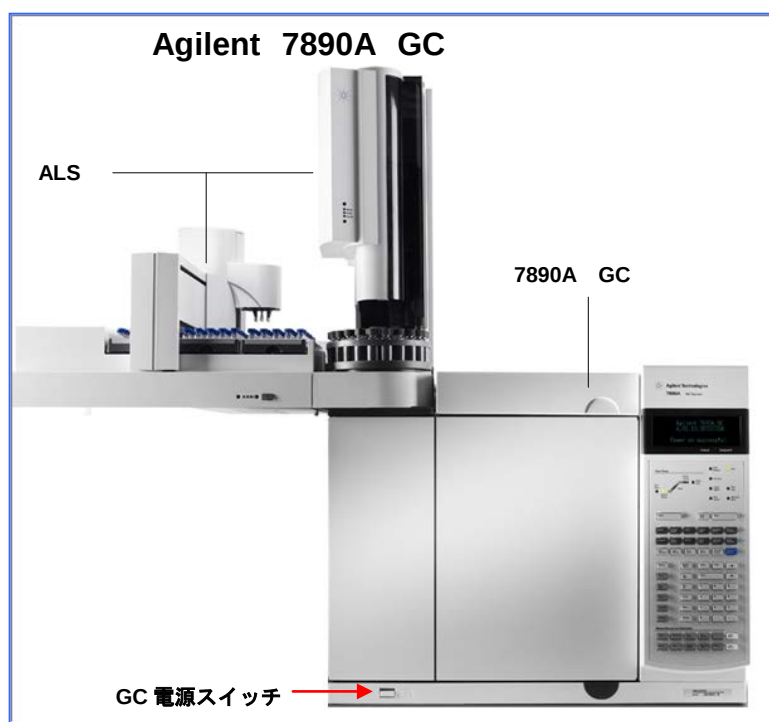
Windows XP の場合

ユーザー名	パスワード	
Administrator	3000hanover	システムを変更する権限を持っています。通常こちらを使用します。
Chemist	Hp	システムを変更する権限はもっていません。

Windows 7 の場合

ユーザー名	パスワード	
Admin	3000hanover	システムを変更する権限を持っています。通常こちらを使用します。
Chemist	Hp	システムを変更する権限はもっていません。

注入口セプタムとインサート、カラムなどが正しく取り付けられていることを確認して、GCの電源を入れます。



2-3. 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、デスクトップ上のオンラインショートカットをダブルクリックします。



注意

オンラインソフトウェアは機器コントロール用で、オフラインソフトウェアはデータ解析用です。オンラインとオフラインを同時に使用する場合は、必ずオンラインソフトウェアを先に起動しておいてください。



ケミステーションを起動すると、以下の画面が表示されますので、メソッド読み込みのオプションを選択します。通常は「機器へ書き込み」を選択します。



注意

「機器へ書き込み」を選択すると、前回ケミステーションを終了する直前に選択されていたメソッドが GC に転送されます。そのため、システムを停止する場合には、毎回クールダウン用のメソッドを読み込んだ後、ケミステーションを終了することを推奨します。クールダウン用のメソッドを読み込んでおくことにより、キャリアガスによるカラム内の置換が不十分な状態で、オープン、注入口、検出器などが加熱されてしまう可能性を回避できます。なお、クールダウン用メソッドの作成手順については、2-10. 及び2-11. を参照してください。

注意

「機器から読み込み」を選択すると、前回ケミステーションを終了する直前に選択されていたメソッドに、GC 本体の設定値が読み込まれます。ケミステーションを終了した後、GC 本体から設定値を変更した場合に、その状態を保持したままケミステーションを起動したい時に使用します。ただし、このオプションを選択すると、必ずメソッドが編集されることとなりますので、メソッドを実行する前にメソッドの上書き保存、あるいはキャンセルして別のメソッドを読み込み直す必要があります。

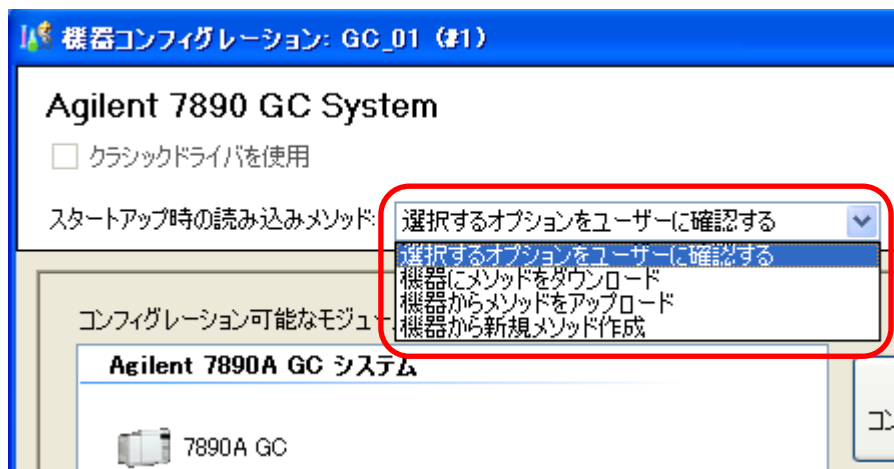
注意

「機器から新規メソッド」を選択すると、デフォルトメソッド（DEF_GC.M）が読み込まれます。デフォルトメソッド（DEF_GC.M）は削除したり、移動したりしないでください。

この画面を毎回表示させないようにするためには、OpenLAB コントロールパネルの機器のパネルから「機器コンフィグレーション」をダブルクリックします。



「選択するオプションをユーザーに確認する」以外の項目を選択すれば、オンラインソフトウェア起動時に「メソッド読み込みオプションの選択」画面は表示されません。



2-4. 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 [F1] 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。

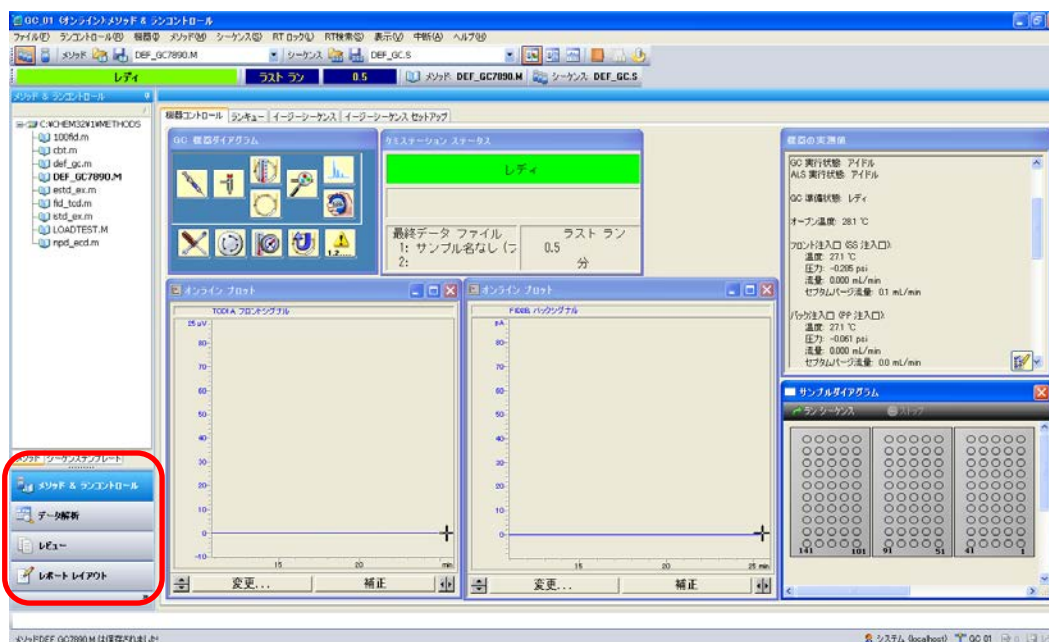
また、インストールメディアのディスク 2 の¥Docs¥JPN に保存されているマニュアル（「操作原理」及び「コンセプトとワークフロー」）も参照してください。

2-5. 画面構成

ソフトウェアは、次の 4 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

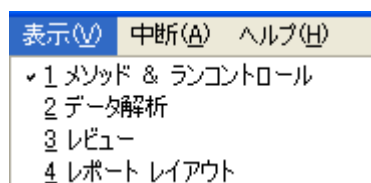
画面の切り替えは、左下の画面切り替えのボタンをクリックします。



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。



メニューの「表示」の中で選択することにより、画面を切り替えることもできます。日常使用する画面は「メソッド&ランコントロール」と「データ解析」です。

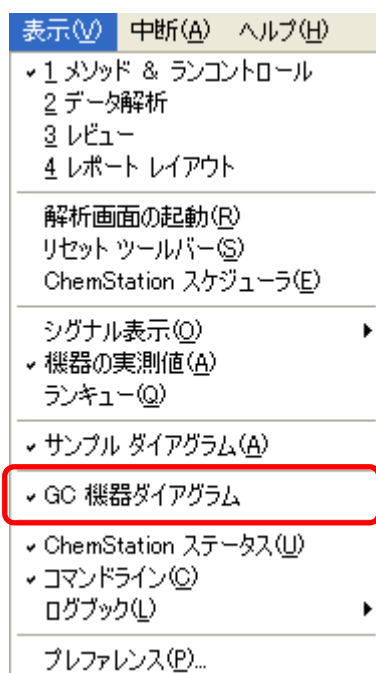


2-6 メソッド&ランコントロール画面

「メソッド&ランコントロール画面」に表示する項目は「表示」の中で設定します。

2-6-1. GC 機器ダイアグラム

設定 GC パラメータのアイコン群を表示します。



2-6-2. オンラインプロット 検出器の出力をプロットします。

表示(V) 中断(A) ヘルプ(H)

- ✓ 1 メソッド & ランコントロール
- 2 データ解析
- 3 レビュー
- 4 レポート レイアウト

解析画面の起動(R)
リセット ツールバー(S)
ChemStation スケジューラ(E)

シグナル表示(Q) ▶

シグナル ウィンドウ 1(1)
シグナル ウィンドウ 2(2)

- ✓ 機器の実測値(A)
ランキュー(Q)

✓ サンプル ダイアグラム(A)

✓ GC 機器ダイアグラム

✓ ChemStation ステータス(U)
✓ コマンドライン(C)
ログブック(L) ▶

プリファレンス(P)...



2-6-3. 機器の実測値 機器の実測値を表示します。

表示(V) 中断(A) ヘルプ(H)

- ✓ 1 メソッド & ランコントロール
- 2 データ解析
- 3 レビュー
- 4 レポート レイアウト

解析画面の起動(R)
リセット ツールバー(S)
ChemStation スケジューラ(E)

シグナル表示(Q) ▶

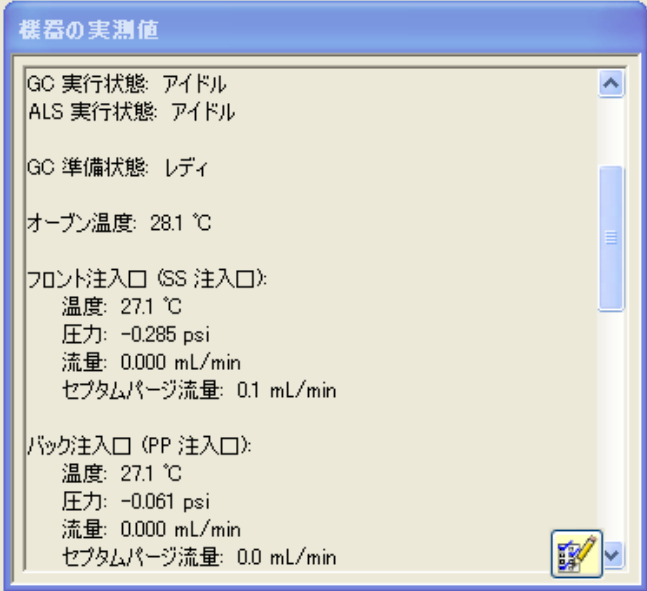
✓ 機器の実測値(A)
ランキュー(Q)

✓ サンプル ダイアグラム(A)

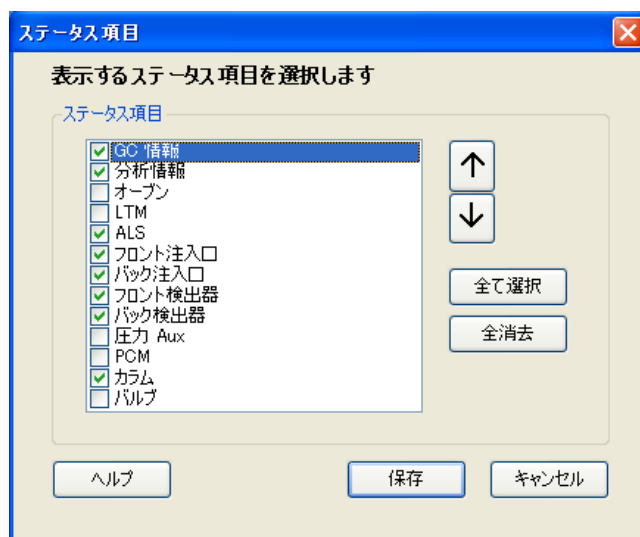
✓ GC 機器ダイアグラム

✓ ChemStation ステータス(U)
✓ コマンドライン(C)
ログブック(L) ▶

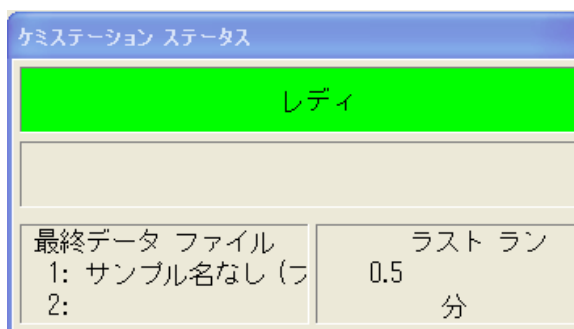
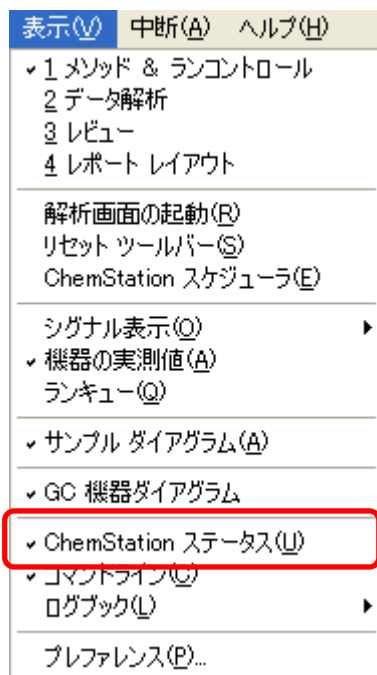
プリファレンス(P)...



機器の実測値のウィンドウ内の  アイコンをクリックすると、ステータス項目が表示されますので、表示させたい項目をチェックして「保存」をクリックします。

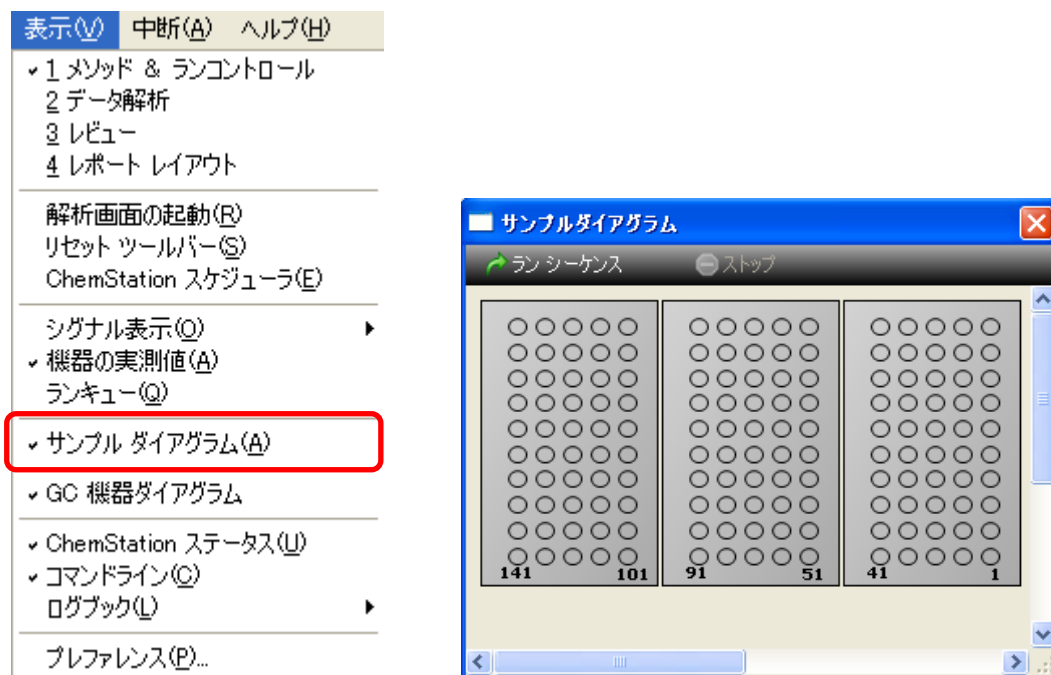


2-6-4. ケミステーションステータス ケミステーションステータスを表示します。

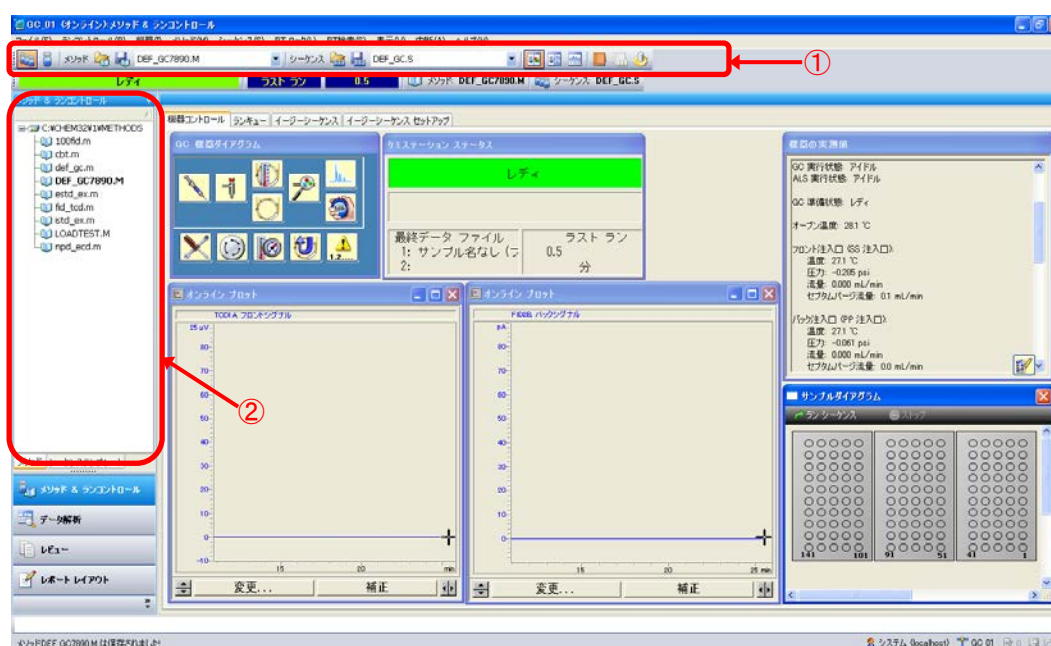


2-6-5. サンプルダイアグラム

オートサンプラのダイアグラムを表示します。



2-6-6. メソッド&ランコントロール画面全体

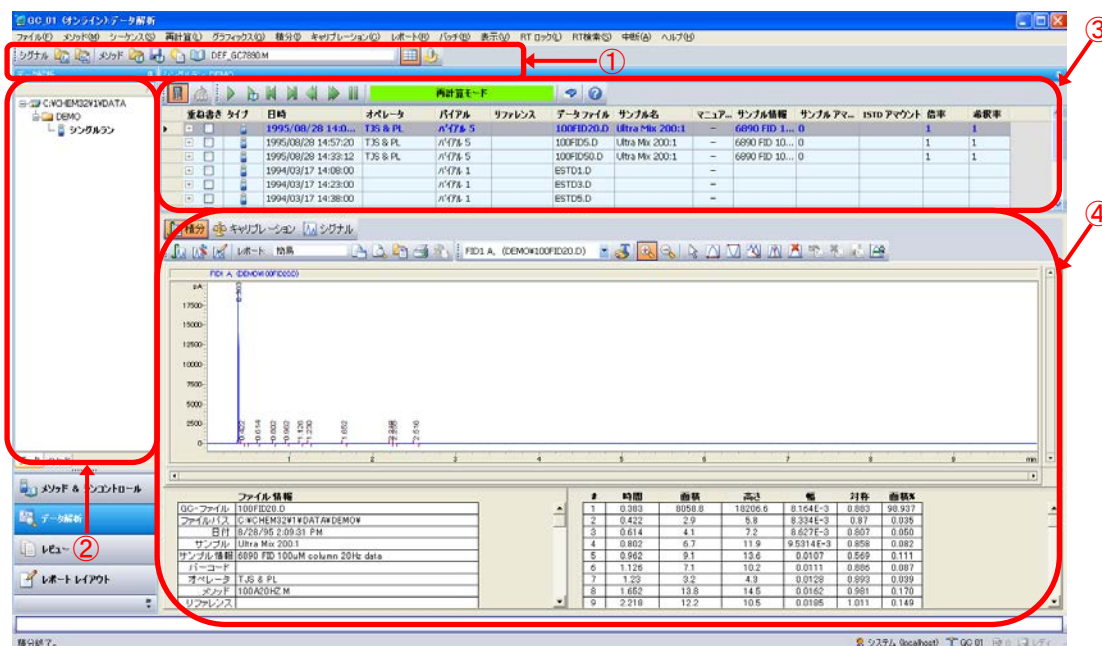


- ① ツールバー：現在のマスターメソッド、シーケンステンプレートを表示しています。
- ② ケミステーションエクスプローラ：マスターメソッドとシーケンステンプレートを読み込ませることができます。右クリックでメニューが表示されます。なお、メソッドのタブと、シーケンステンプレートのタブでツリー表示を切り替えることができます。

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。

現在のログブック ファイルINSTR1.LOG				
モジュール	#	イベントメッセージ	日付	時間
メソッド		メソッド DEF_GC7890.M 保存中	2012/10/17	17:21:00
CPコマンド		キューの項目サンプル名なしのステータスが完了に変わりました:	2012/10/17	16:56:16
メソッド		メソッド終了	2012/10/17	16:56:16
メソッド		メソッド DA.M 保存中	2012/10/17	16:56:14
CPマクロ		生データサンプル名なし(フロント) 2012-10-17 16:54:33.D データ解析	2012/10/17	16:56:14
メソッド		測定終了	2012/10/17	16:56:10

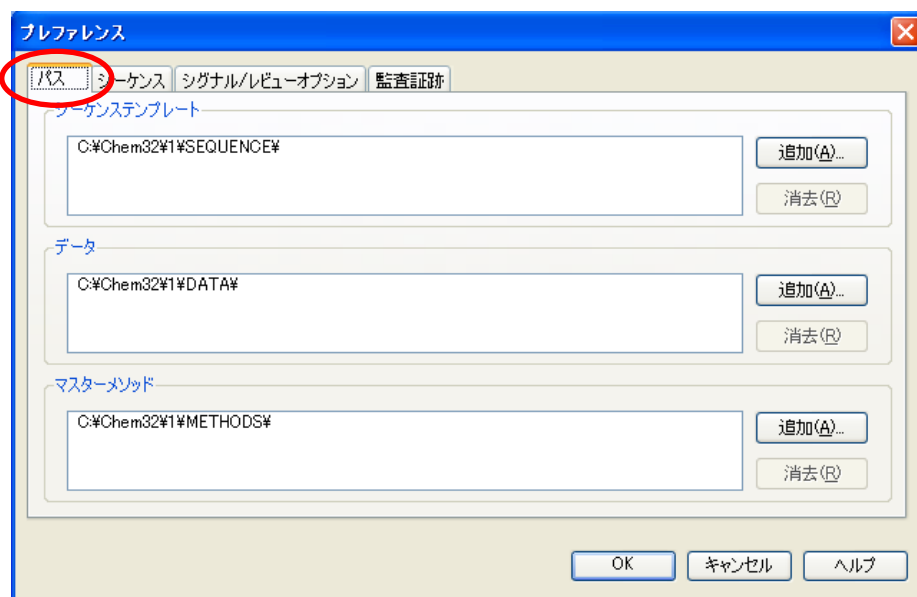
2-7. データ解析画面



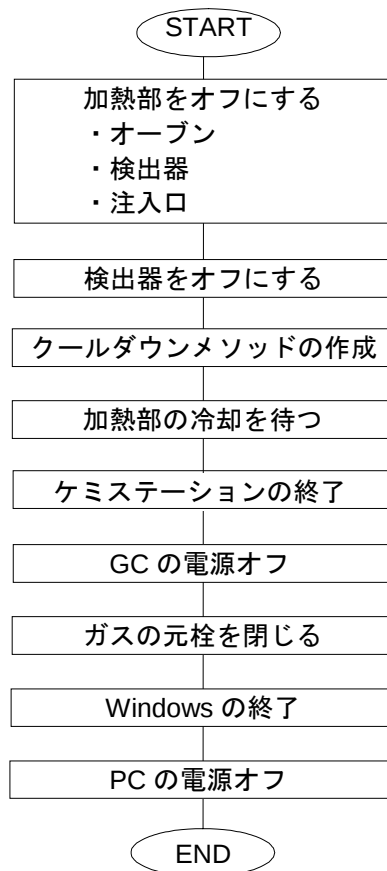
- ① ツールバー：現在の解析メソッドを表示しています。
- ② ケミステーションエクスプローラ：データ群や解析メソッドを読み込ませることができます。右クリックでメニューが表示されます。
- ③ ナビゲーションテーブル：読み込まれた一連のデータを表示します。1行が1つの測定データを示します。
- ④ クロマトグラムウインドウ：読み込まれたデータのクロマトグラムを表示します。

2-8. プレファレンス設定でのパスの設定

メニューから[表示] - [プリファレンス]の[パス]のタブを選択すると、シーケンステンプレート、データ及び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、ケミステーションエクスプローラのツリー表示に現われるようになります。



2-9. システムの終了のフロー



2-10. 加熱部と検出器のオフ

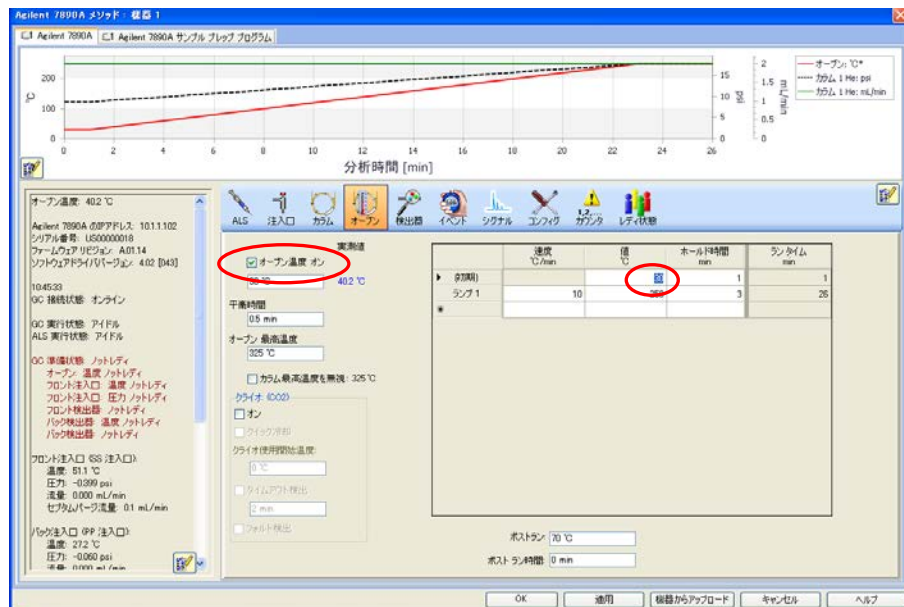
システムを停止する場合、加熱部をオフにし、電源をオフにする準備をします。

(1) オープン温度



①  をクリックします。

② オープンの初期温度の「値」欄に、冷却に適切な値（例：30℃）を入力します。



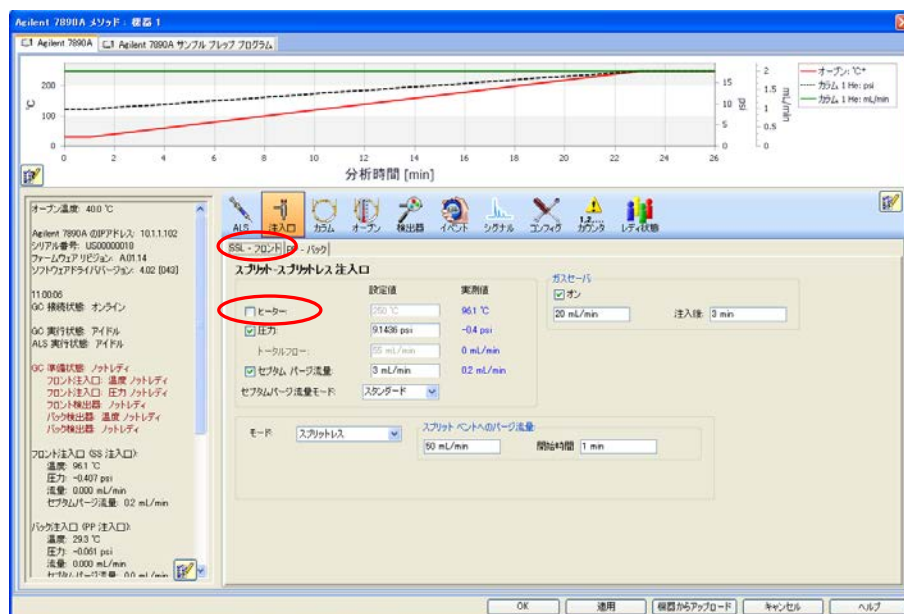
通常、オープンは低い温度に設定し、オンの状態にしておきますが、必要に応じてオフに設定します。

(2) GC 注入口の温度

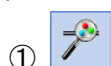


①  をクリックします。

② 使用している注入口のタブをクリックし「ヒーター」のチェックを外します。
「圧力」のチェックは外さないでください。

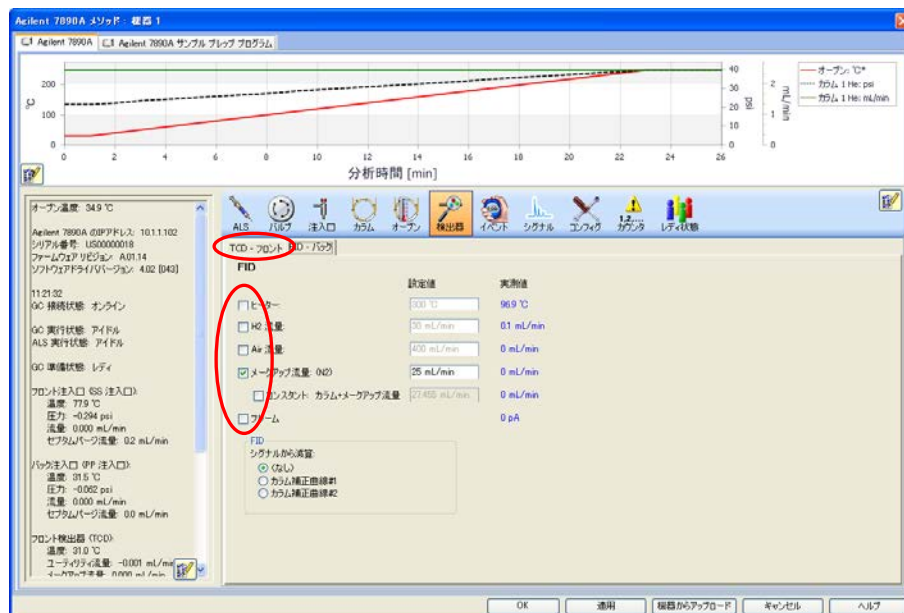


(3) 検出器



① をクリックします。

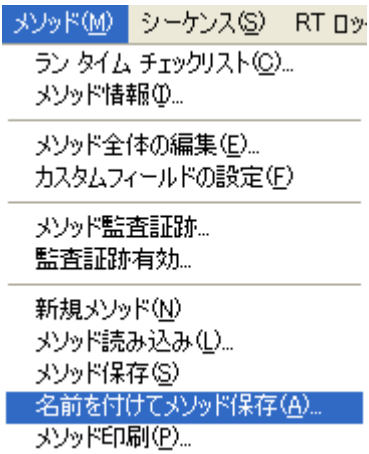
② 使用している検出器のタブをクリックし [メークアップ流量] のみ、チェックを付けます。



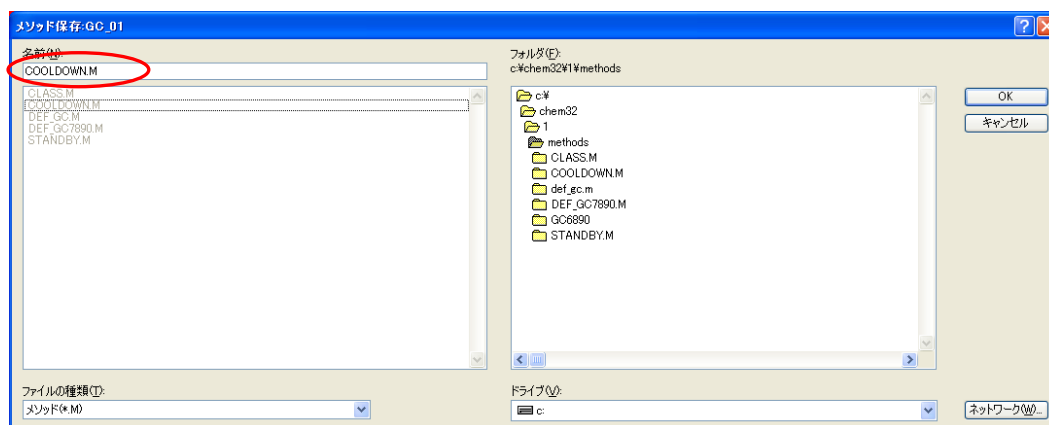
最後に [OK] をクリックします。

2-11. クールダウンメソッドの作成

[メソッド] - [名前を付けてメソッド保存] をクリックします。



名前を COOLDOWN.M に変更し [OK] をクリックします。



2-12. 機器の停止

- (1) 必要に応じて、ケミステーションを終了します。
- (2) 必要に応じて、GCの電源をオフにします。また、キャリアガスやその他のガスの元栓を閉じます。



注意

カラムにダメージを与えないよう、GCの電源をオフにする前に、オーブン、注入口、検出器などが十分に冷却されていることを確認します。

- (3) Windowsタスクバーの〔スタート〕ボタンから〔シャットダウン〕をクリックしてWindowsを終了します。
- (4) PC、モニタ及びプリンタの電源をオフにします。





第3章 マスターメソッドの作成

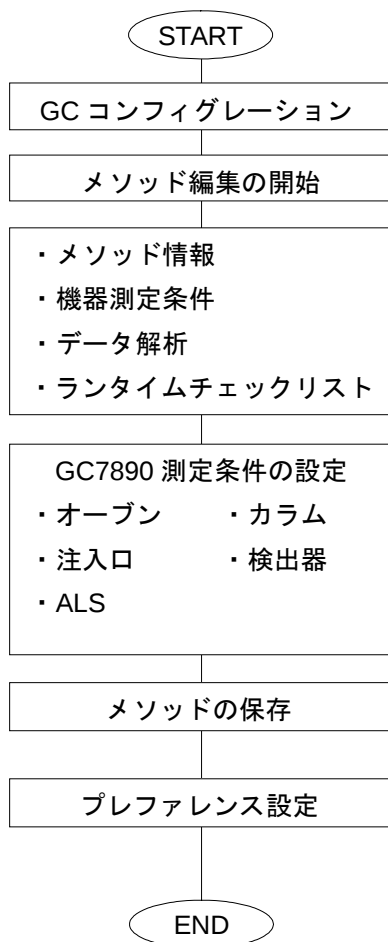
3-1. マスターメソッドの作成のフロー	3-2
3-2. GC コンフィグレーション	3-3
3-3. メソッド変換	3-4
3-4. 機器コンフィグレーションの編集	3-4
3-5. コンフィグレーション	3-6
3-5-1. カラムの設定	3-7
3-5-2. モジュールの設定	3-9
3-5-3. ALS の設定	3-9
3-5-4. その他の設定	3-10
3-6. メソッド編集の開始	3-11
3-6-1. メソッド情報の設定	3-11
3-6-2. 試料導入方法の設定	3-12
3-6-3. GC のパラメータ編集	3-12
3-6-4. オープン温度の設定	3-14
3-6-5. カラム流量の設定	3-15
3-6-6. 注入口の設定	3-16
3-6-7. 検出器の調整	3-17
3-6-8. シグナルの設定	3-18
3-6-9. オートサンブラの設定	3-19
3-6-10. AUX の設定	3-23
3-6-11. READY 状態の確認	3-24
3-7. シグナルの詳細	3-24
3-8. 積分イベント	3-25
3-9. レポート条件	3-26
3-10. ランタイムチェックリスト	3-27
3-11. メソッドの保存	3-28
3-12. プレファレンスの設定	3-30
3-13. メソッドの印刷方法	3-32
3-14. eMethod (エクスポート)	3-33
3-15. eMethod (インポート)	3-35

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。

マスターメソッドは、測定条件の指示書の役割を果たします。この中には、GC によるデータ採取から解析までの一連の条件が含まれます。

3-1. マスターメソッドの作成のフロー



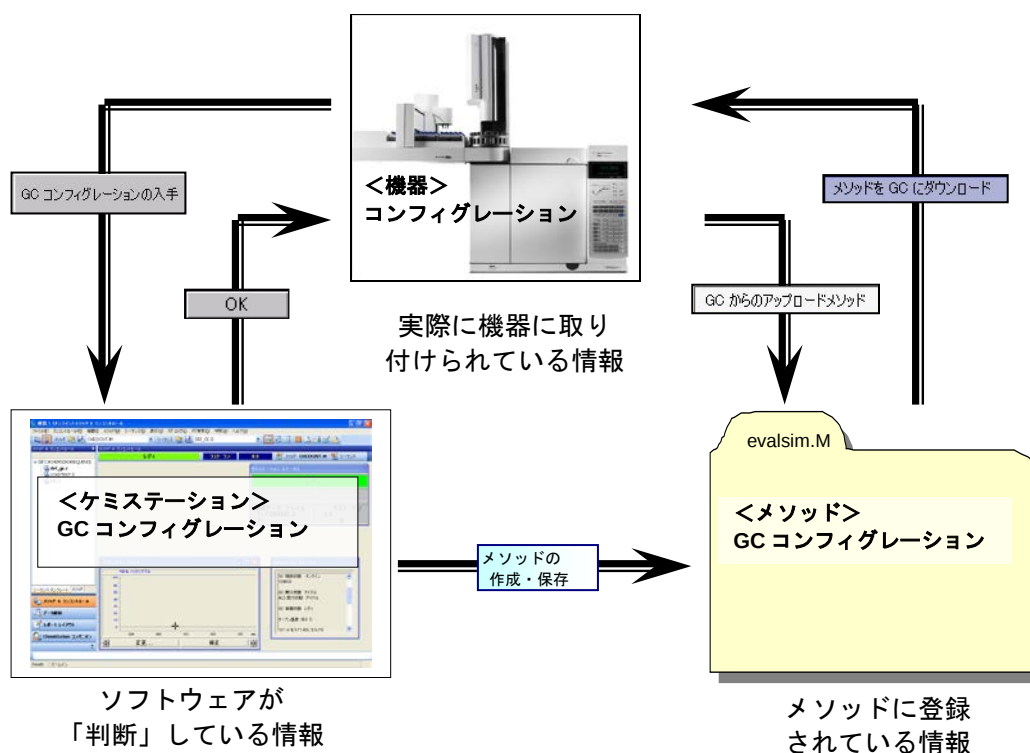
3-2. GC コンフィグレーション

機器にインストールされたハードウェア（注入口、検出器など）やリソース（カラム、ガスなど）をコンフィグレーションと呼びます。

一方、ケミステーションが GC に付属していると「判断」しているコンフィグレーションを「GC コンフィグレーション」と呼びます。

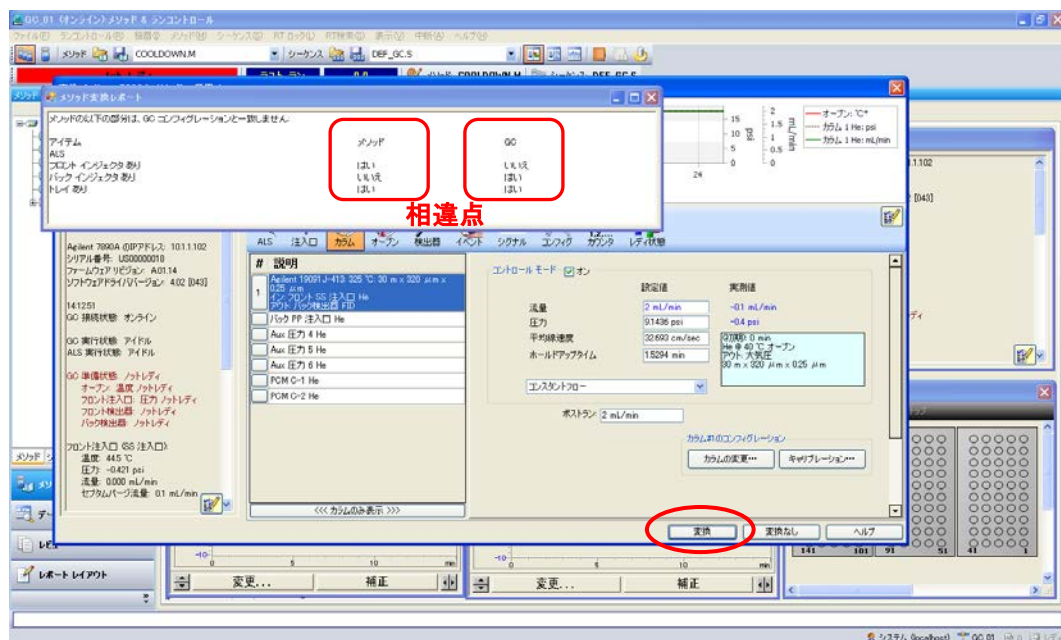
圧力、流量のコントロールや注入量など、正確なオペレーションを実現するためには、実際の機器のコンフィグレーションとケミステーションの「GC コンフィグレーション」が一致している必要があります。

また、機器に設定値をダウンロードするためには、メソッドの「GC コンフィグレーション」が機器のコンフィグレーションに一致している必要があります。



3-3. メソッド変換

インジェクタの取り付け位置に変更があった場合などは、コンフィグレーションの矛盾を解決するために、編集画面が表示されます。それと同時に、メソッド変換レポートも表示されます。なお、インジェクタの取り付け位置の変更方法については、付録Aを参照してください。



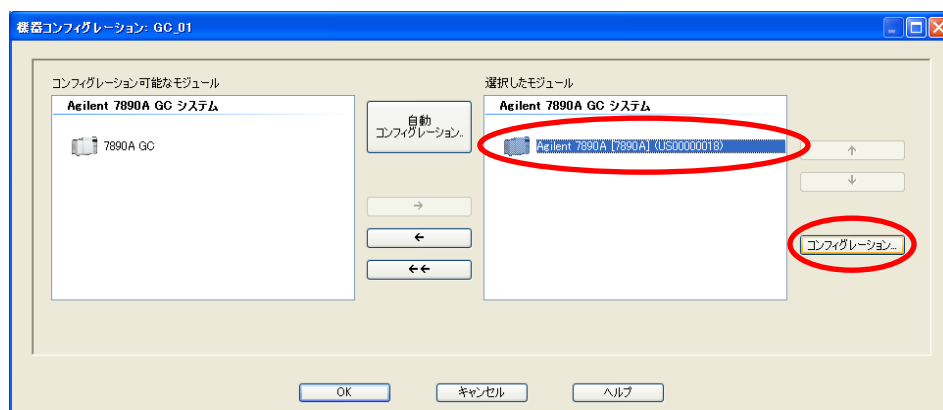
メソッド変換レポートに表示された項目が相違点になります。[変換]をクリックして、設定を受け入れます。

3-4. 機器コンフィグレーションの編集

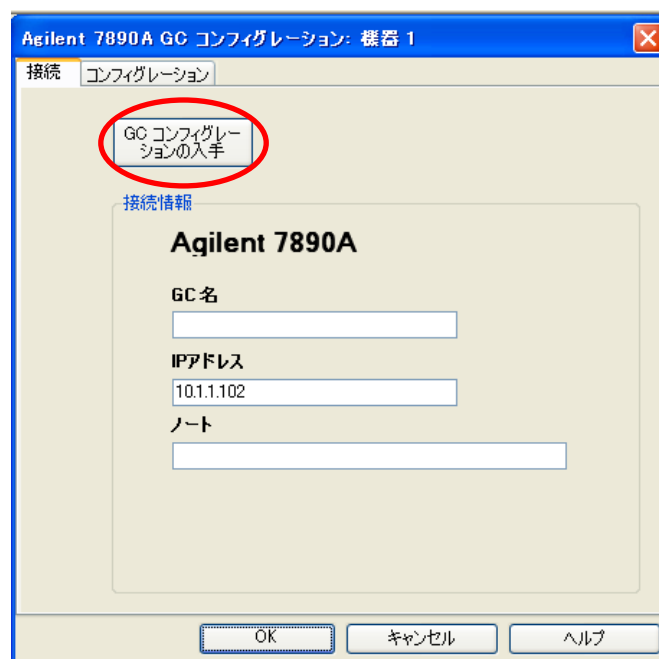
オンラインソフトウェアを起動し、メソッド&ランコントロールの画面からメニューの[機器] - [コンフィグレーション]を選択します。



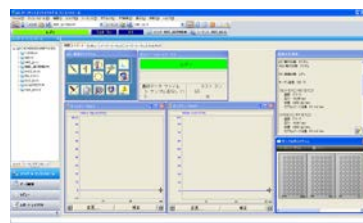
選択したモジュールから機器を選択し「コンフィグレーション」をクリックします。



「GC 名」及び「ノート」欄の入力は任意です。なお「IP アドレス」欄には、GC の IP アドレスが表示されています。



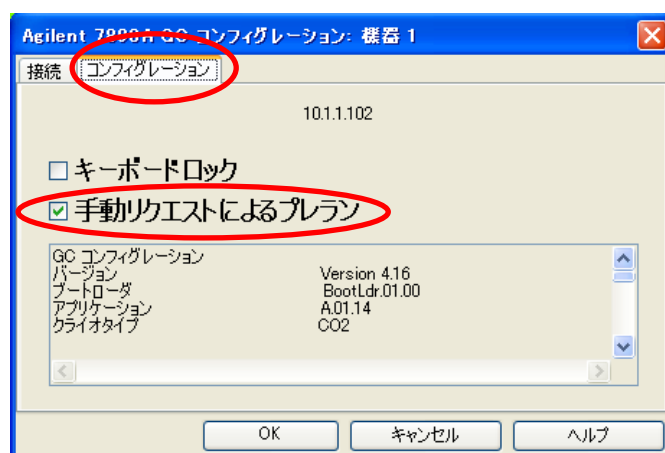
「GC コンフィグレーションの入手」をクリックすると、機器のコンフィグレーション情報が GC コンフィグレーションにコピーされます。



<参考>

GC 本体のキーボードからコンフィグレーションを変更した場合に、この機能を使用するとスムーズにコンフィグレーションを一致させることが可能です。

「[コンフィグレーション]」のタブに切り替え、[手動リクエストによるプレラン]にチェックをすると、ケミステーションがGCにプレランを指示します。チェックされていない場合は、GCのキーボードなどを使用して手動でGCにプレランの設定をする必要があります。

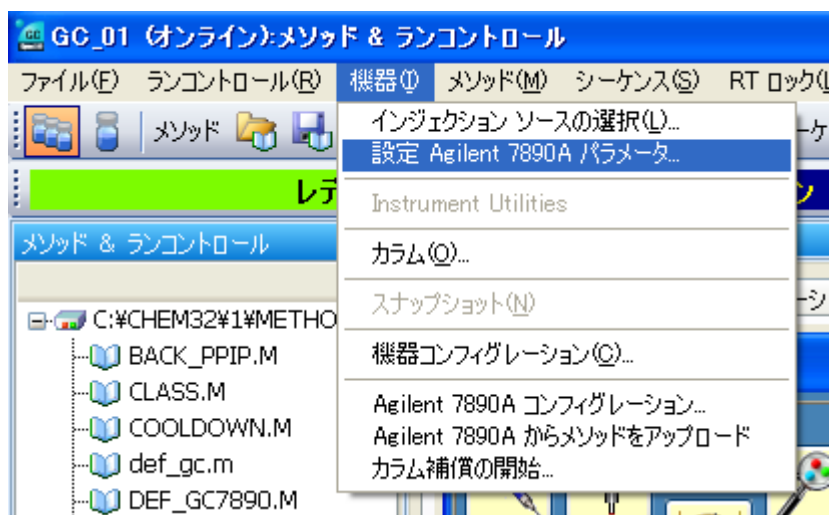


注意

注入口の種類と操作モードによっては、測定中と測定間で装置の設定値が異なる場合があります。試料の注入に備えて設定値を元に戻すには、GCをプレラン状態にしておく必要があります。例えば、ガスセバ使用時、スプリットレスモード使用時、圧力パルスモード使用時、ソルベントベントモード使用時などは、試料を注入する前にGCをプレラン状態にしておく必要があります。

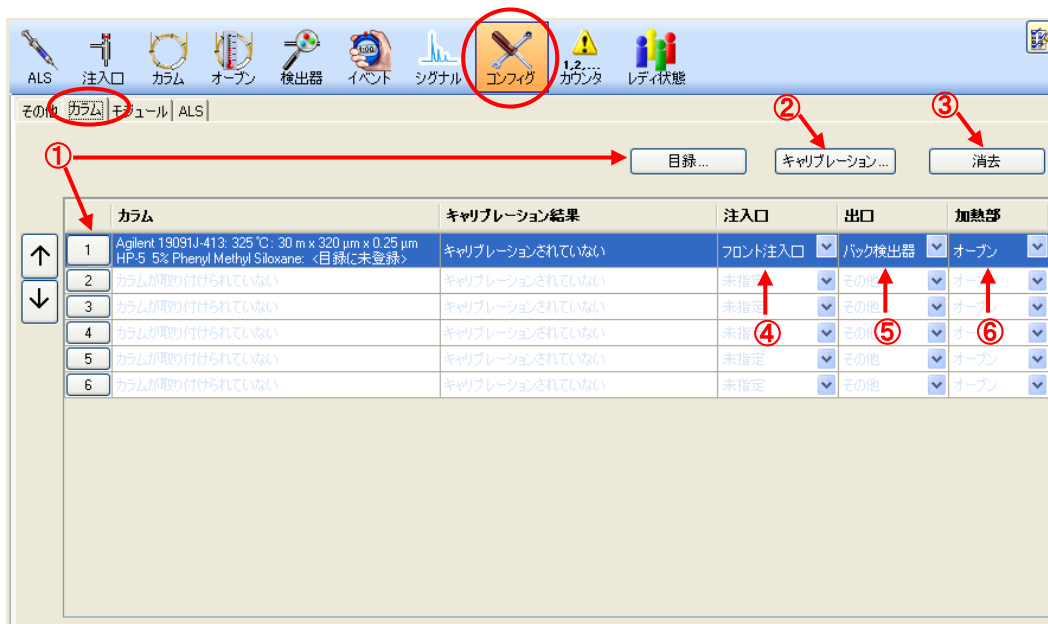
3-5. コンフィグレーション

GC機器ダイアグラムからをクリックするか、あるいはメニューの「機器」-「設定 Agilent7890A パラメータ」を選択して表示される画面の中のをクリックします。



3-5-1. カラムの設定

「[カラム]」のタブをクリックします。GC7890 では最大 6 つのカラムをコンフィグレーションすることが可能です。ここでは、カラムの変更やキャリブレーション、接続位置（注入口、出口）及び加熱部の設定をします。



- ① カラムの変更を開始することができます。
- ② カラムのキャリブレーションの設定画面に移行します。
- ③ コンフィグレーションからカラムを消去することができます。
- ④ ドロップダウンから、カラムの注入口側の取り付け位置を選択します。
- ⑤ ドロップダウンから、カラムの出口側の取り付け位置を選択します。
- ⑥ ドロップダウンから、加熱部の設定を選択します。

注意

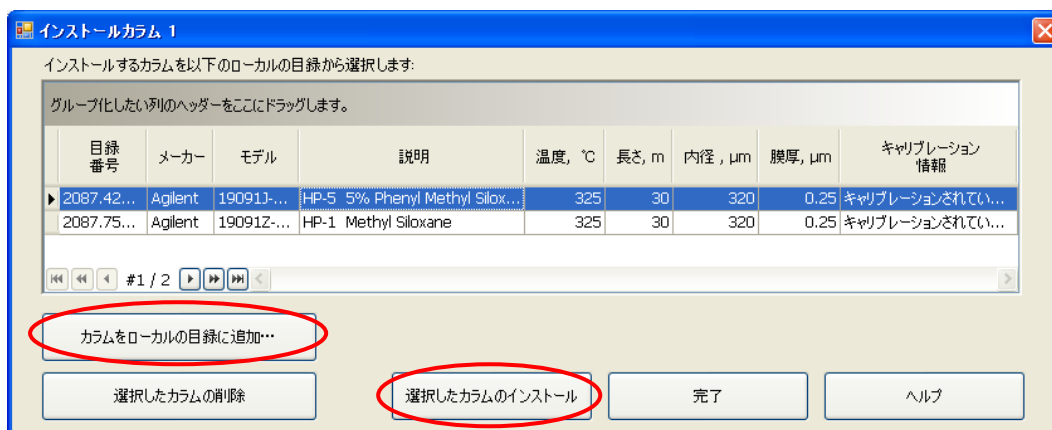
カラムを消去する場合には、消去前に出口の設定をあらかじめ「その他」に変更してください。

注意

カラムが正しくコンフィグレーションされていることを確認します。正確なカラム情報が入力されていないと、カラム流量及び圧力の計算が正しく行われません。

第3章 マスターメソッドの作成

目録をクリックした状態です。ローカル目録が表示されます。

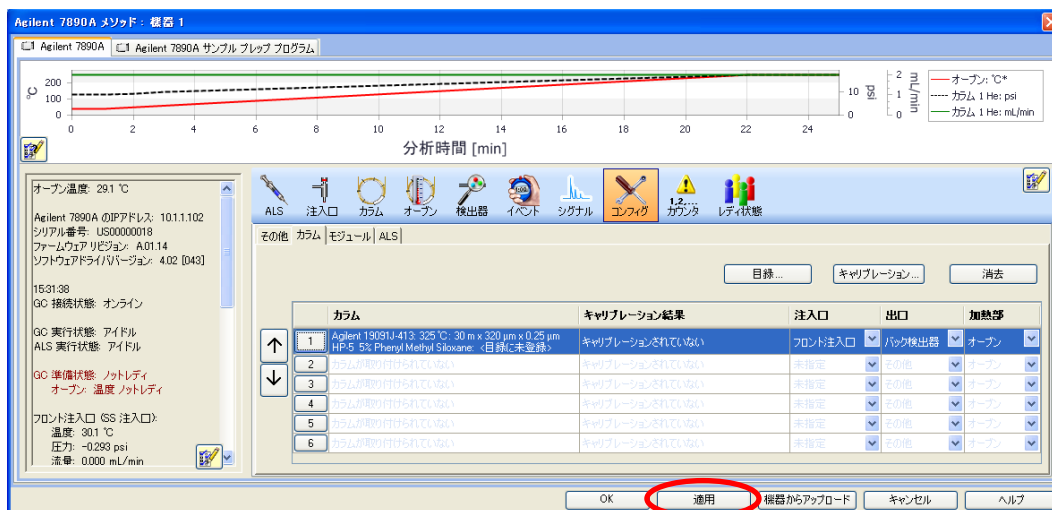


接続するカラムをローカル目録から選択し「選択したカラムのインストール」をクリックします。目録にカラムを登録する場合は「カラムをローカル目録に追加…」をクリックします。

注意

ローカル目録には、日常で使用するカラムをあらかじめ登録しておきます。

ローカル目録で選択したカラムがコンフィグレーションに設定されます。

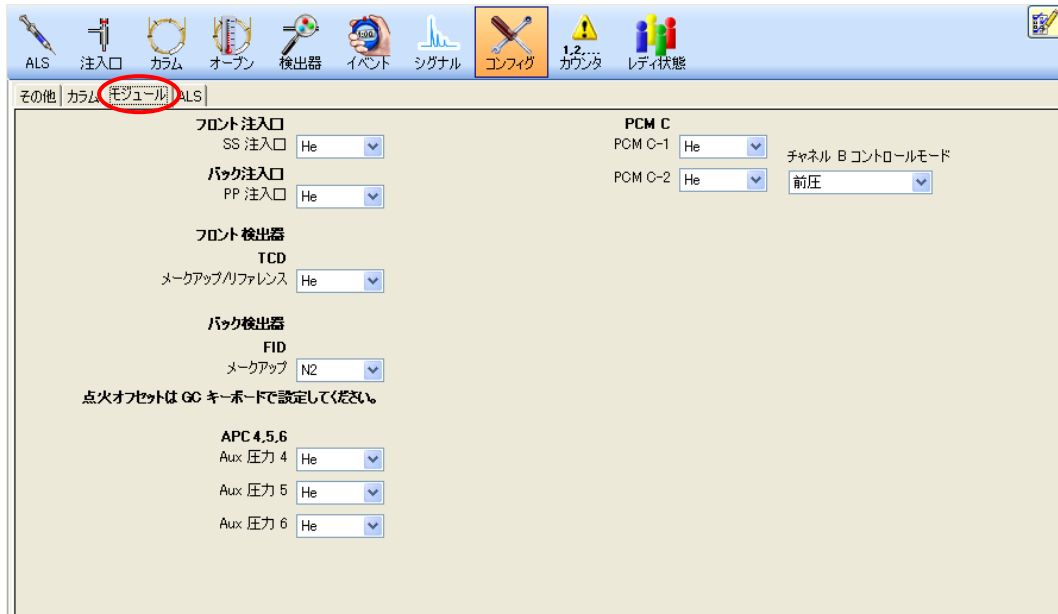


接続する注入口などに変更が無いか確認を行い「適用」をクリックします。

3-5-2. モジュールの設定

[モジュール] のタブをクリックし、各モジュール（注入口、検出器、Aux 圧力コントローラなど）の設定を行います。

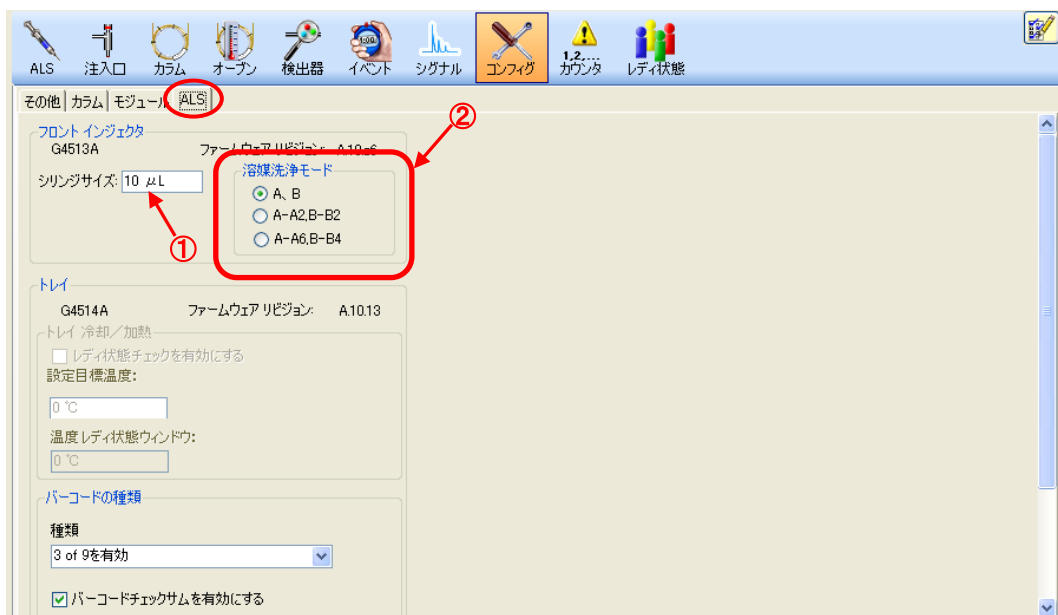
- (1) 現在 GC に配管されているガスの種類をドロップダウンから選択します。
- (2) 各モジュール特有の項目があれば、それも設定します。

**警告**

火災の危険があります。水素をキャリアガスとして使用する場合は、コンフィグレーションのガスタイプを必ず更新してください。更新しないと不正な流量の原因となるばかりでなく、GCの安全機能が正しく機能しません。

3-5-3. ALS の設定

[ALS] のタブをクリックし、オートサンプラ（インジェクタ、トレイなど）の設定を行います。



<画面の説明>

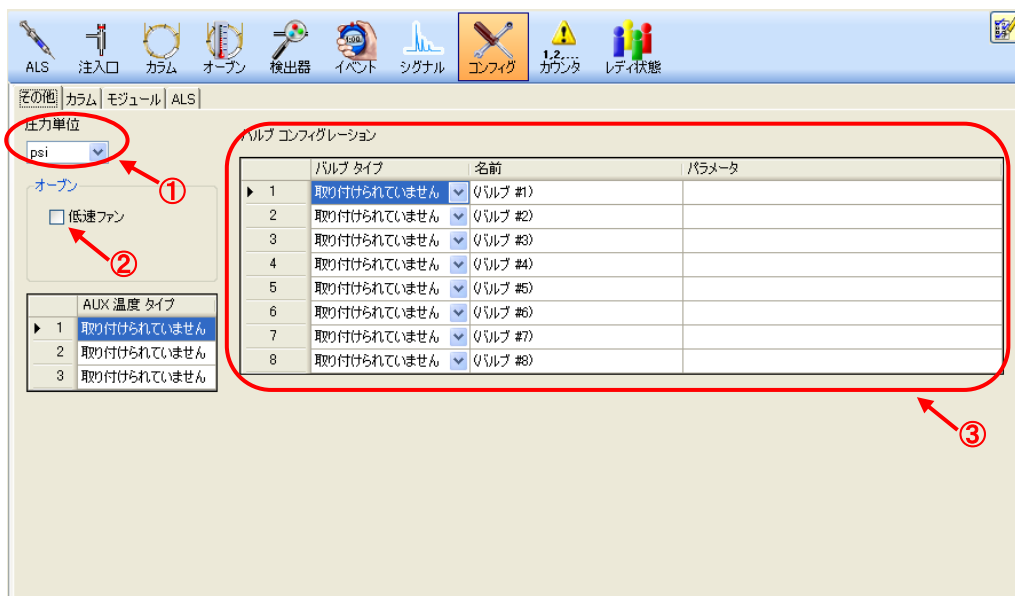
- ① シリンジサイズ欄には、インジェクタに取り付けられているシリンジの最大容量を入力します。
- ② 溶媒洗浄モードでは、必要に応じたモードを選択します。
 A,B : 溶媒ボトルとして A、B 各 1 本ずつ使用
 A-A2,B-B2 : 溶媒ボトルとして A、B 各 2 本ずつ使用
 A-A6,B-B4 : 溶媒ボトルとして A 6 本、B 4 本を使用

注意

シリンジはメーカーによりラベルに注入可能な最大容量を表示している場合があります。シリンジサイズにはシリンジの最大容量を入力します。なお、Agilent インジェクタにインストールされたシリンジの注入可能な最大容量は、シリンジの最大容量の 50% です（10 μ L のシリンジの場合、1 回に注入できる容量は最大 5 μ L まで）。

3-5-4. その他の設定

[その他] のタブをクリックします。



- ① 使用する圧力単位をドロップダウンから選択します。

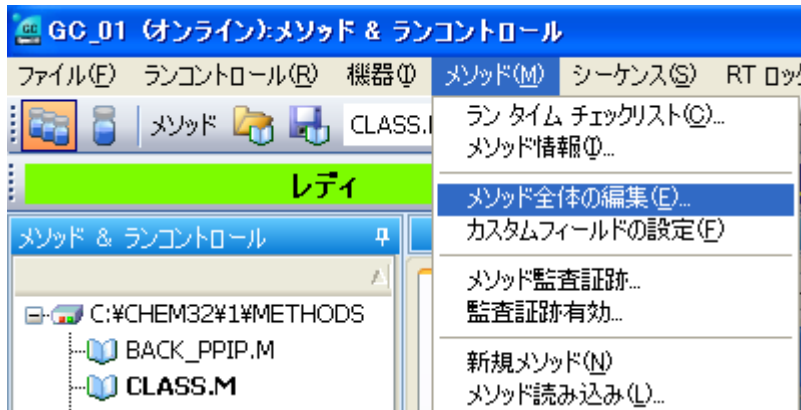
<参考>

1 kPa = 0.145 psi = 0.01 bar
 6.895 kPa = 1 psi = 0.06895 bar
 100 kPa = 14.504 psi = 1 bar

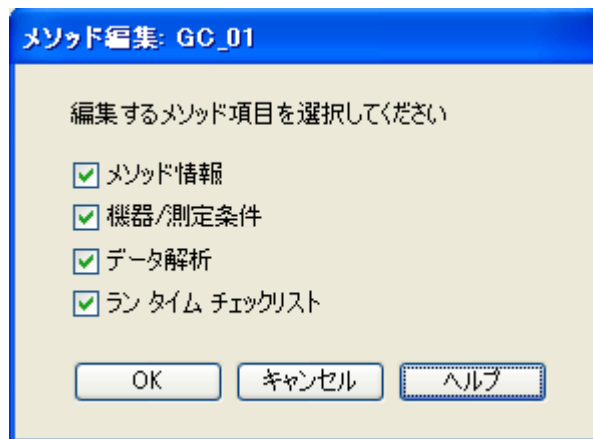
- ② 低速ファンにチェックを入れると、オープンファンの速度が低速モードになります。
 オープン冷却時の音は低減しますが、冷却に要する時間は長くなります。
- ③ バルブがある場合、そのタイプ、名前及びパラメータを入力します。

3-6. メソッド編集の開始

オンラインソフトウェアを起動し、メソッド&ランコントロール画面のメニューから「メソッド」－「メソッド全体の編集」を選択します。

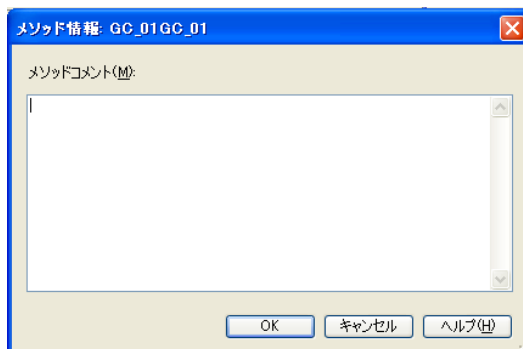


「メソッド編集」の画面が表示されます。すべての項目にチェックを付けて「OK」をクリックします。



3-6-1. メソッド情報の設定

「メソッドコメント」欄に、メソッドの説明を入力して「OK」をクリックします。



3-6-2. 試料導入方法の設定

オートサンプラ（ALS）を使用する場合は「GC インジェクタ」を選択します。マニュアル注入あるいは他のオートサンプラを使用する場合は「マニュアル」を選択します。設定を確認して「OK」をクリックします。

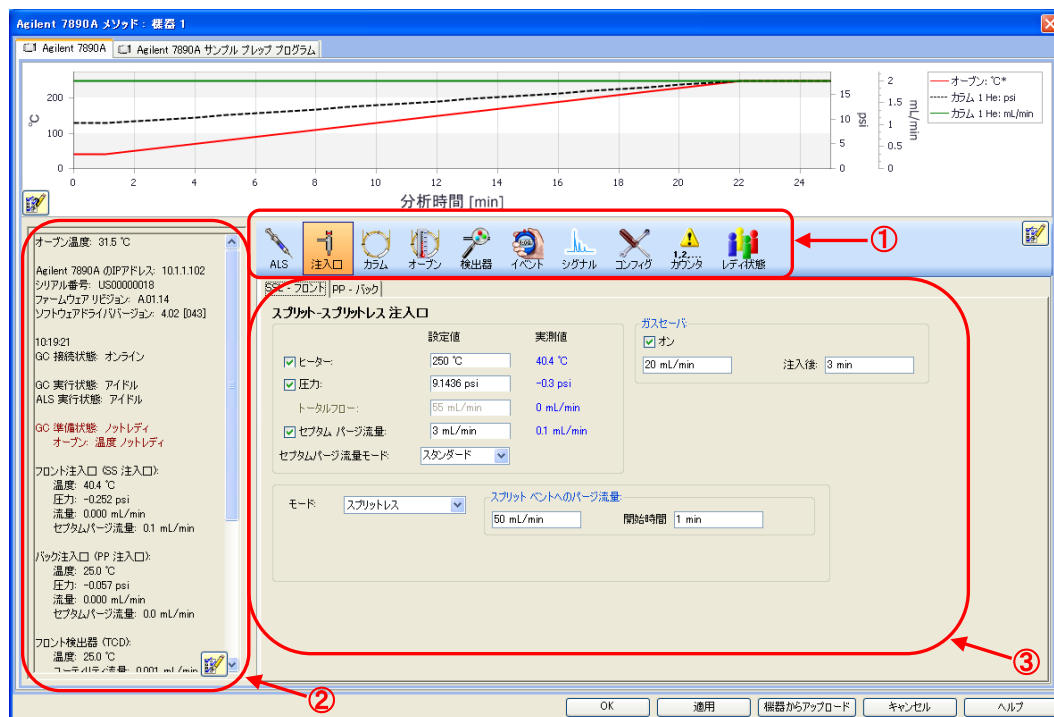


注意

パイロライザ及び Gerstel MPS を使用する場合は「マニュアル」を選択します。ヘッドスペースコントロールソフトウェアを使用する場合は「ヘッドスペースサンプラ」を選択します。ただし、スタンドアロンでヘッドスペースサンプラを使用する場合（ヘッドスペースコントロールソフトウェアを使用しない）は「マニュアル」を選択します。

3-6-3. GC のパラメータ編集

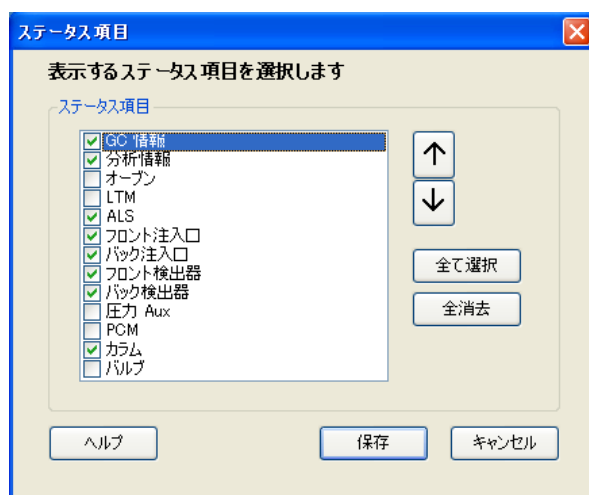
パラメータ編集画面で、GC の測定条件を入力します。



① 各ボタンをクリックすると、その項目の設定画面が表示されます。現在選択中の項目は強調表示されます。

② ステータス(メソッドサマリ)がリストされています。 ボタンをクリックすると、

ステータス項目の設定が変更できます。

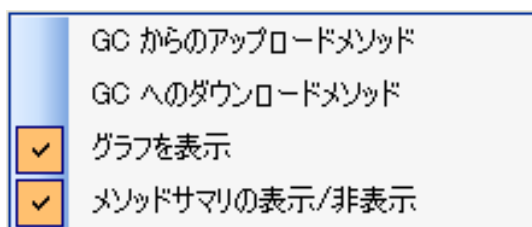


- ③ カーソルを設定値欄の上に持って来ると、有効な設定値の範囲がポップアップで表示されます。各設定の単位は自動的に入力されますので、数値のみを入力します（例：注入口の温度は「250℃」ではなく「250」と入力します）。

注意

有効な設定値の範囲を超える値を入力した場合、その値は自動的に取り消されて元の値に再設定されます。

また、パラメータ編集画面の余白でマウスの右ボタンをクリックすると、グラフの表示／非表示やステータス（メソッドサマリ）の表示／非表示が変更できます。



3-6-4. オープン温度の設定

ここでは、例として以下の条件を入力する手順を説明します。

<例>

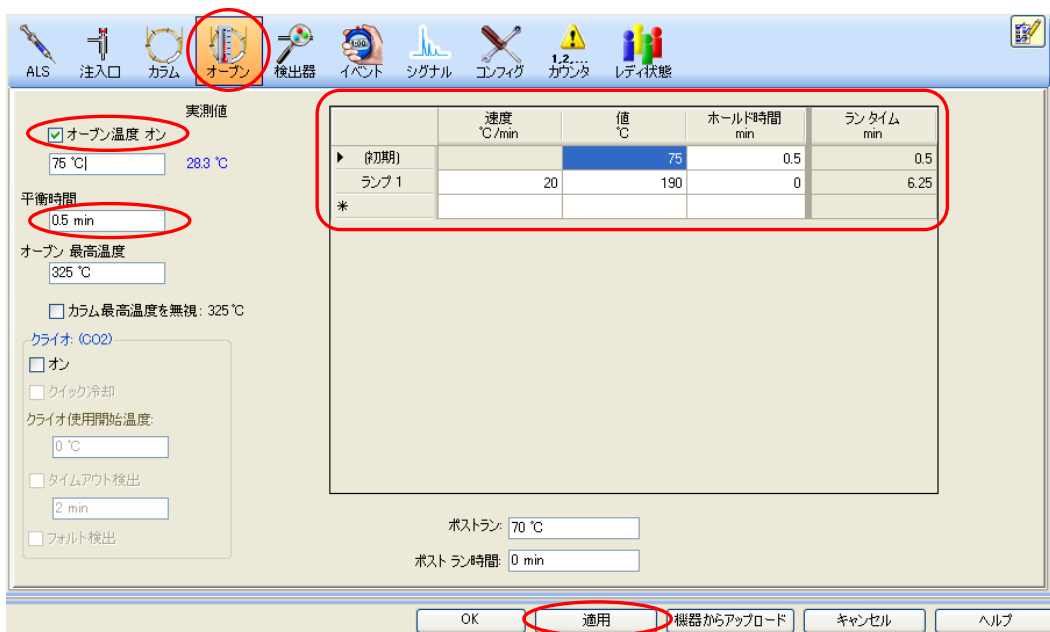
オープン温度条件

初期温度：75℃、ホールド時間：0.5min

1 段目昇温：昇温速度 20℃/min、到達温度：190℃、ホールド時間：0min

2 段目昇温：なし

- (1)  をクリックします。
- (2) オープン温度の「オン」にチェックを付けます。
- (3) 平衡時間の設定値欄に「0.5」を入力します。
- (4) 右側のテーブルに昇温プログラムを入力します。
- (5) 必要に応じて「適用」をクリックし、オープンの設定を GC ヘダウンロードします。



ALS 注入口 カラム **オープン** 検出器 イベント シグナル コンフィグ 12ピン カウンタ レディ状態

実測値
☒ オープン温度 オン
 75 °C 28.3 °C
 平衡時間

 オープン 最高温度

☐ カラム最高温度を無視: 325 °C
 クライオ (CO2)
☒ オン
☐ クイック冷却
 クライオ使用開始温度:

☐ タイムアウト検出

☐ フォルト検出

	速度 °C/min	値 °C	ホールド時間 min	ランタイム min
▶ (初期)		75	0.5	0.5
ランプ 1	20	190	0	6.25
*				

ポストラン:
 ポストラン時間:

OK **適用** 機器からアップロード キャンセル ヘルプ

3-6-5. カラム流量の設定

ここでは、例として以下の条件を入力する手順を説明します。

<例>

モード : コンスタントフロー (定流量)

流量 : 6.5ml/min

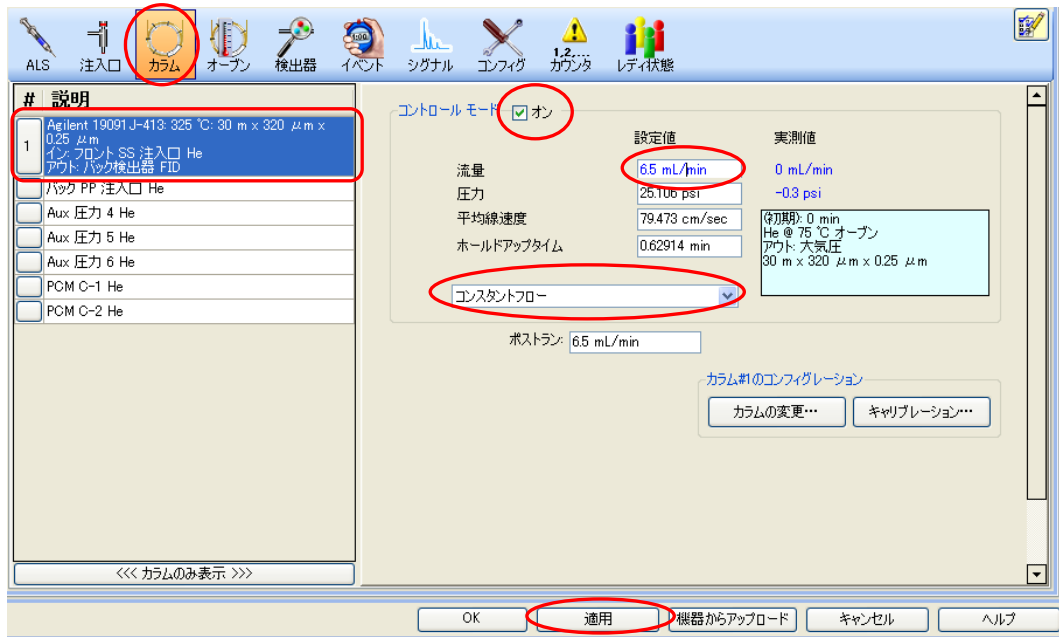
カラム : 19091J-413 (HP-5 30m x 320um x 0.25um)

イン : フロント注入口

アウト : バック検出器



- (1)  をクリックします。
- (2) カラムの情報を確認します。
実際に取り付けられているカラムの情報が正しく表示されていることを確認します。
インに使用する注入口、アウトに使用する検出器が表示されています。
- (3) コントロールモードの「オン」にチェックを付け、モードのドロップダウンから「コンスタントフロー」を選択します。
- (4) 流量の設定値欄に「6.5」を入力します。
- (5) 必要に応じて「適用」をクリックし、カラム流量の設定を GC ヘダダウンロードします。



<参考>

必要に応じて、接続されている AUX あるいは PCM の設定を行います。

3-6-6. 注入口の設定

ここでは、例として以下の条件を入力する手順を説明します。

<例>

フロント注入口（SSL）

モード : スプリットレス

ヒーター : オン、250℃

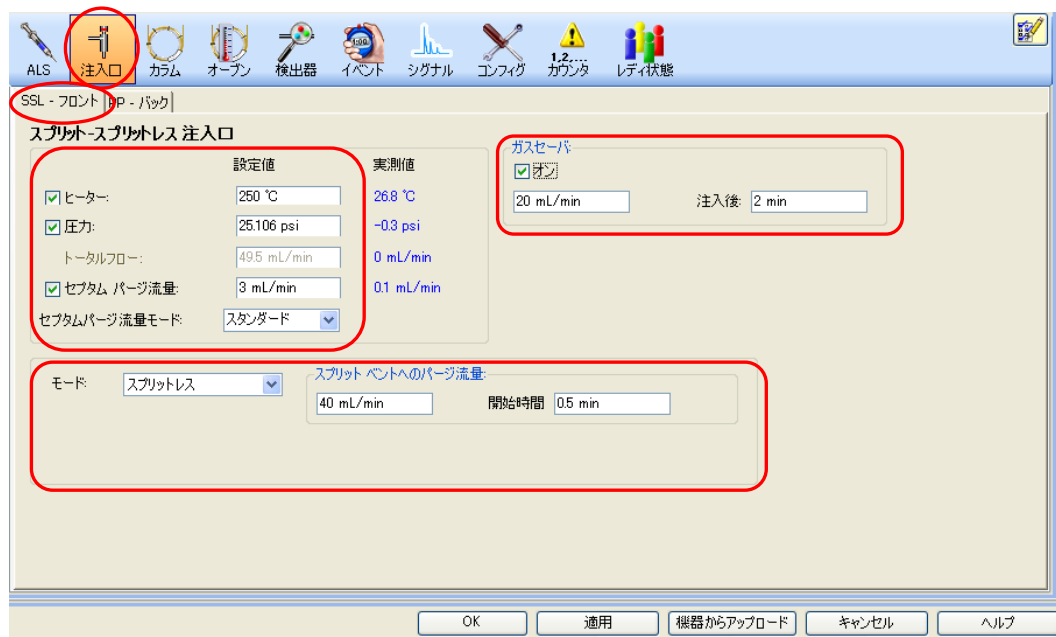
圧力 : オン（カラム流量の条件から自動的に設定されます）

セプタムパージ流量 : オン、3ml/min（スタンダードモード）

ベントへのパージ流量 : 40ml/min、開始時間 0.5min

ガスセーバー : オン（使用する）、20ml/min、注入後 2min

- (1)  をクリックします。
- (2) 使用する注入口の位置のタブを選択します。
- (3) [ヒーター] にチェックを付け、設定値欄に [250] を入力します。
- (4) [圧力] にチェックを付けます（カラム流量の条件から自動的に設定されます）。
- (5) [セプタムパージ流量] にチェックを付け、設定値欄に [3] を入力します。セプタムパージ流量モードのドロップダウンから [スタンダード] を選択します。
- (6) ガスセーバーの [オン] にチェックを付け、流量の設定値欄に [20]、注入後の設定値欄に [2] を入力します。
- (7) モードのドロップダウンから [スプリットレス] を選択し、スプリットベントのパージ流量の設定値欄に [40]、開始時間の設定値欄に [0.5] を入力します。
- (8) 必要に応じて [適用] をクリックし、注入口の設定を GC ヘダウンロードします。



SSL - フロント | DP - バック

スプリット-スプリットレス注入口

設定項目	設定値	実測値
☒ ヒーター	250 °C	26.8 °C
☒ 圧力	25.106 psi	-0.3 psi
トータルフロー	49.5 mL/min	0 mL/min
☒ セプタム パージ流量	3 mL/min	0.1 mL/min
セプタムパージ流量モード	スタンダード	

ガスセーバー

☒  20 mL/min 注入後 2 min

モード: スプリットレス

スプリット ベントへのパージ流量: 40 mL/min 開始時間 0.5 min

OK 適用 機器からアップロード キャンセル ヘルプ

注意

カラムが接続されている注入口の圧力には、必ずチェックを付けてください。カラムが接続されていない注入口は、圧力のチェックを外します。

3-6-7. 検出器の設定

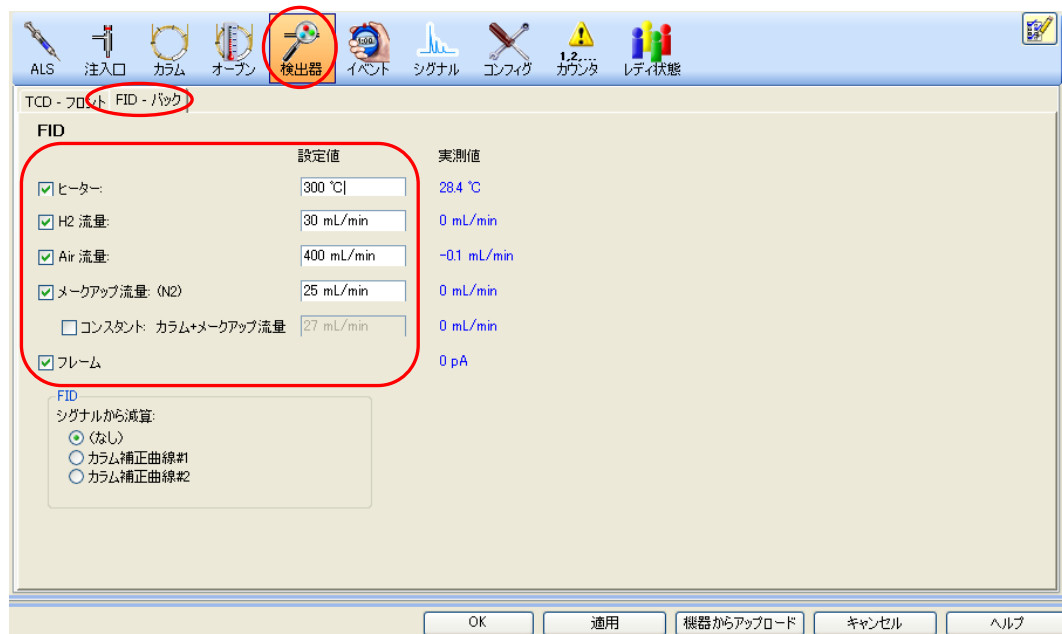
ここでは、例として以下の条件を入力する手順を説明します。

<例>

バック検出器 (FID)

ヒーター : オン、300℃
 H2 流量 : オン、30 mL/min
 Air 流量 : オン、400mL/min
 メークアップ流量 : オン、25 mL/min
 コンスタント : カラム+メークアップ流量は、オフ
 フレーム : オン

- (1)  をクリックします。
- (2) 使用する検出器の位置のタブを選択します。
- (3) [ヒーター] にチェックを付けて、設定値欄に [300] を入力します。
- (4) [H2 流量] にチェックを付けて、設定値欄に [30] を入力します。
- (5) [Air 流量] にチェック付けて、設定値欄に [400] を入力します。
- (6) [メークアップ流量] にチェックを付けて、設定値欄に [25] を入力します。
- (7) [コンスタント：カラム+メークアップ流量] にチェックを付けると、カラム流量とメークアップ流量の合計流量を一定にすることができます。合計流量を設定値欄に入力します。
- (8) [フレーム] にチェックを付けます。
- (9) 必要に応じて [適用] をクリックし、検出器の設定を GC ヘダウンロードします。



3-6-8. シグナルの設定

ここでは、例として以下の条件を入力する手順を説明します。

<例>

バック検出器 (FID)

シグナルソース : バックシグナル

データ速度 : 5Hz/.04 min

保存 : バックシグナル (FID) のみオン



- (1)  をクリックします。
- (2) シグナルソースのドロップダウンから、使用する検出器の位置を選択します。
- (3) データ速度/最小ピーク幅の選択のドロップダウンから [5Hz/.04 min] を選択します。
[Hz] の数値は 1 秒間に何ポイントでデータを取り込むかを示しています。
[min] の数値は予想される最小ピーク幅を示しています。
- (4) スタート時に検出器シグナル値をゼロ点に補正したい時は [ゼロ] にチェックを付けます (通常はチェックを外しておきます)。
- (5) データを保存するため [保存] にチェックを付けます。

デュアル	シグナルソース	データ速度 / 最小ピーク幅 の選択	ゼロ	保存
F	#1: フロントシグナル (TCD)	5 Hz / .04 min	☐	☐
F	#2: バックシグナル (FID)	5 Hz / .04 min	☐	☒
B	#3: 診断: テスト プロット	50 Hz / .004 min	☐	☐
B	#4: 診断: テスト プロット	50 Hz / .004 min	☐	☐

デュアル注入のシグナルの割り当てを非表示

イベントの削除

シグナルイベントテーブル		
シグナルソース	時間、分	シグナルイベント
**		

OK 適用 機器からアップロード キャンセル ヘルプ

3-6-9. オートサンプラの設定

ここでは、例として以下の条件を入力する手順を説明します。この項目は、オートサンプラを使用する場合のみ設定します。

<例>

7693 シリーズを使用

注入量 : 1 μ L
 溶媒 A 洗浄回数 : 注入前 0 回 / 注入後 5 回
 溶媒 B 洗浄回数 : 注入前 0 回 / 注入後 0 回
 サンプル洗浄（共洗い） : 3 回
 サンプルポンプ : 5 回

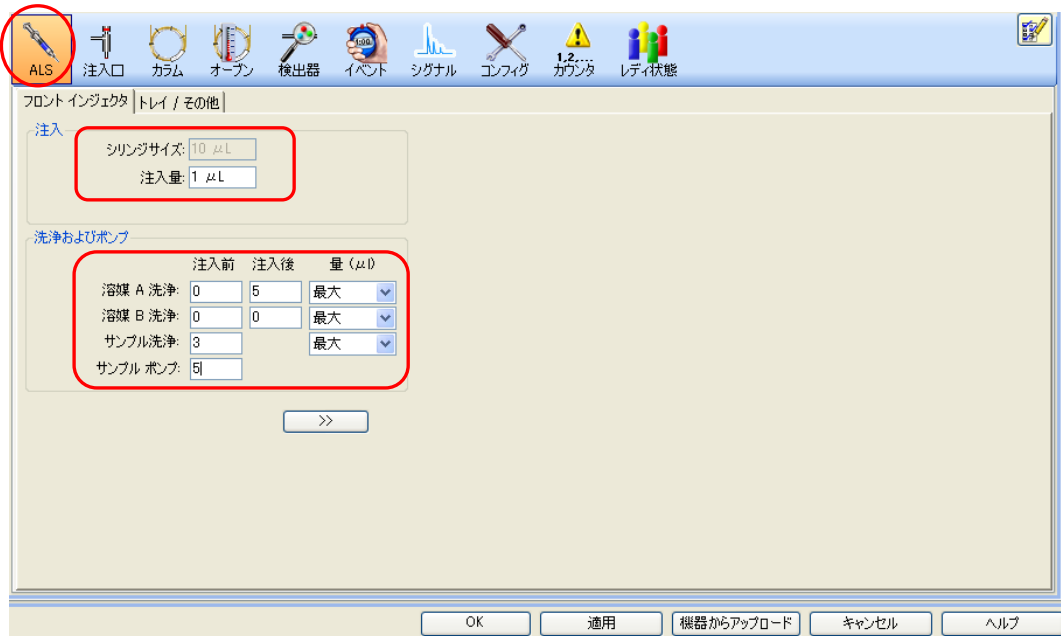


- (1)  をクリックします。
- (2) 使用するインジェクタのタブをクリックします。

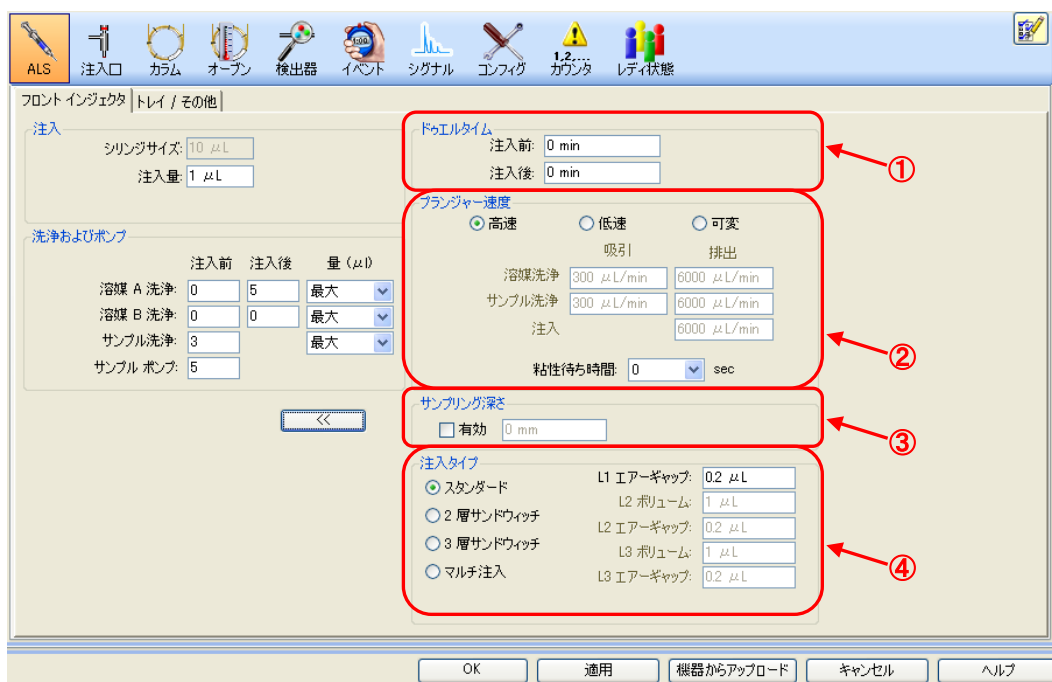
注意

フロントインジェクタとバックインジェクタの切り替え方法は、付録 A を参照してください。

- (3) 正しいシリンジサイズが表示されていることを確認します。注入量に [1] を入力します。
- (4) 溶媒 A 洗浄の注入後の設定値欄に [5] を入力します。
- (5) サンプル洗浄の設定値欄に [3] を入力します。
- (6) サンプルポンプの設定値欄に [5] を入力します。
- (7) 量 (μ l) のドロップダウンから [最大] を選択します。



 ボタンをクリックすると拡張設定画面が表示されます。必要に応じて拡張設定を行います。



ALS 注入口 カラム オープン 検出器 イベント シグナル コンフィグ カウンタ レディ状態

フロント インジェクタ | トレイ / その他

注入
 シリンジサイズ: 10 μL
 注入量: 1 μL

洗浄およびポンプ

	注入前	注入後	量 (μD)
溶媒 A 洗浄:	0	5	最大
溶媒 B 洗浄:	0	0	最大
サンプル洗浄:	3		最大
サンプル ポンプ:	5		

ドゥエルタイム
 注入前: 0 min
 注入後: 0 min

プランジャー速度
☒ 高速 ☐ 低速 ☐ 可変
 吸引 排出
 溶媒洗浄: 300 $\mu\text{L}/\text{min}$ 6000 $\mu\text{L}/\text{min}$
 サンプル洗浄: 300 $\mu\text{L}/\text{min}$ 6000 $\mu\text{L}/\text{min}$
 注入: 6000 $\mu\text{L}/\text{min}$
 粘性待ち時間: 0 sec

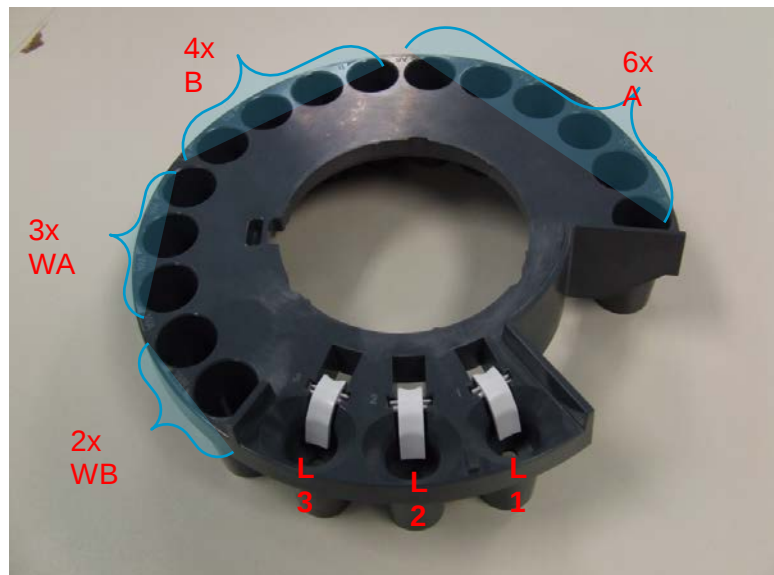
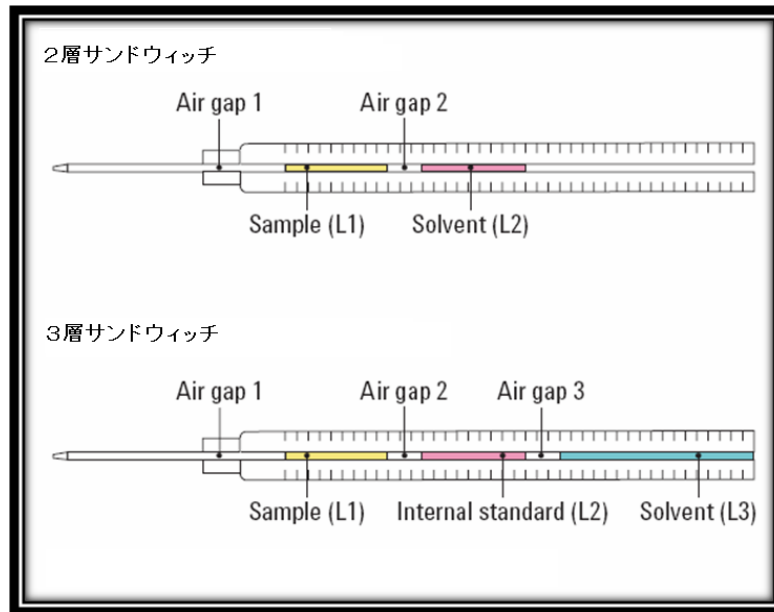
サンプリング深さ
☐ 有効 0 mm

注入タイプ
☒ スタンダード
☐ 2 層サンドウィッチ
☐ 3 層サンドウィッチ
☐ マルチ注入

	L1 エアギャップ:	L2 ボリューム:	L2 エアギャップ:	L3 ボリューム:	L3 エアギャップ:
スタンダード	0.2 μL	1 μL	0.2 μL	1 μL	0.2 μL

OK 適用 機器からアップロード キャンセル ヘルプ

- ① ドゥエルタイム
 注入前または注入後にシリンジニードルを注入口に挿し込んでおく時間です。
- ② プランジャー速度
 プランジャーの動作スピードです。通常は高速を選択します。
- ③ サンプリング深さ
 サンプリング時にバイアル内へ挿入するニードルの深さです。デフォルトの 0 ミリは、バイアルの底から 3.6 ミリの位置です。
- ④ 注入タイプ
 [スタンダード]
 液体注入の一般的な注入タイプです。
 [2 層サンドウィッチ]
 2 つの液体層 (L1、L2 ボリューム) を吸引します。
 2 箇所 (L1、L2) の空気層 (エアギャップ) を挟みます。
 L1 エアギャップ: ニードルとサンプル間
 L2 エアギャップ: サンプルと溶媒間
 [3 層サンドウィッチ]
 3 つの液体層 (L1、L2、L3 ボリューム) を吸引します。
 3 箇所 (L1、L2、L3) の空気層 (エアギャップ) を挟みます。
 L1 エアギャップ: ニードルとサンプル間
 L2 エアギャップ: サンプルと内部標準溶液間
 L3 エアギャップ: 内部標準溶液と溶媒間
 [マルチ注入]
 大容量注入時に使用します。



150 サンプルトレイが接続されている時のインジェクタのターレット

L1 にサンプルバイアルを置きます。

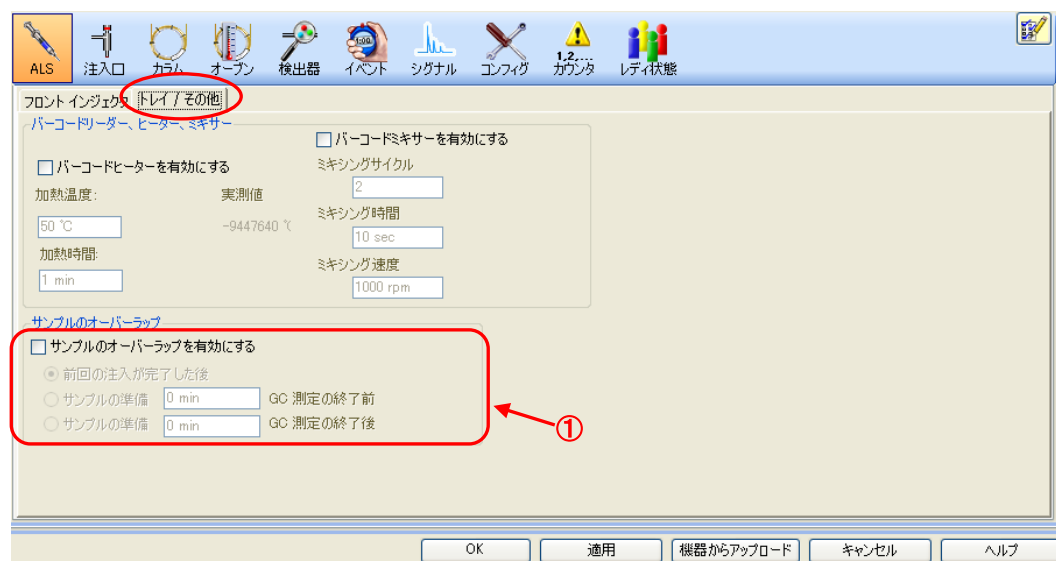
L2、L3 にサンドウィッチ注入するときのバイアルを置きます。



150 サンプルトレイが接続されていない時のインジェクタのターレット
(16 バイアルターレット)

(8) サンプルのオーバーラップ

サンプルのオーバーラップを実施する場合には、トレイ／その他のタブをクリックします。[サンプルのオーバーラップを有効にする] にチェックを付け、オプションから次のサンプルを準備するタイミングを選択します。



オーバーラップのタイミングを3つのモードから選択し、必要に応じて時間を分単位で入力します。

- ・ 前回の注入が完了した後に、オーバーラップを開始する
- ・ 測定が終了する前に、オーバーラップを開始する
- ・ 測定が終了した後に、オーバーラップを開始する

注意

測定サイクルがサンプルの準備にかかる時間よりも短い場合には、サンプルのオーバーラップを使用しないでください。このような場合にサンプルのオーバーラップを使用するとシーケンスが停止します。

3-6-10. AUX 温度の設定

この項目は、ガスサンプリングバルブなどのヒーターが接続されているときのみ設定します。

注意

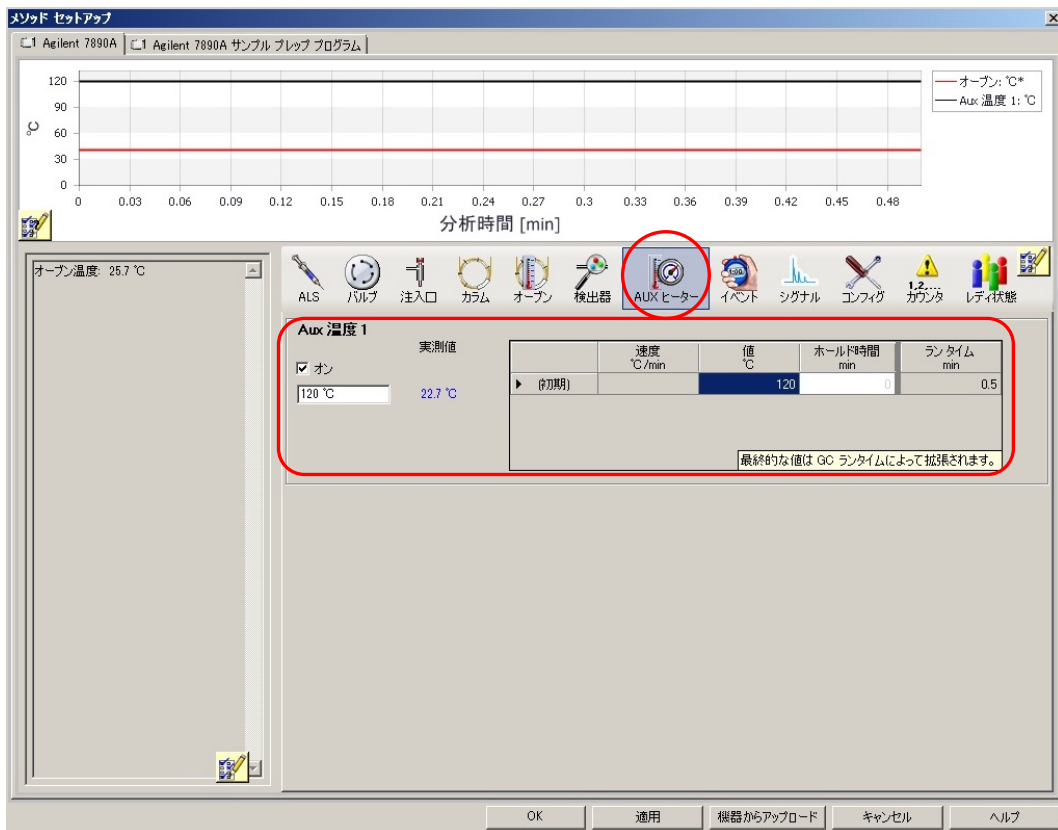
AUX 温度がコンフィグレーションされていない時は、AUX 温度を設定するアイコン



は表示されません。



- (1) をクリックします。
- (2) 使用するヒータの [オン] にチェックを付けます。
- (3) 設定値を入力します。
- (4) 必要に応じて [適用] をクリックし、AUX 温度の設定を GC ヘダウンロードします。



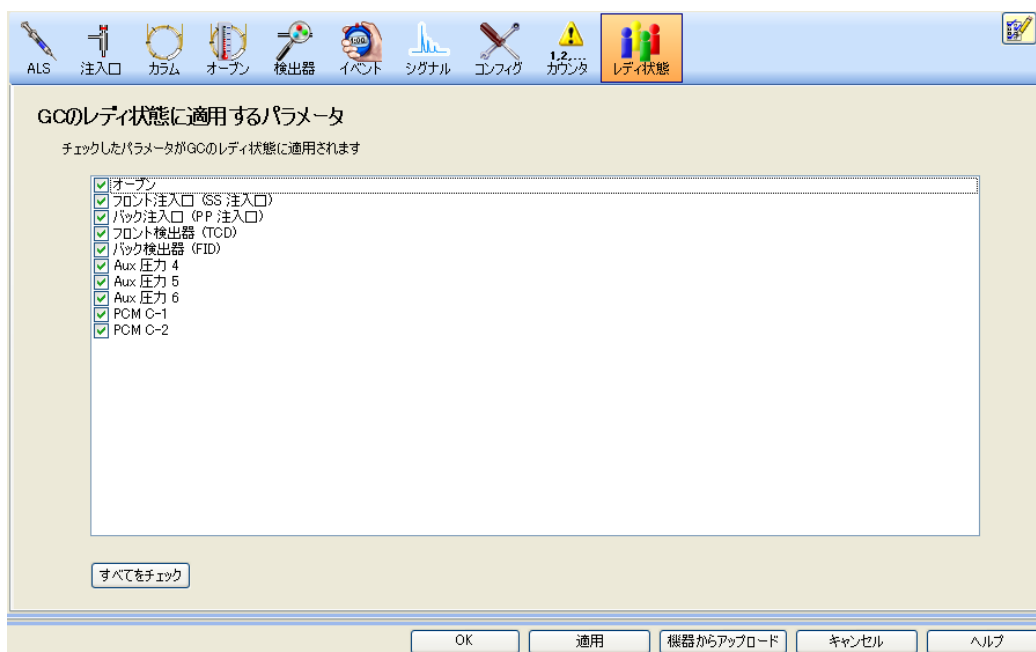
3-6-1.1. READY 状態の確認

測定メソッドで使用しないハードウェアの READY 状態を無視する場合に使用します。例えば、バック検出器のみを使用する場合は、測定開始時にフロント検出器の温度が設定値に到達するまで待つ必要はありません。

測定析開始時に、ここで選択した項目が GC 本体側で READY 状態になっているかを確認してから測定が開始されます。

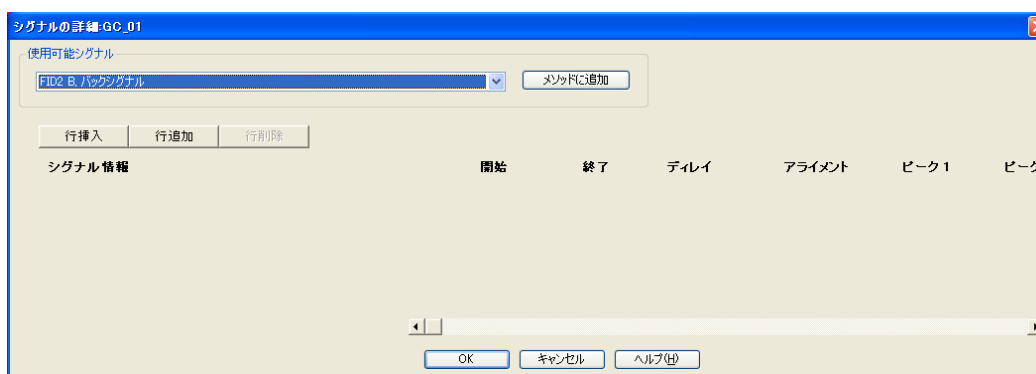


- (1)  をクリックします。
- (2) READY 状態の確認を適用する項目にチェックを付けます。



3-7. シグナルの詳細

この画面以降は、データ解析に関連する設定画面が表示されます。ここでは [OK] をクリックします。



3-8. 積分イベント

積分イベント変更の画面が表示されます。ここでは [OK] をクリックします。詳細は、5-7. を参照して下さい。

積分イベント変更

メソッド マニュアル イベント ☐

OK

キャンセル

全てのシグナルの初期イベント:

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

シグナル特定イベント:

uECD デフォルト

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	500
初期	ピーク幅	0.08
初期	面積リジェクト	1
初期	高さリジェクト	1
初期	ショルダー	オフ

3-9. レポート条件

レポートとは、シグナルの計算及び解析結果のことです。レポート条件の設定画面では、レポートに出力する内容などを設定します。

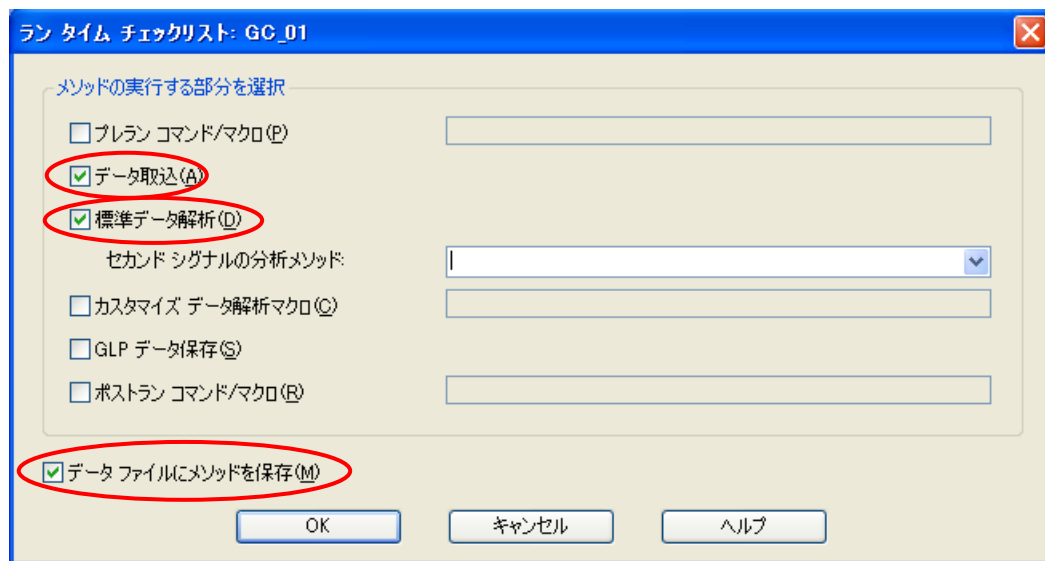
- ① レポートの出力先を選択します。
- ② 定量方法を選択します。計算のドロップダウンから計算方法を選択します。選択するのは以下の項目です。
 - ・ %
 - ・ 外部標準 (ESTD) 及び ESTD%
 - ・ Norm%
 - ・ 内部標準 (ISTD) 及び ISTD%
- ③ レポートスタイルを選択します。通常は「簡易」を選択します。

- ④ レポートにクロマトグラムを追加する場合は「クロマトグラム出力の追加」にチェックを付けます。
- ⑤ クロマトグラムを出力する向きを選択します。
- ⑥ レポートにおけるクロマトグラムの占める割合を設定します。
- ⑦ シグナルの表示画面を変更できます。
- ⑧ [OK] をクリックして、設定を終了します。

3-10. ランタイムチェックリスト

測定を実行する時、メソッドでどの項目を実行するか設定します。

- (1) 「データ取り込み」と「標準データ解析」にチェックを付けます。これにより、測定はデータの取り込みと解析を連続して実施します。
- (2) 「データファイルにメソッドを保存」にチェックを付けます。これにより、データファイルにメソッドが保存されます。
- (3) [OK] をクリックして、設定を終了します。

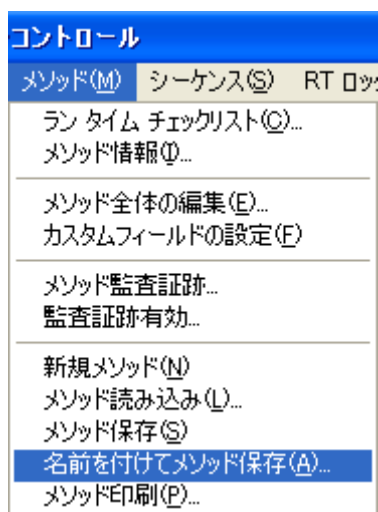


以上で「メソッド全体の編集」による、メソッドの編集が終わりました。メソッドを保存する前に、再度「メソッド全体の編集」を実施し、メソッドのパラメータを確認してみましょう。

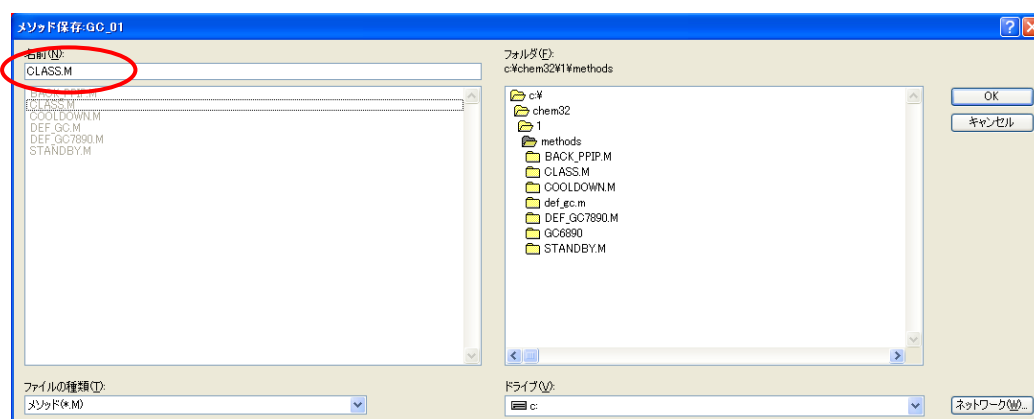
3-1-1. メソッドの保存

編集したメソッドを保存します。

- (1) メソッドのファイル名を変更して保存する場合は「メソッド」－「名前を付けてメソッド保存」を選択します。



- (2) 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。



注意

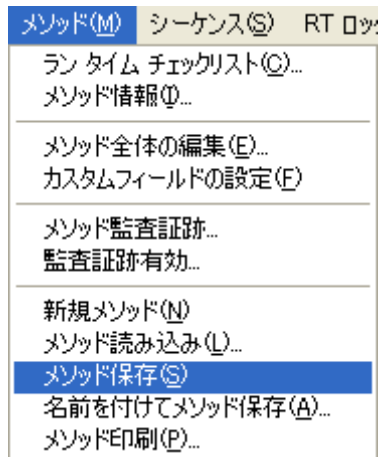
以下の文字は、ファイル名に含めないでください

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

ケミステーションに付属している「Chemstation の理解」の「1 章 Agilent ChemStation の機能」の「ファイルの命名規則」を参照してください。

- (3) 「OK」をクリックして設定を終了します。

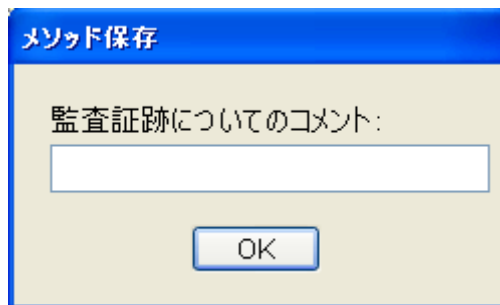
- (4) メソッド名を変更せずに上書きする場合は [メソッド] - [メソッド保存] を実施します。



注意

上書きに対する警告のメッセージは現われません。

- (5) メソッドを保存するたびに、メソッド編集に関連したコメントを残すことができます。これにより、メソッド名を上書きで保存しても履歴を見ることができます。コメントを入力し [OK] をクリックします。

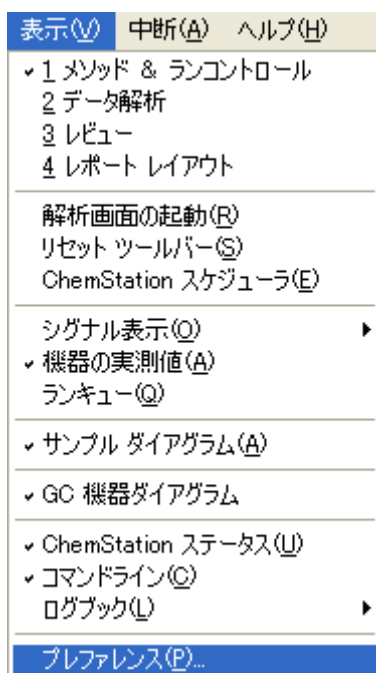


注意

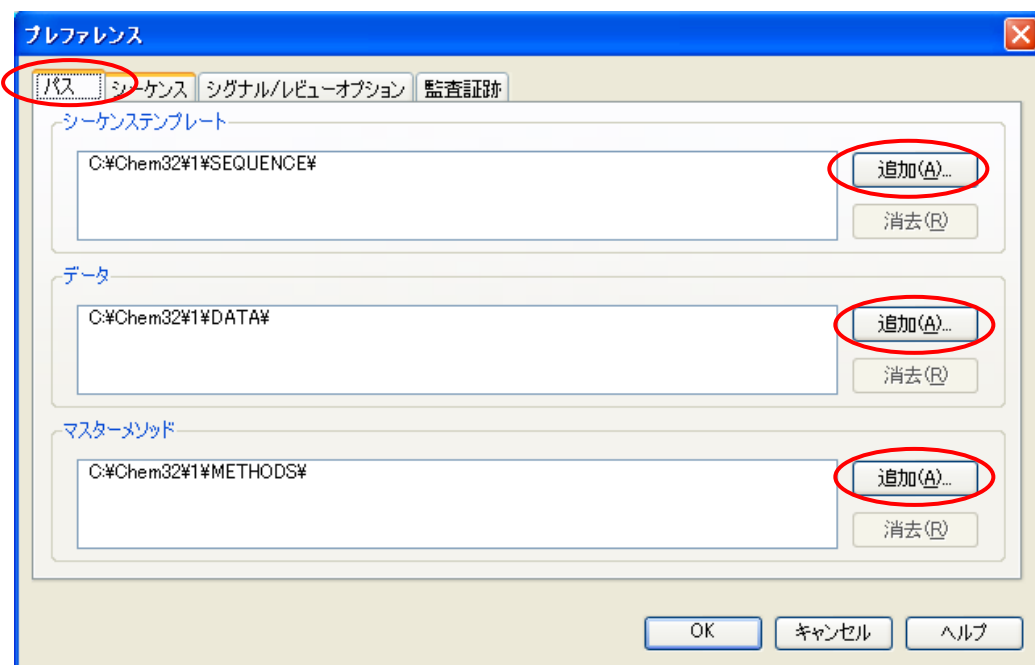
メソッドの保存履歴を記録するため、メソッドを保存するたびに「監査証跡のためのコメント」の入力を求められます。監査証跡有効を設定すると、より詳細なメソッド変更履歴がメソッドに記録されます。しかし、監査証跡有効を設定すると、メソッド印刷をした時、監査証跡の部分が膨大になりますので注意が必要です。監査証跡を有効にするには、メニューの [メソッド] - [監査証跡有効] を選択します。

3-12. プレファレンスの設定

プレファレンスとは、メソッド/シーケンス/データファイルの保存先パスの設定を変更できる機能です。メニューの「表示」－「プレファレンス」を選択します。

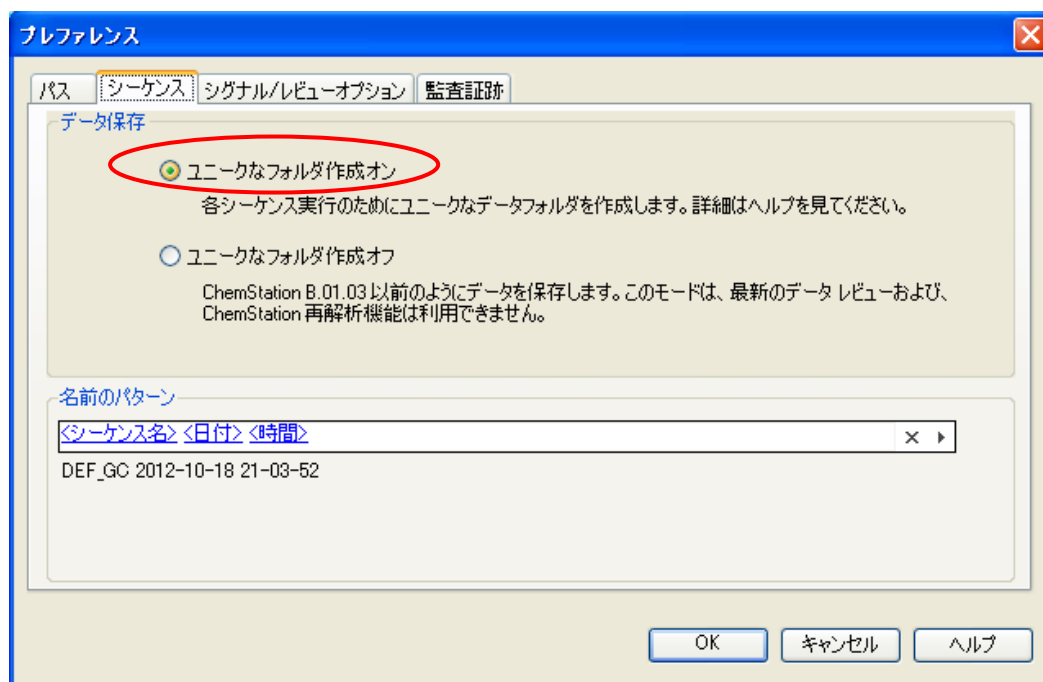


- (1) 「パス」のタブをクリックします。ここでは「追加」をクリックして、保存先のパス名を選択します。選択するパスは、あらかじめ Windows のエクスプローラなどで作成しておく必要があります。

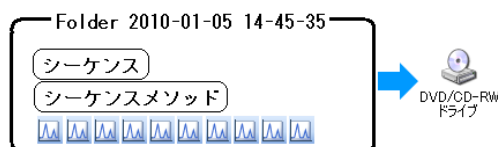


各項目における Default パス (C:\Chem32\1\SEQUENCE%, C:\Chem32\1\DATA%, C:\Chem32\1\METHOD%) は削除できません。また、既に登録されたパスのさらに下の階層に、ディレクトリを追加することはできません。

- (2) [シーケンス] のタブをクリックして、データ保存を [ユニークなフォルダ作成オン] にチェックを付けます。これは、シーケンスにおけるデータの保存場所を指定するものです。シングルランには影響を与えません。詳細については、4-3. を参照してください。



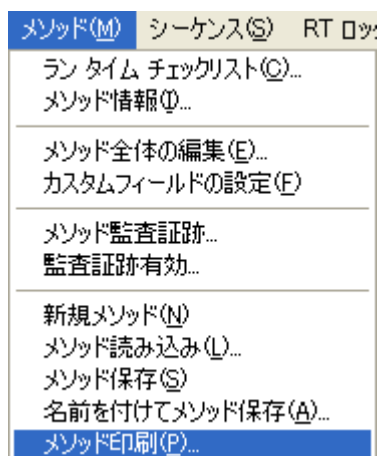
データ保存を [ユニークなフォルダ作成オン] にすると、シーケンスごとにフォルダが作成され、使用したシーケンスのコピー、使用したメソッド及び採取したデータが1つのフォルダにまとめて保存されます。このフォルダを「結果セット」と呼びます。



データ保存を [ユニークなフォルダ作成オフ] にすると、ケミステーションのバージョンが B.01.03 以前のようなデータの管理方法が用いられることになり、「結果セット」は作成されなくなります。

3-13. メソッドの印刷方法

(1) [メソッド] - [メソッド印刷] をクリックします。



(2) 印刷したい項目をチェックして [印刷] をクリックします。

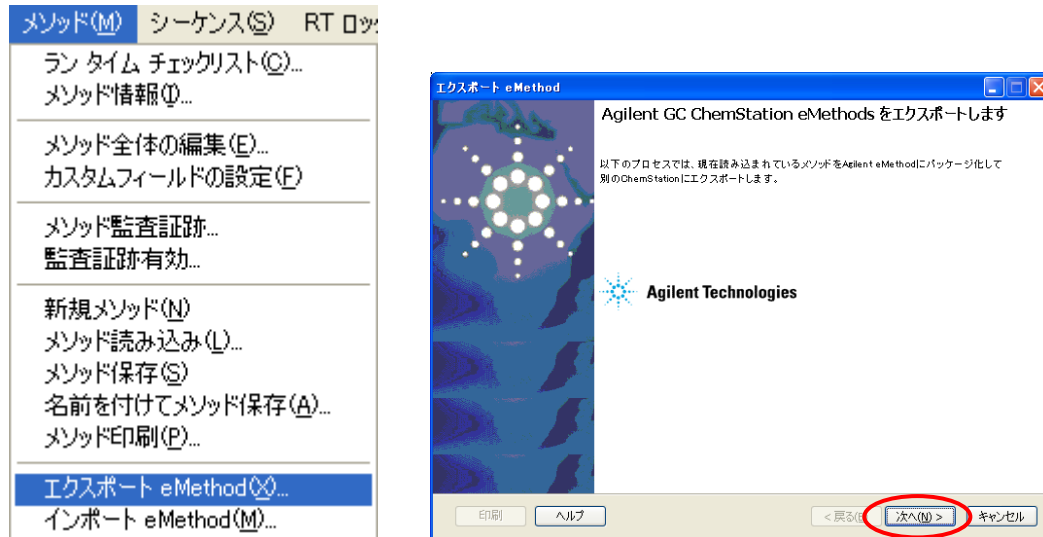


3-14. eMethod (エクスポート)

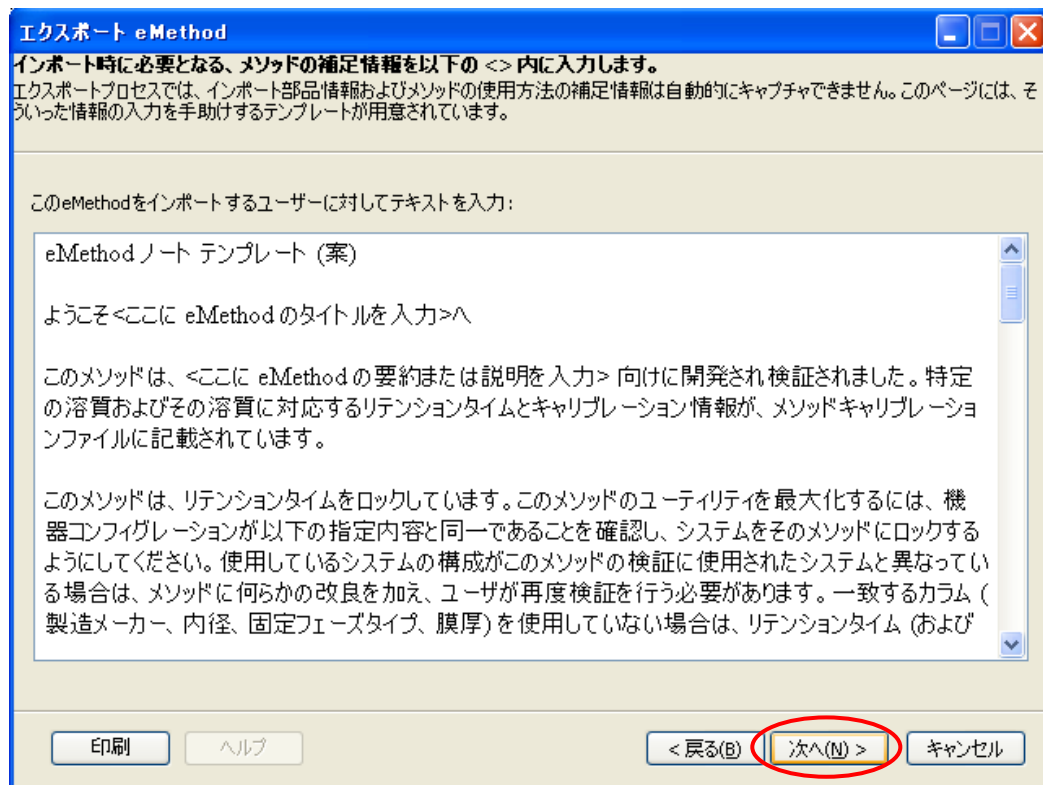
eMethod は、別のケミステーションに簡単にメソッドを転送するためのツールです。複数のファイルで構成されているメソッドを、1つのエンコードされたファイルに圧縮することができます。メソッドをエクスポートすることで、この圧縮ファイルを作成することができます。

なお、eMethod をインポートすると、エクスポートで圧縮されたファイルをオリジナルのメソッドファイルに変換することができます。3-15. を参照してください。

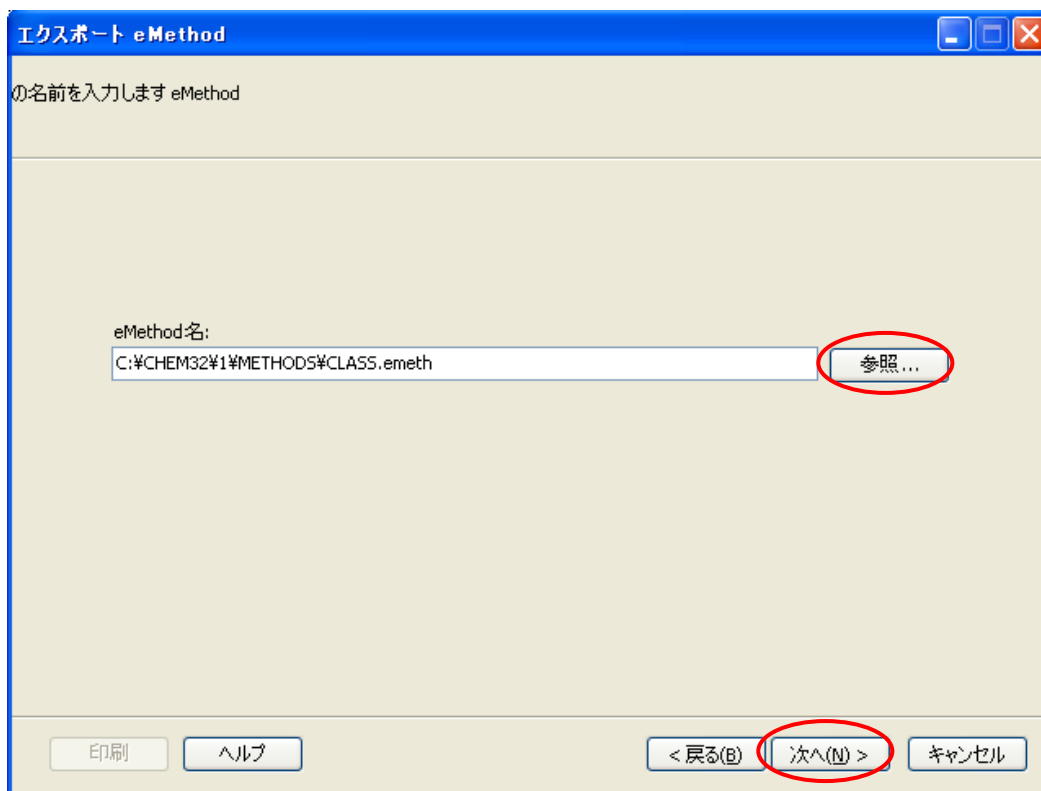
- (1) [メソッド] - [エクスポート e Method] をクリックします。
- (2) [次へ] をクリックします。



- (3) 必要に応じてメソッドの補足情報を入力し [次へ] をクリックします。



- (4) 「参照」をクリックしてメソッド名を選択した後、「次へ」をクリックします。拡張子の emeth が自動的に付けられます。



- (5) エクスポートが完了したので「完了」をクリックします。

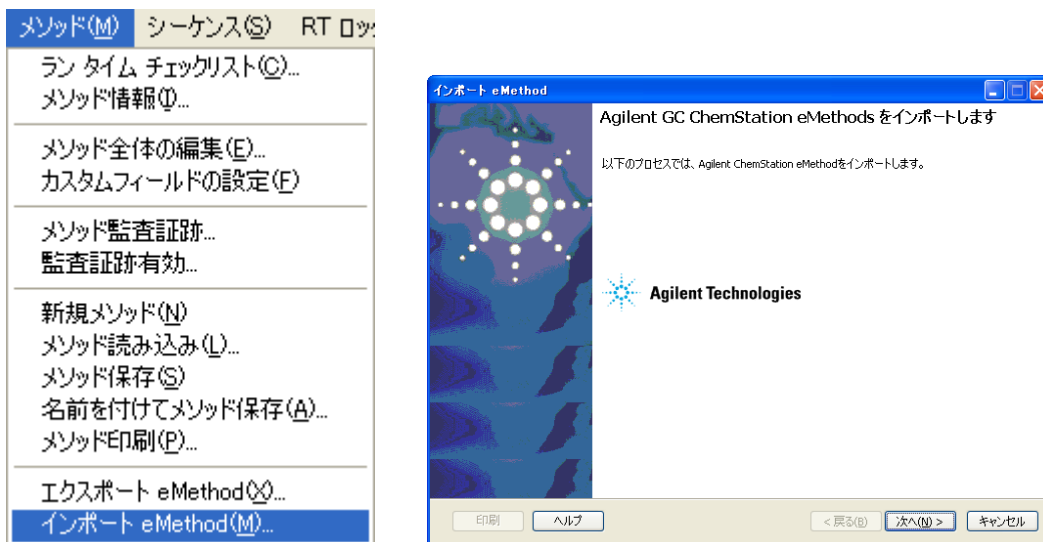


注意

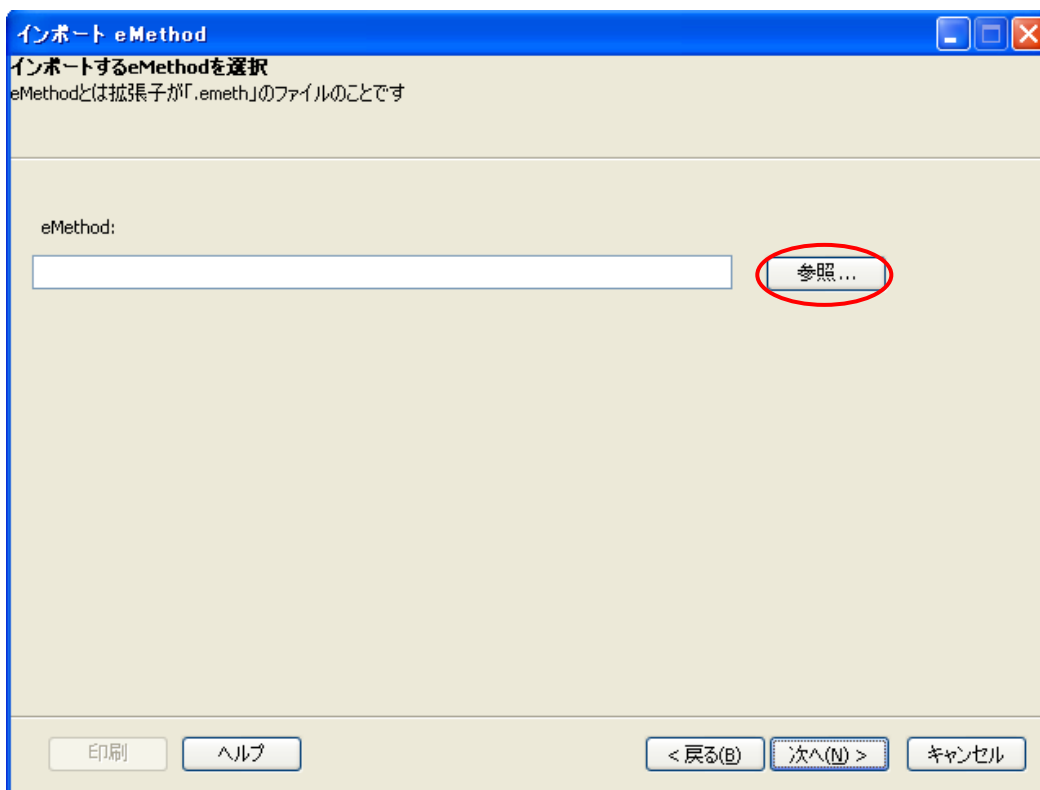
eMethod は編集できません。

3-15. eMethod (インポート)

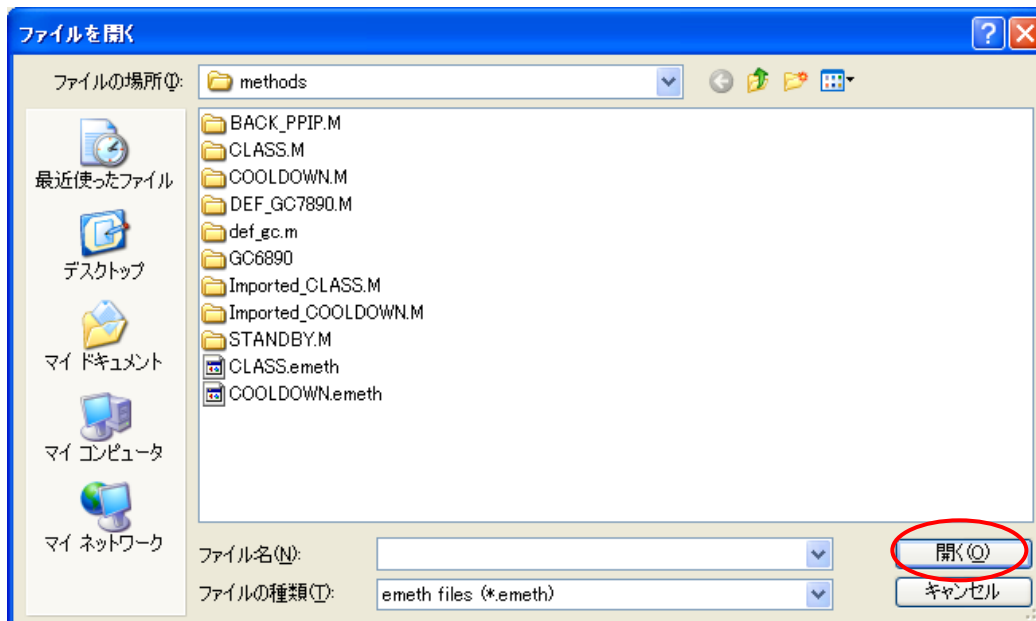
- (1) [メソッド] - [インポート e Method] をクリックします。
- (2) [次へ] をクリックします。



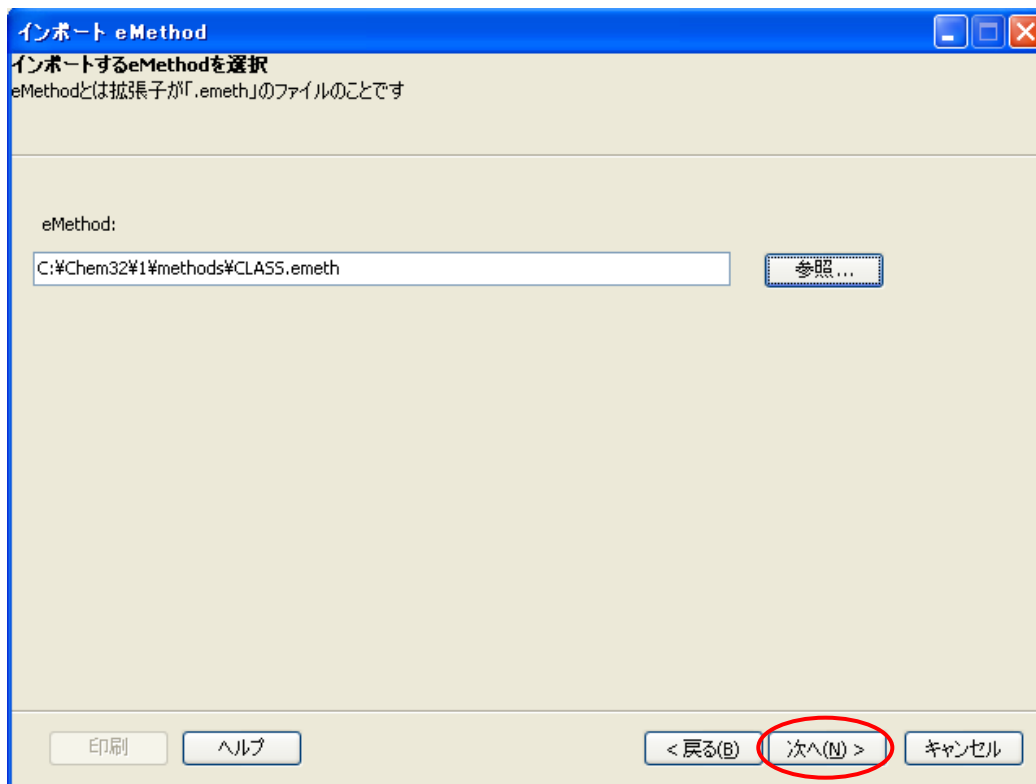
- (3) [参照] をクリックして、インポートしたいメソッド名を選択します。



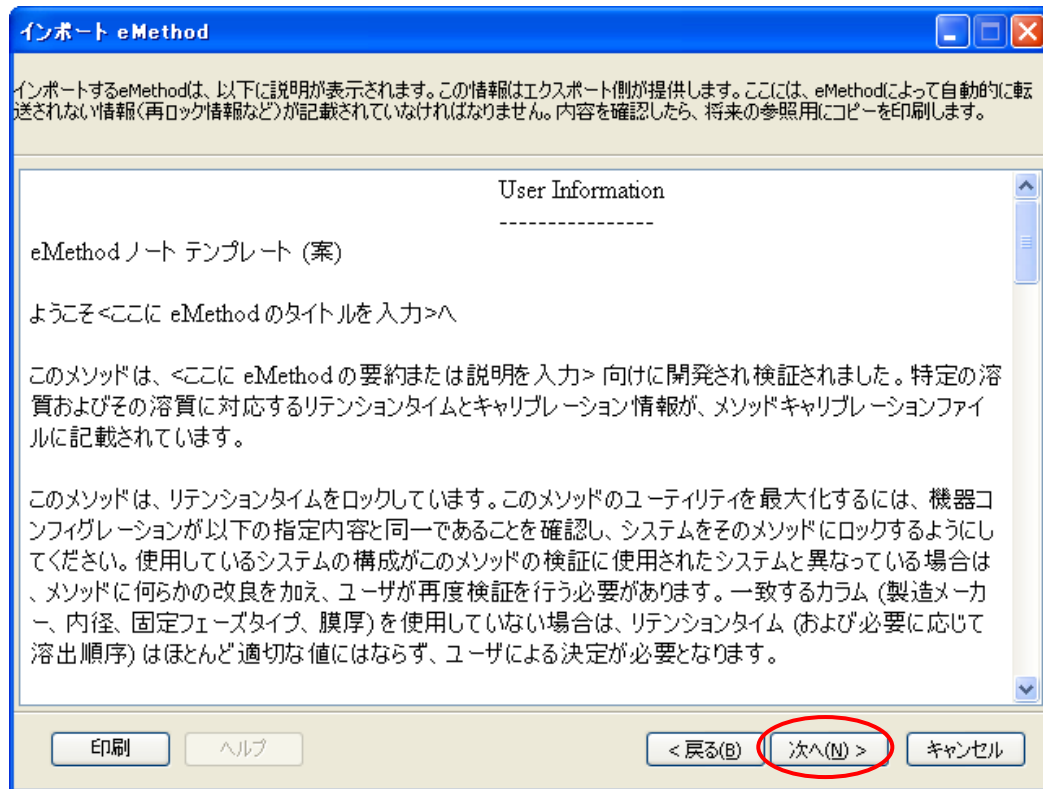
- (4) 拡張子が emeth のファイルがエクスポートされたファイルです。インポートしたいファイルを選んで「開く」をクリックします。



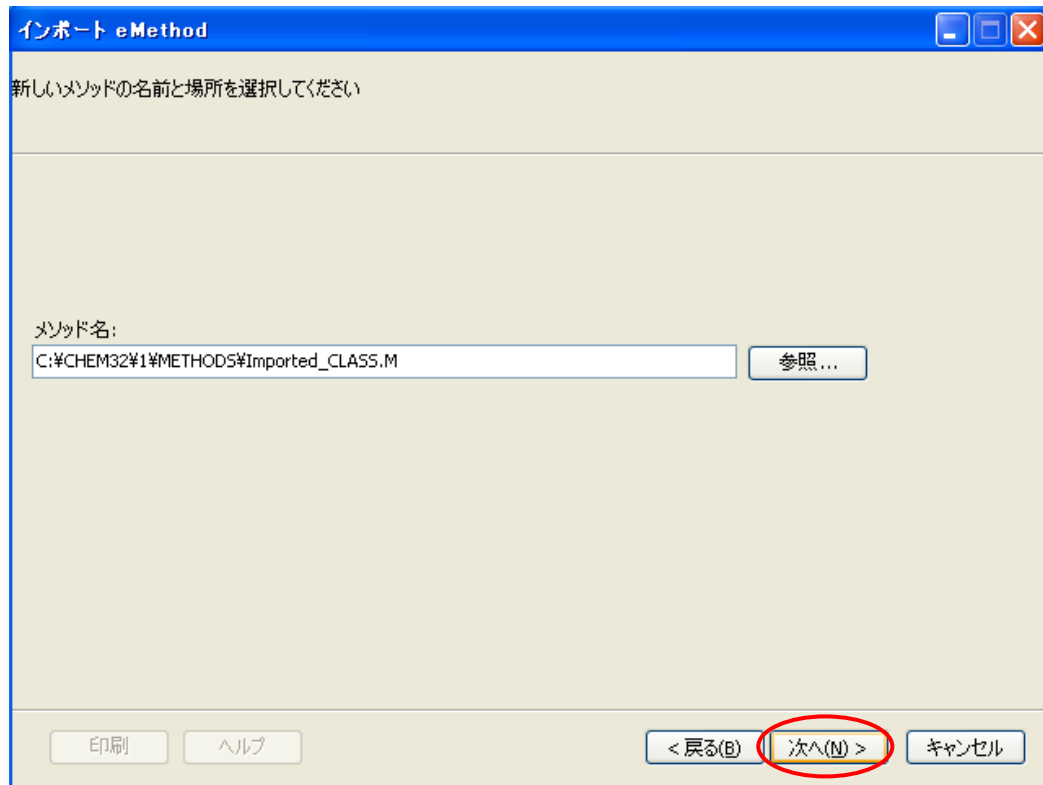
- (5) メソッド名を選択した後「次へ」をクリックします。



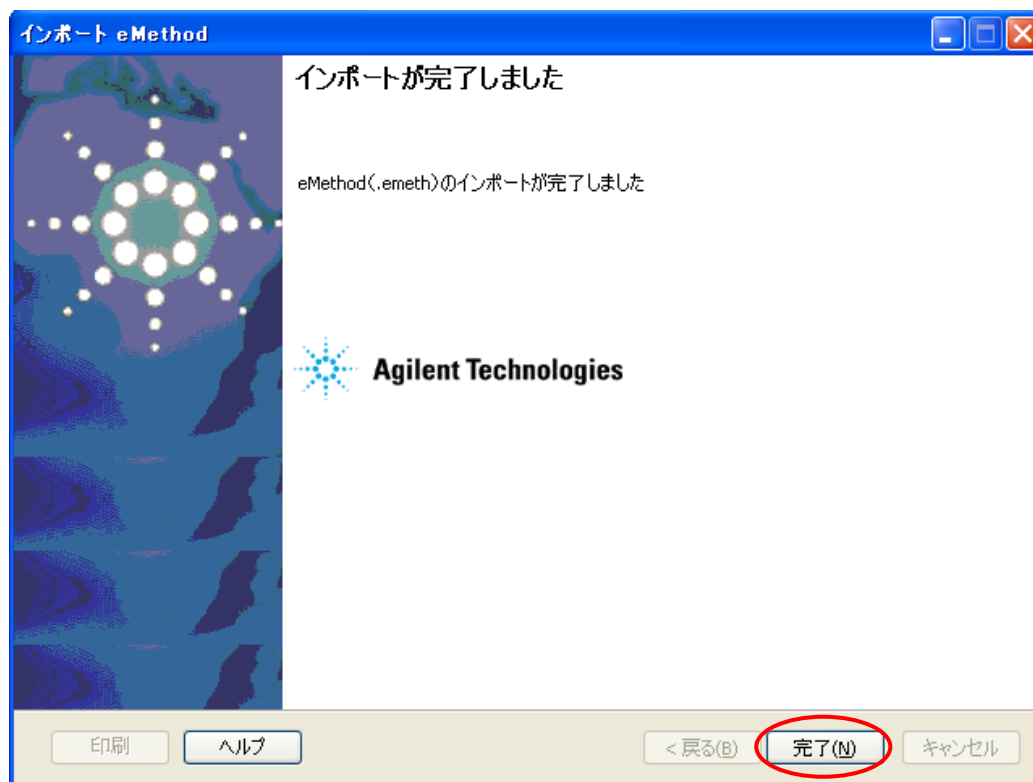
(6) エクスポート時に入力された情報を確認した後「次へ」をクリックします。



(7) インポート後のメソッド名を入力した後「次へ」をクリックします。



(8) インポートが完了したので「完了」をクリックします。





第4章 測定の実行とログブック

4-1. 測定の実行のフロー	4-2
4-2. メソッドの実行（ランメソッド）	4-3
4-2-1. メソッドの読み込み	4-3
4-2-2. サンプル情報の設定	4-4
4-2-3. メソッドの実行	4-5
4-3. シーケンスの実行	4-6
4-3-1. データフォルダの設定	4-7
4-3-2. シーケンステーブルの設定	4-9
4-3-3. シーケンスパラメータの設定	4-12
4-3-4. シーケンスファイルの保存	4-13
4-3-5. シーケンスの実行	4-14
4-3-6. カスタムフィールドの設定	4-15
4-4. ログブックの確認	4-21

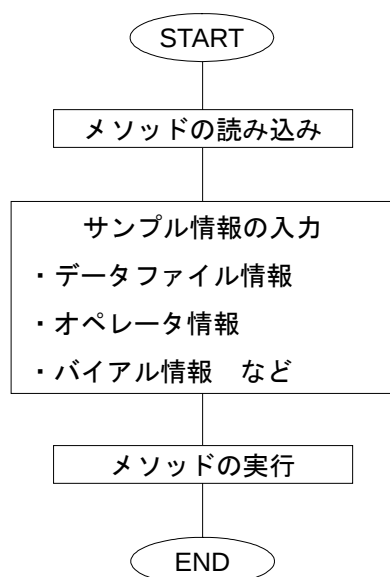
4. 測定の実行とログブック

この章では、測定の実行とログブックについて説明します。

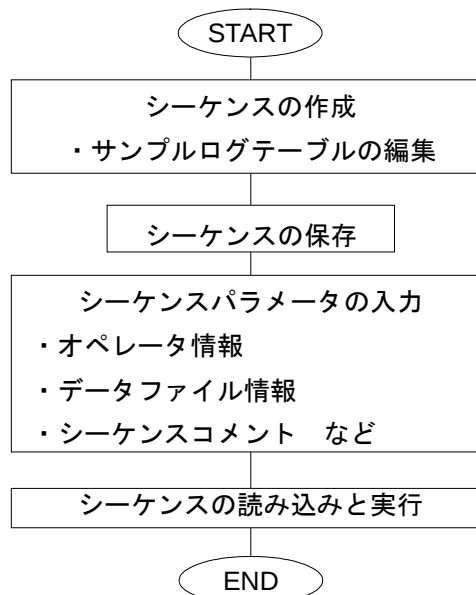
測定を実行する方法として、メソッドの実行（1 試料の測定）とシーケンスの実行（2 試料以上の連続測定）の2種類があります。

4-1. 測定の実行のフロー

<メソッドの実行>



<シーケンスの実行>

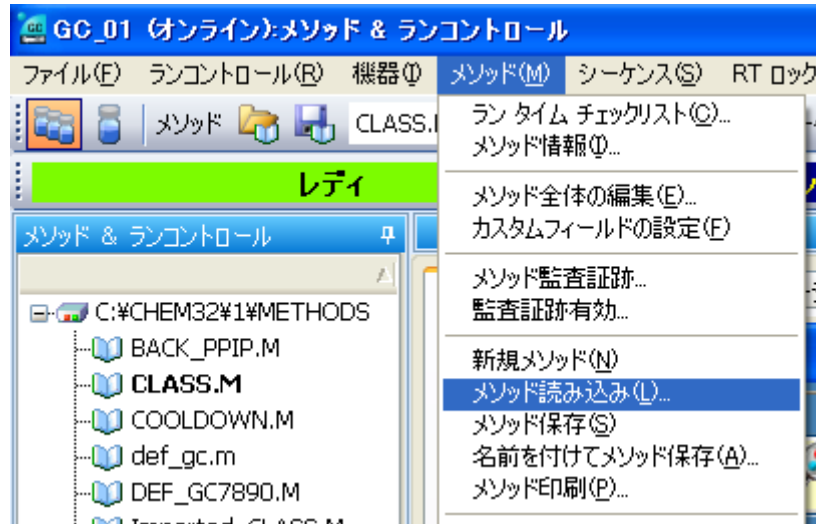


4-2. メソッドの実行（ランメソッド）

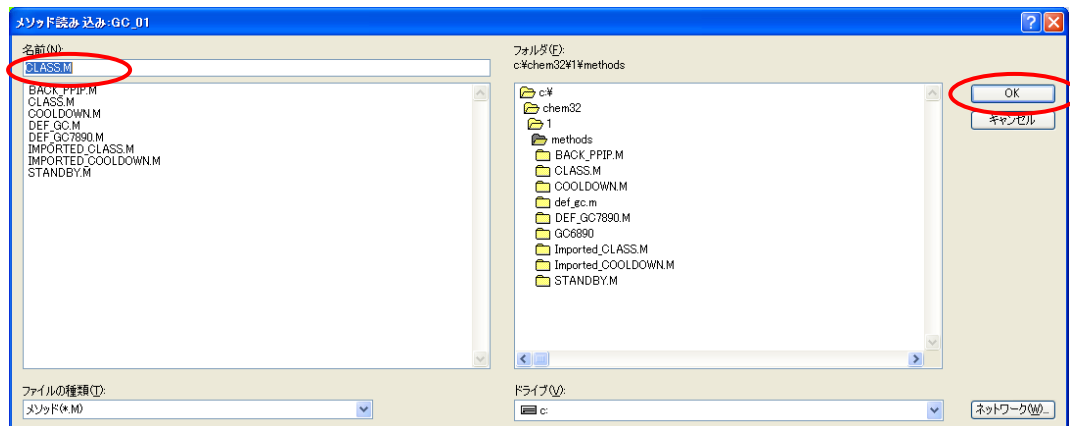
シングルラン（1 試料のみ）のデータを採取する場合には、サンプルロケーション（バイアル番号）の設定と、データの保存フォルダ及びデータファイル名を設定する必要があります。

4-2-1. メソッドの読み込み

(1) メニューから選択する場合は [メソッド] - [メソッドの読み込み] を選択します。

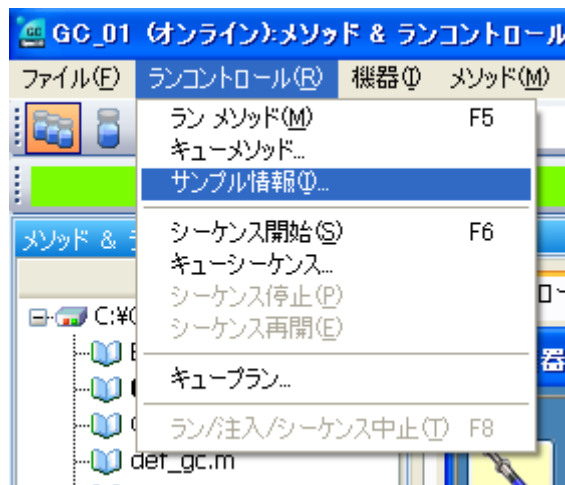


(2) 測定メソッド（以下の例では CHECKOUT.M）を選択して [OK] をクリックします。

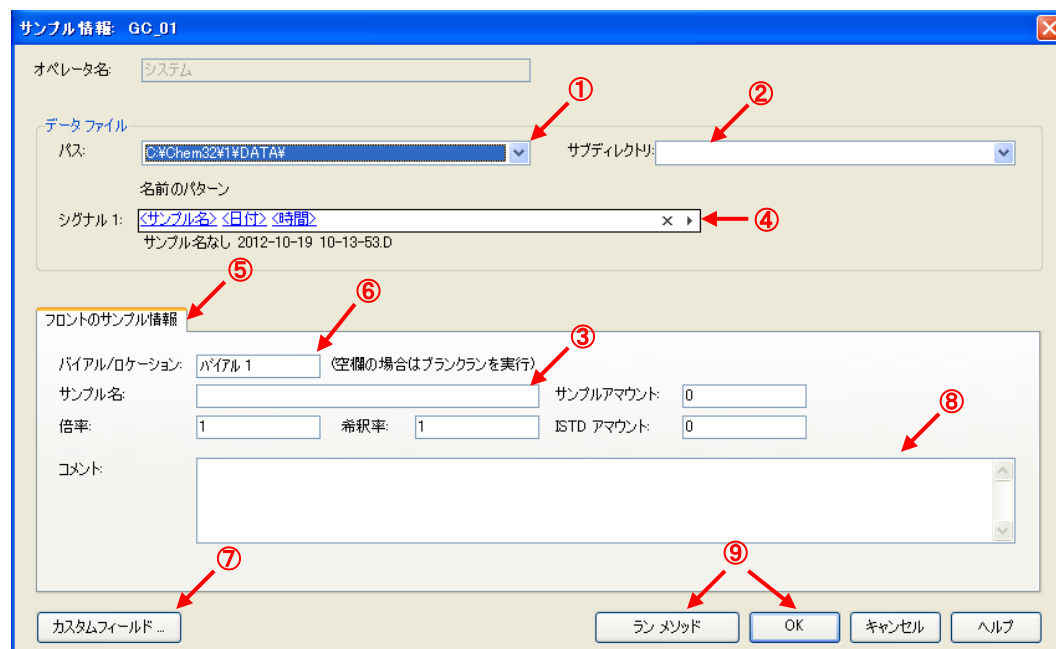


4-2-2. サンプル情報の設定

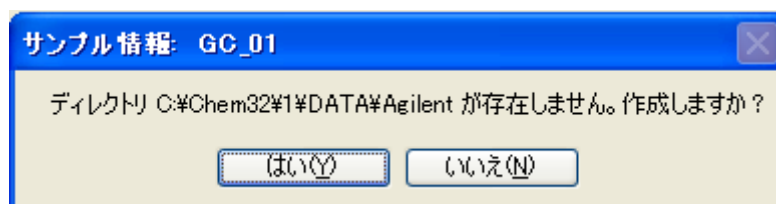
(1) メニューから [ランコントロール] - [サンプル情報...] を選択します。



(2) [サンプル情報] の画面が開きます。



- ① データファイルのパスをプルダウンから選択します。パスの追加方法は 2-8. を参照してください。
- ② データ管理をしやすいするため、サブディレクトリを設定します。半角英数字で 40 文字以内です。入力後、他のパラメータを編集しようとするメッセージが表示されますので [OK] をクリックします。



- ③ 任意でサンプル名を入力します。
- ④ データファイル名のパターンを指定します。デフォルトの設定では〔③で入力したサンプル名〕＋〔日付〕＋〔時間〕のパターンでデータファイル名が付けられます。拡張子の D は自動的に付与されます。フロント注入口を使用する時は、シグナル 1 でファイル名のパターンを指定します。バック注入口を使用する時は、シグナル 2 でファイル名のパターンを指定します。
- ⑤ 使用する注入口のタブが表示されます。デュアルインジェクション時は、フロント及びバックのサンプル情報をそれぞれ設定してください。
- ⑥ オートサンプルラで測定するバイアル位置の入力をします。空欄の場合は、ブランクランとなります。

【7693 シリーズ使用時】

150 サンプルトレイが接続されている場合 : 1～150

150 サンプルトレイが接続されていない場合

(16 バイアルターレットを使用する場合)

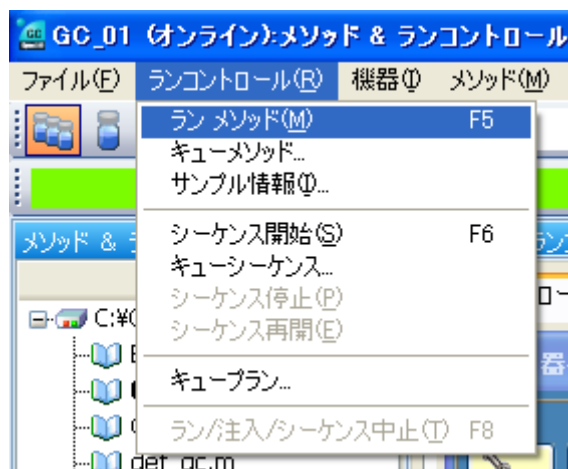
フロントインジェクタ : 101～116

バックインジェクタ : 201～216

- ⑦ [カスタムフィールド] は、サンプルや化合物の情報を測定ごとに入力したい場合に使用します。詳細は 4-3-6. を参照して下さい。
- ⑧ 任意でコメントを入力します。
- ⑨ [ランメソッド] で測定が開始されます。[OK] で上記の編集内容が保存されます。

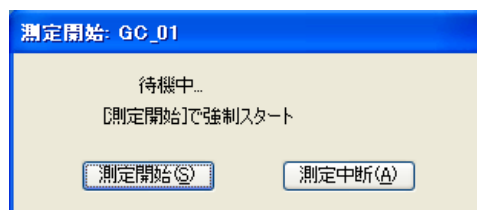
4-2-3. メソッドの実行

- (1) メニューから [ランコントロール] - [ランメソッド] を選択します。または、サンプル情報の画面 (4-2-2. を参照) から [ランメソッド] をクリックしても測定が開始されます。



<参考>

測定を開始すると状況により、以下のようなメッセージが表示されます。GC がレディー状態になっていない場合は、準備が完了するまでこのメッセージが表示されます。



<参考>

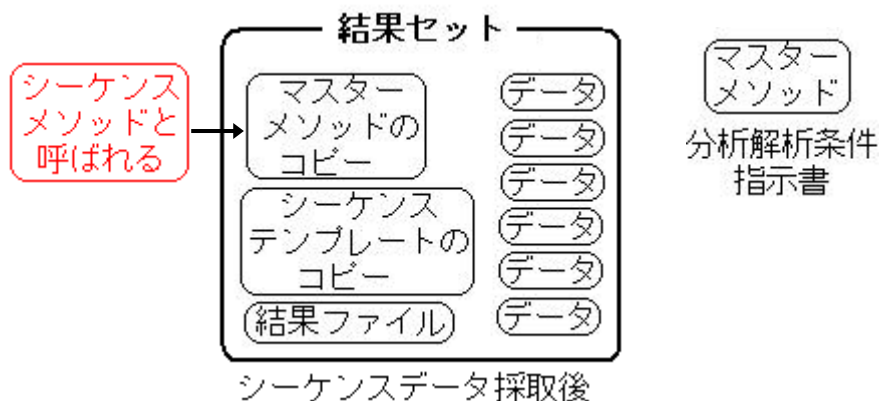
オンラインプロットには、測定が開始した時点で、赤い縦線が表示されます。

(2) 測定が正常に終了すると、レポートがスクリーン及びプリンタに出力されます。

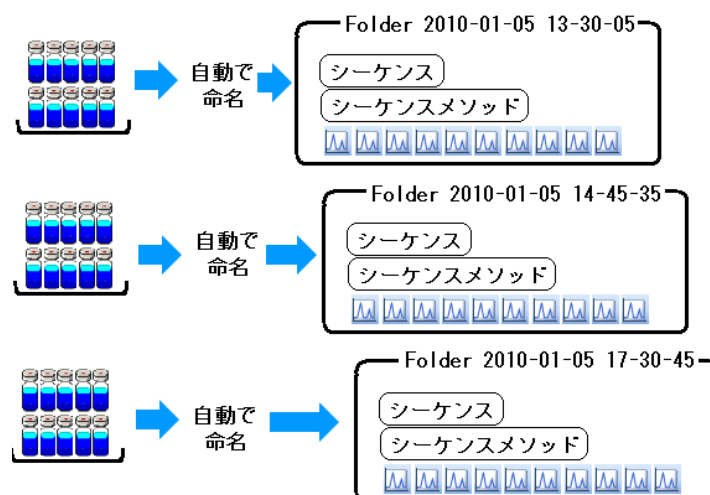
4-3. シーケンスの実行

指定した順序で、指定したメソッドを連続して実行することをシーケンスと呼びます。シーケンスを用いると、試料の連続測定を効率良く行うことが可能です。シーケンスは、シーケンステンプレートの情報に基づいて実行されます。シーケンステンプレートでは「何番のバイアルを」「どのメソッドで」「何回繰り返して」測定するか、などの情報が定められています。

詳細については、ケミステーションに付属している「新しい ChemStation ワークフロー入門」を参照してください。

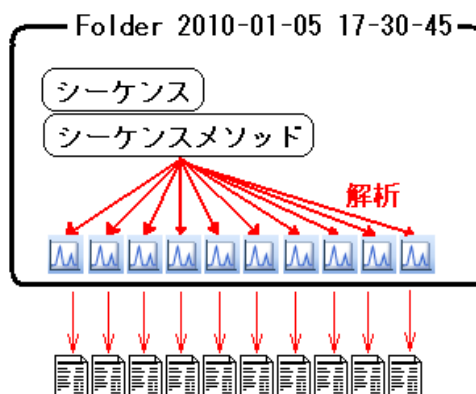


ケミステーションでは、シーケンスで採取した一連のデータ、使用したメソッドのコピー、使用したシーケンステンプレートのコピー及び結果ファイルを1つのセットとして保存する機能があります。これを「結果セット」と呼びます。これにより、シーケンスごとのデータ管理が容易になります。



結果セット内に保存される、測定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、データ解析の結果として「ACAML」ファイルが生成されますが、これはレビューで使用されます。

結果セット内の「シーケンスメソッド」を使用することにより、同じメソッドで一連のデータを再解析することができます。なお、この場合、マスターメソッドに影響を与えることはありません。

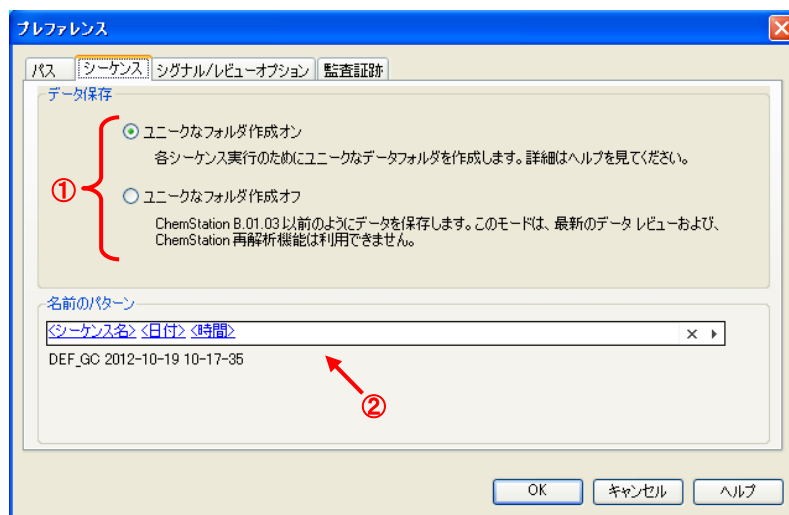


また、データの上書きを防止するため、シーケンスを実行するたびに、結果セットが生成されます。すなわち、毎回ユニークな（フォルダ名が異なる）新しいフォルダが生成されることになります。このことから、結果セットを生成する機能のことを「ユニークなフォルダ作成機能」と呼びます。この機能については、次の4-3-1.を参照してください。

4-3-1. データフォルダの設定

メニューから「表示」-「プレファレンス」を選択します。

(1) 「プレファレンス」ダイアログボックスのシーケンスタブを開きます。



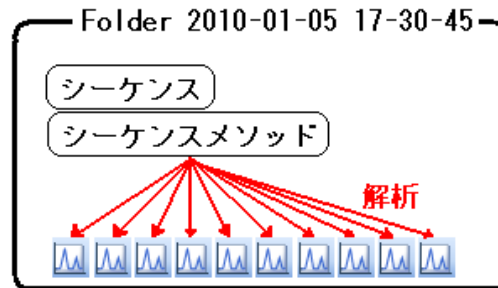
① データ保存方法について、ケミステーション B.02.01 以降に取り入れられたユニークなフォルダ作成の利用の有無を選択できます。

[ユニークなフォルダ作成オン]

- ・ シーケンスを実行するたびに新しいフォルダが作成され、シーケンスで採取した一連のデータ、使用したメソッドのコピー、使用したシーケンステンプレートのコピー及び結果ファイルが、このフォルダの中にまとめて保存されます。そのため、既存のデータファイルが上書きされてしまう心配がありません。
- ・ データを解析する時に、結果セット内のシーケンスメソッドを参照するため、メソッド及びデータの一括管理が可能です。

<例>

結果セット内のシーケンスメソッドを使用して解析するときのイメージを示します。

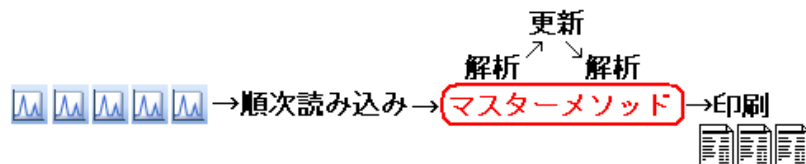


[ユニークなフォルダ作成オフ]

- ・ 結果セットは作成されません。データは、指定されたフォルダに保存されます。
- ・ メソッドやシーケンスは、データと一緒に保管されません。
- ・ 解析の時はマスターメソッドあるいはデータごとに付属するメソッド（DA.M）のいずれかを使用します。
- ・ マスターメソッドは、常に変更を受ける可能性があります。
- ・ データとその解析に使用したメソッドを、ユーザーが組み合わせて保管する必要があります。
- ・ データごとに付属するメソッド（DA.M）を使用する場合、他のデータと比較する時に注意が必要になります。

<例>

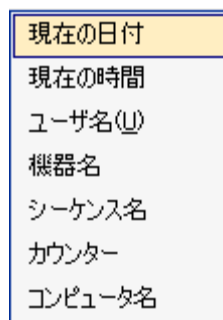
マスターメソッドを使用して解析するときのイメージを示します。この場合、解析メソッドとしてどのメソッドを使用したかを正確に記録しておく必要があります。



注意

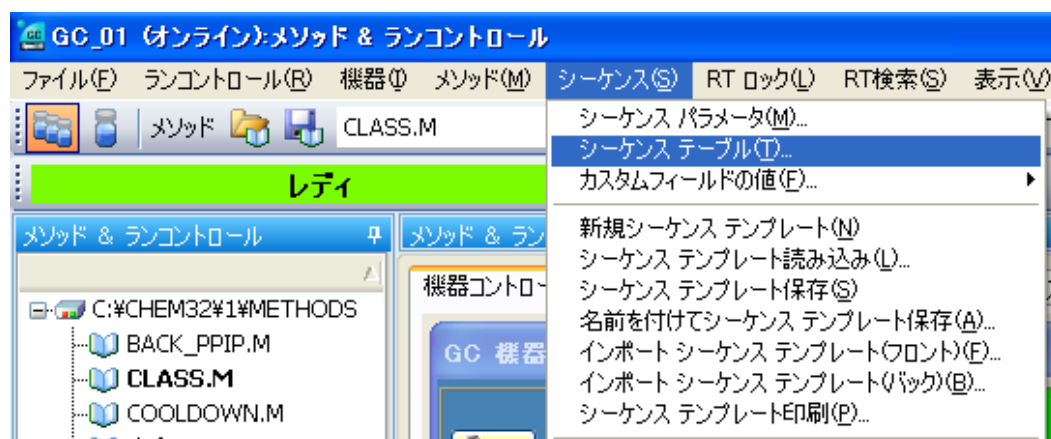
データ保存方法の設定を、日常の測定において途中で変更することは、推奨できません。必ず、どちらかの保存方法に固定して使用してください。予期しないデータの上書きが発生する可能性があります。

- ② 結果セット名のパターンを設定します。右端の [ㅓ] をクリックすると、項目選択メニューが表示されるので、その中から必要な項目をクリックします。

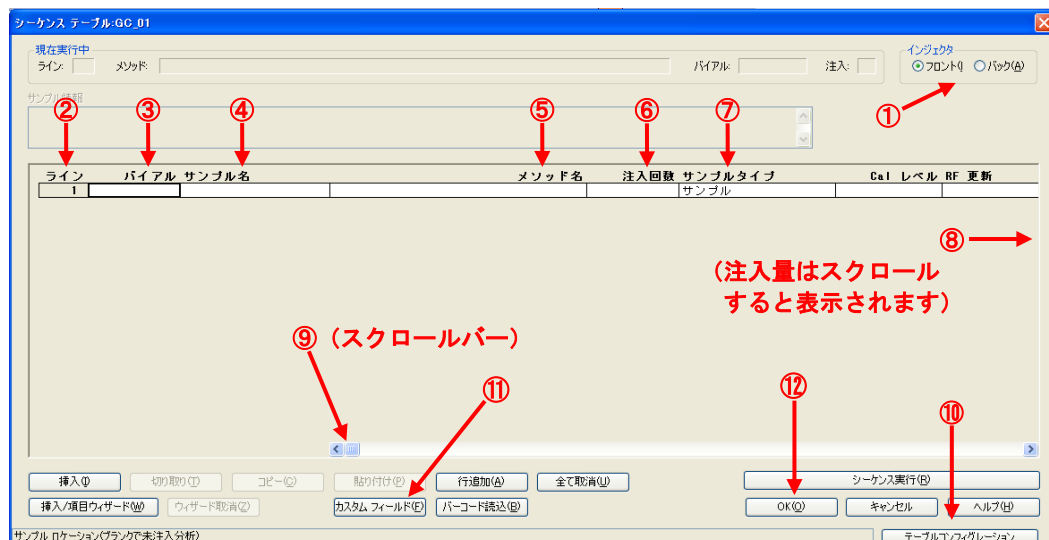


4-3-2. シーケンステーブルの設定

- (1) 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。



(2) [シーケンステーブル] ダイアログボックスを編集します。



- ① インジェクタ：接続されているインジェクタを選択します（フロント、バック）。デュアルインジェクタの場合は、フロント、バックともに設定します。
- ② ライン：シーケンスライン番号です。自動的に付与されます。
- ③ バイアル：バイアル番号を入力します。空欄の場合はブランクランになります。
【7693 シリーズ使用時】
150 サンプルトレイが接続されている場合 : 1～150
150 サンプルトレイが接続されていない場合
(16 バイアルターレットを使用する場合)
フロントインジェクタ : 101～116
バックインジェクタ : 201～216
- ④ サンプル名：サンプル名を入力します。入力しなくても測定できます。
- ⑤ メソッド名：メソッド名のフィールドをクリックすると矢印が表示されます。矢印をクリックすると、保存されているメソッドファイル名が表示されますので、その中から使用するメソッドファイル名を選択します。
- ⑥ 注入回数：1 バイアルごとの注入回数を入力します。
- ⑦ サンプルタイプ：通常の測定では「サンプル」を選択します。
- ⑧ 注入量：スクロールバー（⑨）を右側へスライドしていくと、注入量が右端にあります。ここで入力した注入量は、メソッドで設定された注入量よりも優先されます。通常は設定不要です。
- ⑨ スクロールバー
- ⑩ [テーブルコンフィグレーション] をクリックすると、シーケンステーブルエディタ設定画面が表示されます。シーケンステーブルに表示させる項目の表示／非表示を切り替えることができます。また、各カラム幅の数値を変更すると、シーケンステーブルのカラム幅が変更できます。
- ⑪ [カスタムフィールド] は、サンプルや化合物の情報を測定ごとに入力したい場合に使用します。詳細は4-3-6. を参照してください。
- ⑫ [OK] をクリックすると、画面が閉じます。

シーケンス テーブル エディタ設定

カラム	表示	幅
バイアル	☒	12
サンプル名	☒	20
メソッド名	☒	35
注入回数	☒	12
サンプルタイプ	☒	21
Cal レベル	☒	14
RF 更新	☒	18
RT 更新	☒	17
インターバル	☒	14
サンプル アマウント	☒	20
ISTD アマウント	☒	18
倍率	☒	17
希釈率	☒	17
データ ファイル	☒	25
注入量	☒	15
Lims ID	☒	25
Lims ID2	☒	25
Lims ID3	☒	25

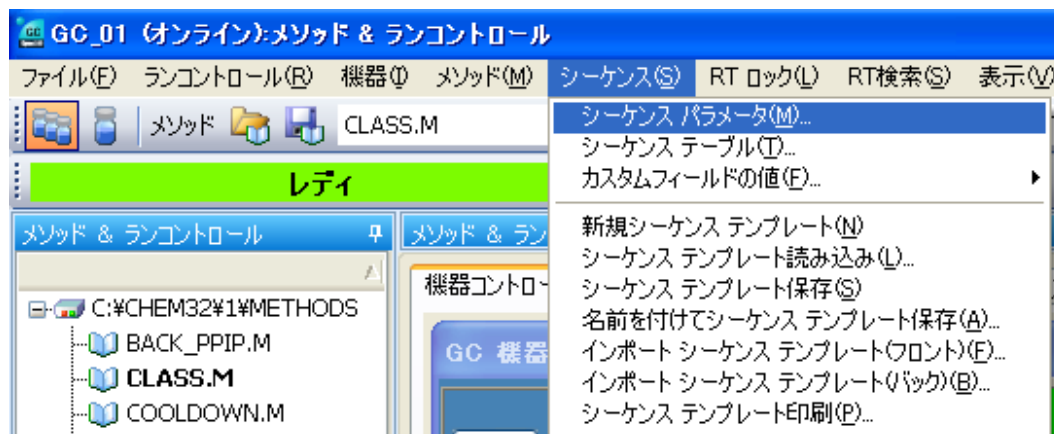
OK キャンセル 初期値

- (3) 連続したバイアルの設定を行うには、以下の機能を使用すると簡単に設定できます。シーケンステーブルダイアログボックス内の「挿入/項目ウィザード」をクリックします。

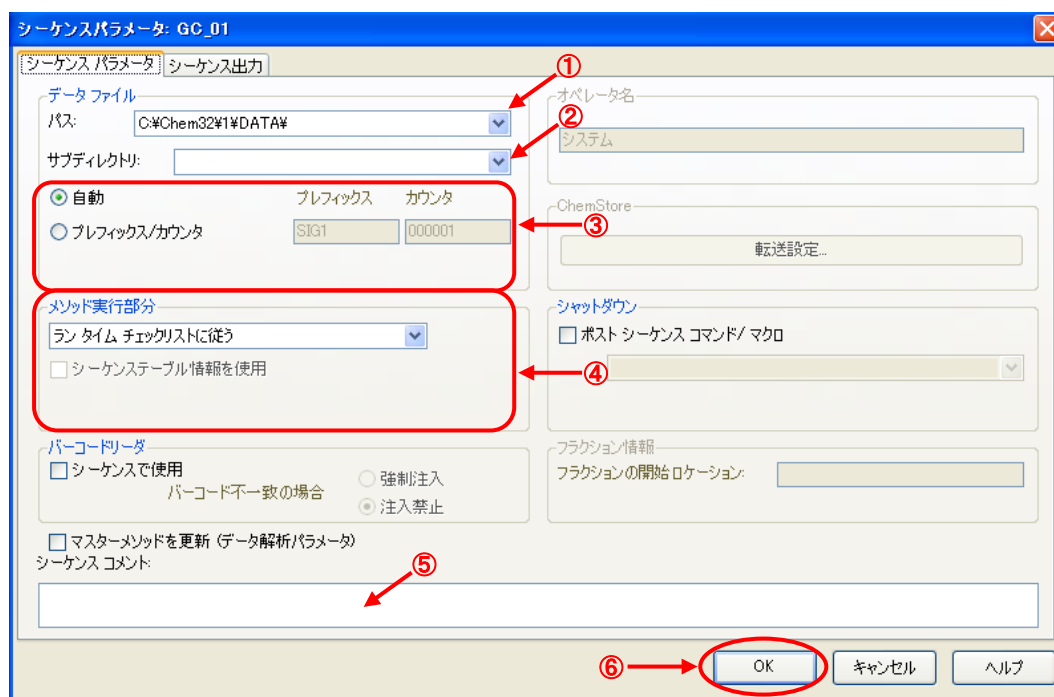
- ① シーケンステーブルの編集方法を指定することができます。次の項目の中から選択できます。
- 追加 : 行をシーケンステーブルの最後に追加します。シーケンステーブルが空の場合は、このモードしか利用できません。
 - 挿入 : 選択したシーケンスラインの上に行を挿入します。
 - リスト設定 : 検出された範囲のリストがアクティブになり、変更が可能となります。
 - 行間隔 : 挿入またはリスト設定でのみ、利用可能です。
 - 挿入する行数 : 追加または挿入モードでのみ、利用可能です。
- ② ロケーション指定
- 開始ロケーション : フィールドに最初のロケーション（バイアル）番号を入力します。
 - インクリメント : ロケーション（バイアル）番号の増分数です。通常は1を入力します。
- ③ メソッド名 : 使用するメソッドファイル名を選択します。
- ④ サンプル名 : サンプル名を入力します。
- ⑤ 注入回数 : 1 バイアルごとの注入回数を入力します。
- ⑥ サンプルタイプ : 通常の測定では「サンプル」を選択します。
- ⑦ 注入量 : メソッドで設定した注入量と同じ場合、入力する必要はありません。
- 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。

4-3-3. シーケンスパラメータの設定

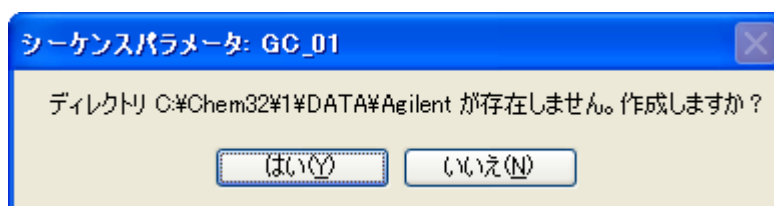
(1) メニューから [シーケンス] - [シーケンスパラメータ...] を選択します。



(2) [シーケンスパラメータ] のタブをクリックします。



- ① データファイルのパスはプルダウンから選択します。パスの追加方法は2-8. を参照してください。
- ② データ管理をやすくするため、サブディレクトリを設定します。半角英数字で 40 文字以内です。入力後、他のパラメータを編集しようとすると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>003 F 01 01.Dの場合

003 [バイアル番号]

F [シグナル 1(F)またはシグナル 2(B)]

01 [シーケンスライン]

01 [注入回数]

[プレフィックス／カウンタ]

プレフィックス+カウンタ(数字) で構成されます。合計で最大 15 文字の名前が付けられます。プレフィックスが 9 文字を超えると、カウンタの長さは短くなります。

<例>TEST 000001.D の場合

TEST [任意の英数字を使用]

000001 [最大 6 桁の数値]

④ メソッド実行部分

[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。

[データ取り込みのみ]

データ取り込みのみを実施します。

[データ解析のみ]

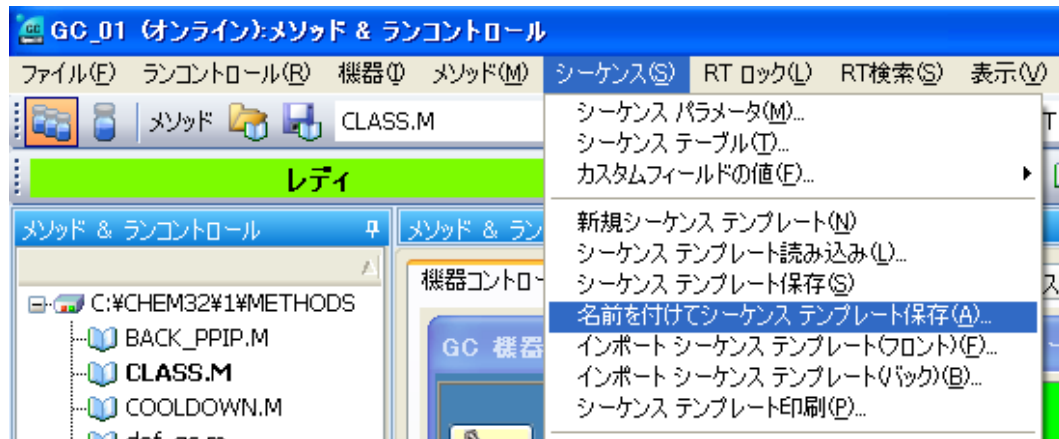
データ解析のみを実施します。

⑤ 任意でシーケンスコメントを入力します。

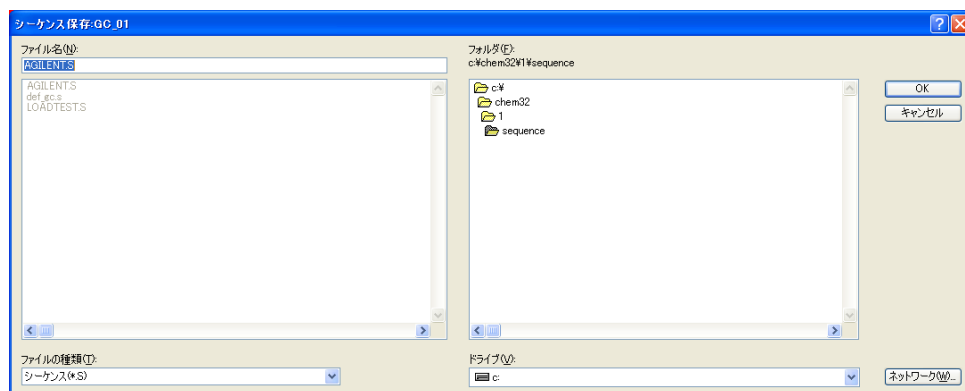
⑥ [OK] をクリックすると、上記の編集内容が保存されます。

4-3-4. シーケンスファイルの保存

(1) メニューから [シーケンス] - [名前を付けてシーケンス保存...] を選択します。



(2) [シーケンス保存] ダイアログボックスにシーケンスファイル名を入力します。拡張子の S は自動的に付与されます。



- (3) シーケンスを上書き保存する場合は、メニューから [シーケンス] – [シーケンス保存] を選択します。

4-3-5. シーケンスの実行

- (1) メニューから [ランコントロール] – [シーケンス開始] を実施すると、シーケンスが開始します。



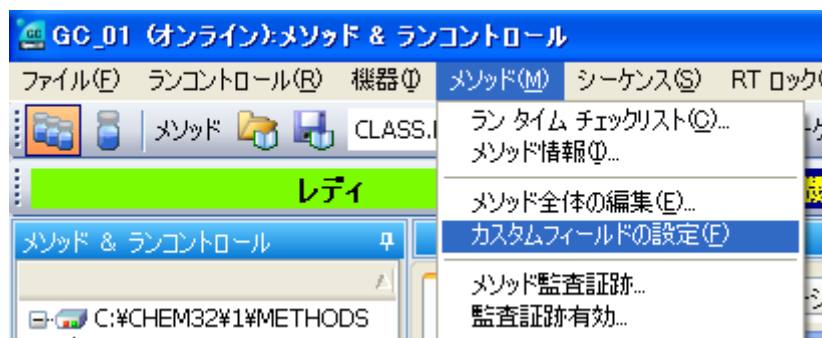
<参考>

シーケンスパラメータ画面（4-3-3. を参照）の [メソッド実行部分] で設定した内容に基づきシーケンスが開始します。

4-3-6. カスタムフィールドの設定

ケミステーションにはメソッドやシーケンスのコメント、サンプル情報、シーケンスラインごとのサンプル情報などを入力するフィールドがあります。しかし、入力忘れてフィールドが空欄のままでも測定は実行できます。カスタムフィールドの機能では、サンプルや化合物ごとにカスタムフィールドを定義することができ、情報を入力することができます。カスタムフィールドを入力しないと測定は開始されません。

(1) メニューから [メソッド] - [カスタムフィールドの設定] を選択します。



(2) [カスタムフィールド定義の設定] 画面が表示されます。



- ① カスタムフィールドの追加
- ② カスタムフィールドの削除
- ③ カスタムフィールドの順序調整
- ④ カスタムフィールドの順序調整
- ⑤ サンプルカスタムフィールドです。サンプルに関する内容を定義します。
- ⑥ 化合物カスタムフィールドです。サンプルに含まれる各化合物の内容を定義します。
化合物カスタムフィールドを反映させるには検量線を作成する必要があります。

- (3) カスタムフィールドを追加するには、[カスタムフィールド定義の設定] 画面の  をクリックすると追加されます。各フィールドには最大 10 個の項目を作成することが出来ます。



カスタムフィールド定義の設定: CLASS.M

サンプルカスタムフィールド

	名前	タイプ	デフォルト値	必須
1.	Sample	TEXT	5188-5372	☒
2.	LOT	TEXT	CD-1663	☒

化合物カスタムフィールド

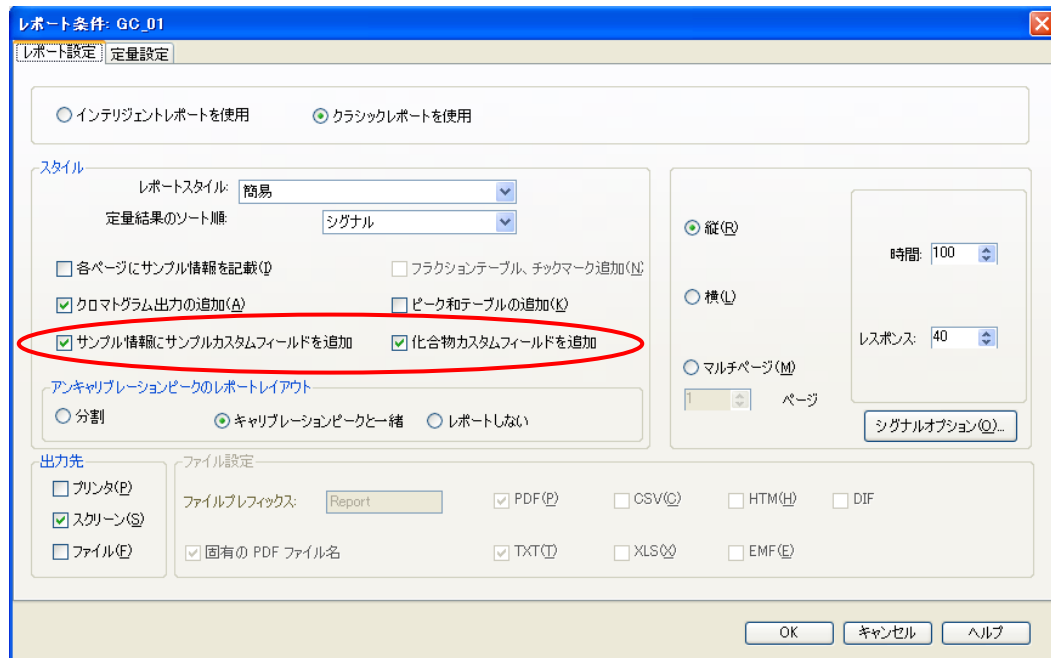
	名前	タイプ	デフォルト値	必須
1.	濃度	TEXT		☒

OK キャンセル ヘルプ インポート

- ① [名前] にはフィールドの名前を入力します。最大 30 文字まで入力可能です。
 <例> Lot No、Parts No、重さ、色など。
- ② [タイプ] をプルダウンから選択します。
 DATETIME [デフォルト値] に日付が表示されるので変更します。
 NUMERIC [デフォルト値] に数値のみ入力可能です。
 TEXT [デフォルト値] に最大 50 文字まで入力可能です。
- ③ [デフォルト値] には [タイプ] で指定した内容を入力します。測定前に入力が可能です。空欄でもかまいません。
- ④ [必須] のチェックボックスがオンの場合、カスタムフィールドの値を入力しないと、測定またはシーケンスが開始されません。
- ⑤ [インポート] をクリックすると、メソッド選択画面が表示されます、別のメソッドからカスタムフィールドをインポートするときに使用します。

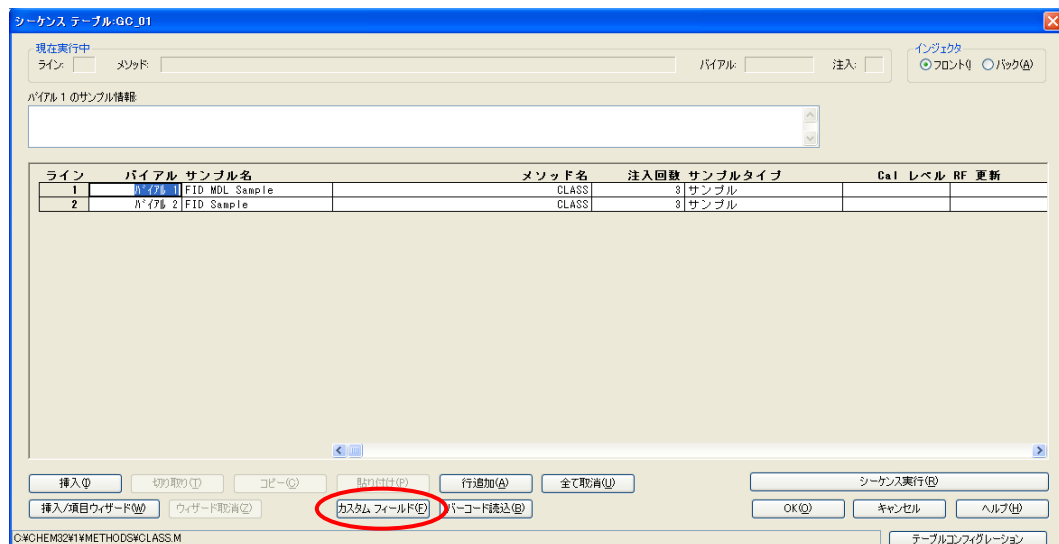
(4) カスタムフィールド情報をレポートに表示させる

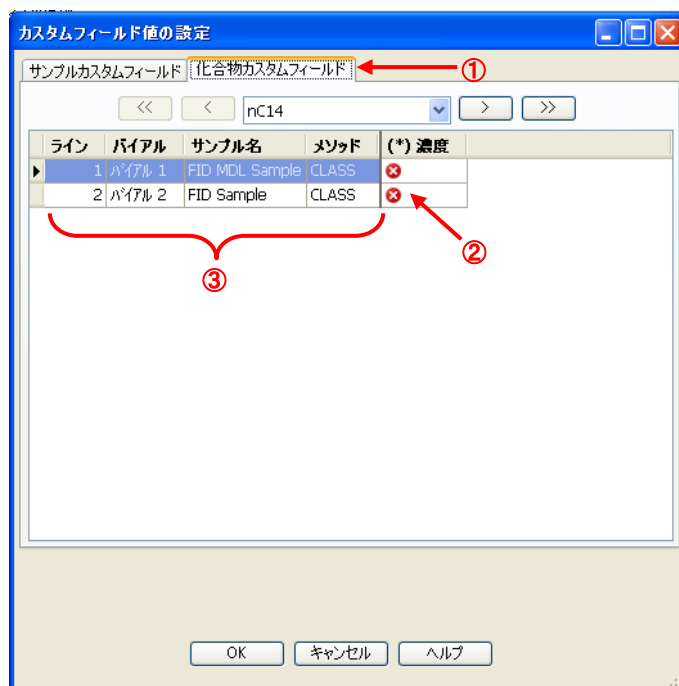
データ解析画面のメニューから「レポート」－「レポート条件」を選択します。「サンプル情報にカスタムフィールドを追加」と「化合物カスタムフィールド」にチェックを入れます。



(5) カスタムフィールド値の指定

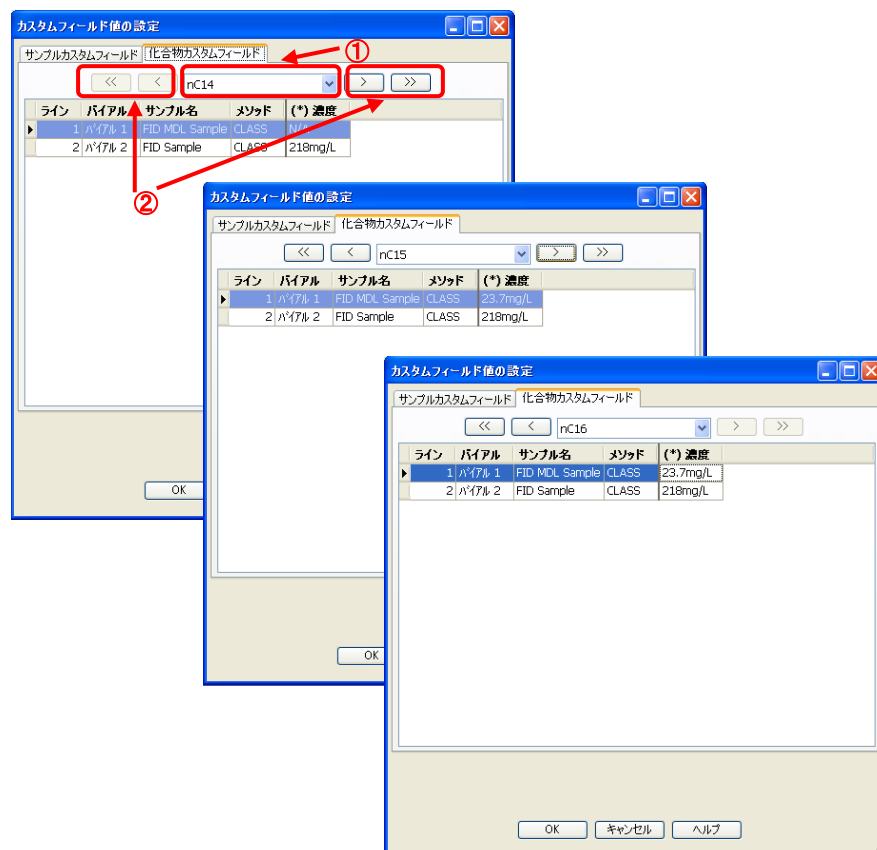
メニューから「シーケンス」－「シーケンステーブル」を選択します。「カスタムフィールド」をクリックします。





- ① タブをクリックして目的のフィールドを表示します。
[化合物カスタムフィールド] タブは、検量線テーブルが作成されていないと表示されません。
- ② ✕ の項目を入力します。デフォルト値が入力されている場合は再入力します。
- ③ [ライン]、[バイアル]、[サンプル名] 及び [メソッド] は、シーケンステーブルで入力した項目が反映されます。

(6) 化合物カスタムフィールドタブ



- ① ここには検量線テーブルに登録してある化合物名が表示され、選択できます。
- ② 各化合物のフィールドを編集するには << < > >> をクリックします。または、化合物名のプルダウンから移動します。

注意

化合物カスタムフィールドタブは、あらかじめ検量線テーブルを作成していないと表示されません。[ライン]、[バイアル]、[サンプル名] 及び [メソッド] は、シーケンステーブルで入力した項目が反映されます。この画面では編集できません。

(7) サンプルカスタムフィールド タブ

[(*) Sample] [(*) LOT] の(*)が表示されている項目は、カスタムフィールド定義の設定画面（4-3-6. (3)の画面）で追加した項目です。(*)の項目に、サンプル情報を入力してください。このフィールドを空欄にすることはできません。入力する必要の無い場合は「カスタムフィールド定義の設定」画面の「必須」のチェックボックスからチェックを外してください。

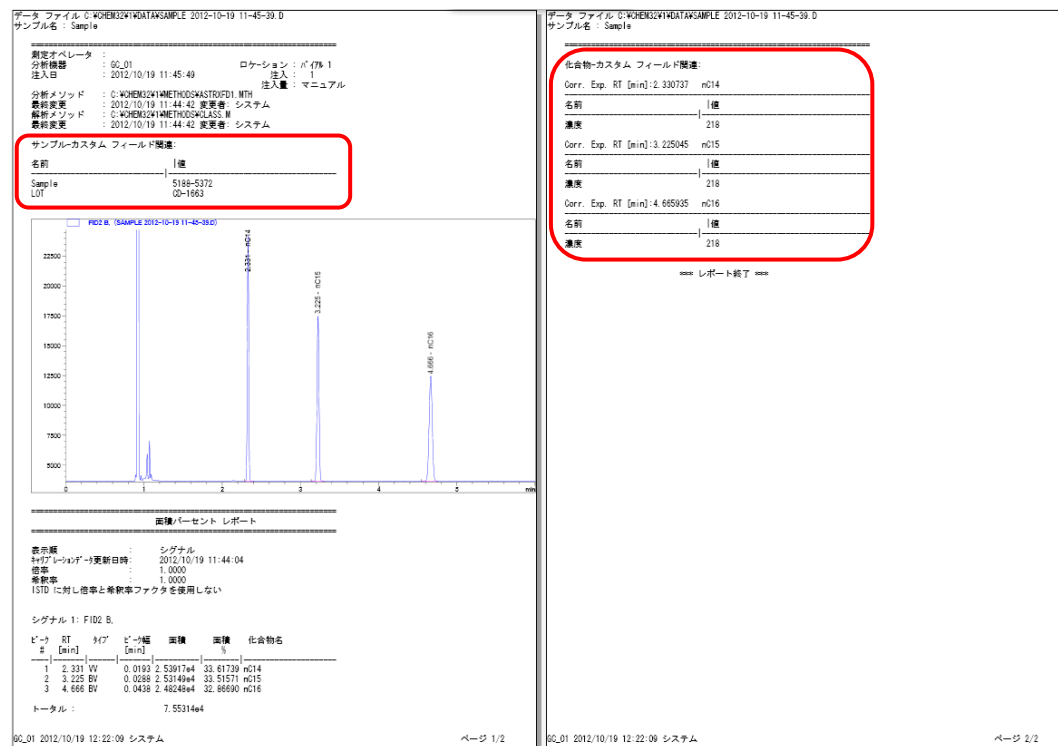
ライン	バイアル	サンプル名	メソッド	(*) Sample	(*) LOT
1	バイアル 1	FID MDL Sample	CLASS	5188-5372	CD-1663
2	バイアル 2	FID Sample	CLASS	18710-60170	CC-3175

注意

[ライン]、[バイアル]、[サンプル名] 及び [メソッド] は、シーケンステーブルで入力した項目が反映されます。この画面では編集できません。

(8) カスタムフィールド情報の入ったレポート作成

カスタムフィールドの値をレポートへ出力させるには「サンプル情報にサンプルカスタムフィールドを追加」(4-3-6. (4)の画面)のチェックボックスにチェックを入れてください。レポートを出力すると、カスタムフィールド関連の項目が表示されます。以下のレポートの例では、赤枠内が カスタムフィールドで追加された項目になります。



4-4. ログブックの確認

(1) 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。

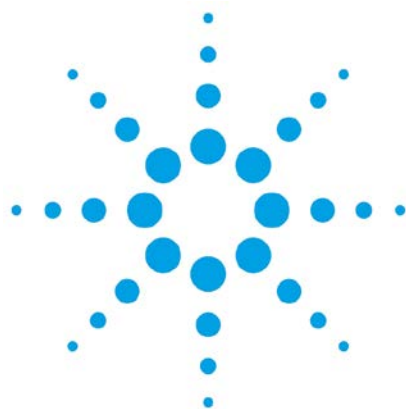


(2) 以下のようなウィンドウが開きます。ログブックには、システムによって作成されたメッセージが表示されます。ここで表示されているメッセージは、モジュールからのエラーメッセージやシステムメッセージなどです。ログブックは、トラブルシュートの時に重要なツールとなります。

現在のログブック ファイル INSTR1.LOG				
モジュール	#	イベントメッセージ	日付	時間
メソッド		サンプル バイアル 102 (バック)測定中	2012/10/19	13:36:22
メソッド		サンプル バイアル 101 (フロント)測定中	2012/10/19	13:36:22
CP コマンド		キューの項目 Sample/サンプル名なしのステータスが実行中に変まりました:	2012/10/19	13:36:21
メソッド		メソッド開始	2012/10/19	13:36:21
CP コマンド		キューの項目 Sample/サンプル名なしのステータスが登録中に変まりました:	2012/10/19	13:36:19
メソッド		メソッド CLASS.M 保存中	2012/10/19	13:35:45
CP マクロ		シーケンス読み込み中AGILENT.S	2012/10/19	13:34:31
メソッド		メソッド CLASS.M 読み込み中	2012/10/19	13:34:29
ログブック		ようこそ ChemStationへ	2012/10/19	13:34:09
7890A	1	10.1.1.102で Agilent 7890Aに接続完了	2012/10/19	13:33:59

(3) ログブックを印刷する場合は、現在のログブックを表示させた状態で、メニューから [表示] - [ログブック] - [ログブック印刷] を選択します。





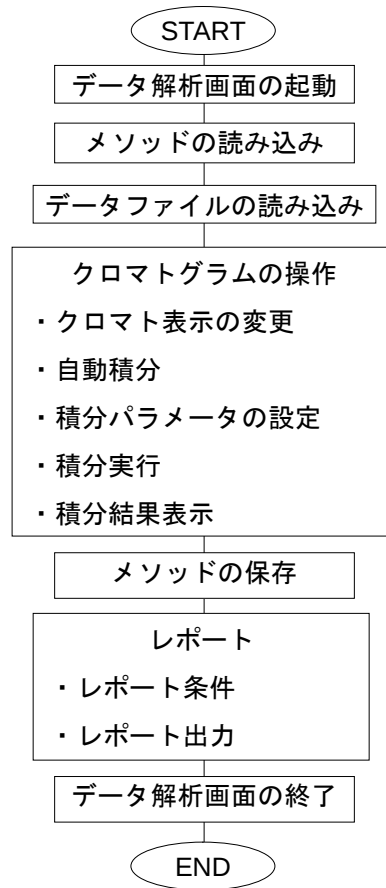
第5章 データ解析

5-1. データ解析のフロー	5-2
5-2. オフラインソフトウェアの起動	5-3
5-3. データ解析画面の概要	5-3
5-4. データの読み込み	5-4
5-4-1. ナビゲーションパネルからの読み込み	5-4
5-4-2. メニューからの読み込み	5-5
5-5. データ取り込みメソッドの表示	5-7
5-6. グラフィックスメニューでのウィンドウ表示	5-7
5-7. クロマトグラム表示に注釈を追加	5-8
5-8. 積分	5-9
5-8-1. 自動積分	5-9
5-8-2. 積分条件を変更して積分	5-10
5-8-3. タイムプログラム/積分イベント追加の設定	5-12
5-8-4. 積分実行	5-13
5-8-5. 積分結果表示	5-14
5-9. マニュアル積分	5-14

5. データ解析

この章では、データ解析の手順について説明します。

5-1. データ解析のフロー



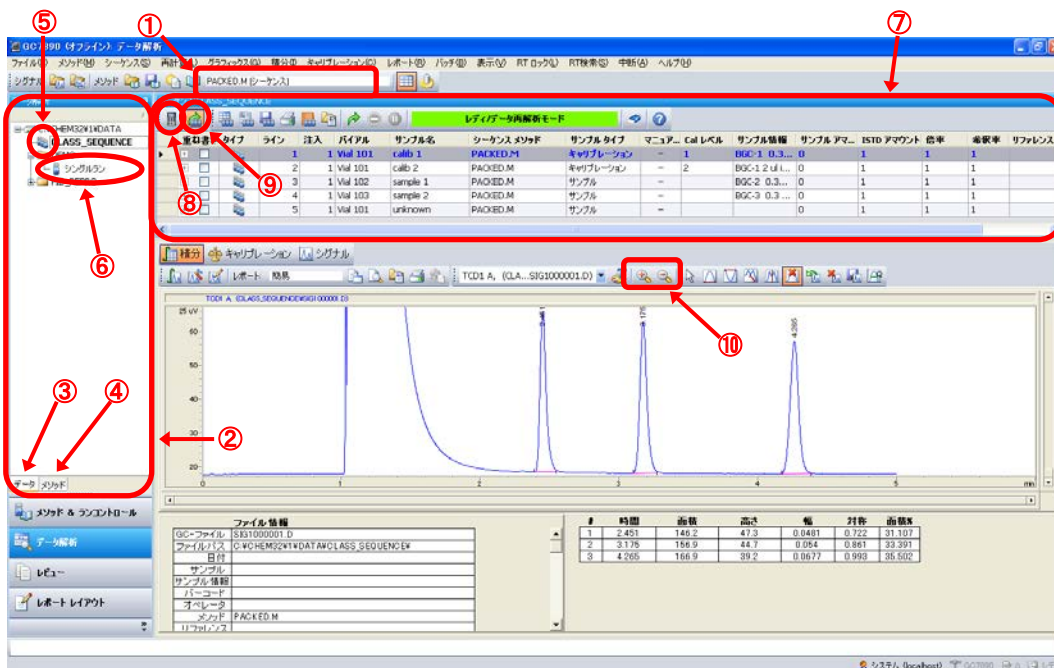
5-2. オフラインソフトウェアの起動

OpenLAB コントロールパネルの機器のパネルから「オフライン起動」をクリックするか、デスクトップ上のオフラインショートカットをダブルクリックします。



5-3. データ解析画面の概要

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。表示設定により、画面の構成が下記のスクリーンと異なる場合があります。



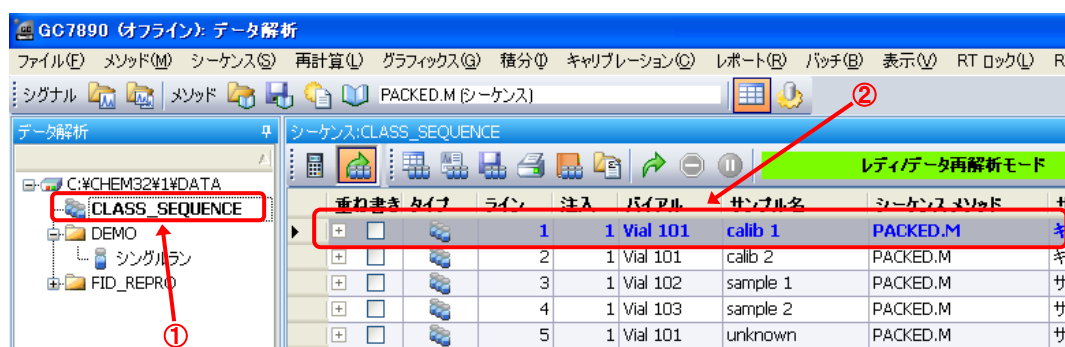
- ① ツールバーのメソッド表示：現在使用しているメソッド名が表示されています。
- ② ケミステーションエクスプローラ：データのタブとメソッドのタブがあります。
- ③ データのタブからは、結果セットのデータやシングルランのデータの読み込みができます。
- ④ メソッドのタブからはメソッドを読み込むことができます。結果セットのデータを読み込んだ場合、上段がシーケンスメソッド、下段がマスターメソッドです。
- ⑤ 結果セットを示すアイコンです。ダブルクリックするか、マウスの右ボタンをクリックすると表示されるメニューで、データをナビゲーションテーブルに読み込むことができます。
- ⑥ シングルランのデータを示すアイコンです。ダブルクリックするか、マウスの右ボタンをクリックすると表示されるメニューで、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、結果セットに含まれる一連のデータを表示します。シングルランを読み込んだ場合は、シングルランで採取したデータ群のリストを表示します。
- 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 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。
- ⑩  で、ズームイン、ズームアウトが可能です。

5-4. データの読み込み

データファイルは、ナビゲーションパネルあるいはメニューからの読み込みができます。

5-4-1. ナビゲーションパネルからの読み込み

(1) 結果セットのデータの読み込み



- ① ケミステーション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データのクロマトグラムになります。

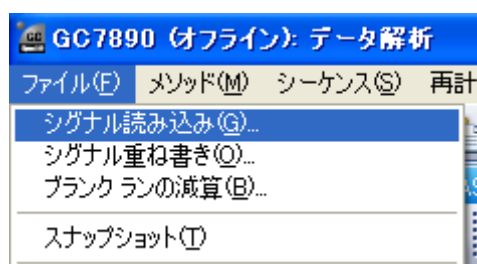
(2) シングルランのデータの読み込み



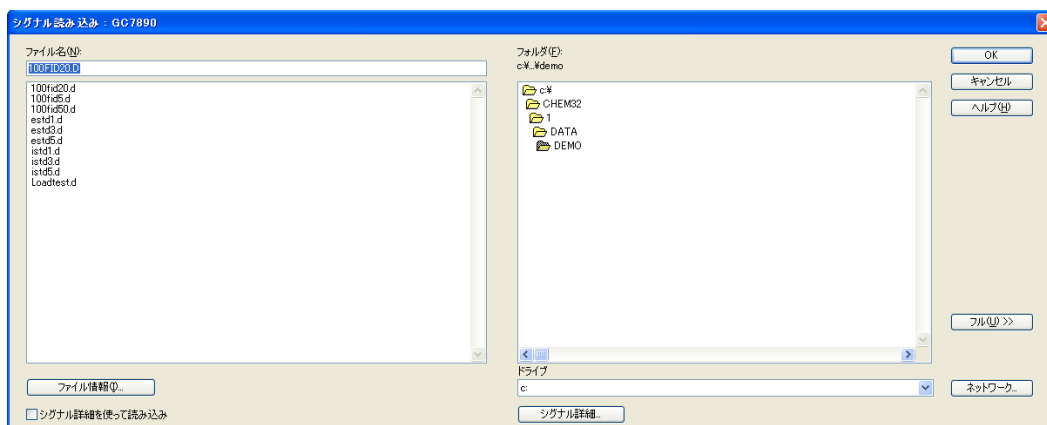
- ① ケミステーションエクスプローラ上のシングルランのアイコンをダブルクリックして、ナビゲーションテーブルにリスト表示させます。
- ② ナビゲーションテーブル上から目的のデータの行をダブルクリックします。ワークスペースのクロマトグラム表示は目的のデータのクロマトグラムになります。

5-4-2. メニューからの読み込み

- (1) [ファイル] - [シグナル読み込み...] をクリックします。

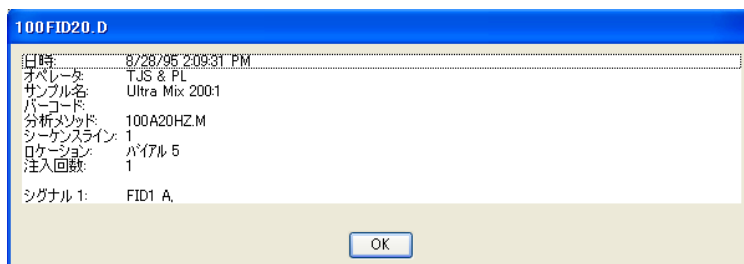


- (2) 読み込みたいデータ（以下の例では 100FID20.D）を選択して [OK] をクリックします。



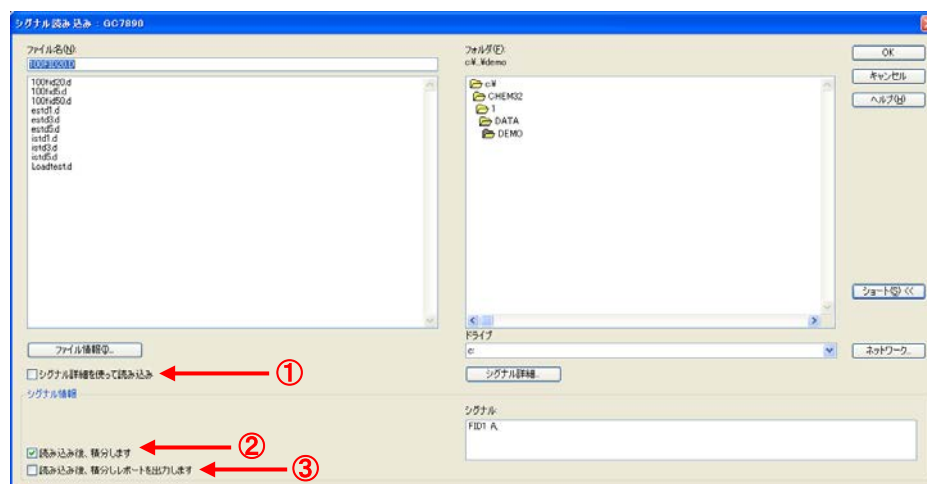
<参考>

シグナル読み込みの画面で「ファイル情報」をクリックすると、測定データに関する情報を確認できます。



<参考>

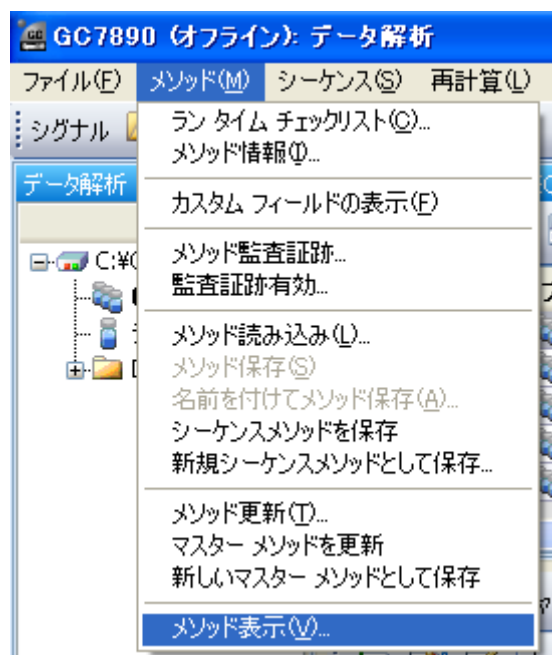
シグナル読み込みの画面で「フル」をクリックすると、シグナルの設定ができます。



- ① 複数のシグナルが存在する時に使用します。
- ② データ読み込み後、積分させない場合はチェックを外します。
- ③ データ読み込み後、レポートを出力しない場合はチェックを外します。

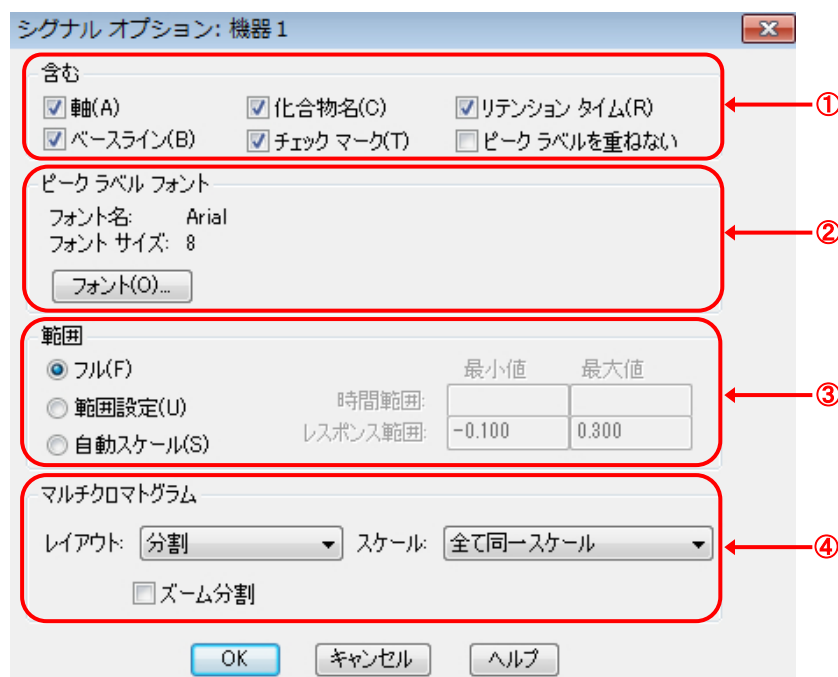
5-5. データ取込メソッドの表示

データが採取されたときのマスターメソッドを表示させることができます。メニューから [メソッド] - [メソッド表示] を選択します。



5-6. グラフィックスメニューでのウィンドウ表示

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。クロマトグラムに表示する内容やスケールの範囲指定などの設定ができます。



① 含む

[軸]

クロマトグラム上に XY 軸を表示します。

[ベースライン]

積分されたピークに対し、ベースラインを描きます。

[化合物]

キャリブレーションテーブルに化合物名を入力した場合に、表示します。

[チェックマーク]

積分されたピークの始点と終点を表示します。

[リテンションタイム]

積分されたピークに対し表示します。

[ピークラベルを重ねない]

お互いに重なっている化合物名とリテンションタイムを表示しません。

② ピークラベルフォント

クロマトグラムの印刷/表示時のピークラベルに使用するフォントを選択します。

③ 範囲

[フル]

クロマトグラム全体を表示します。

[範囲指定]

: 範囲設定された部分のクロマトグラムを表示します。

任意の [時間範囲]、[レスポンス範囲] を入力します。

範囲指定を有効にするには [スケール] を [全て同スケール] にします。

[自動スケール]

: レスポンス範囲は、2 番目に高いピークの高さに応じて自動的に縮小されます。[時間範囲] は任意に入力します。

④ マルチクロマトグラム

[レイアウト]

: 複数のクロマトグラムを印刷/表示する時に使用され、[分割] または [重ね書き] するレイアウトを選択します。

[スケール]

スケール方法を選択します。

全て同スケール : すべてのクロマトグラムが同じ縮尺で描かれます。

各データフルスケール : 各クロマトグラムがウィンドウに完全に合うように、フルスケールで表示されます。

[ズーム分割]

レイアウトで [分割] を選択した時のみ有効になります。チェックが付いていると、分割表示されている複数クロマトグラムから 1 つのクロマトグラムのみスケール変更が出来ます。

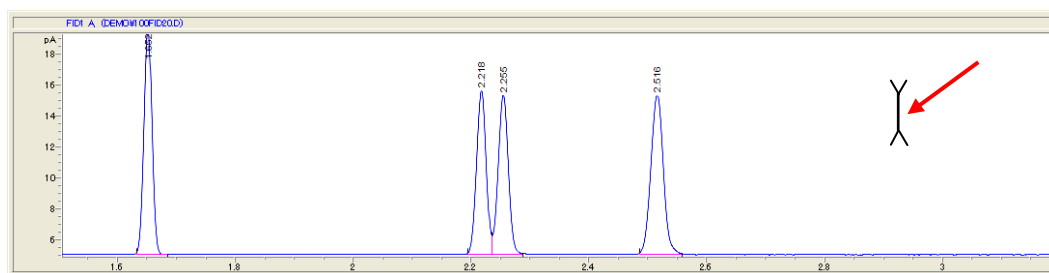
5-7. クロマトグラム表示に注釈を追加

クロマトグラム上に注釈を付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。



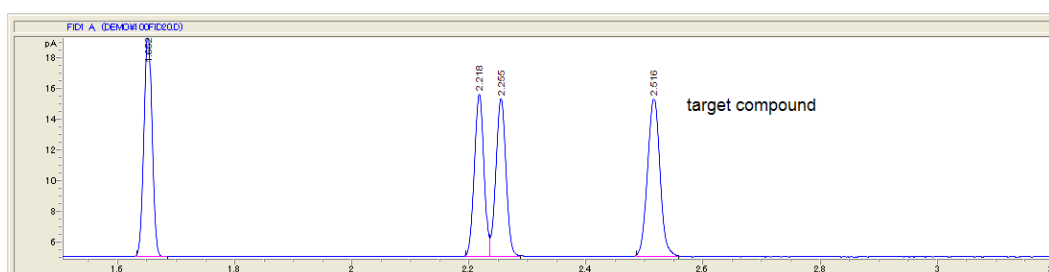
新しい注釈を入力してください

テキスト

target compound

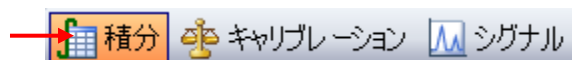
表示 オプション OK キャンセル

テキストを入力し OK すると注釈が表示されます。



5-8. 積分

積分はピークの面積を決定します。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：ケミステーションが自動的に計算した積分パラメータが提示されます。次の方法②で積分パラメータを最適化する時の起点となります。
- ② ユーザーが積分条件を変更して積分パラメータを最適化します。
- ③ マニュアル積分：ユーザーが手動でベースラインを引くなどして、方法①及び②では解析困難なピークを積分します。

5-8-1. 自動積分

ケミステーションが自動的に計算した積分パラメータが、次の5-8-2. で示す積分イベント欄に提示されます。これは、積分パラメータを最適化する上での起点となるもので、初回の積分パラメータの設定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。マニュアル積分については、5-9. を参照してください。

〔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。



5-8-2. 積分条件を変更して積分

〔積分イベントテーブル設定〕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。

プルダウンメニューに、編集可能なシグナルのイベントテーブルが表示されます。

シグナル特定イベント:

FID1 A 指定

このリストから、積分条件を調整したいシグナルを選択してから、積分イベントテーブルの編集を開始します。以下の画面から積分条件を変更します。



積分イベントの編集を保存し、終了します



使用可能な積分イベントテーブルをリストアップします



別のテーブルが持つイベントを入れ替えます



積分イベントテーブルに新しい行を挿入します



積分イベントテーブルから選択された行を削除します



積分に使用されるシグナル及び積分イベントテーブルをリストアップします



イベントテーブルを閉じます



ヘルプを表示します

積分

キャリブレーション

シグナル

レポート: 簡易

FID1 A, (DEMO¥100FID20.D)

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

シグナル特定イベント:

FID1 A 指定

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	.82695377
初期	ピーク幅	.01232342
初期	面積リジェクト	.06768354
初期	高さリジェクト	0.0457689
初期	ショルダー	オフ

すべてのシグナルで利用できる積分イベントです。詳細はヘルプを参照ください。

全てのシグナルの初期イベント:

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

[タンジェントスキムモード]

テリングピークに乗ったピークを積分する時のベースラインの処理モードを選択します。

[テールピークスキム高さ]

テリングピークのテール側に乗った小さなピークを認識する条件を設定します。

[フロントピークスキム高さ]

リーディングピークのフロント側に乗った小さなピークを認識する条件を設定します。

[スキム谷比]

ピークのテールまたはフロント上の小さなピークを認識する条件を設定します。

[ベースライン補正]

ベースライン補正のタイプを設定します。

[ピーク谷比]

2つのピークを分割するかどうかを決めます。ベースライン補正された谷の高さに対するベースライン補正された小さい方のピークの高さの比率です。

指定されたシグナルにおける特定の積分イベントです。[初期]が付いている項目はクロマトグラムの最初から適用される値です。

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	.82695377
初期	ピーク幅	.01232342
初期	面積リジェクト	.06768354
初期	高さリジェクト	0.0457689
初期	ショルダー	オフ

[スロープ感度]

スロープ（傾き）感度の値を設定します。ピークの立ち上がりが設定した値より大きいとピークとして認識されます。設定した値を越えるとピークの開始点、数値を下回るとピークの終了点として認識され、積分されます。

[ピーク幅]

ピークとノイズの識別基準です。最初のピーク（溶媒ピークを除く）の半値幅が設定されます。ピーク幅は、ピークの半分の高さにおけるピークの幅（単位：min）として定義されます。クロマトグラムで予想される最も幅の狭いピークを基準に半値幅を設定します。

[面積リジェクト]

ピークとして認識する最小ピーク面積値です。設定値より小さい面積のピークは積分対象となりません。

[高さリジェクト]

ピークとして認識する最小ピーク高さです。設定値より小さい高さのピークは積分対象となりません。

[ショルダー]

ピークの肩に乗っているピークを検出したい場合に設定します。

5-8-3. タイムプログラム/積分イベント追加の設定

積分イベント上部のアイコンからイベントの追加ができます。また、アイコンからイベントの削除ができます。イベント追加アイコンをクリックすると、積分イベントの一覧が表示され、イベントを選択することができます。

積分イベントに対応する時間、値及びオン／オフなどを入力／選択します。

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	.82695377
初期	ピーク幅	.01232342
初期	面積リジェクト	.06768354
初期	高さリジェクト	0.0457689
初期	ショルダー	オフ
0.200	積分	オフ

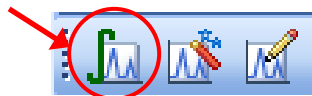
積分
 スロープ感度
 面積リジェクト
 高さリジェクト
 固定ピーク幅

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	.82695377
初期	ピーク幅	.01232342
初期	面積リジェクト	.06768354
初期	高さリジェクト	0.0457689
初期	ショルダー	オフ
0.200	積分	オフ
0.500	積分	オン

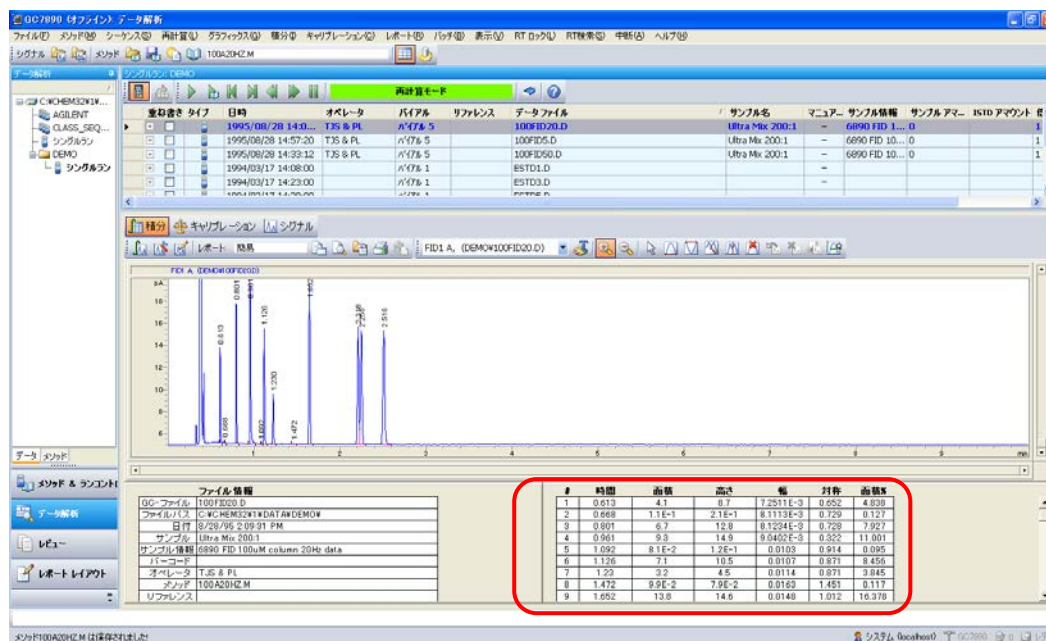


5-8-4. 積分実行

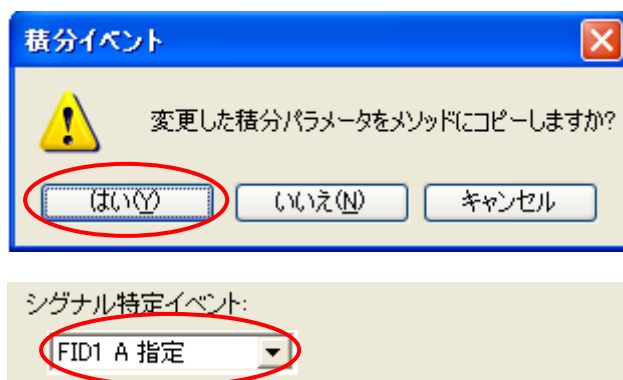
「現在のクロマトグラムを積分する」のアイコンをクリックします。またはメニューから「積分」－「積分」を選択します。



もし、積分結果が適切でない場合は5-8-2. 及び5-8-3. の積分条件を見直して、積分を実行する操作を繰り返します。クロマトグラムの下側には積分結果が表示されます。



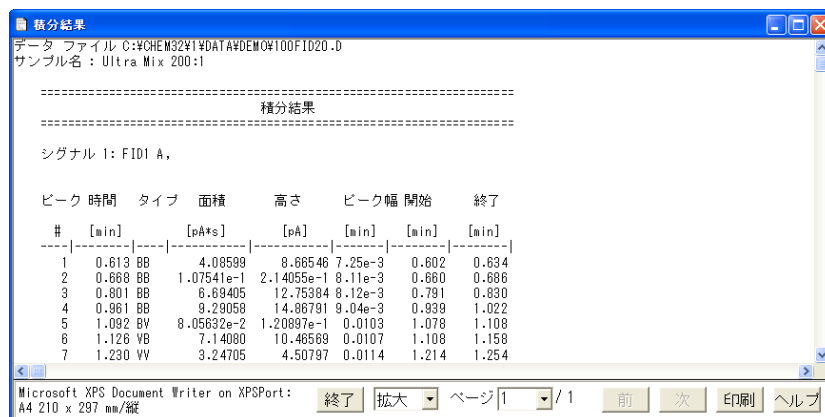
積分結果に問題がなければ、積分イベント上部の  アイコンをクリックします。



上記のようなメッセージが表示されますので「はい」を選択してください。また、上記の例では、積分イベントは「FID1 A 指定」に保存されます。

5-8-5. 積分結果表示

〔積分〕－〔積分結果〕をクリックします。積分結果ウィンドウが表示されます。プリンタが設定されている場合は〔印刷〕ボタンで出力できます。



5-9. マニュアル積分

積分条件の変更だけでは適切な積分を行うことのできないクロマトグラムなどに利用します。ケミステーションでは、各データファイル内にマニュアル積分の条件を保存することができます。また、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。

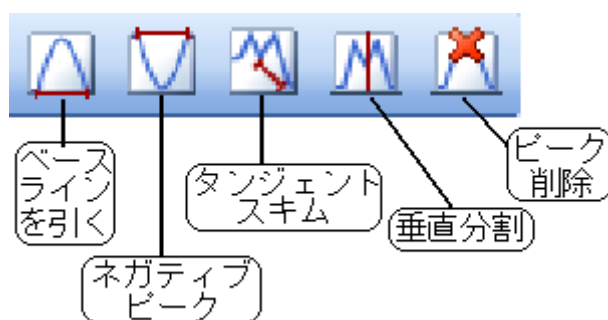
注意

メソッドに保存したマニュアル積分の条件を、別のクロマトグラムに適用する場合は、必ずしも最適であるとは限りませんので、積分結果を確認する必要があります。

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



各アイコンをクリックすると、カーソルが変化します。



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。



ネガティブピーク

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



タンジェントスキム

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



ピークの分割

分離が不十分なピークに対して、最初のピークの積分開始点から最後のピークの積分終了点までベースラインを引きます。

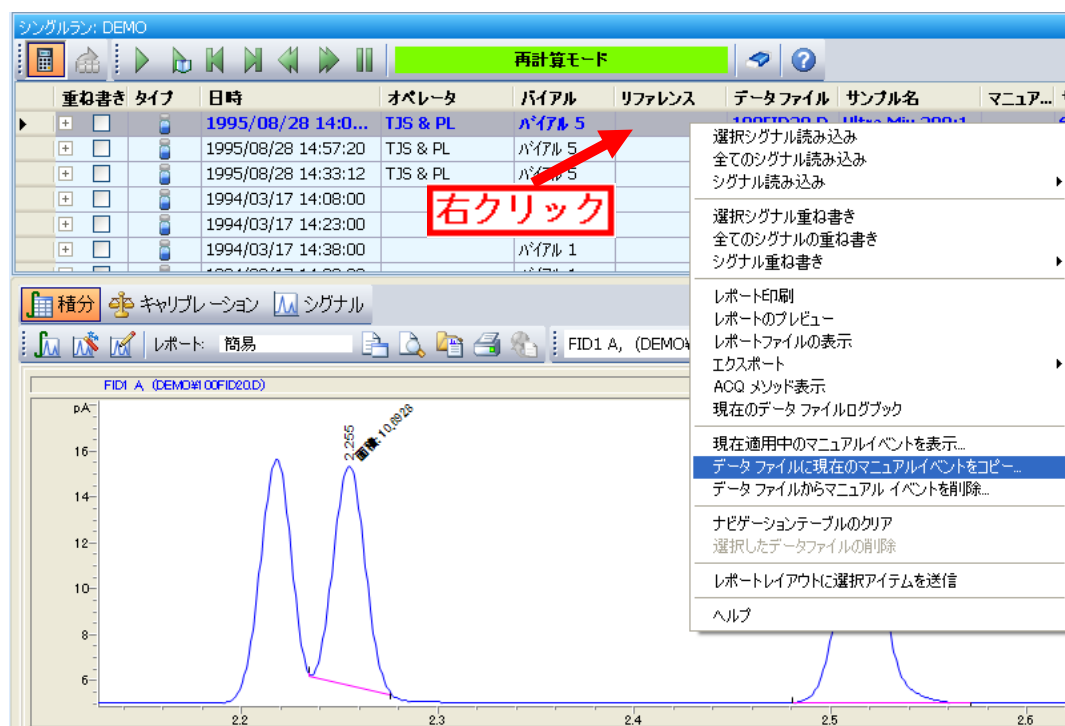
ピーク分割をクリックするとカーソルの形が変わります。ピークの分割点でクリックします。



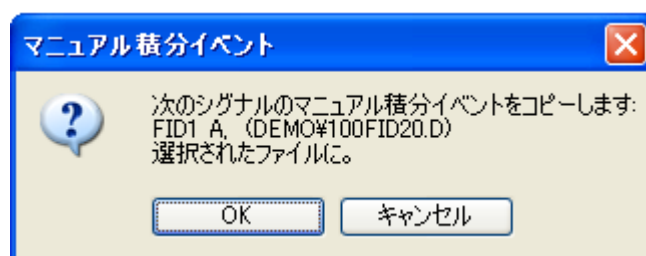
ピーク削除

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積分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て「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。



問題がなければ「OK」をクリックします。

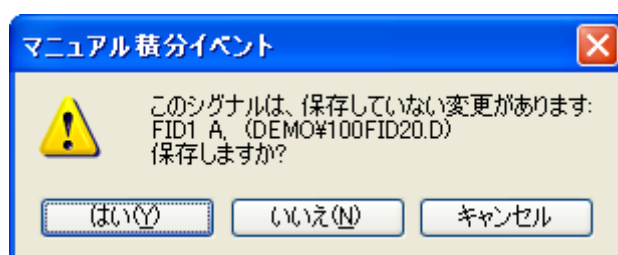


データファイル内にマニュアル積分イベントが保存されました。

シングルラン: DEMO									
再計算モード									
重ね書き	タイプ	日時	オペレータ	バイアル	リファレンス	データファイル	サンプル名	マニ...	サンプル情報
+		1995/08/28 14:0...	TJS & PL	バイアル 5		100FID20.D	Ultra Mix 200:1		6890 FID 1...
+		1995/08/28 14:57:20	TJS & PL	バイアル 5		100FID5.D	Ultra Mix 200:1	-	6890 FID 10...
+		1994/03/17 14:08:00		バイアル 1		ESTD1.D		-	
+		1994/03/17 14:23:00		バイアル 1		ESTD3.D		-	
+		1994/03/17 14:38:00		バイアル 1		ESTD5.D		-	

注意

〔データファイルに現在のマニュアルイベントをコピー〕を実行せずに、行を移るなどの操作を行った時に、以下のような確認画面が表示されます。

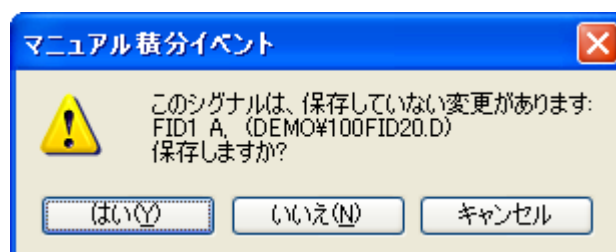


ここで〔はい〕を選択するとマニュアル積分イベントは保存されます。〔いいえ〕を選択するとマニュアル積分イベントは保存されません。

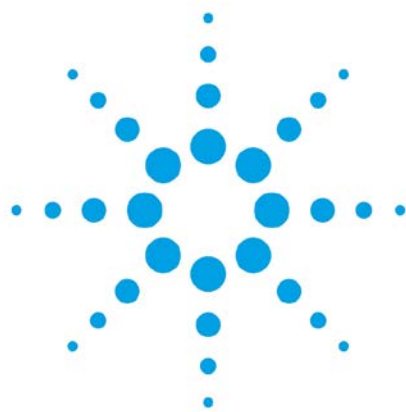
注意

マニュアル積分を実行した後に自動積分を実行すると、マニュアル積分イベントが消去される場合があります。ナビゲーションテーブルにおいて、マニュアル積分イベントが存在する行を選択している時（マークのついた行が青色太字になっており、クロマトグラムが表示されている時）に自動積分を実行し、その後、他の行に移るなどの操作をした場合、以下のような確認画面が表示されます。

重ね書き	タイプ	日時	オペレータ	バイアル	リファレンス	データファイル	サンプル名	マニ...
+		1995/08/28 14:0...	TJS & PL	バイアル 5		100FID20.D	Ultra Mix 200:1	



ここで〔はい〕を選択すると、自動積分イベントが反映されるため、マニュアル積分イベントは消去されます。〔いいえ〕を選択すると、マニュアル積分イベントは保持されます。



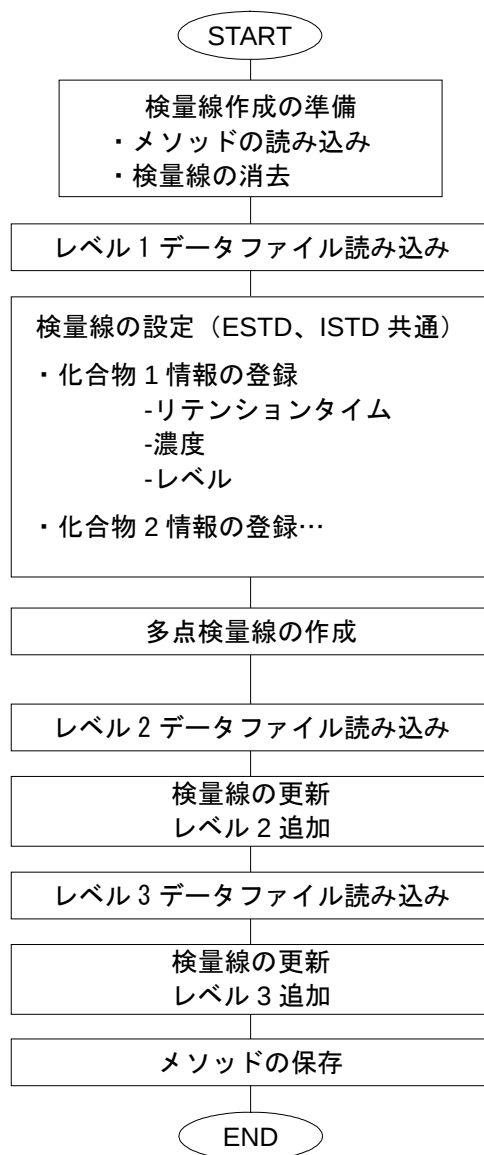
第 6 章 定量

6-1. 定量計算のフロー	6-2
6-2. 検量線作成の準備	6-3
6-3. 新規検量線テーブルの作成	6-3
6-4. 検量線（絶対検量線）の作成	6-3
6-5. 多点検量線の作成	6-5
6-6. 検量線の条件設定	6-7
6-7. 定量レポートの出力	6-8
6-8. メソッドの保存	6-11
6-8-1. マスターメソッドを編集した場合	6-11
6-8-2. シーケンスメソッドを編集した場合	6-11
6-9. レポートの印刷	6-11
6-10. リキャリブレーション	6-12
6-11. 内部標準法（ISTD）による定量	6-13
6-12. 定量レポートの出力	6-15

6. 定量計算

この章では、定量計算を行うための設定方法について説明します。検量線の情報は、すべてメソッドに保存されます。

6-1. 定量計算のフロー



6-2. 検量線作成の準備

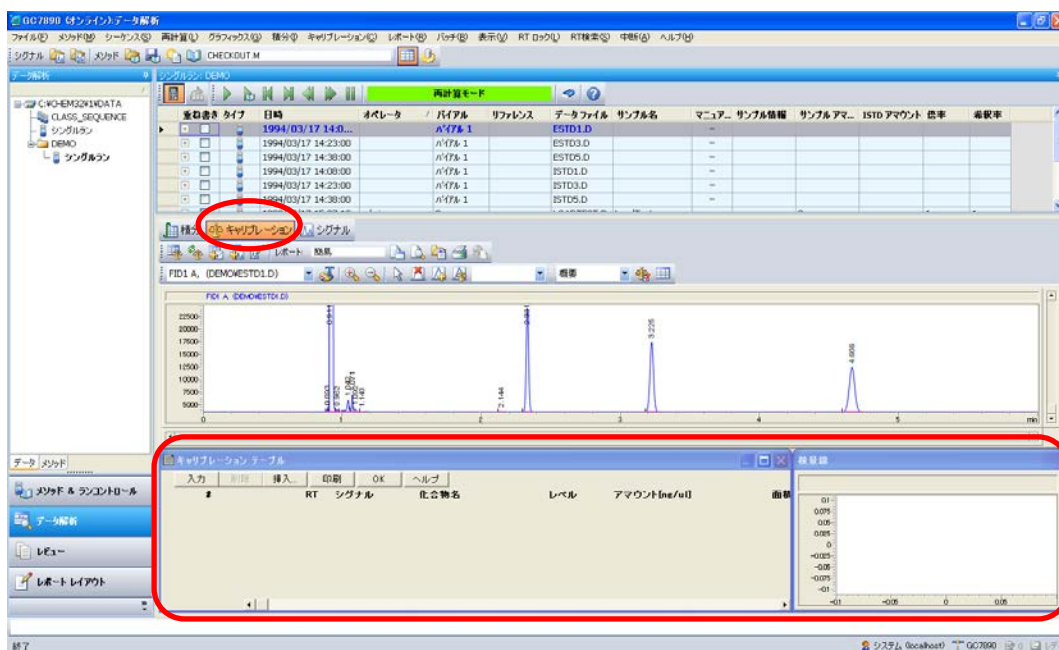
ここでは、例として DEMO フォルダに保存されている以下のデータを使用して検量線を作成する手順を説明します。あらかじめ、各データを積分しておいて下さい。

- ESTD1.D
- ESTD3.D
- ESTD5.D

はじめに、ESTD5.D を読み込みます。

6-3. 新規検量線テーブルの作成

検量線を作成するためのツールバーに切り替えます。検量線が作成されていないことを確認します。



検量線が作成されていた場合は、一度削除してから作成を始めてください。[キャリブレーション] - [キャリブレーションテーブル削除] をクリックします。

キャリブレーション(C) レポート(R) バッチ(B)
 新しいキャリブレーション テーブル(N)...
 キャリブレーション テーブル削除(E)...

6-4. 検量線（絶対検量線）の作成

ここでは、以下の例を用いて検量線を作成します。

定量データベース条件

#	化合物 1	化合物 2	化合物 3
名前	PEAK1	PEAK2	PEAK3
リテンションタイム	約 2.3min	約 3.2min	約 4.6min

検量線のレベルと化合物濃度

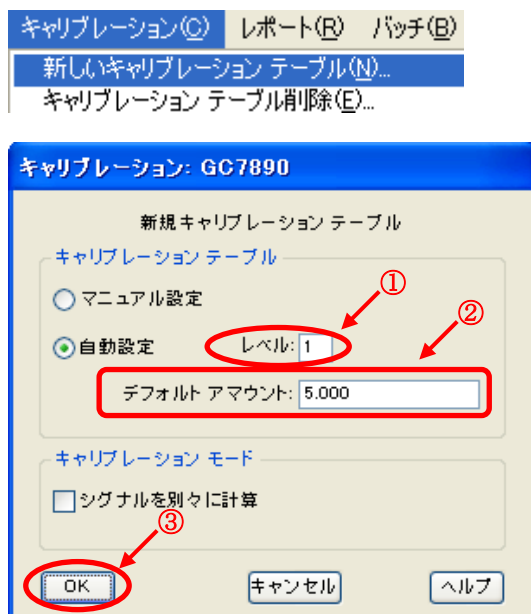
レベル 1	標準試料 C (ESTD5.D)	5 ng/uL
レベル 2	標準試料 B (ESTD3.D)	3 ng/uL
レベル 3	標準試料 A (ESTD1.D)	1 ng/uL

定量データベースへ登録するレベルの順序は任意です。レベルは高濃度順または低濃度順のどちらでも指定可能です。

ただし、ピークが正しく認識され、定量データベースの作成がスムーズに行われるよう、検量線を初めて作成する場合は、最も高濃度のサンプルから実施することを推奨しています。

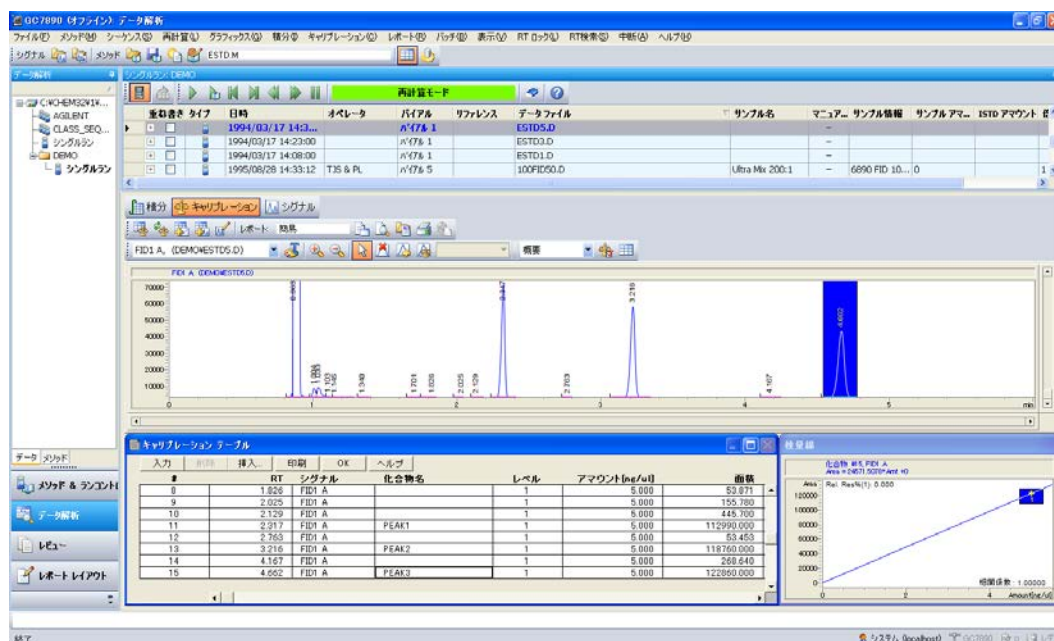
(1) 検量線（キャリブレーション）テーブルの作成

[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] をクリックします。



- ① レベルが 1（検量線の 1 点目）であることを確認します。
- ② 化合物の濃度が、すべて同じ場合は、デフォルトアマウントに数値を入力します。
個々の化合物で濃度が異なる場合は、入力しません。
- ③ [OK] をクリックします。

(2) 検量線（キャリブレーション）テーブルの入力



- ① [化合物名] 欄に化合物名を入力します。
- ② [アマウント] 欄に濃度を入力します。(1)の② においてデフォルトアマウントに入力した数値になっています。個々の化合物で濃度が異なる場合は、ここで変更します。
- ③ 必要のないピークは、PEAK 番号(#)の左側でクリックして行を反転させてから [削除] をクリックします。

キャリブレーション テーブル

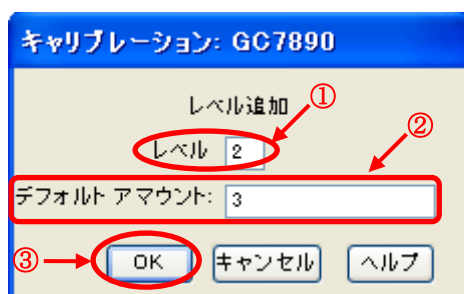
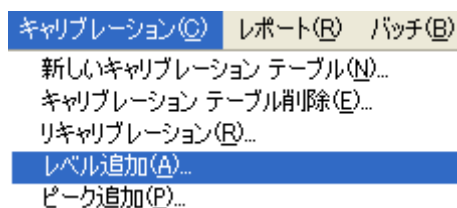
#	RT	シグナル	化合物名	レベル	アマウント[ng/ul]	面積
7	1.701	FID1 A		1	5.000	15.499
8	1.826	FID1 A		1	5.000	53.871
9	2.025	FID1 A		1	5.000	155.780
10	2.129	FID1 A		1	5.000	445.700
11	2.317	FID1 A	PEAK1	1	5.000	112990.000
12	2.763	FID1 A		1	5.000	53.453
13	3.216	FID1 A	PEAK2	1	5.000	118760.000
14	4.167	FID1 A		1	5.000	268.640
15	4.662	FID1 A	PEAK3	1	5.000	122860.000

6-5. 多点検量線の作成

(1) データの読み込み

検量線の 2 点目のデータファイル (ESTD3.D) を読み込みます。

(2) [キャリブレーション] - [レベル追加] をクリックします。



- ① レベルに 2 と入力します。
 - ② 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力します。個々の化合物で濃度が異なる場合は、入力しません。
 - ③ [OK] をクリックします。
- (3) 2 点目のデータが追加された検量線 (キャリブレーション) テーブルが表示されます。1 点目と同様に、濃度を入力します。化合物名の入力、必要ありません。

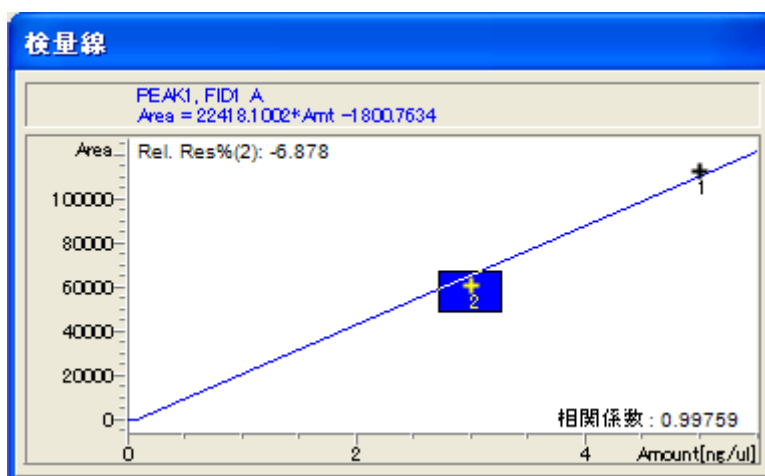
キャリブレーション テーブル

#	RT	シグナル	化合物名	レベル	アマウント[ng/ul]	面積
1	2.325	FID1 A	PEAK1	1	3.000	60952.000
				2	5.000	112990.000
2	3.221	FID1 A	PEAK2	2	3.000	61393.000
				1	5.000	118760.000
3	4.664	FID1 A	PEAK3	2	3.000	61463.000
				1	5.000	122860.000

- (4) 検量線の 3 点目のデータファイル (ESTD1.D) を読み込みます。(2)~(3)を繰り返します。

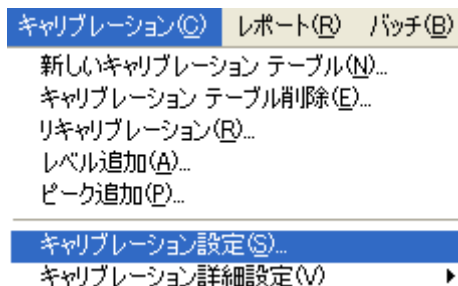
キャリブレーション テーブル							
入力 削除 挿入... 印刷 OK ヘルプ							
#	RT	シグナル	化合物名	レベル	アmount [ng/ul]	面積	
1	2.331	FID1 A	PEAK1	3	1.000	25370.000	
				2	3.000	60952.000	
				1	5.000	112990.000	
2	3.225	FID1 A	PEAK2	3	1.000	25259.000	
				2	3.000	61393.000	
				1	5.000	118760.000	
3	4.666	FID1 A	PEAK3	3	1.000	24780.000	
				2	3.000	61463.000	
				1	5.000	122860.000	

- (5) 検量線 (キャリブレーション) テーブルの右側に表示される検量線プロットを確認します。

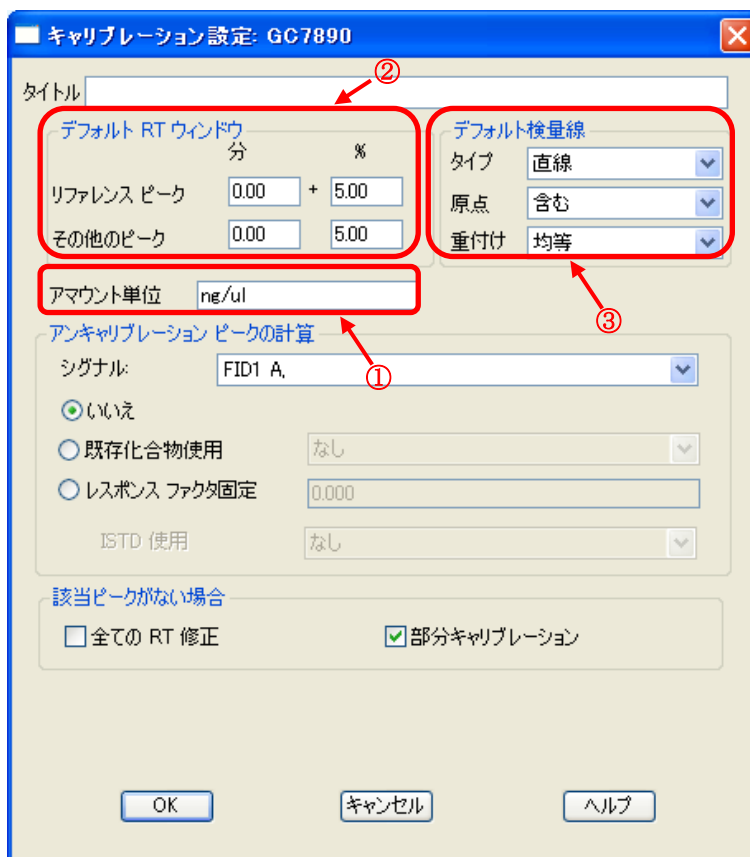


6-6. 検量線の条件設定

(1) [キャリブレーション] – [キャリブレーション設定] をクリックします。



(2) 検量線の条件設定画面が表示されます。



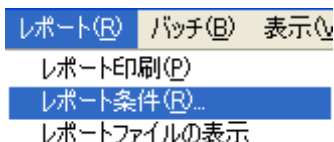
- ① [アマウント単位] に、サンプル濃度の単位を入力します。
- ② [デフォルト RT ウィンドウ] で、ピークを同定するリテンションタイム (RT) の範囲を設定します。分析ごとの RT の僅かなずれを補正することができます。
- ＜例＞
- 0.00min + 5% (0.00±2.5%)
- RT が 5 分の場合、ピークとして認識される範囲は 4.875 分～5.125 分となります。
- ③ [デフォルト検量線] で、検量線の種類、原点の処理方法及び検量線上のデータポイントの重み付けを指定します。

6-7. 定量レポートの出力

作成した検量線（絶対検量線）を用いて、定量結果を出力します。

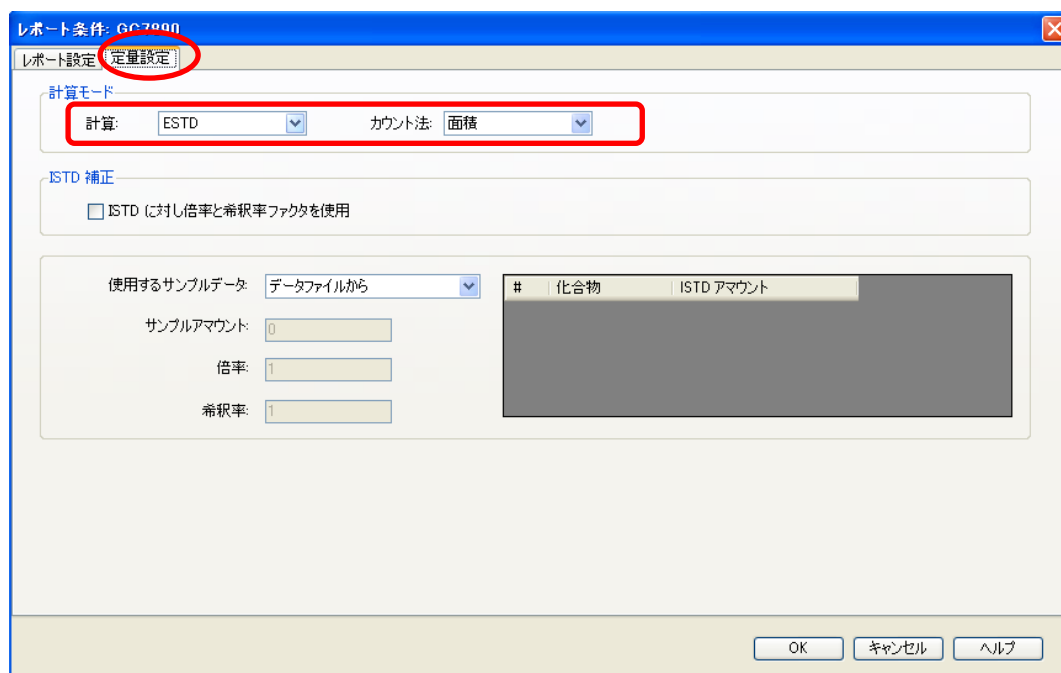
(1) レポート条件の設定

〔レポート〕－〔レポート条件〕をクリックします。



(2) レポート条件設定の画面

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。

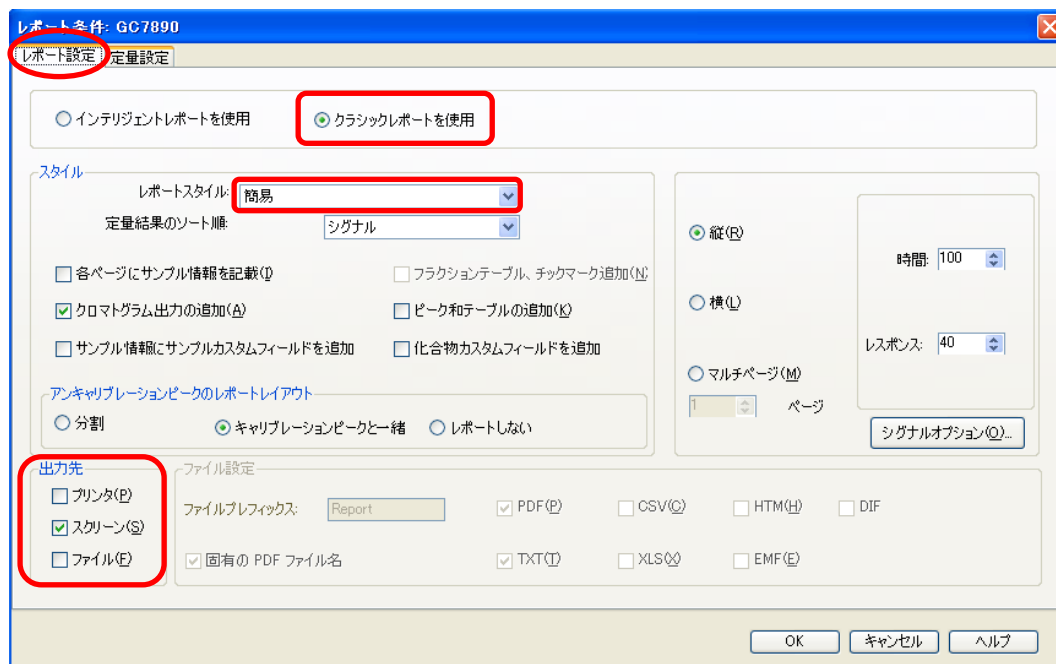


<参考>

定量計算の方法として、以下の項目が選択できます。

- ・ % : 面積百分率あるいは高さ百分率のレポートです。
- ・ ESTD/ESTD% : 絶対検量線法のレポートです。各化合物の濃度は検量線により計算されます。ESTD%は各化合物の濃度を相対的に百分率で表示するレポートです。
- ・ Norm% : 補正百分率のレポートです。
- ・ ISTD/ISTD% : 内部標準法のレポートです。各化合物の濃度は検量線により計算されます。ISTD%は各化合物の濃度を相対的に百分率で表示するレポートです。

レポート設定では「クラシックレポートを使用」を選択してください。また、レポートスタイルを「簡易」に設定してください。必要に応じて、出力先の「プリンタ」にチェックを入れてください。設定が終了したら「OK」をクリックします。



<参考>

インテリジェントレポートを使用する場合、

- ・レポートテンプレートは「Short_ESTD」
- ・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タイルのレポートを出力する時に有効になります。

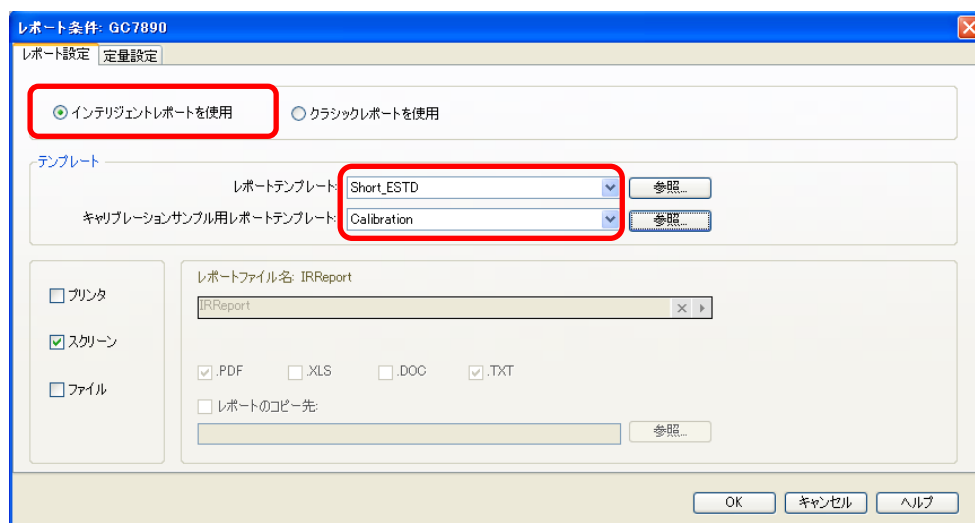
テンプレートを選択するには「参照」ボタンをクリックし、以下のフォルダの中からテンプレートを選択してください。

- ・C:\¥Chem32¥REPSTYLE¥ja-JP

なお、DEMO フォルダに保存されているデータを使用する場合は、

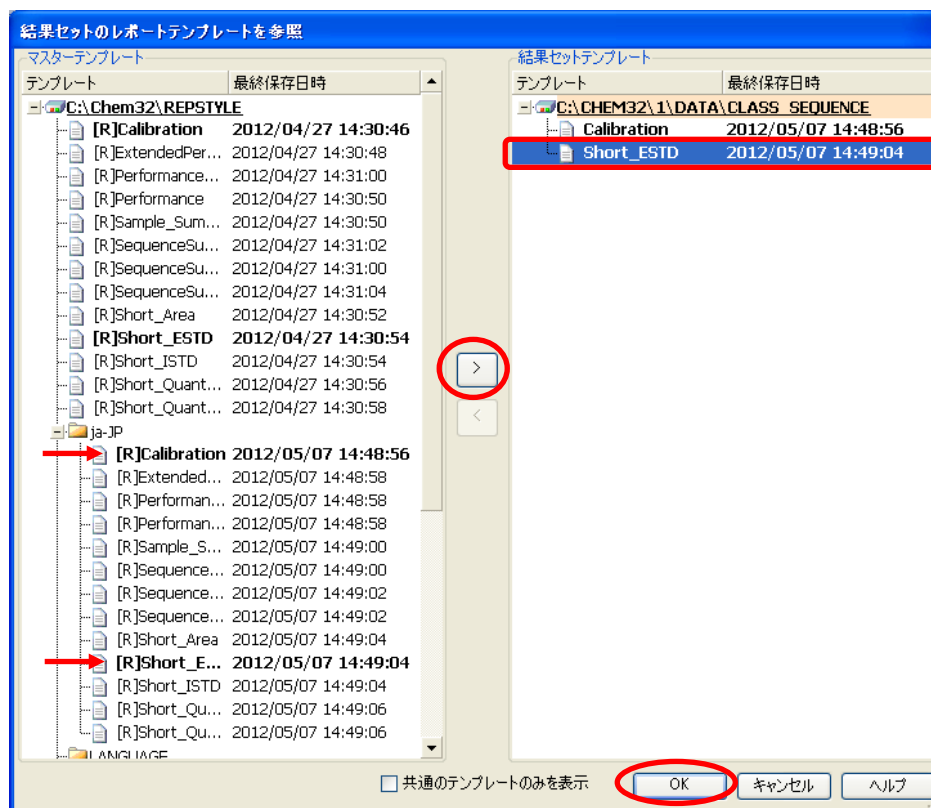
- ・C:\¥Chem32¥REPSTYLE

の中からテンプレートを選択してください。



注意

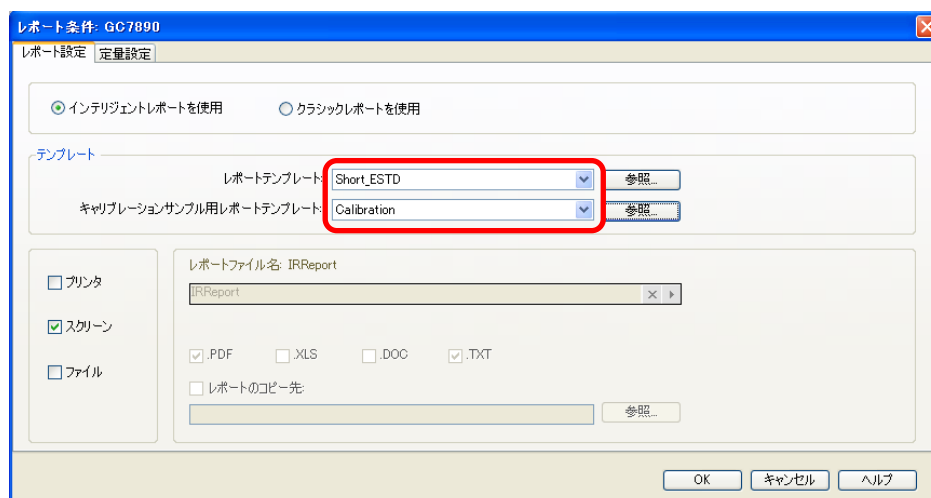
結果セットについて、テンプレートを選択するために「参照」ボタンをクリックすると、以下の画面が現われます。



マスターテンプレートの一覧に、フォルダ **C:\Chem32\REPSTYLE\ja-JP** があるので、この中から「Short-ESTD」と「Calibration」をクリックして選択します。

中央の「>」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画面が表示されたら「OK」をクリックします。

結果セットテンプレートから「Short-ESTD」を選択（反転表示）して「OK」をクリックします。同様にキャリブレーションサンプル用レポートテンプレートに「Calibration」を選択します。11-2. を参照してください。



6-8. メソッドの保存

6-8-1. マスターメソッドを編集した場合

メニューの「メソッド」－「メソッド保存」（上書き保存されます）を選択するか、あるいは「名前を付けてメソッド保存」を選択します。

監査証跡についてのコメントを入力して「OK」をクリックしてください。

6-8-2. シーケンスメソッドを編集した場合

メニューの「メソッド」－「シーケンスメソッドを保存」（上書き保存されます）を選択するか、あるいは「新規シーケンスメソッドとして保存」を選択します。

<参考>

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を用いて検量線を作成した場合、その検量線テーブルはシーケンスメソッドに保存されます。シーケンスメソッドに保存されている検量線テーブルを、これから測定に使用したい時などは、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。

監査証跡についてのコメントを入力して「OK」をクリックしてください。

メソッド(M) シーケンス(S) 再計算(L)	メソッド(M) シーケンス(S) 再計算(L)
ランタイムチェックリスト(C)...	ランタイムチェックリスト(C)...
メソッド情報(I)...	メソッド情報(I)...
カスタムフィールドの表示(F)	カスタムフィールドの表示(F)
メソッド監査証跡...	メソッド監査証跡...
監査証跡有効...	監査証跡有効...
メソッド読み込み(L)...	メソッド読み込み(L)...
→ メソッド保存(S)	メソッド保存(S)
→ 名前を付けてメソッド保存(A)...	名前を付けてメソッド保存(A)...
シーケンスメソッドを保存	→ シーケンスメソッドを保存
新規シーケンスメソッドとして保存...	→ 新規シーケンスメソッドとして保存...
メソッド更新(U)...	メソッド更新(U)...
マスターメソッドを更新	→ マスターメソッドを更新
新しいマスターメソッドとして保存	→ 新しいマスターメソッドとして保存
メソッド表示(V)...	メソッド表示(V)...

6-9. レポートの印刷

(1) データファイルの読み込み

「ファイル」－「シグナル読み込み」でデータファイルを選択します。ナビゲーションテーブル上でダブルクリックしても、データを読み込むことができます。

(2) レポートの印刷

「レポート」－「レポート印刷」をクリックします。

レポート(R) バッチ(B) 表示(V)
レポート印刷(P)
レポート条件(R)...
レポートファイルの表示
システムスタートリガー(V) ▶

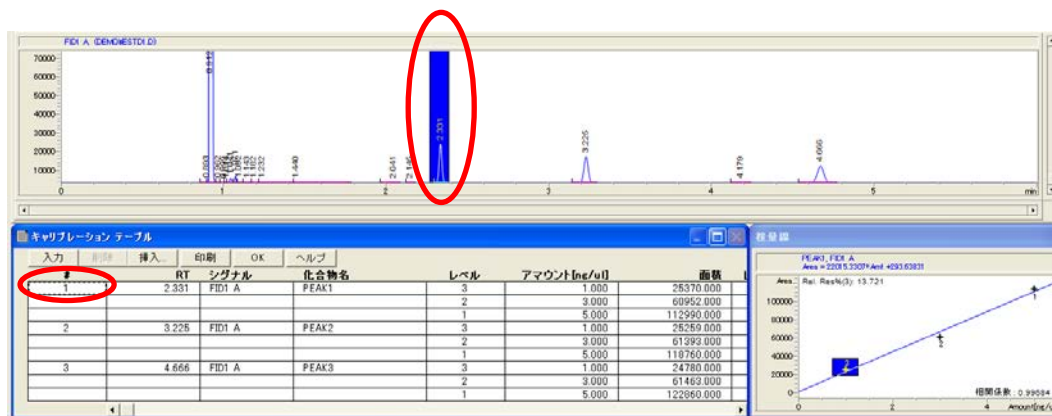
6-10. リキャリブレーション

既存の検量線（キャリブレーション）テーブルのレベルを更新する場合に使用します。

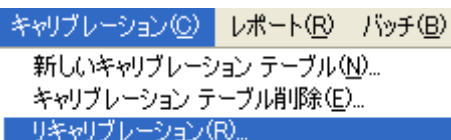
- (1) 検量線の更新に使用する新しいデータファイルを読み込みます。

注意

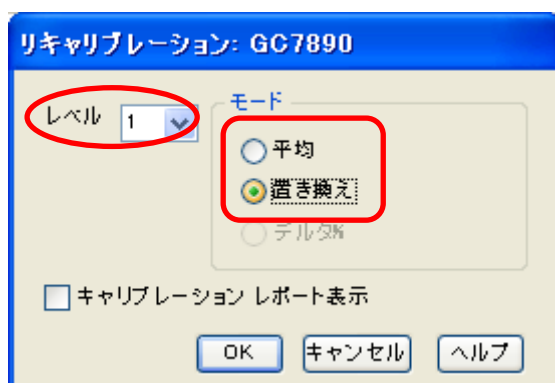
「キャリブレーション」－「キャリブレーションテーブル」から、検量線（キャリブレーション）テーブルを開き、定量対象となるピークがRT ウィンドウ（ピークを同定するリテンションタイムの範囲）内に入っていることを確認します。キャリブレーションテーブルのピーク番号 [#] をクリックすると、クロマトグラム上に RT ウィンドウ（青色）が表示されます。もし、当該ピークが RT ウィンドウの範囲に入っていない場合は、RT を変更します。



- (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) 更新するレベルと更新方法（平均あるいは置き換え）を選択し、「OK」をクリックします。



- (4) 多点検量線の場合、他のレベルも同様に更新します。

6-11. 内部標準法 (ISTD) による定量

絶対検量線 (ESTD) との違いは、以下の通りです。

- ・キャリブレーションテーブルに ISTD のピークを設定する。
- ・レポートの計算方法を ISTD に設定する。
- ・インテリジェントレポートを使用する場合、レポートスタイル及びテンプレートに ISTD 用のものを設定する。

ここでは、すでに保存されている下記のデータを使用して検量線を作成します。

- ・ ISTD1.D
- ・ ISTD3.D
- ・ ISTD5.D

定量データベース条件

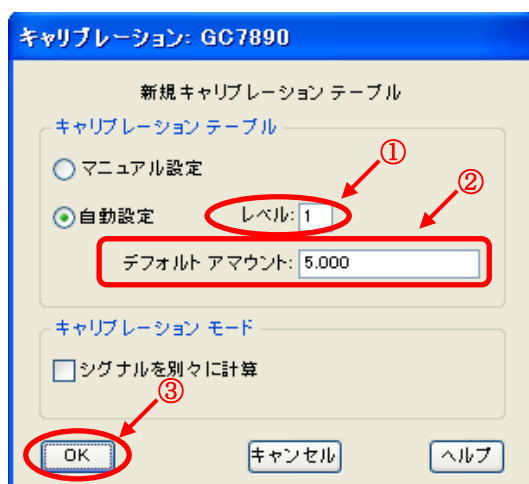
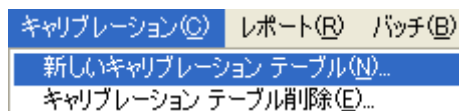
#	内部標準 (IS)	化合物 1	化合物 2
名前	PEAK_IS	PEAK1	PEAK2
リテンションタイム	約 3.2min	約 2.3min	約 4.6min

検量線のレベルと濃度

	データファイル名	内部標準 (IS) 濃度	IS 以外の化合物濃度
レベル 1	ISTD5.D	1 ng/uL	5 ng/uL
レベル 2	ISTD3.D	1 ng/uL	3 ng/uL
レベル 3	ISTD1.D	1 ng/uL	1 ng/uL

(1) 検量線 (キャリブレーション) テーブルの作成

[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] をクリックします。



- ① レベルが 1 (検量線の 1 点目) であることを確認します。
- ② 化合物の濃度が、すべて同じ場合は、デフォルトアマウントに数値を入力します。
個々に化合物の濃度が異なる場合は、入力しません。
- ③ [OK] をクリックします。

(2) キャリブレーション（検量線）テーブルの入力

次の(3)の操作に先立ち、検量線（キャリブレーション）テーブルの「アマウント」欄に濃度を入力してください。

キャリブレーション テーブル

#	RT	シグナル	化合物名	レベル	アマウント [ng/ul]	面積
1	2.317	FID1 A	PEAK1	1	5.000	112990.000
2	3.198	FID1 A	PEAK JS	1	5.000	25326.000
3	4.662	FID1 A	PEAK2	1	5.000	122860.000

(3) 内部標準物質の設定

内部標準物質（ISTD）の「ISTD」欄のプルダウンから「はい」を選択すると、設定画面が表示されます。

キャリブレーション テーブル

#	アマウント [ng/ul]	面積	レスポンス ファクタ	リファレンス	ISTD	#
1	5.000	112990.000	4.4251e-5	いいえ	いいえ	
2	5.000	25326.000	1.9743e-4	いいえ	はい	
3	5.000	122860.000	4.0698e-5	いいえ	いいえ	

キャリブレーション テーブル: GC7890

ISTD #: 1

サンプル デフォルト

ISTD アマウント: 1

OK キャンセル ヘルプ

- ① 内部標準物質の濃度を入力します。ここでは1を入力します。
- ② 内部標準物質を2つ以上使用する場合、「ISTD#」欄に番号を入力してから濃度を入力します
- ③ [OK] をクリックします。検量線（キャリブレーション）テーブルの右端にある「[#]」欄に、使用する ISTD の番号（ISTD#）を入力します。

キャリブレーション テーブル

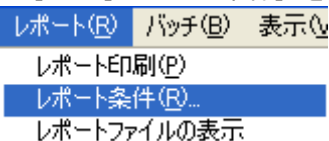
#	アマウント [ng/ul]	面積	レスポンス ファクタ	リファレンス	ISTD	#
1	5.000	112990.000	4.4251e-5	いいえ	いいえ	1
2	5.000	25326.000	1.9743e-4	いいえ	はい	1
3	5.000	122860.000	4.0698e-5	いいえ	いいえ	1

(4) 多点検量線の作成

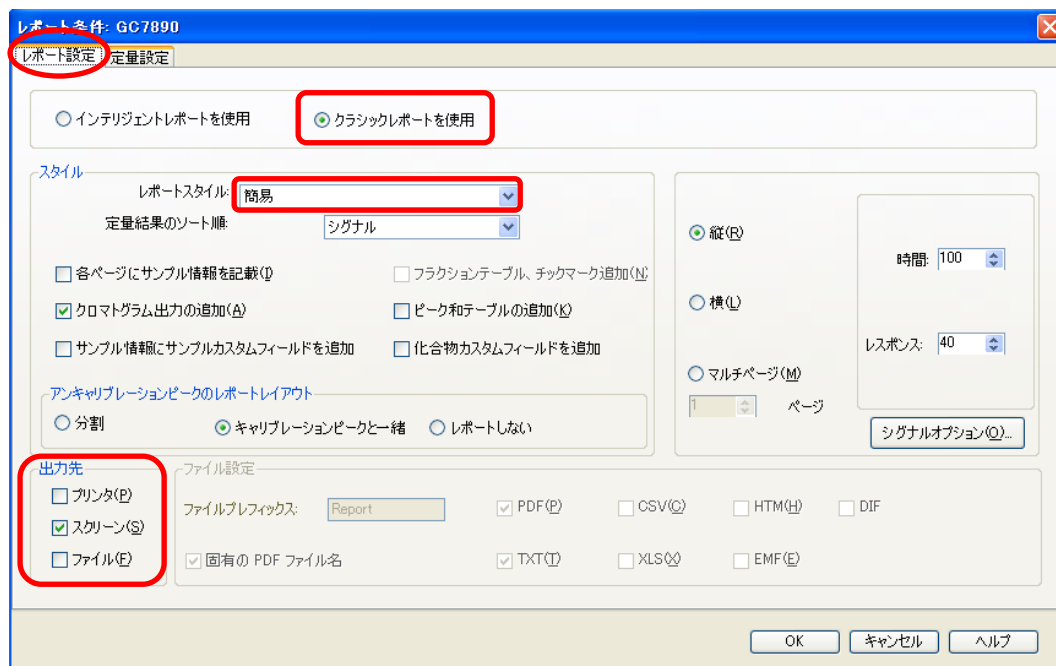
作成方法は、絶対検量線の場合と同様です。

7-12. 定量レポートの出力

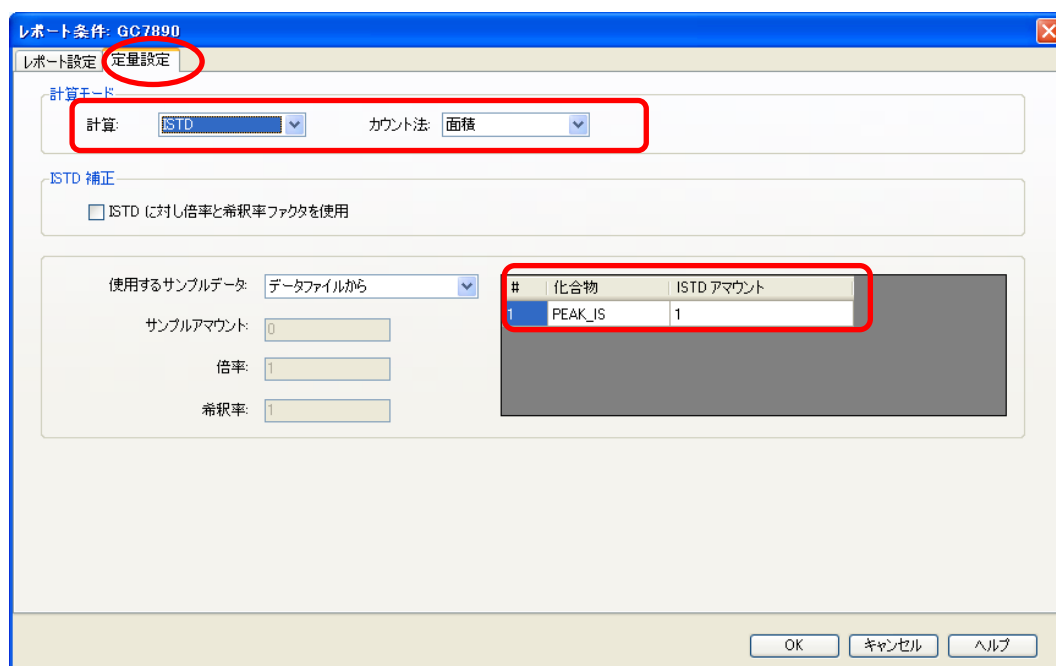
(1) [レポート] - [レポート条件] をクリックします。



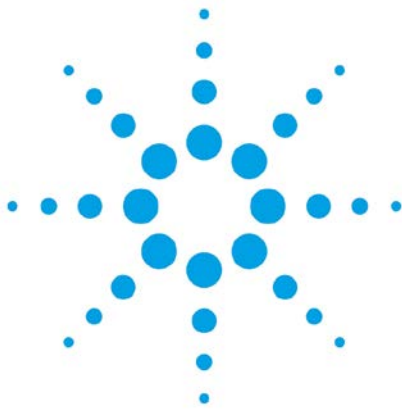
(2) レポート設定タブでは[クラシックレポートを使用]を選択してください。また、レポートスタイルを[簡易]に設定してください。必要に応じて、出力先の[プリンタ]にチェックを入れて下さい。設定が終了したら[OK]をクリックします。



(3) 定量設定タブでは、計算方法を[ISTD]に、カウント法を[面積]に設定します。
 7-11. の(3)で入力した内部標準物質の濃度が表示されています。



- (4) 設定が終了したら、メソッドを保存します。
メソッドの保存方法は、絶対検量線の場合と同様です。
- (5) レポートの印刷
レポートの印刷方法は、絶対検量線の場合と同様です。



第 7 章 データ解析のモード

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. 結果セット	7-4
7-2-2. 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
7-4. 前回の結果モード（DA.M を使用）	7-7

7-1. データ解析のモード

データ解析は、データ採取の方法やユニークなフォルダ作成のオン／オフなどによって手順が異なります。解析のモードは3つあります。

なお、ユニークなフォルダ作成のオン／オフについては、4-3-1. を参照してください。

① 再解析モード

結果セット内の一連のデータ解析を実行します。
再解析ごとに、DA.M が更新されます。

② 再計算モード

シングルランのデータ解析を実行します。
任意のマスターメソッドでの積分及び計算が可能です。

③ 再計算モード：前回の結果モード（DA.M を使用）

データファイルに含まれるメソッドを使用します。

再解析モードと再計算モードの違いを以下に示します。

	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を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を作成できる	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)	・ 任意のマスターメソッド ・ データごとに付属するメソッド (前回の結果モード)
連続再解析	可能	できない
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	結果セットごとに保管	データ、使用したメソッド及びシーケンスをユーザが管理する必要がある
結果ファイルの作成 (レビュー画面で使用)	連続再解析で作成	すべてのデータの印刷／レビューが必要



7-2. 再解析モード

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。再解析モードでは、結果セットの再解析を実行します。

また、結果ファイル（ACAML ファイル）が自動的に作成されますので、レビュー画面で結果をレビューすることができます。

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において、すべての結果ファイル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することができます。

注意

再解析モードでは「ユニークなフォルダ作成オン」で作成された結果セットだけを使用することができます。

<参考>

ACAML=Agilent Common Analytical Markup Language

7-2-1. 結果セット

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（シーケンスメソッドと呼びます）
- ・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）

などが格納されます。

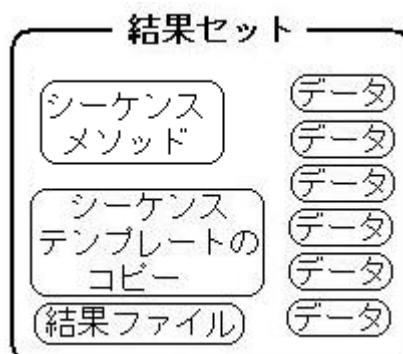
注意

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。マスターメソッドやシーケンステンプレートには影響を与えません。また、再解析の結果として ACAML ファイルが自動的に作成されますので、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。

シーケンスの採取データが、

- ・検量線作成用の標準試料と未知試料のセット
- ・繰り返し再現性試験のデータセット

などのように、セットとして意味を持つ場合は、再解析モードを推奨します。



7-2-2. 結果セットの再解析

シーケンスメソッドの解析条件を最適化して、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ときの解析の手順は以下のとおりです。

- ① 結果セットの読み込み
- ② データの読み込み
- ③ 積分条件の最適化
- ④ キャリブレーションテーブルの作成、レポートの設定
- ⑤ シーケンスメソッドの保存
- ⑥ シーケンス出力の設定
- ⑦ シーケンスの保存
- ⑧ 結果セットの再解析、レポートの印刷
- ⑨ 結果に満足であれば終了
- ⑩ マスターメソッドを更新または必要に応じて新規に作成
- ⑪ レビュー画面で結果の閲覧が可能

注意

サンプルタイプが「キャリブレーション」の場合は、結果セット内のシーケンスメソッドが更新されます。

注意

シーケンスメソッドにおける変更の内容を、次回の測定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「メソッド」－「マスターメソッドを更新」あるいは「新しいマスターメソッドとして更新」を実行します。

注意

再解析するたびに、D.A.M が更新されます。

注意

「ユニークなフォルダ作成オン」に設定すると「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」から「データ再解析のみ」を選択することができません。

7-3. 再計算モード（任意のメソッドでの再計算）



シングルランのデータや、ユニークなフォルダの作成をオフに設定して採取したシーケンスデータなどを再計算します。任意のマスターメソッドで再計算し、積分結果をレビューすることができます。

ただし、マスターメソッドは、日常の操作で随時変更する場合がありますので、データとその解析に使用したマスターメソッドは、セットで管理しておく必要があります。

注意

結果ファイルは自動的に作成されません。結果ファイルを作成するためには、データファイルごとに「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、あらかじめ結果ファイルを作成しておく必要があります。

注意

サンプルタイプが「キャリブレーション」の場合でも、キャリブレーションの更新は行われません。

注意

オートステップを実行しても、レポートは自動的に出力されません。「表示」－「プリファレンス」の「シグナル／レビューオプション」タブから「読み込み後積分およびレポート印刷」を選択すれば、レポートの出力が可能となります。

再計算モードを使用した時の解析の手順は以下のとおりです。

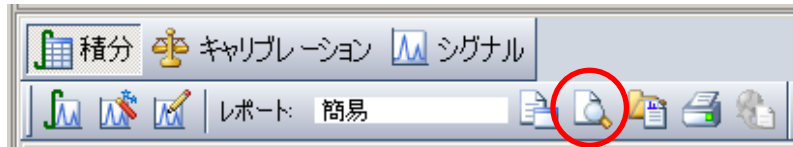
- ① 解析に使用するメソッドの選択
- ② 解析するデータ群の読み込み
- ③ 解析するデータを選択
- ④ 積分条件の最適化
- ⑤ 各データの積分状態をオートステップで確認
- ⑥ 必要なデータの印刷またはプレビュー
- ⑦ 必要に応じて、データファイルにマニュアル積分を適用することも可能
- ⑧ 必要に応じて、キャリブレーションテーブルの作成とレポートの設定が可能
- ⑨ 必要に応じて、メソッドを保存
- ⑩ 必要に応じて、レポートの出力
- ⑪ レポートの出力後は、レビュー画面で結果の閲覧が可能

7-4. 前回の結果モード (DA.M を使用)

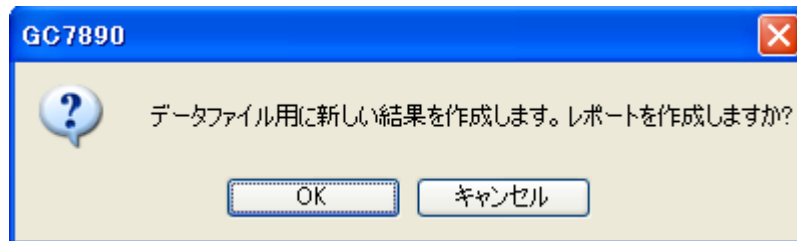
前回の結果モードを使用するには、メニューから [再計算] - [前回の結果モード] を選択します。

前回の結果モードでは、データごとに付属するメソッド (DA.M) が読み込まれます。DA.M には、当該データを最後に解析した結果が保存されています。そのため、一時的にシーケンスメソッドが変更された場合にも、前回の結果を DA.M を用いて再生することができます。

解析条件を変更した後などに DA.M を更新するには、レポートをプレビューするか、あるいはメニューから [レポート] - [レポート印刷] を実行します。レポートのプレビューにはアイコンを使用します。



この時、以下のような確認画面が表示されますので [OK] をクリックすると DA.M が更新されます。

**注意**

メニューの [メソッド] - [メソッドの保存] から DA.M を保存することはできません。

注意

DA.M を、マスターメソッドにすることはできません。

注意

DA.M は、他のモードで [レポートの印刷] を実行した場合や、再解析モードで再解析を実行した場合などに、その時点で使用されていたメソッドで更新されます。

前回の結果モードを使用した時の解析の手順は以下のとおりです。

- ① 再計算モードに移行
- ② 前回の結果モードに移行
- ③ 解析するデータ群の読み込み
- ④ 解析するデータの読み込み (同時に DA.M が読み込まれる)
- ⑤ 必要に応じて積分条件の最適化
- ⑥ 別のデータを読み込む前に DA.M の保存
- ⑦ 別のデータを読み込む
- ⑧ 各データの比較をする





第 8 章

再解析モードにおける 結果セットのシーケンス解析

8-1. 結果セットの再解析	8-2
8-2. シーケンスサマリレポート	8-2
8-3. シーケンス再解析の実行	8-4
8-4. 異なるメソッドでのシーケンス再解析	8-4
8-5. 結果セットの新規作成	8-5

8. 再解析モードにおける結果セットのシーケンス再解析

この章では、再解析モードにおける結果セットのシーケンス再解析について、説明します。シーケンス再解析を実行すると、統計レポートなどのシーケンスサマリレポートを出力させることができます。

8-1. 結果セットの再解析

結果セットを再解析すると、結果ファイル（ACAML）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。

結果セットの再解析は、シーケンスメソッドに基づいて行われます。解析条件などを変更して結果セットの再解析を行う場合は、シーケンスメソッドを更新してください。また、次の測定で使用するマスターメソッドに反映したい場合は「マスターメソッドの更新」を行います。

<参考>

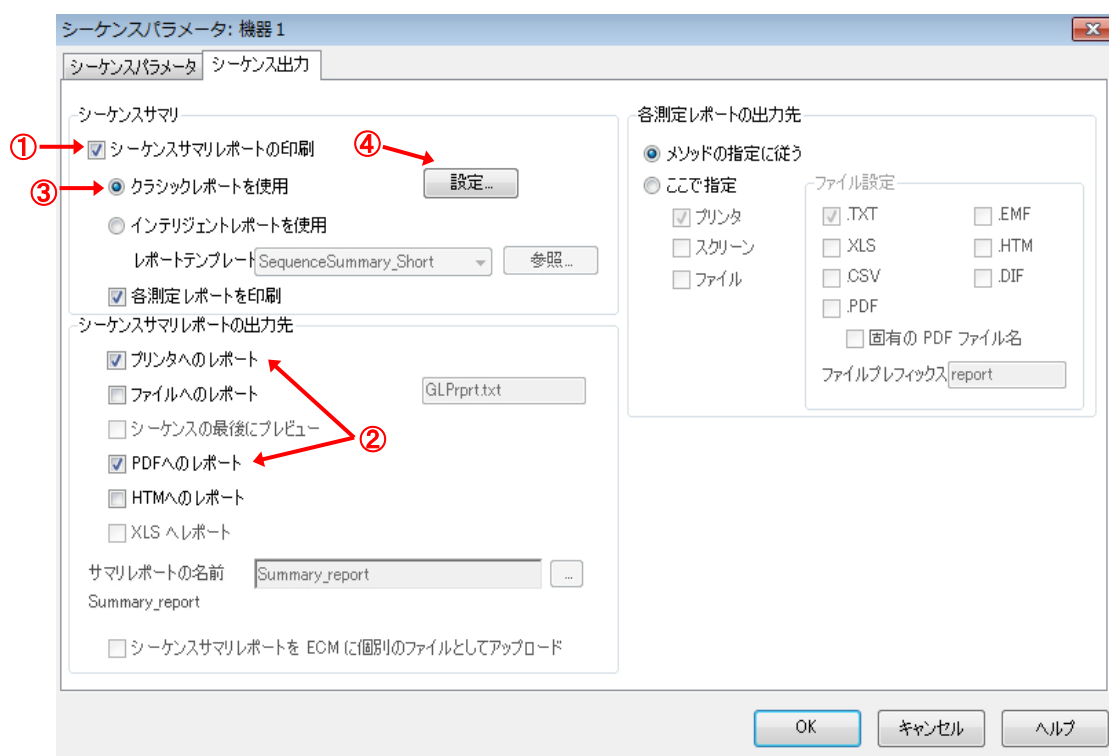
再解析を行うことにより、バッチファイル（拡張子：b）、ログファイル（拡張子：log）及びナビゲーションテーブルが更新されます。

データごとに付属するメソッド（D.A.M）は、シーケンスメソッドにより更新されます。これにより、前回の結果モードを使用した時に、最後の解析結果を表示させることができます。

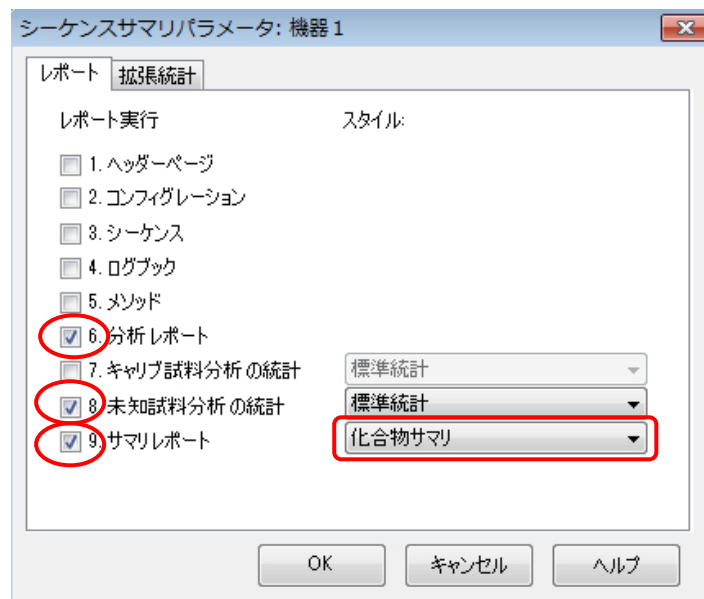
8-2. シーケンスサマリレポート

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を出力させることができます。これにより、例えば、標準試料を繰り返し 6 回測定した時の相対標準偏差など、統計計算の結果を出力させることが可能です。ただし、この場合は、あらかじめ積分条件を最適化し、検量線を作成しておく必要があります。

- (1) 再解析モード  になっていることを確認してください。
- (2) 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」のタブを選択します。



- ① [シーケンスサマリレポートの印刷] にチェックを付けます。
- ② 出力先を設定します。上の例では、プリンタと PDF ファイルに出力します。
- ③ [クラシックレポートを使用] を選択します。
- ④ [設定] をクリックし、レポート出力する項目を選択します。

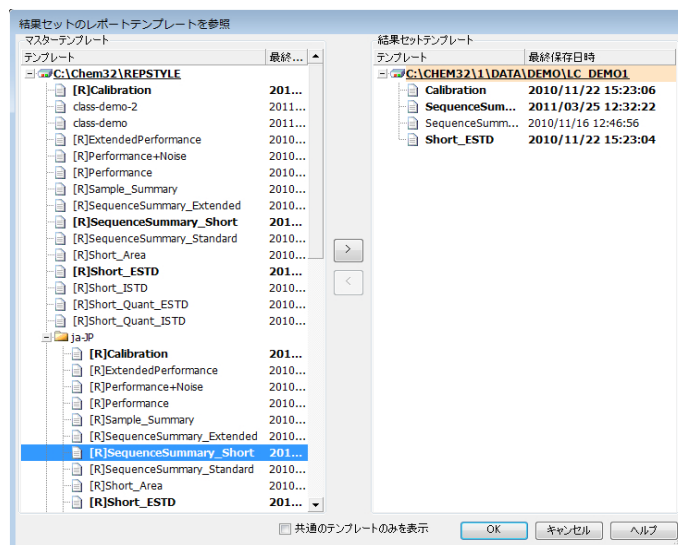


- ⑤ 例として [6.] [8.] [9.] にチェックを付けます。[9.] のスタイルのプルダウンから [化合物サマリ] を選択し [OK] をクリックします。

<参考>

インテリジェントレポートを使用する場合、テンプレートを選択するには [参照] ボタンをクリックします。

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 などの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。



中央の  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画面が表示されたら [OK] をクリックします。画面下の [OK] をクリックして、この画面を閉じます。

8-3. シーケンス再解析の実行

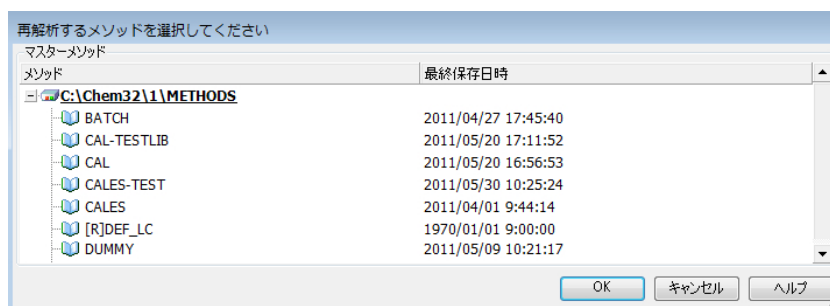
メニューから[シーケンス] - [シーケンス再解析]を選択します。あるいは、シーケンス再解析  をクリックします。8-2. で示した例のとおりシーケンス再解析を実行すると、分析レポート、各化合物の濃度、平均値、相対標準偏差などを含むシーケンスサマリレポートが印刷されます。

なお、この結果セットには結果ファイルが作成されますので、レビュー画面におけるレビューが可能です。

8-4. 異なるメソッドでのシーケンス再解析

通常、シーケンス再解析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を実行することもできます。

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します。

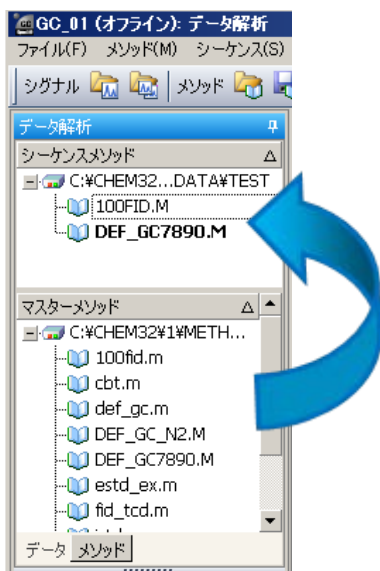
選択したメソッドは結果セット内にコピーされ、そのメソッドで解析された結果ファイルが作成されます。

注意

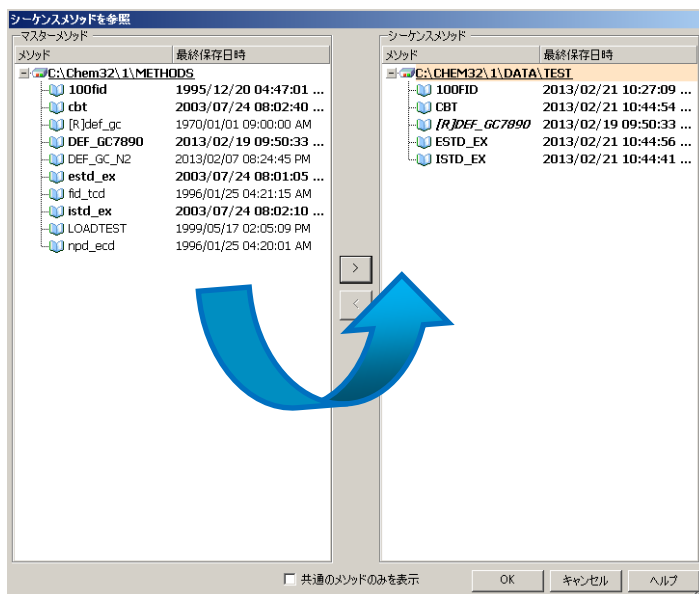
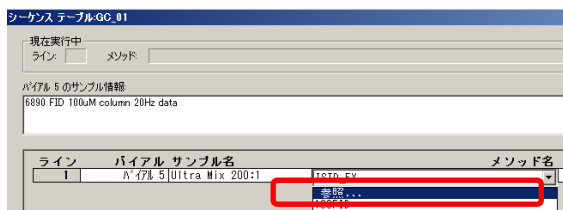
上記の手順では、1種類のマスターメソッドのみで再解析を実行していますが、シーケンスライン（データ行）ごとに異なるマスターメソッドで再解析を実行する場合は、以下のような操作を行う必要があります。

- ① 初めにケミステーションエクスプローラの[メソッド]のタブで、マスターメソッドからシーケンスメソッドへメソッドをコピーします。
- ② 次にシーケンステーブルの[メソッド名]のプルダウンから、①でコピーしたメソッドを選択します。

なお、シーケンステーブルでは、行の追加及び削除はできません。



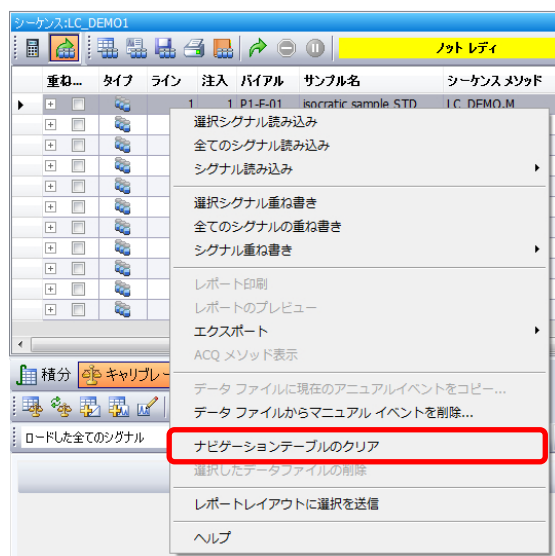
あるいは、シーケンステーブルの「メソッドの名」のプルダウンから「参照...」を選択して表示される画面でも、マスターメソッドからシーケンスメソッドへメソッドをコピーすることができます。



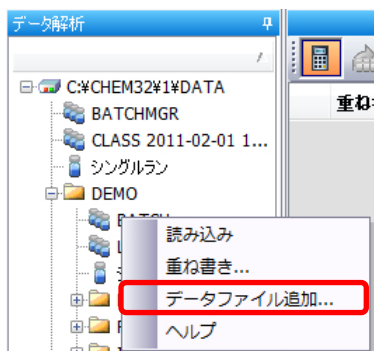
8-5. 結果セットの新規作成

ここでは、シングルランのデータあるいは異なる結果セットからデータを取り出して、それらを集めて新たに結果セットを作成する方法について説明します。なお、新たに結果セットを作成するためには、マスターメソッドが必要です。また、新たに作成した結果セットについても、シーケンス再解析が可能です。

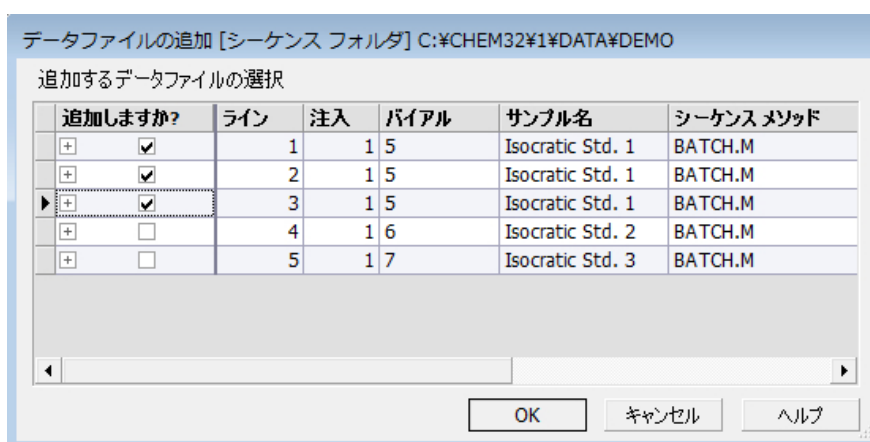
- (1) ナビゲーションテーブル上でマウスの右ボタンをクリックして、表示されるメニューから「ナビゲーションテーブルのクリア」を選択します。



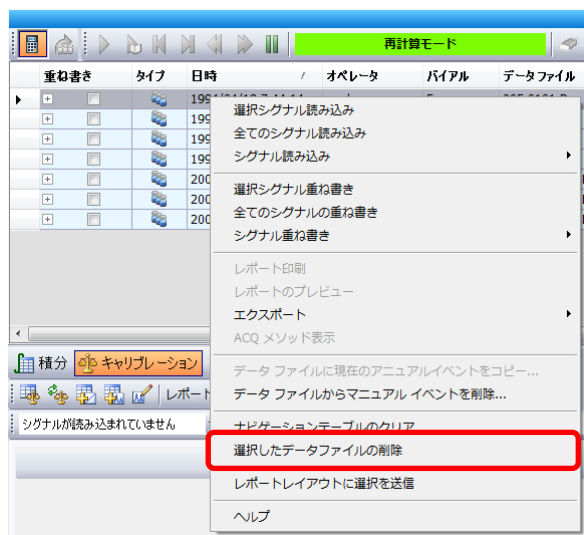
- (2) データを取り出したいシングルランあるいは結果セットのアイコンを右クリックして表示されるメニューから「データファイル追加」を選択します。



- (3) 必要なデータ行の「追加しますか?」にチェックを付けて「OK」をクリックします。

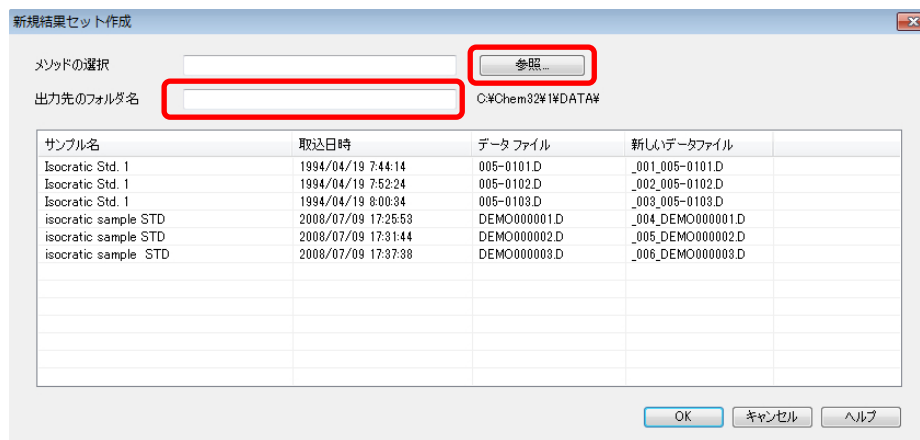


- (4) 他にも追加したいデータがあれば、(2)~(3)の操作を繰り返します。
 (5) ナビゲーションテーブル上には、追加したデータの一覧が表示されます。もし不要なデータがあれば、そのデータ行で、マウスの右ボタンをクリックして表示されるメニューから「選択したデータファイルの削除」を選択します。

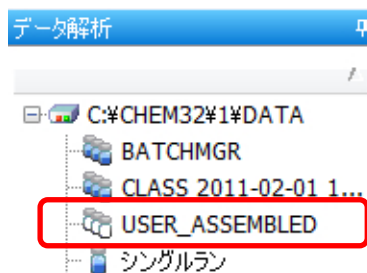


- (6) 一番上の行をクリックし、さらに「[Shift]」キーを押したまま一番下の行をクリックします。すべての行が選択状態になり、ハイライトされます。
 (7) メニューから「シーケンス」 - 「新規結果セット作成」を選択します。

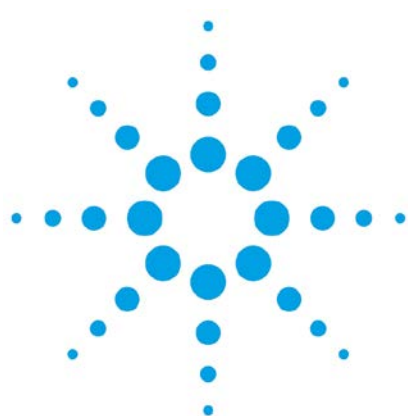
- (8) 新規結果セットには、シーケンスメソッドとなるメソッドが必要です。[参照] をクリックして、マスターメソッドの中から選択してください。
- (9) 出力先のフォルダ名を設定してください。これが結果セットの名前になります。
- (10) [OK] をクリックして、画面を閉じます。



- (11) 新たに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。







第 9 章

再計算モードにおけるデータ解析

9-1. 再計算モードでの解析	9-2
9-2. 前回の結果モード (DA. M を使用) での再計算	9-3

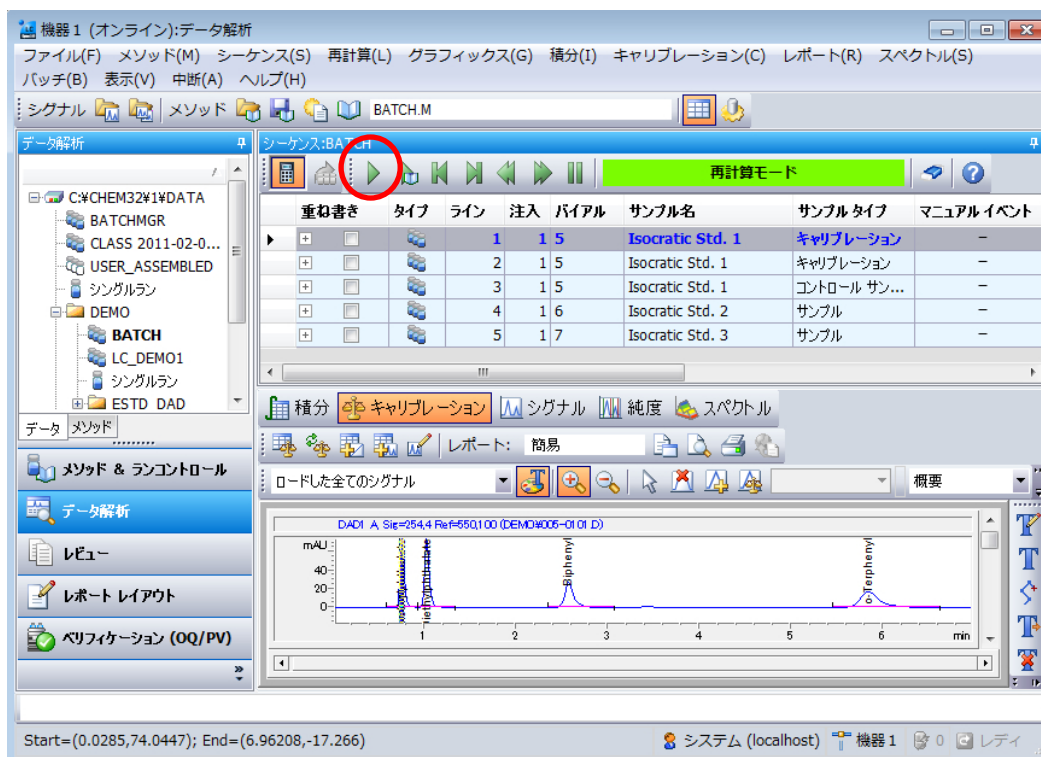
9. 再計算モード

この章では、シングルランのデータや、ユニークなフォルダの作成をオフに設定して採取したシーケンスデータなどを再計算する方法について、説明します。

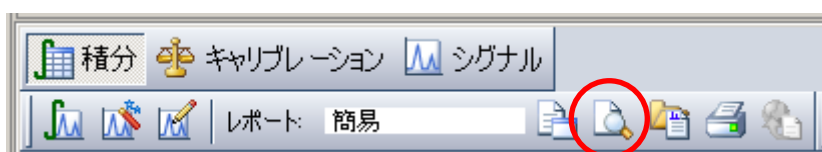
任意のマスターメソッドで再計算し、積分結果をレビューすることができます。

9-1. 再計算モードでの解析

- (1) 再計算モード  に切り替えます。
- (2) メニューから [メソッド] - [メソッド読み込み] を選択します。
- (3) シングルランのデータや、ユニークなフォルダの作成をオフに設定して採取したシーケンスデータなどをケミステーションエクスプローラから読み込みます。
- (4) ナビゲーションテーブルで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) 積分の結果は、オートステップ機能で連続的に計算することができます。ナビゲーションテーブルの一番上の行をクリックして、オートステップ開始  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 [シグナル/レビューオプション] のタブで変更できます。3-12. を参照してください。
クロマトグラムの表示が順次切り替わり、積分の状態を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。



- (6) 現在読み込まれているメソッドでは、積分条件や定量の条件などを変更することができます。
- (7) 積分条件を最適化して、レポートをプレビューします。レポートのプレビュー  をクリックしてください。この操作で、結果ファイルが作成されます。



注意

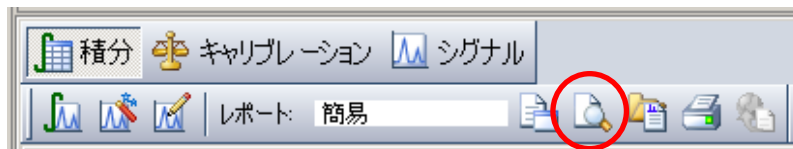
オートステップ機能では、検量線の更新は行われません。

注意

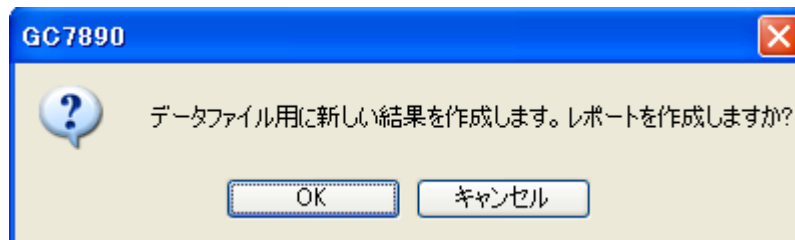
結果ファイルを作成するためには、レポートのプレビュー  をクリックするか、あるいはメニューから [レポート] - [レポート印刷] を選択してください。

9-2. 前回の結果モード (DA.M を使用) での再計算

- (1) 再計算モード  に切り替えます。
- (2) メニューから [再計算] - [前回の結果モード] を選択します。
- (3) シングルランのデータ、ユニークなフォルダの作成をオフに設定して採取したシーケンスデータなどをケミステーションエクスプローラから読み込みます。
- (4) ナビゲーションテーブルからデータ行をダブルクリックします。これによりデータに付属するメソッド (DA.M) が読み込まれます。
- (5) 積分条件を最適化します。
- (6) DA.M を更新するには、レポートをプレビューする必要があります。レポートのプレビューをクリックします。あるいはメニューから [レポート] - [レポート印刷] を選択します。



この時、以下のような確認画面が表示されますので [OK] をクリックすると DA.M が更新されます。



- (7) 必要に応じて、再計算の結果を印刷します。

注意

メニューの [メソッド] - [メソッドの保存] から DA.M を保存することはできません。

注意

DA.M を、マスターメソッドにすることはできません。

注意

DA.M は、他のモードで [レポートの印刷] を実行した場合や、再解析モードで再解析を実行した場合などに、その時点で使用されていたメソッドで更新されます。





第 10 章 レビュー画面

10-1. シングルランのレポート表示	10-2
10-2. 結果セットのレポート表示	10-3
10-3. 結果セットのサマリレポート表示	10-3

10. レビュー画面

この章では、レビュー画面について説明します。レビュー画面では、データファイルや結果セット内に作成される結果ファイル（ACAML）を用いることにより、再解析をすることなくレポートの表示や印刷を行うことができます。

レビュー画面では、メソッドの読み込みはできません。また、再解析及び再計算の新規結果を作成することはできません。作成するレポートは、すでに計算済みの結果を表示しています。

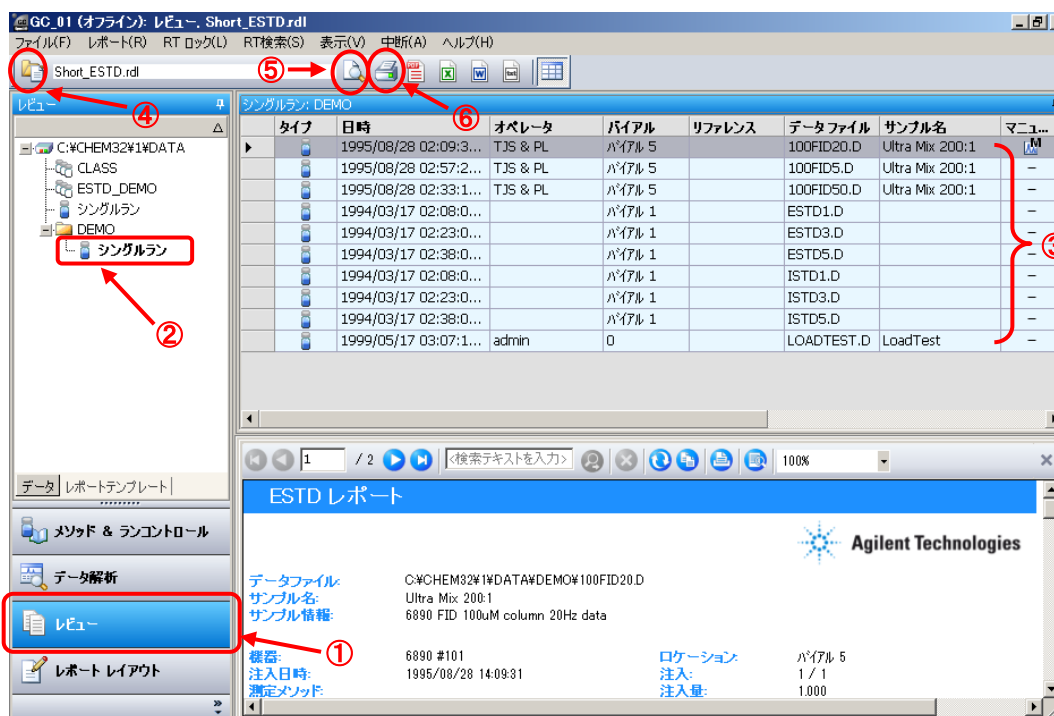
注意

積分の実行あるいは再計算の実行だけでは、結果ファイルは作成されません。結果ファイルは、以下の操作を実行した時に作成あるいは更新されます。

- ・ レポートをプレビューした時
- ・ 印刷を実行した時
- ・ シーケンス再解析を実行した時

10-1. 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。
- ② ケミステーションエクスプローラから、対象のフォルダの「シングルラン」を選択します。
- ③ ナビゲーションテーブルで対象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¥chem32¥REPSTYLE¥ja-JPの中から選択します。
- ⑤ 印刷プレビュー  をクリックすると、プレビューが表示されます。
- ⑥ 必要に応じて、レポート印刷  をクリックします。



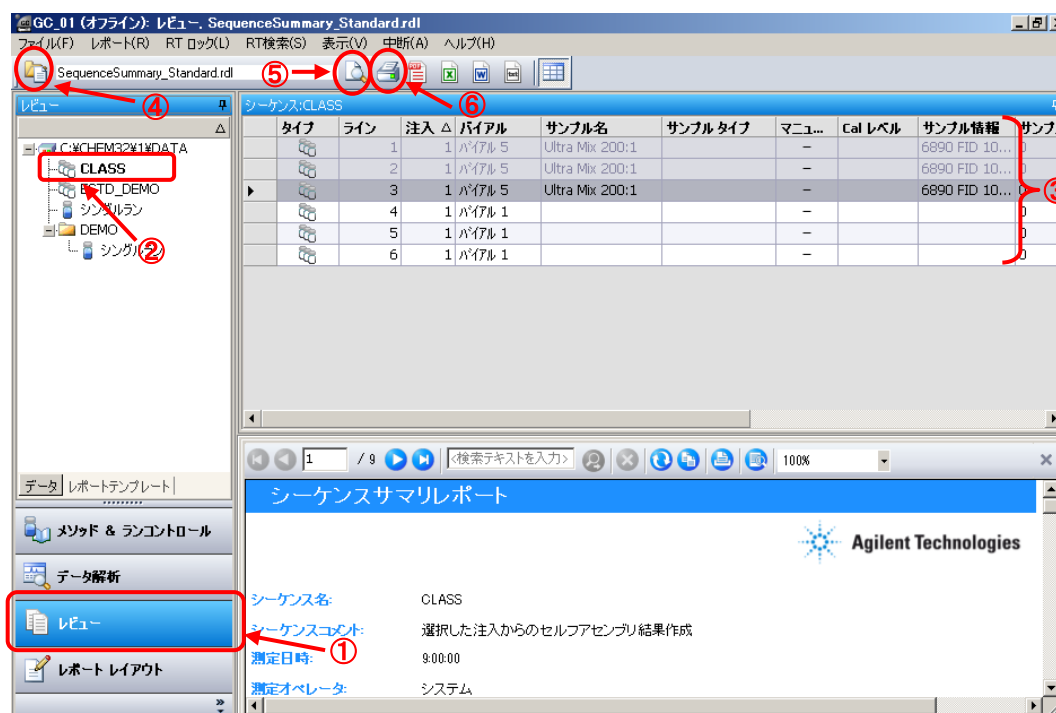
10-2. 結果セットのレポート表示

結果セット内のデータ行について、レポートを表示する方法は、シングルランの時と同様です。ケミステーションエクスプローラから、対象の結果セットを選択した後の操作は、10-1. を参照してください。

10-3. 結果セットのサマリレポート表示

結果セットからは、サマリレポートを作成することができます。

- ① レビュー画面に移行します。
- ② ケミステーションエクスプローラから、対象の結果セットを選択します。
- ③ ナビゲーションテーブルで、サマリレポートを出力させたいデータ行を選択します。
[Ctrl] キーを押しながら対象のデータ行をクリックすると、選択した行がハイライトされます。また、マウスの右ボタンをクリックして表示されるメニューから、すべてのデータ行を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。フォルダ ¥chem32¥REPSTYLE¥ja-JP の中から、シーケンスサマリタイプのレポートテンプレートを選択します。
- ⑤ 印刷プレビュー  をクリックすると、プレビューが表示されます。
- ⑥ 必要に応じて、レポート印刷  をクリックします。







第 11 章 レポートの概要

11-1. クラシックレポートの概要	11-2
11-2. インテリジェントレポートの概要	11-3

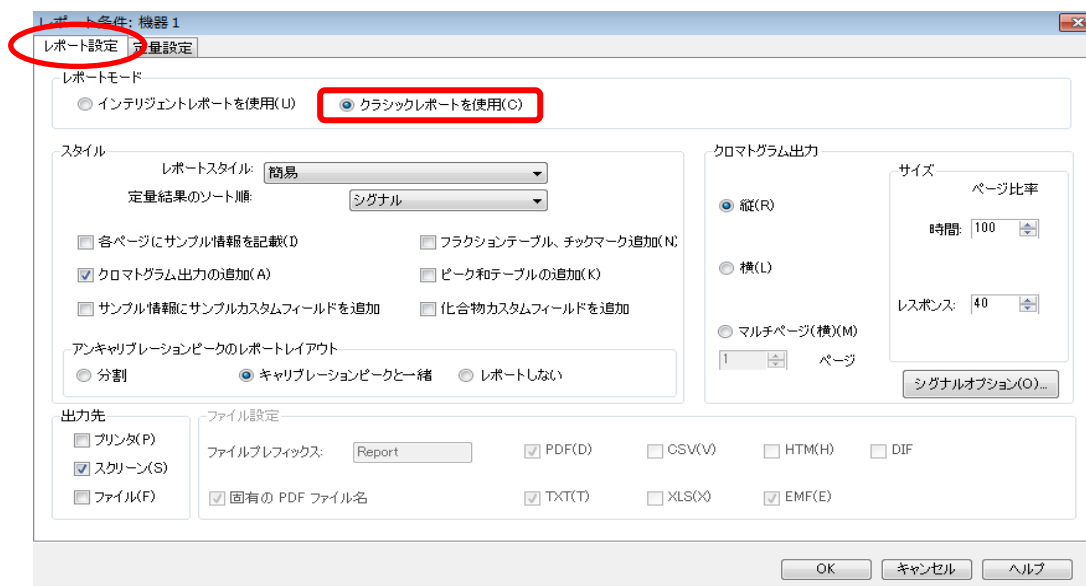
11. レポートの概要

この章では、レポートの概要について説明します。レポートのスタイル（様式）には、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。レポートの種類には、シングルランのレポートとシーケンスサマリレポートがあります。

レポートの出力先として、スクリーン、プリンタ及びファイルが選択できます。

11-1. クラシックレポートの概要

クラシックレポートは、従来のケミステーションのバージョンと同様のスタイルのレポートです。クラシックレポートを使用するには、レポート設定タブで「クラシックレポートを使用」を選択します。



クラシックレポートを出力するには、印刷プレビュー  をクリックするか、あるいはレポート印刷  をクリックします。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」を選択します。

なお、シーケンスサマリレポートを出力する場合は「レポート」のメニューからではなく「シーケンス」－「シーケンスパラメータ」－「シーケンス出力」のタブで、「シーケンスサマリレポートの印刷」にチェックを付けて、シーケンスの再解析を実行する必要があります。8-2. を参照してください。

11-2. インテリジェントレポートの概要

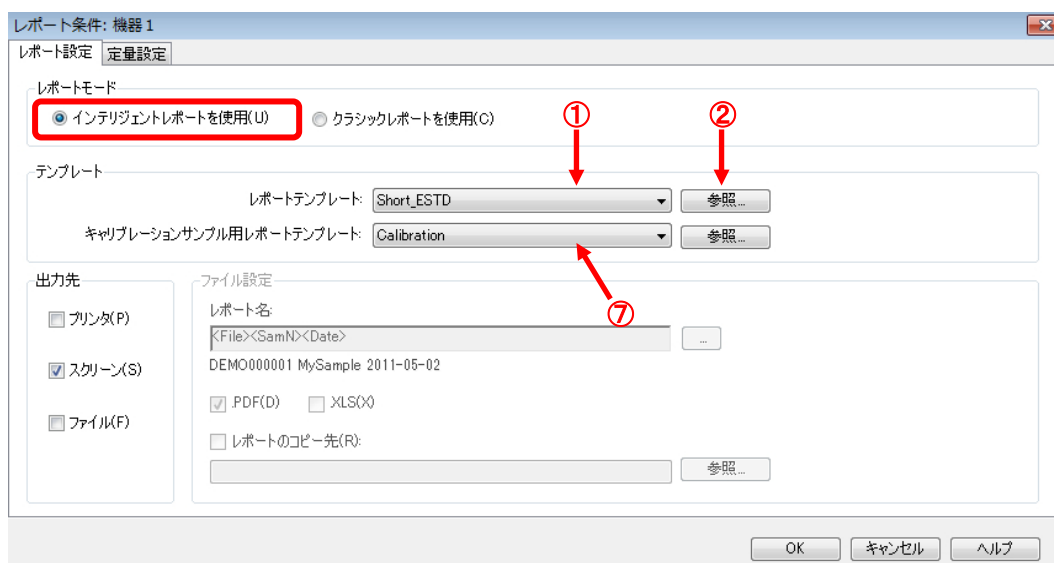
インテリジェントレポートは、OpenLAB ケミステーションから採用された新しいレポートのスタイルです。

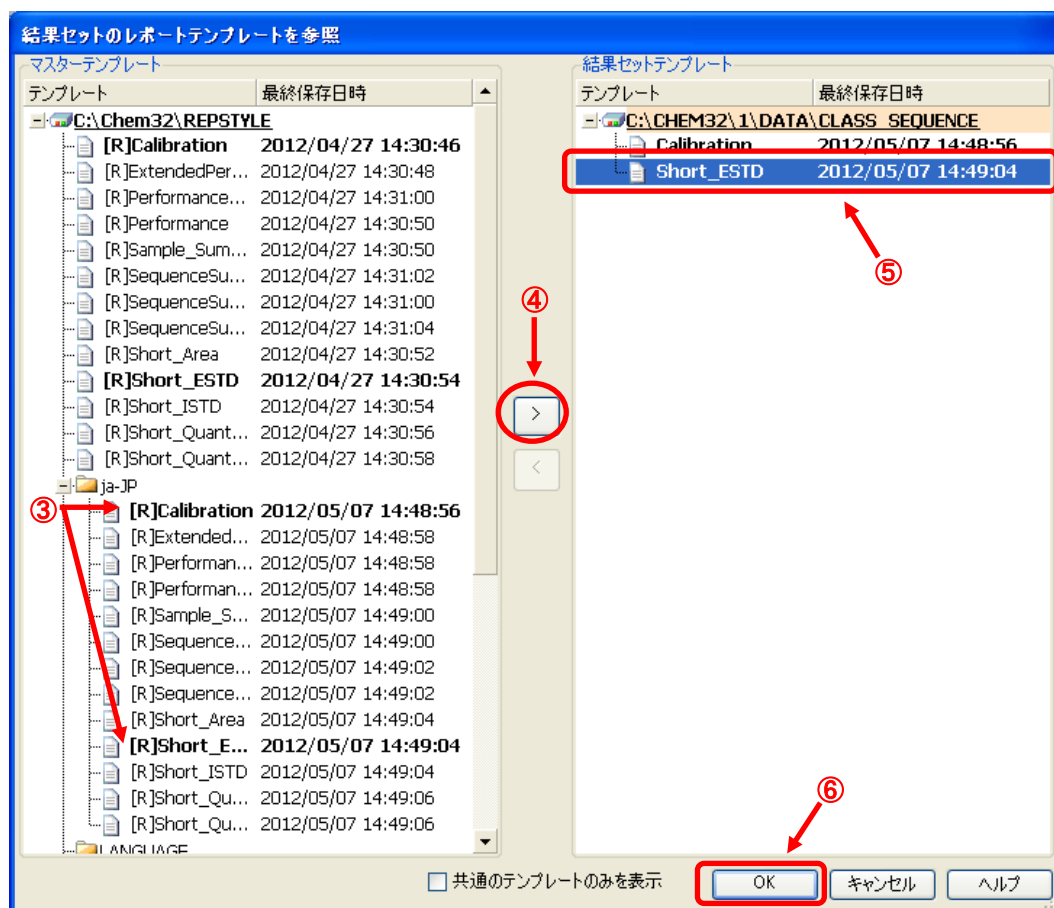
レポートレイアウト画面を使用して、レポートテンプレートを作成し、編集することができます。レポートレイアウトの画面では、

- ・ レポートテンプレートの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式を作成することができます。
- ・ Microsoft Visual Basic で記述された任意の式を使用することができます。
- ・ 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) を用いて、より高度な編集が可能です。
- ・ 結果の値に対して条件を設定し、その結果の判断基準や強調表示をするための式を設定することができます。
- ・ 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することができます。

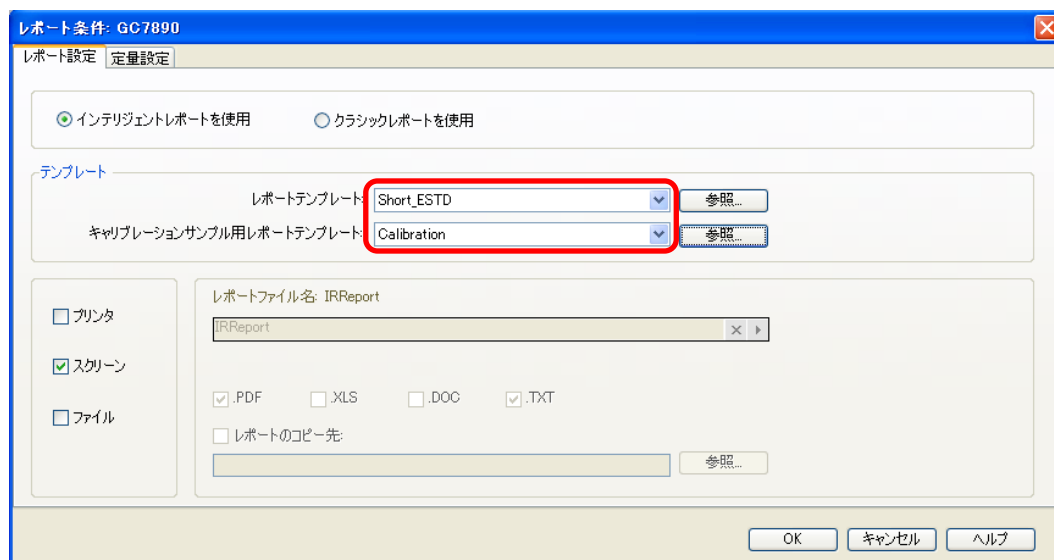
日本語版のソフトウェアには、日本語のテンプレートが用意されています。レポートテンプレートの選択で、フォルダ ¥chem32¥REPSTYLE¥ja-JP の中にあるテンプレートを使用してください。6-7. (2)の<参考>を参照してください。

- ① [レポートテンプレート] のプルダウンから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は[参照] をクリックします。





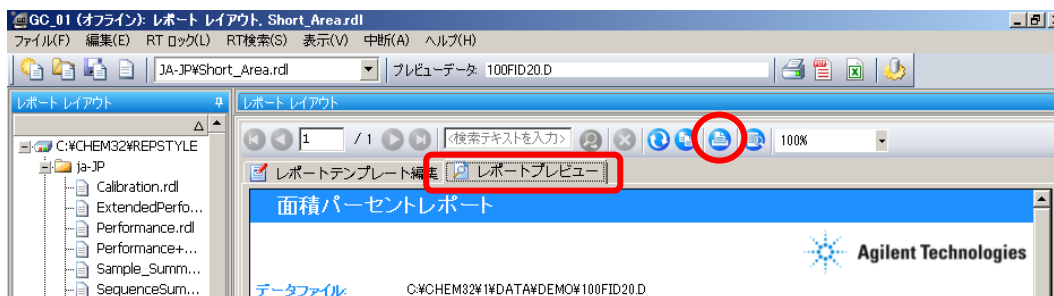
- ③ マスターテンプレートのフォルダ C:\Chem32\REPSTYLE\ja-JP からテンプレートを選択します。ここでは例として [Short-ESTD] と [Calibration] を選択します。
- ④ 中央の  をクリックして、結果セットテンプレートにコピーします。
テンプレートの上書きの確認画面が表示されたら [OK] をクリックします。
- ⑤ 結果セットテンプレートから [Short-ESTD] を選択 (反転表示) します。
- ⑥ [OK] をクリックします。
- ⑦ 同様に [キャリブレーションサンプル用レポートテンプレート] に [Calibration] を選択します。これは、シーケンス再解析でキャリブレーションサンプル用に使用するテンプレートになります。



- ⑧ 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、印刷プレビュー  をクリックするか、あるいはレポート印刷  をクリックします。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] を選択します。

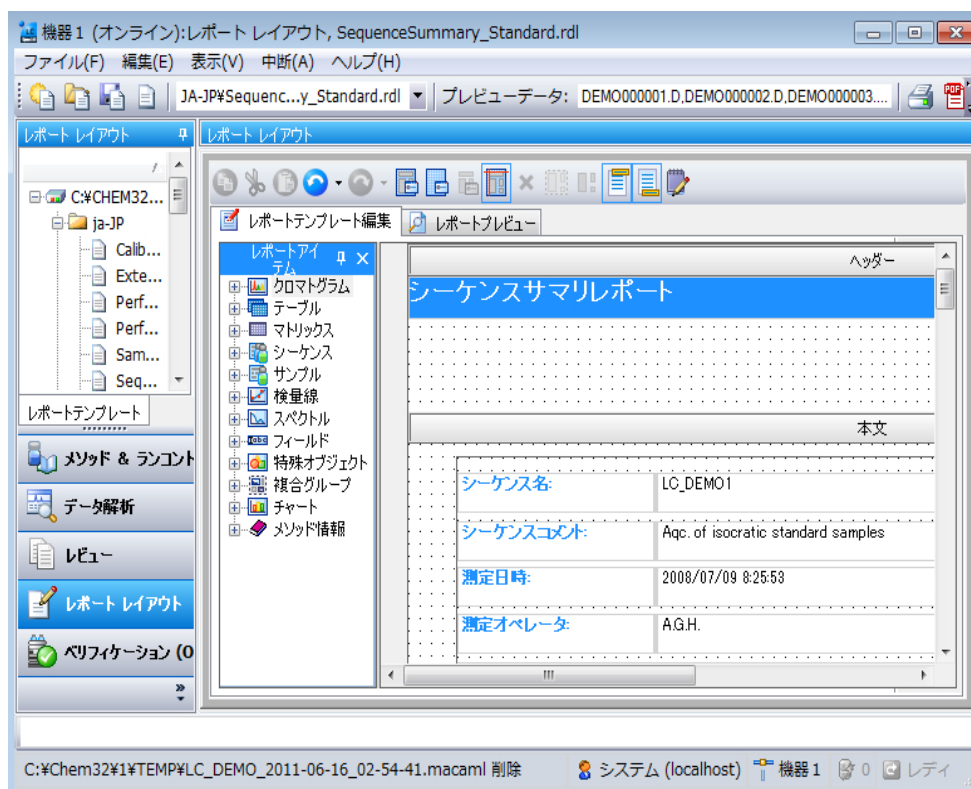
注意

ナビゲーションテーブルでデータ行を選択し、マウスの右ボタンをクリックして表示されるメニューから [レポートレイアウトに選択アイテムを送信] を選択すると、レポートレイアウトの画面に移行します。ここで [レポートプレビュータブ] から印刷することも可能です。



<参考>

インテリジェントレポートのテンプレートは、新規に作成することができます。あるいは、既存のテンプレートを編集することもできます。また、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。以下の図は、テンプレートの編集画面の一例です。







付録 A

オートインジェクタの切り替え方法

(フロントからバックへ移動)

この章では、フロントインジェクタからバックインジェクタに切り換える手順を説明します。なお、バックからフロントに切り換える場合も同様の手順で実施します。

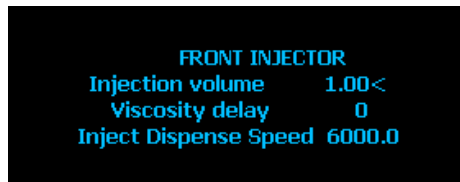
- (1) 現在のインジェクタ位置を確認します。以下の手順はフロントインジェクタが設定されている場合です。

- ① 7890A キーボードで確認する場合



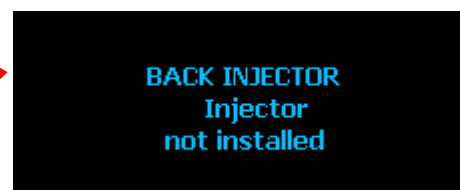
を押します。

GC ディスプレイ上には
このように表示されます。
現在はフロントインジェクタ
の設定になっています。



を押します。

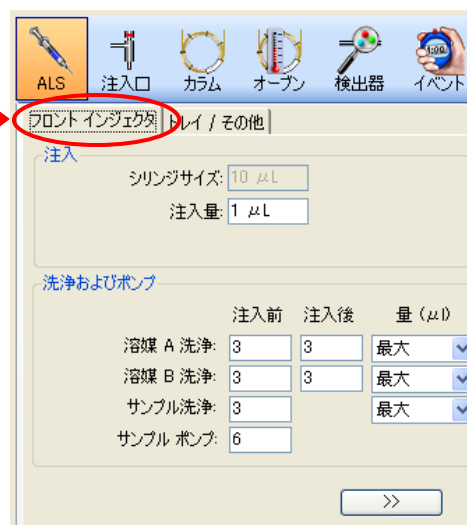
この表示は
バックインジェクタの設定
はされていません。



- ② ケミステーションで確認する場合

メニューから「機器」－「設定 Agilent 7890A パラメータ」を選択します。
パラメータ画面からインジェクタアイコンを選択します。
(パラメータ画面の表示については 3－6－9. を参照してください)

フロントインジェクタタブ
が表示されます。



(2) フロント側のインジェクタをバック側に切り換えます。バックからフロント側に切り換える場合も同様の手順で実施します。

- ① フロント側にインジェクタが設置されています。



- ② インジェクタを両手で持ち上げポストから外します。



- ③ インジェクタのケーブルのツメを押しながらケーブルを抜きます。



- ④ インジェクタのケーブルをインジェクタブラケットの穴から抜きます。



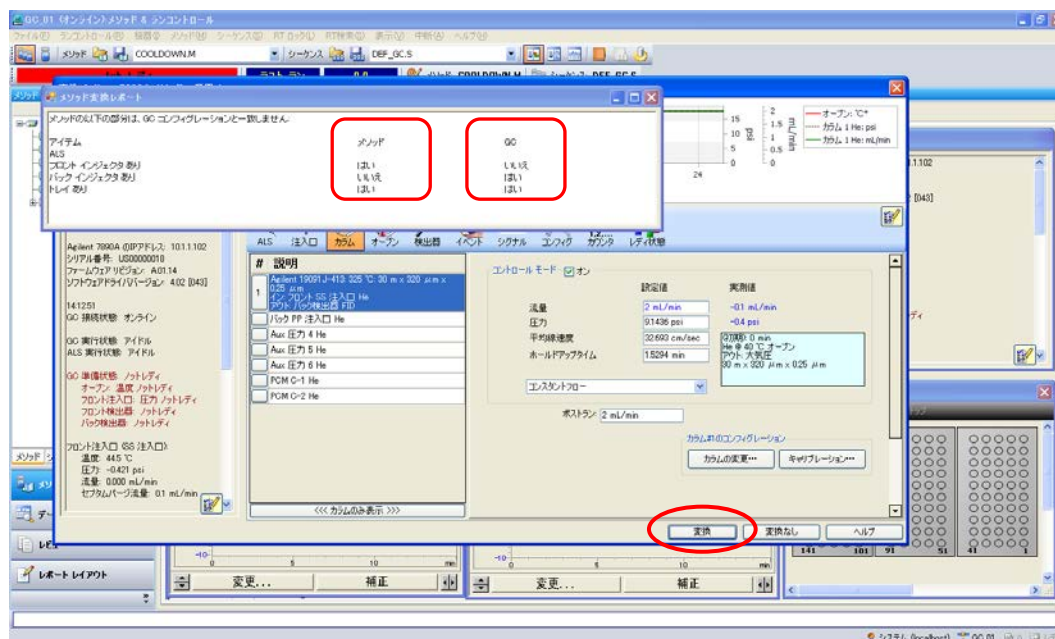
- ⑤ インジェクタブラケットから抜き出したケーブルをインジェクタに接続します。



- ⑥ インジェクタをバック位置に設置します。
インジェクタ前面の
"Ready"LED が点灯して
いることを確認します。



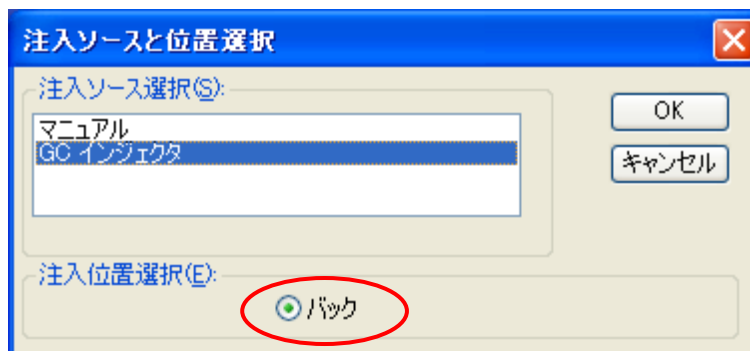
- ⑦ ケミステーションにメソッド変換画面が自動的に表示されます。変更された内容を確認して「変換」をクリックします。以下の例では、GC 側でフロントインジェクタからバックインジェクタに変更した時の画面を表示しています。



メソッド変換レポートが残っている場合は、右上の「×」をクリックして閉じます。なお、インジェクタケーブルを抜いた時に、インジェクタなしの状態を示すメソッド変換画面が表示されますので「変換なし」をクリックして画面を閉じます。

- (3) インジェクタが正しく切り換えられているか、確認します。

- ① 「機器」－「インジェクションソースの選択」から注入ソースの確認をします。
「GC インジェクタ」がハイライトになっていることを確認します。「マニュアル」が選ばれている場合は、「GC インジェクタ」を選択します。「OK」をクリックします。

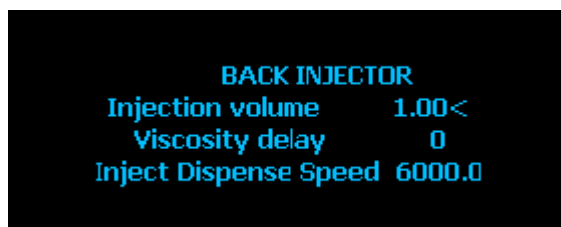


- ② 7890A キーボードでインジェクタ位置を確認する場合。



を押します。

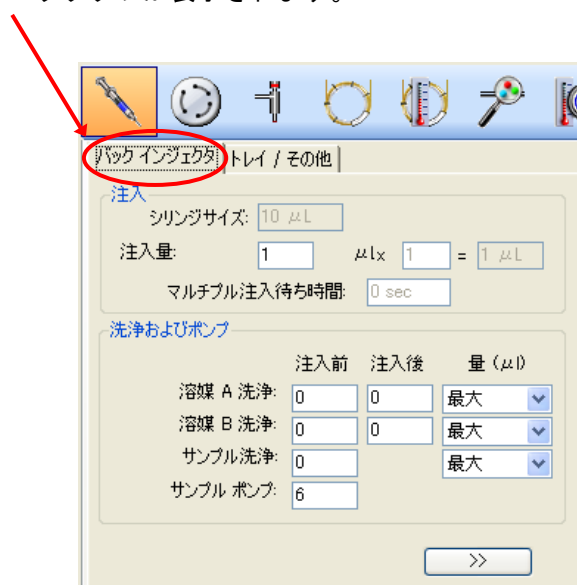
GC ディスプレイには次のように表示され、バックインジェクタに切り換えられたことが確認出来ます。



- ③ ケミステーションで確認する場合。

メニューから「機器」－「設定 Agilent 7890A パラメータ」を選択します。
パラメータ画面からインジェクタアイコンを選択します。

バックインジェクタタブが表示されます。



- (4) メソッドを保存します。

使用しているインジェクタがフロント、バックどちらの位置で設定されているのか分かりやすいメソッド名で作成すると、メソッドを読み込む時に便利です。

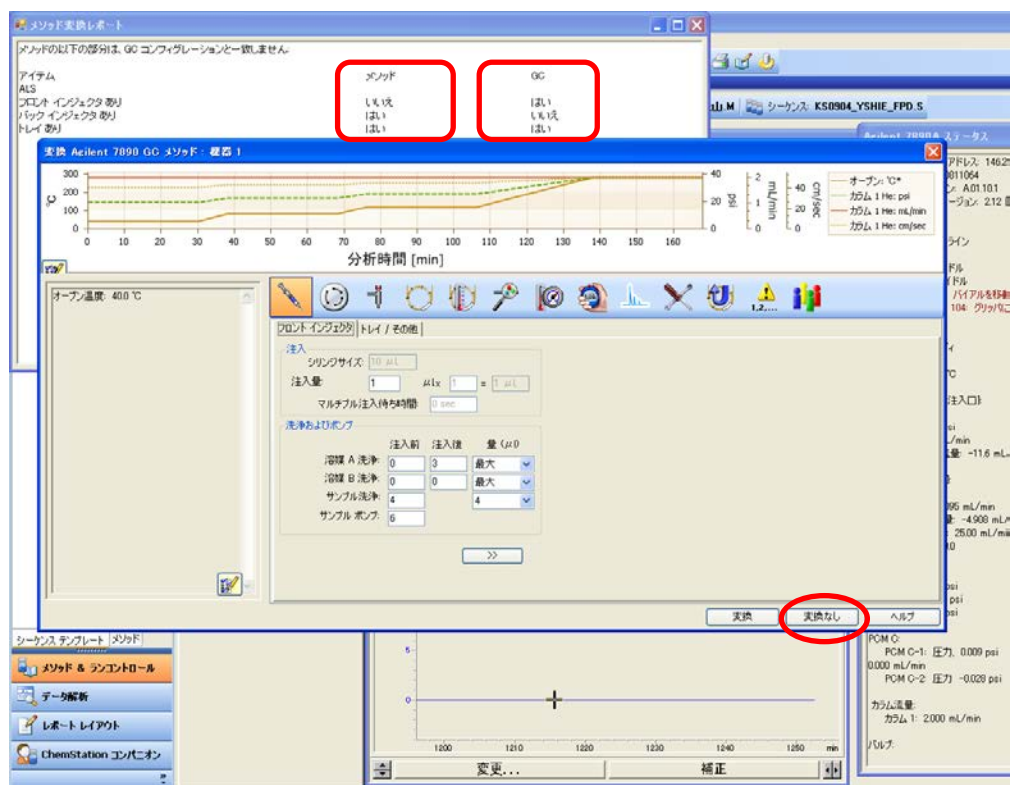
<参考>

フロントインジェクタのメソッドから、バックインジェクタのメソッドを読み込んだ後にインジェクタ本体を切り換える方法。

(インジェクタはフロント位置にあるとします。)

- ① ケミステーション画面に、コンフィグレーションが異なる為、メソッド変換画面が自動的に表示されます。

以下の画面では GC 側ではフロントインジェクタにあり、メソッド側ではバックインジェクタの設定になっていることが確認出来ます。



- ② バックインジェクタで使用する場合は「変換なし」をクリックします。メソッド変換レポートが表示されている場合は、右上の「×」をクリックして閉じます。
- ③ フロントインジェクタを両手で持ち上げバック位置に移動します。





付録 B PC のメンテナンス

この章では、PC のメンテナンスについて説明します。

(1) バックアップについて

データやメソッドなどのファイル／フォルダは、万一の障害に備えて外部のメディアに保存することを推奨します。

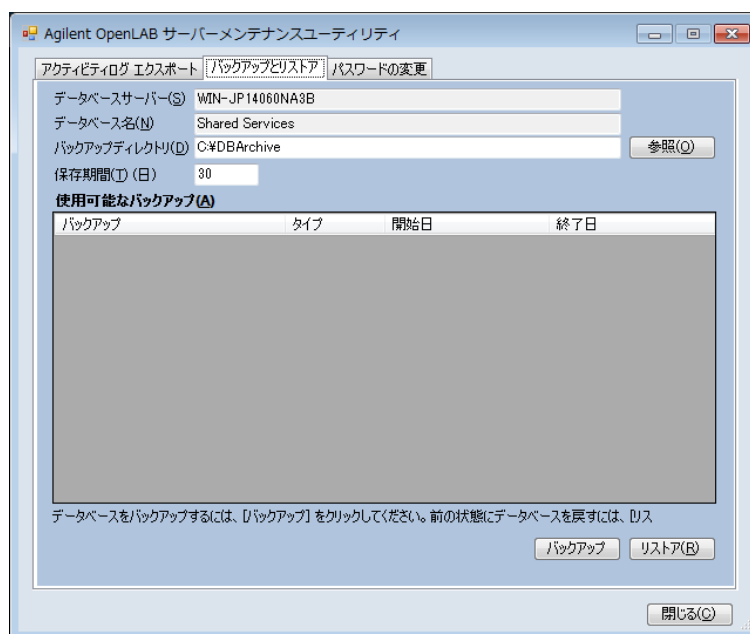
バックアップの作成が必要なファイル／フォルダは以下のとおりです。

＜例：機器 1 の場合＞

- ・ 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
プレファレンスで指定したフォルダ
- ・ 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
- ・ その他、ユーザーが作成したファイル／フォルダ

上記以外に、ユーザーやロールの設定、機器のコンフィグレーションなどをバックアップする場合は、OpenLAB サーバーメンテナンスユーティリティを使用します。

このツールを用いることにより、Shared Service 設定（OpenLAB コントロールパネル）のユーザーやロールの設定などをバックアップすることができます。重要な変更をする時には、バックアップすることを推奨します。バックアップを外部のメディアに保存することにより、ユーザーやロールの設定などを復元することができます。



(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、適宜ディスクの最適化を実行してください。

なお、オンラインソフトウェア使用中及びオフラインソフトウェア使用中は、ディスクの最適化を実行しないでください。Windows7 では、毎週水曜日の AM:1:00 に自動的にディスクの最適化が実行されるようなスケジュールが設定されていますので、深夜運転をされる時は、その設定を無効化することを推奨します。なお、最適化が実行されるスケジュールは、PC が起動しており、かつ、測定が実行されない時間帯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手順は、以下のとおりです。

- ① Windows の [スタートボタン] をクリックし、右側のメニューから [コンピュータ] を選択します。
- ② [ローカルディスク] のところでマウスの右ボタンをクリックし [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] をクリックします。
- ④ [ディスクの最適化] をクリックします。

(3) 電源の管理

Windows の電源オプションで、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。

(4) ライセンスの管理

ライセンスファイルの作成は、オンラインの Agilent Subscribe Net サイト上で実行します。

<https://agilent.subscribe.net.com>

納入されたライセンスの Authorization Code や Agilent Subscribe Net 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。

Open LAB CDS ソフトウェアの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作成されています。そのため、他の PC では使用できません。

他の PC で使用する場合や、PC の修理などで MAC アドレス変更された場合は、ライセンスファイルを再取得することが必要です。

重要

お客様がご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）においてAuthorization Codeを用いてライセンスを有効化することで、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、その中にライセンスが保管されています。ライセンス登録時に指定させていただいたお客様ご本人と、弊社の担当エンジニアのみが、このAccountにアクセスすることが可能です。

システムの再インストールやアップグレードの時に、スムーズなライセンス移行を実施するため、Agilent Subscribe Netへの登録情報は、大切に保管をお願いします。

また、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、MACアドレスとホスト名にリンクして作成されています。一旦作成したライセンスファイルを、他のPCで使用することはできません。また、PCの修理などでハードウェアが変更された場合は、ライセンスファイルの再取得が必要になります。

改定履歴

版 (Rev.)	内容	日付	改訂者
初版 (Rev.1)	第 1 版	2013/02/26	HK

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 9:00～18:00 (土、日、祝祭日を除く)

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

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

AT2A4A14

©Agilent Technologies, Inc. 2013

Printed in Japan 2013/02



Agilent Technologies