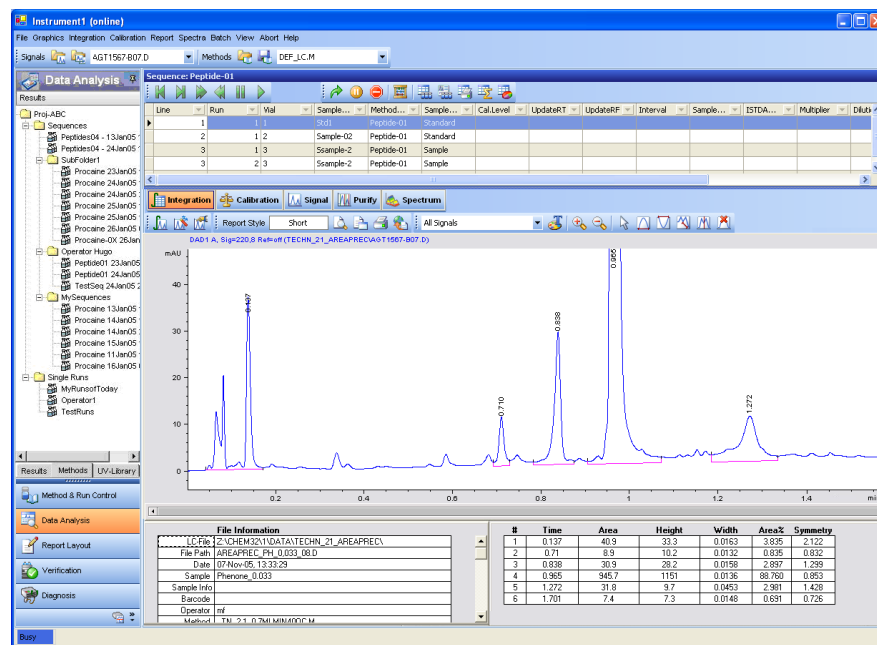


OpenLAB CDS ChemStation (C.01.04以降) 日本薬局方(JP)対応の値について



付録: ChemStation B.03.02以降の
場合について

Nov2014

OpenLAB CDS ChemStationで 日本薬局方対応の値をレポートするには

第15,16改正日本薬局方に対応しています。

方法1: インテリジェントレポート機能を活用する。

- ピーク幅(50%)
- カラム効率(理論段数)
- 分離度(半値幅法)
- シンメトリー係数
- SN比
- 分離係数(調整済みの相対リテンションタイム)
- ピーク谷比

リビジョンBの ChemStation
(B.03.02以降)の
ソフトウェアでは、
方法2、方法3が利用できます。

方法2: クラシックレポートのパフォーマンス、拡張パフォーマンスレポートを利用する。

- ピーク幅(50%)
- カラム効率(理論段数)
- 分離度(半値幅法)
- シンメトリー係数(USPテーリングファクタ)

方法3: クラシックレポートのJP対応カスタムレポートを利用する。

- ピーク幅(50%)
- カラム効率(理論段数)
- 分離度(半値幅法)
- シンメトリー係数(USPテーリングファクタ)

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート インテリジェントレポートの活用

レポートできる値

- ピーク幅(50%)
- カラム効率(理論段数)
- 分離度(半値幅法)
- シンメトリー係数
- SN比
- 分離係数(調整済みの相対リテンションタイム)
- ピーク谷比

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート インテリジェントレポートの活用:基本操作

レポートテンプレートの結果テーブルに、
希望の値を表示する列を追加します。

1 レポートレイアウト画面

2 既存のテンプレートを選択する

3 右クリック

4

5

6

ここに分離度(JP)を入れたい!

化合物名	RT	面積	RF	高さ	高さ%	ID
o-desm tramadol (D)	0.915	0.34488	0.1193	0.04115		Impurities
...

- グリッドに合わせる
- アライメント
- サイズを揃える
- 左右の間隔
- 上下の間隔
- グループ化(G)
- グループ解除
- 自動(V)
- 解除(D)
- 左に列を挿入
- 右に列を挿入
- 列の削除(C)
- 列のプロパティ
- ロック
- ロック解除(N)
- プロパティ(R)
- シーケンス
- サンプル
- 注入
- シグナル
- 化合物
- ピーク
- 検量線
- 機器
- プロジェクト
- 補正予想リテンションタイム
- 下方変曲点ベースライン時間
- 下方変曲点ベースライン Y
- 終了時間
- 尖度 (Excess)
- 高さ
- 高さ%
- ID
- レベル終了
- レベル開始
- ノイズ
- ピーク谷比
- 理論段数 5σ
- 理論段数統計法
- リファレンスピーク ID
- 相対リテンションタイム
- 相対リテンションタイム EP
- 分離度クラシック
- 分離度 EP
- 分離度 JP
- 分離度 USP
- 分離度 5σ
- 分離度統計法
- リテンションタイム
- 選択性
- S/N EP
- S/N USP
- S/N 6σ
- 歪度 (Skew)

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート インテリジェントレポートの活用:基本操作

7

列が増えます。

化合物名	RT [min]	RF	面積	アmount [ng/ul]	ピーク分離度 JP	グループ
dimethylphthalate	0.449	3.81759	50.5527	192.9895		
diethylphthalate	0.589	4.14749	46.3175	192.1011	3.35900	
biphenyl	1.067	2.78722	54.7498	152.5829	9.94911	
o-terphenyl	1.973	0.74618	76.7173	57.2451	3.44187	
合計			594.9187			

テンプレートの
編集結果を確認して
名前を付けて
保存します。

8 プレビューして確認

8

プレビューして確認

レポートプレビュー

ESTD レポート

Agilent Technologies

ESTD レポート (カウント法: 面積)

シグナル: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=360,100

化合物名	RT [min]	RF	面積	アmount [ng/ul]	ピーク分離度 JP	グループ
dimethylphthalate	0.449	3.81759	50.5527	192.9895		
diethylphthalate	0.589	4.14749	46.3175	192.1011	3.35900	
biphenyl	1.067	2.78722	54.7498	152.5829	9.94911	
o-terphenyl	1.973	0.74618	76.7173	57.2451	3.44187	
合計			594.9187			

9 名前を付けて保存

1290-01 (オフライン): レポートレイアウト, Short

ファイル(F)

- 新規レポートテンプレート(N)...
- 新規レポートテンプレートウィザード...
- レポートテンプレートの読み込み(L)...
- レポートテンプレートの保存(S)
- レポートテンプレートに名前を付けて保存(A)...

ローカル ディスク (C:) > Chem32 > REPSTYLE > ja-JP

例: ja-JP

ファイル名(N): short_ESTD_resoJP

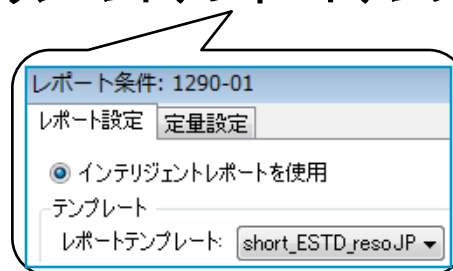
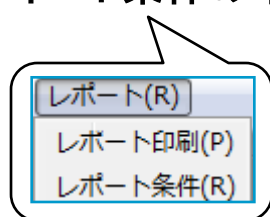
保存(S)

※デモデータでは、表示されないものがあります。

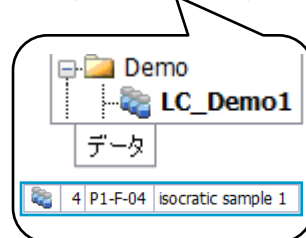
OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート インテリジェントレポートの活用:基本操作

レポートを印刷するには、

- 1) データ解析画面で、レポート条件の中で、インテリジェントレポートテンプレートを選ぶ。



- 2) レビュー画面で、レポートテンプレートと、データを選んで、プレビューしてから、印刷



OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート

インテリジェントレポートの活用: パラメータの種類

※値の名称です。表に行を挿入するときの表示と、若干異なります。

JPでの値	インテリジェントレポートで使用する値
ピーク幅 (高さ50%での幅)	「ピーク_ピーク幅 (50パーセント)」
カラム効率 (理論段数)	「ピーク_理論段数_JP」
分離度 (半値幅法)	「ピーク_分離度_JP」
シンメトリー係数	「ピーク_テーリングファクタ」
SN比	※C.01.04、C.01.05ではテーブル中で式を利用する。 「ピーク_高さ/ピーク_ノイズ*2」 ※C.01.06では、 「ピーク_S2N (EP)」 (EPと同じ計算です)
分離係数 (調整済みの相対リテンションタイム)	「相対リテンションタイム_EP」 ※C.01.04 更新プログラムHF06 [49]以上(2013/12発行) ※C.01.05 更新プログラムHF06 [41]以上(2013/11発行) ※C.01.06以上
ピーク谷比	「ピーク_ピーク谷比」





OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート インテリジェントレポートの活用:SN比について①

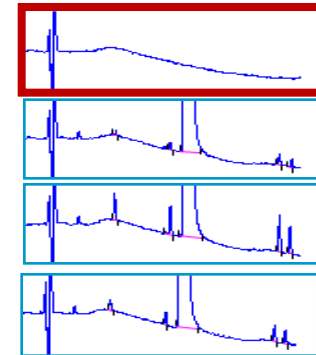
OpenLAB CDS ChemStationでは、バックグラウンドノイズについて、「溶媒ブランクを用いる場合」の計算を使用します。

なお、基線及びバックグラウンドノイズは対象物質のピーク高さの中心におけるピーク幅の20倍に相当する範囲で測定する。また、溶媒ブランクを用いる場合、対象物質が溶出する位置付近で、上記とほぼ同様の範囲で測定する。

シーケンス分析で、先にブランク分析をするよう設定します。(たとえば先頭)
このブランク分析のサンプルタイプを、「ブランク」とします。
※データ解析画面で後から変更した場合は、全体の再解析を実行してください。

シーケンス:LIR-2007-1-2007-02-27_13-43-28

タイプ	ライン	バイアル	サンプル名	注入	サンプル情報	サンプルタイプ
	1	P1-D-01	Solvent	1		ブランク
	2	P1-E-01	Sample 1	2	2007-1.1	サンプル
	3	P1-E-02	Sample 2	1	2007-1.2	サンプル
	4	P1-E-03	Sample 3	2	2007-1.3	サンプル



OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート インテリジェントレポートの活用:SN比について②

OpenLAB CDS ChemStation リビジョンC.01.06以降では、
SN比の値は「ピーク_S2N(EP)」です。

OpenLAB CDS ChemStation リビジョンC.01.04、C.01.05では、
SN比の値は式を利用して、「ピーク_高さ/ピーク_ノイズ*2」です。

The image illustrates the steps to add a peak height column to a table in OpenLAB CDS ChemStation. It shows a table with columns for compound name, RT, RF, area, amount, and peak height. A context menu is shown over the table with 'プロパティ(R)' (Properties) selected. The 'Table Properties' dialog box is open, showing the 'Table Layout' tab where the 'Peak Height' column is highlighted. The 'Table Properties' dialog box is also open, showing the 'Table Properties' tab where the 'Peak Height' column is highlighted.

- 1 ピーク 高さ の列を追加する
- 2 右クリック
- 3 プロパティ(R)
- 4 スクロール
- 5 ピーク高さの列をクリック
- 6 列のプロパティをクリック

化合物名	RT	RF	面積	アmount	ピーク高さ
dimethylphthalate	0.110	0.01250	50.5503	100.00054	01.015
dichlorobiphenylate	0.110	0.01250	50.5503	100.00054	01.015

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート インテリジェントレポートの活用: SN比について②

列のプロパティ - ピーク 高さ

値プロパティのカスタマイズ

7

ヘッダー

ヘッダーテキスト: ピーク高さ fx

値

値: =ピーク高さ fx

9

重複データを表示しない

重複データを表示しない

< 前の列 次の列 > OK(O) キャンセル(O) 適用(A)

8 ラベルを入力

式エディタ

式

SN比(JP)

式エディタ

式

=ピーク高さ/ピークノイズ*2

10 式を入力
=ピーク_高さ/ピーク_ノイズ*2

半角 半角 半角 半角

ヘッダー

ヘッダーテキスト: SN比(JP)

値

値: =ピーク高さ/ピークノイズ*2

11 OK(O)

下部の変数リストからも選べます

グローバル
パラメータ
カスタムクラス
フィールド
シーケンス
サンプル
注入
シグナル
化合物
ピーク
複製
機器

修正予想リテンションタイム
下方変曲点ベースライン時
下方変曲点ベースライン
終了時間
尖度(Excess)
高さ
高さ%
ID
レベル終了
理論値

ピーク
ノイズ

レポート例

ESTD レポート (カウント法: 面積)

シグナル: DAD1 A, Sig=270,8 Ref=500,100

化合物名	RT [min]	RF	面積	アmount [ug/ml]	SN比(JP)	グループ
o-desm tramadol (D)	0.920	1.50113	3.5125	5.27274	81.5113756645747	
trans- tramadol (A)	1.481	1.57758	3.0971	4.88595	202.917246289032	
des-hyd cis tramadol (C)	2.562	1.20304	4.3128	5.18849	297.918661487759	
des-hyd trans tramadol (B)	2.886	1.47507	3.2492	4.79286	158.006883113653	
合計				20.1400		

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート インテリジェントレポートの活用: 値の書式

結果表の各列の数値の書式は、
「列のプロパティ」の「値の書式」で設定できます。
(有効数字桁数 または、小数点以下桁数)

列のプロパティ - SN比 (JP)

値
列の値の書式プロパティをカスタマイズ

内部の余白

左: 2 上: 2
右: 2 下: 2

数値書式

詳細行: 1行目

書式

数値 1234

四捨五入:

小数点以下の桁数 0
小数点以下の桁数
有効桁数
プレビュー:

1234

「数値」を選択

数値の表示様式と、
桁数を選択

- ・有効数字
- ・小数点以下

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート パフォーマンスレポートの利用

リビジョンBの
ChemStation
(B.03.02以降)でも
利用可能です

方法2:クラシックレポートのパフォーマンス、拡張パフォーマンスレポートを利用する。

パフォーマンスレポート:

- ピーク幅(50%)
- カラム効率(理論段数)

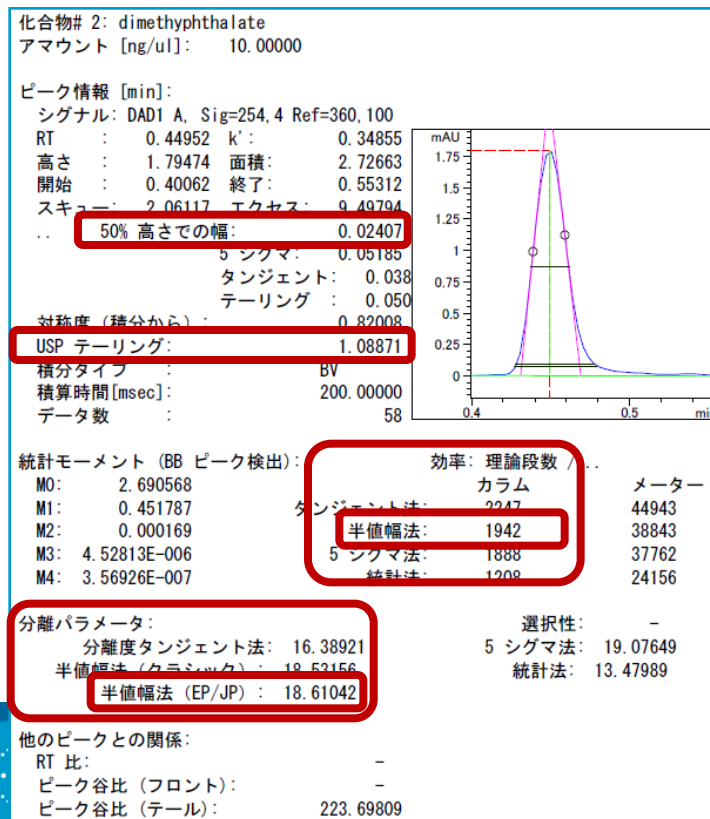
※ここでの対称度は、ChemStation独自の計算値です。
※ここでの分離度は、ChemStationクラシックの計算式の値です。

RT [min]	k'	Sig	アムウント [ng/ul]	対称度	ピーク幅 [min]	理論段数	分離度	化合物名
0.450	0.35	1	10.00000	0.82	0.0241	1942	18.63	dimethylphthalate
0.590	0.77	1	10.00000	0.84	0.0254	2990	3.02	diethylphthalate
1.068	2.20	1	0.00000	0.86	0.0318	6248	1.13	biphenyl
1.975	4.93	1	0.00000	0.90	0.0479	9423	2.20	o-terphenyl

拡張パフォーマンスレポート:

キャリブレーションテーブルが必要です。
(同定できたピークのみレポートする)

- ピーク幅(50%)
- カラム効率(理論段数)
- 分離度(半値幅法)
- シンメトリー係数(USPテーリングファクタ)



OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート

JPLレポート:クラシックカスタムレポートの利用

リビジョンBの
ChemStation
(B.03.02以降)でも
利用可能です

方法3:クラシックレポートのJP対応カスタムレポートを利用する。

クラシックレポートテンプレート

CalPeaks_Performance_jpn.FRP:

キャリブレーションテーブル(検量線設定)が
必要なパフォーマンスレポート用
テンプレート(同定ピークのみレポート)

レポート例

RT [min]	k'	Sig	アマウント [wt%]	対称度	半値幅 [min]	理論 段数	分離度	化合物名
0.450	0.35	1	10.000	0.82	0.024	1942	18.61	dimethylphthal->
0.590	0.77	1	10.000	0.84	0.025	2990	3.34	diethylphthal->
1.068	2.20	1	--	0.86	0.032	6248	6.16	biphenyl
1.975	4.93	1	--	0.90	0.048	9423	2.28	o-terphenyl

Sig_performance_jpn.FRP:

キャリブレーションテーブルは必要ない
パフォーマンスレポート用
テンプレート

レポート例

RT [min]	k'	面積 [mAU*s]	半値幅 [min]	USP テー 対称度	リンゲ リング	理論 段数	分離度
0.006	-0.981	0.010	0.004	0.462		18	
0.450	0.349	2.727	0.024	0.820	1.089	1942	18.610
0.590	0.769	2.506	0.025	0.837	1.090	2990	3.339
0.719	1.157	0.029	0.035	1.099	1.054	2307	2.521
1.068	2.204	2.884	0.032	0.865	1.147	6248	6.156
1.403	3.209	0.015	0.020	1.075	0.992	27170	7.634
1.836	4.507	0.016	0.024	1.171	0.897	31904	11.555
1.975	4.925	4.002	0.048	0.899	1.114	9423	2.284

- ・これらテンプレートは、ChemStationクラシックレポートのスタイルへの登録が可能です。
- ・レポート中のアイテムは、レポートレイアウト画面(クラシックレポートモード)で確認、変更、標準レポートスタイルへの追加が可能です。
- ・これらテンプレートは標準搭載されています。
- ・第15改正日本薬局方に対応しています。

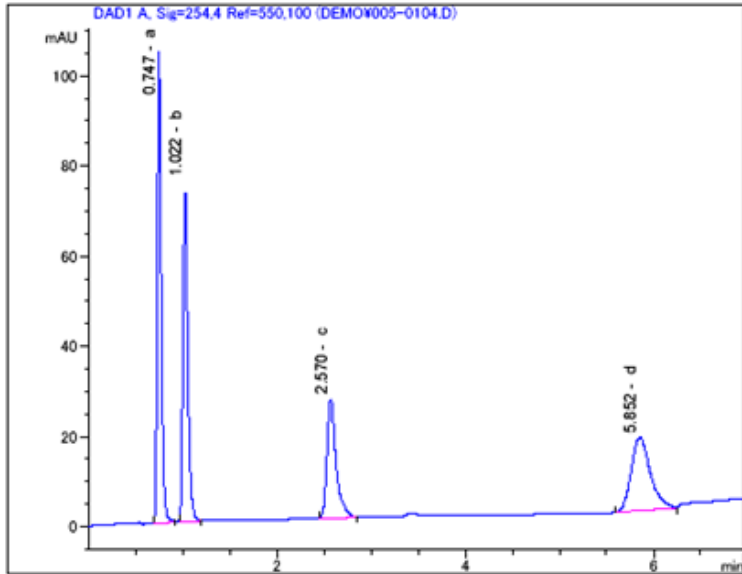


OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート

JPLレポート:クラシックカスタムレポートの利用:その①

CalPeaks_Performance_jpn.FRP:

同定ピークについてのテンプレート(キャリブレーションテーブルが必要)



データ ファイル: C:\CHEM32\1\DATA\DEMO\005-0104.D
 サンプル名 : Isocratic Std. 1

RT [min]	k'	Sig	アmount [wt%]	対称度	半値幅 [min]	理論 段数	分離度	化合物名
0.747	0.87	1	1.000	0.72	0.050	1254		a
1.022	1.55	1	1.000	0.71	0.058	1716	3.01	b
2.570	5.42	1	1.000	0.64	0.096	3970	11.86	c
5.852	13.63	1	1.000	0.75	0.208	4386	12.74	d

レポート項目、数値の桁数は任意に
カスタマイズ可能です！

カスタマイズ レポート: キャリブレーションピーク パフォーマンスレポート

キャリブレーションデータ更新日時 : 2008/10/22 14:58:21
 倍率 : 1.0000
 希釈率 : 1.0000
 アンキャリブレーションピーク : Not reported

使用可能シグナル:
 1. DAD1 A, Sig=254.4 Ref=550.100

設定 ピーク幅(半値幅): 機器 1

固定点, 小数点以下桁数:

e フォーマット, 小数点以下桁数:

現在の幅を用いてできるだけ正確に

左詰め

右詰め

単位:

もし、ピーク幅(半値幅)がない場合に印刷される文字列:

--

OK

キャンセル

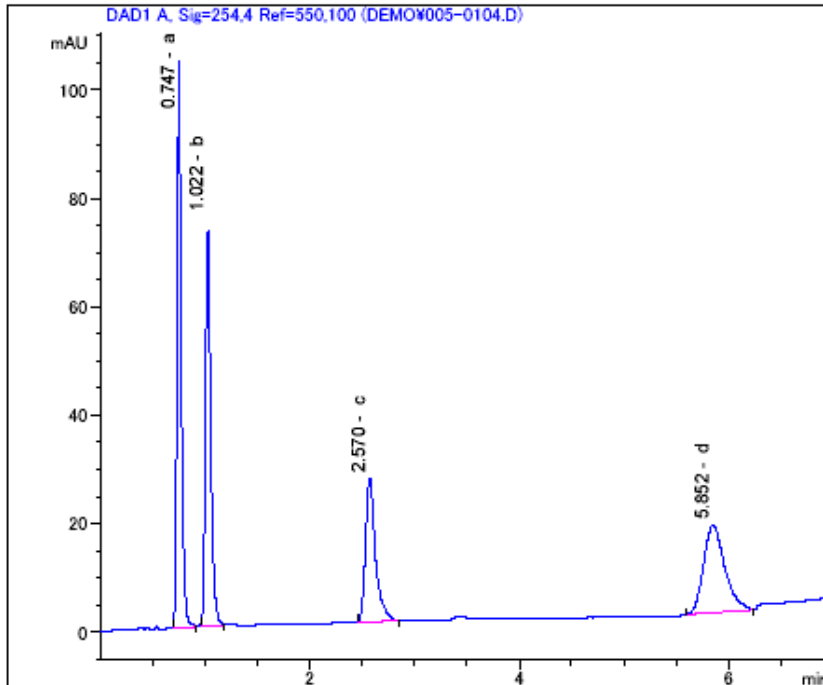
ヘルプ



OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート

JPLレポート:クラシックカスタムレポートの利用:その②

Sig_Performance_jpn.FRP:
同定されていないピークもレポートできる



カスタム レポート: シグナル パフォーマンス レポート
このレポートテンプレートは、アンキャリブレーション メソッド用です。

倍率 : 1.0000
希釈率 : 1.00000

使用可能シグナル:
DAD1 A, Sig=254.4 Ref=550.100

データ ファイル: C:\YCHEM32\1\YDATA\YDEMO\Y005-0104.D
サンプル名 : Isocratic Std. 1

シグナル: DAD1 A, Sig=254.4 Ref=550.100

RT [min]	k'	面積 [mAU*s]	半値幅 [min]	USP 対称度	テーリング	理論段数	分離度
0.747	0.866	294.816	0.050	0.722	1.103	1254	
1.022	1.554	261.666	0.058	0.713	1.214	1716	3.014
2.570	5.425	175.611	0.096	0.640	1.551	3970	11.861
5.852	13.631	228.896	0.208	0.750	1.460	4386	12.741

レポート項目、数値の桁数は任意に
カスタマイズ可能です！

設定 ピーク幅(半値幅): 機器 1

- 固定点, 小数点以下桁数:
- e フォーマット, 小数点以下桁数:
- 現在の幅を用いてできるだけ正確に
- 左詰め
- 右詰め

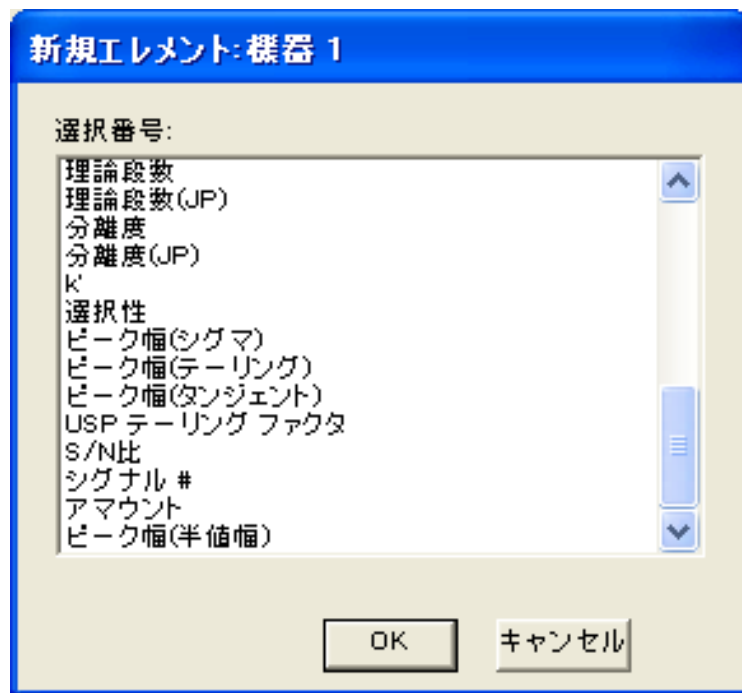
単位:

もし、ピーク幅(半値幅)がない場合に印刷される文字列:

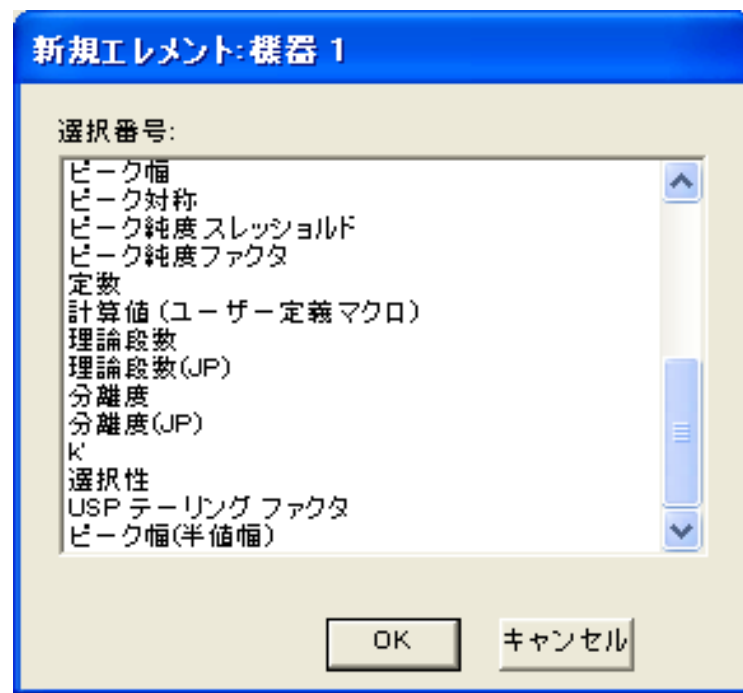
OK キャンセル ヘルプ

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート

JPLレポート:クラシックカスタムレポートの利用:活用



CalPeaks_Performance_jpn.FRPに
追加可能な項目例



Sig_Performance_jpn.FRPに
追加可能な項目例

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート

JPLレポート:クラシックカスタムレポートの利用


テンプレートを利用するには

クラシックカスタムテンプレートを登録するには、
一時的にインテリジェントレポート機能を無効にします。

リビジョンBの ChemStation
(B.03.02以降)のソフトウェアでは
、この操作はありません。

1 
OpenLAB
コントロール
パネル

デスクトップ上

4 
機器コンフィグレーション

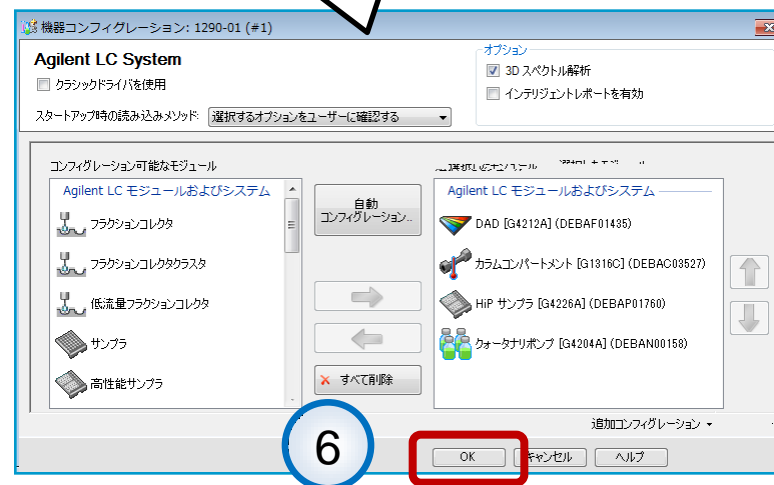
3 
1290-01

2 
機器



はずす

5 インテリジェントレポートを有効

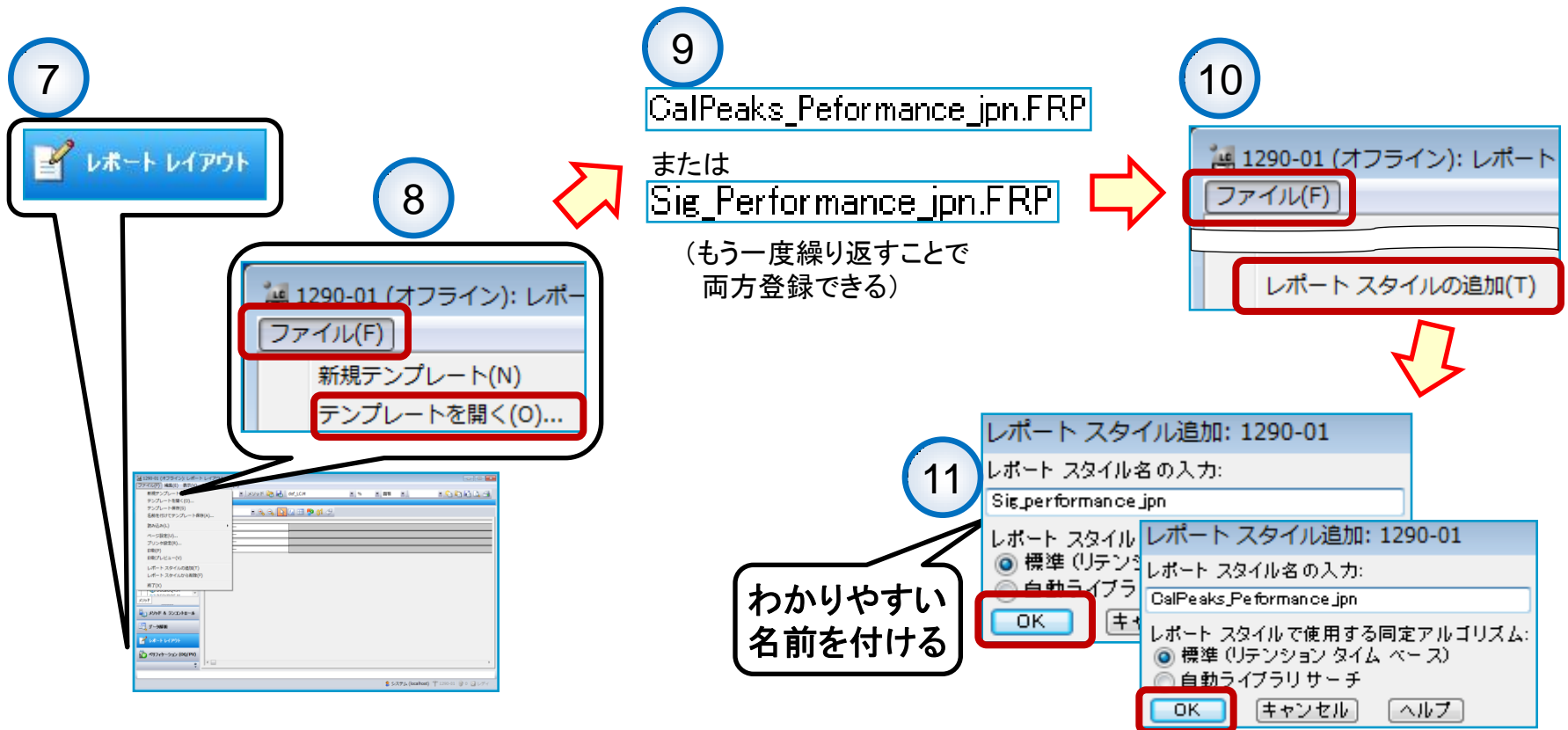


6 インテリジェントレポートを有効

OK

OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート JPLレポート:クラシックカスタムレポートの利用 テンプレートを利用するには

クラシックカスタムテンプレートを読み込んで、
レポートスタイルに追加します。

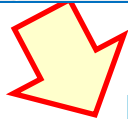
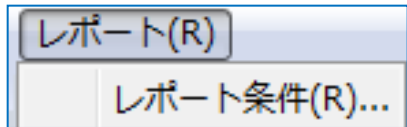


OpenLAB CDS ChemStation : JPLレポート

JPLレポート:クラシックカスタムレポートの利用

テンプレートを利用するには

クラシックレポートのスタイルに登録されました。
いつもの操作でレポートが印刷できます。



レポート条件: 1290-01

レポート設定 定量設定

インテリジェントレポートを使用 クラシックレポートを使用

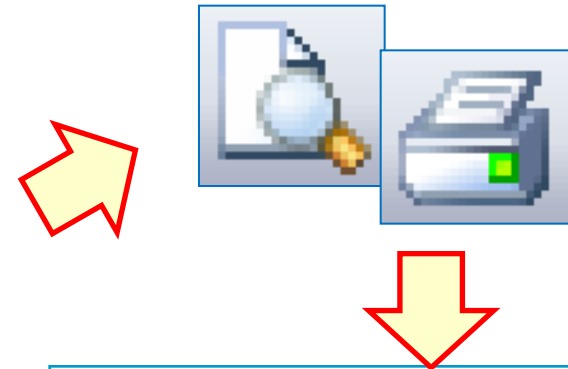
スタイル

レポートスタイル: (なし)

定量結果のソート順: **CalPeaks_Performance_jpn**
Sig_performance_jpn

各ページにサンプル情報を記載
 クロマトグラム出力の追加(A) サンプル情報にサンプルカスタム
アンキアリブレーションピークのレポート

分割



RT [min]	k'	Sig	ア Amount [wt%]	対称度	半値幅 [min]	理論 段数	分離度	化合物名
0.450	0.35	1	10.000	0.82	0.024	1942	18.61	dimethylphthal->
0.590	0.77	1	10.000	0.84	0.025	2990	3.34	diethylphthal->
1.068	2.20	1	—	0.86	0.032	6248	6.16	biophenyl
1.975								
RT [min]	k'	面積 [mAU*s]	半値幅 [min]	USP テー 対称度	理論 リング 段数	分離度		
0.006	-0.981	0.010	0.004	0.462	18			
0.450	0.349	2.727	0.024	0.820	1.089	1942	18.610	
0.590	0.769	2.506	0.025	0.837	1.090	2990	3.339	
0.719	1.157	0.029	0.035	1.099	1.054	2307	2.521	
1.068	2.204	2.884	0.032	0.865	1.147	6248	6.156	
1.403	3.209	0.015	0.020	1.075	0.992	27170	7.634	
1.836	4.507	0.016	0.024	1.171	0.897	31904	11.555	
1.975	4.925	4.002	0.048	0.899	1.114	9423	2.284	

付録: ChemStation B.03.02以降の場合: JPLレポート

リビジョンBのChemStation (B.03.02以降)は、以下が利用できます。

方法2: クラシックレポートのパフォーマンス、拡張パフォーマンスレポートを利用する。

方法3: クラシックレポートのJP対応カスタムレポートを利用する。
リビジョン Bでは、「レポート条件」の画面は以下のようになっています。

追加登録した
レポートスタイルは、
ここに表示されます。

