



Agilent EZChrom *Elite*

PDA オプション



Agilent Technologies

Notices

Copyright © Scientific Software, Inc 1997-2003 © Agilent Technologies, Inc. 2006.

No part of this manual may be reproduced in any form or by any means (including electronic storage and retrieval or translation into a foreign language) without prior agreement and written consent from Agilent Technologies, Inc. as governed by United States and international copyright laws.

Edition

July, 2006

Document Revision 3.2

Printed in USA

Agilent Technologies, Inc.
6612 Owens Dr.
Pleasanton, CA 94588-3334

Warranty

The material contained in this document is provided "as is," and is subject to being changed, without notice, in future editions. Further, to the maximum extent permitted by applicable law, Agilent disclaims all warranties, either express or implied, with regard to this manual and any information contained herein, including but not limited to the implied warranties of merchantability and fitness for a particular purpose. Agilent shall not be liable for errors or for incidental or consequential damages in connection with the furnishing, use, or performance of this document or of any information contained herein. Should Agilent and the user have a separate written agreement with warranty terms covering the material in this document that conflict with these terms, the

warranty terms in the separate agreement shall control.

Technology Licenses

The hardware and/or software described in this document are furnished under a license and may be used or copied only in accordance with such license.

Restricted Rights Legend

If software is for use in the performance of a U.S. Government prime contract or subcontract, Software is delivered and licensed as "Commercial computer software" as defined in DFAR 252.227-7014 (June 1995), or as a "commercial item" as defined in FAR 2.101(a) or as "Restricted computer software" as defined in FAR 52.227-19 (June 1987) or any equivalent agency regulation or contract clause. Use, duplication or disclosure of Software is subject to Agilent Technologies' standard commercial license terms, and non-DOD Departments and Agencies of the U.S. Government will receive no greater than Restricted Rights as defined in FAR 52.227-19(c)(1-2) (June 1987). U.S. Government users will receive no greater than Limited Rights as defined in FAR 52.227-14 (June 1987) or DFAR 252.227-7015 (b)(2) (November 1995), as applicable in any technical data.

目 次

1. この取扱説明書について	6
はじめに	6
対象者	6
本書の読み方	6
2. PDA ソフトウェア	7
3. PDAビュー	8
PDA ツールバー	8
3Dビュー	9
3Dプロパティの設定	10
3Dプロパティ軸の設定	13
3Dプロットの回転	15
等高線ビュー	16
等高線表示プロパティの設定	17
等高線の軸の設定	18
ミックスビュー	20
ミックスビューのオプションボタン	21
ミックスビューのアクションボタン	21
3Dとミックスビュー	21
クロマトグラムビュー	22
マックスプロット	22
マルチクロマトグラムビュー	23
スペクトルビュー	24
スペクトルのプロパティ	25
スペクトルバックグラウンド補正	25
スペクトルの補間	26
スペクトルのエクスポート	26
スペクトル重ね表示	26
ピーク純度プロット	27
ピーク純度表示プロパティ	28
類似度/ピーク純度表示のピークの選択	29
類似度表示プロパティ	29

類似度/ピーク純度表示のピークの選択	31
レシオプロットビュー	31
PDAユーティリティ	32
スペクトル類似度テーブル	33
スペクトル類似度テーブルのプロパティ	34
クロマトグラムの抽出	34
4. PDAオプション	35
PDAオプションライブラリ	35
PDAオプションピーク純度	37
PDAオプションスペクトル	39
PDAオプションマルチクロマトグラム	42
PDAオプションレシオプロット	44
5. スペクトルライブラリ	45
スペクトルライブラリの定義	45
スペクトルライブラリ検索	47
スペクトル情報	49
6. マニュアルライブラリ検索	50
7. マニュアルライブラリ用のスペクトルの収集方法	50
レポートとピークテーブル	51
8. PDAレポートアイテム	51
カスタムレポートグラフアイテム	51
9. カスタムレポートPDAパラメータ	52
ライブラリ検索レポート	52
ライブラリ定義レポート	54
ピーク純度レポート	54
スペクトルレポート	56
10. ピークテーブル	58
11. PDA解析と計算	59
全般	59
等高線ビューから抽出されたクロマトグラム	60
マルチクロマトグラムチャンネル	61
ワーキングクロマトグラム	61

3Dデータから抽出されたスペクトル	61
解析スペクトル	62
ワーキングスペクトル	62
バックグラウンド補正	62
スペクトル補間	63
アップスロープスペクトルとダウンスロープスペクトル	64
スペクトルの演算	64
スペクトルのスムージング	64
スペクトルの微分	65
ライブラリ検索による計算	65
プレフィルター	66
レシオクロマトグラムの計算方法	66
類似度計算	67
極大吸収波長/極小吸収波長の計算	67
ピーク純度の計算	68
トータル純度の計算	68
3 ポイントピーク純度	68

1. この取扱説明書について

はじめに

この PDA ソフトウェアは、EZChromElite データシステムを使用しダイオードアレイ検出器(DAD)からスペクトルデータを抽出して分析します。

対象者

本書は PDA ソフトウェアのユーザー向けです。

本書の読み方

以下は本書の読み方です。

フォント	説明
太字	データベース名、表題名、コラム名、メニュー、コマンド、ダイアログボックスオプション、正確な入力を求められるテキスト、等。
<i>Italic</i>	提供情報の代替。例) <i>ServerName</i> 等、イタリック体で書かれている入力箇所には実際のサーバー名を入力します。
Monospace	プログラミングコードサンプルおよび表示されるテキスト。
全大文字	キーボードで押すキー。プラス(+)があれば、二つのキーを同時に押します。例)SHIFT+TAB 等。

2. PDA ソフトウェア

PDA オプションを使用して、ご使用中の LC にダイオードアレイ検出器(DAD)を接続し、生成されるスペクトルの確認や解析を行うことができます。PDA オプションを使用するためには、PDA を含む LC にコントロール用ソフトウェアがインストールされている必要があります。

PDA オプションの設定

1. 機器構成を開きます。
2. [機器ウィンドウ]で[構成]をクリックします。
3. 有効/設定済モジュール構成ウィンドウで、[オプション]をクリックします。
4. [PDA]を選択後、[OK]をクリックします。
5. LC 機器に PDA 検出器を組み込みます。詳細はコントロールヘルプを参照して下さい。
6. [機器ウィンドウ]で[メソッド]メニューから[PDA オプション]を選択し、post-run PDA 分析パラメータを設定します。メソッドのためのデータ収集パラメータは、PDA 検出器のコントロールソフトウェアの要件に従って[機器設定]に設定します。

PDA 分析ソフトウェアの開始後は、

- ・ 様々な種類のフォーマットでのスペクトルおよびクロマトグラムの確認
- ・ スペクトルライブラリの生成と検索
- ・ オンデマンドピーク純度計算およびプログラムピーク純度計算
- ・ 3D データのスペクトルフィルタリングおよび抽出スペクトルの設定
- ・ マルチ-クロマトグラムオプションの設定
- ・ クロマトグラムレシオの設定
- ・ カスタム PDA レポートの生成

3. PDA ビュー

PDA ビューは、PDA データを見るためのさまざまな方法を提供します。1 度に 1 つのビューを表示することを選択することもできれば、3D と等高線表示、3D とミックスビュー等、いくつかのビューを組み合わせる表示することを選択することもできます。

このビューは、[表示]メニューの[PDA 表示]を選択するか、PDA ツールバーから[表示]を選択します。表示ウィンドウのいずれかの画面内で右クリックすることにより、そのビューに関する様々なオプションメニューが表示されます。

ミックスビュー

3D ビュー

等高線ビュー

マックスプロットビュー

クロマトグラムビュー

マルチクロマトグラムビュー

スペクトルビュー

レシオビュー

PDA ツールバー

PDA ビューを選択すると、表示あるいはさまざまな操作を実行可能なメニューおよびボタンのツールバーが表示されます。



[表示]をクリックし、現在の PDA ビューを選択あるいは変更して下さい。

PDA ツールバー上の[シンクロナイズ]ボタンを使用することにより、軸および拡大の制限値をその他の 2 つのプロットと同期させることができます。等高線表示プロットを拡大すると、クロマトグラムの時間範囲およびスペクトルプロットの波長範囲が自動的にその等高線表示と同じ範囲に調整されます。拡大の同期を行うと、そのクロマトグラムとスペクトルプロットの X 軸のプロット制限値が変更されます。これらのプロットをデータ制限値へと拡大を解除するには、[等高線表示プロットコンテキスト]メニューから[元の倍率に戻す]を選択する必要があります。

[アレンジ]をクリックすると、表示ウィンドウが初期位置に戻ります。ウィンドウをクリックおよびドラッグによりサイズを変更した場合に使用して下さい。

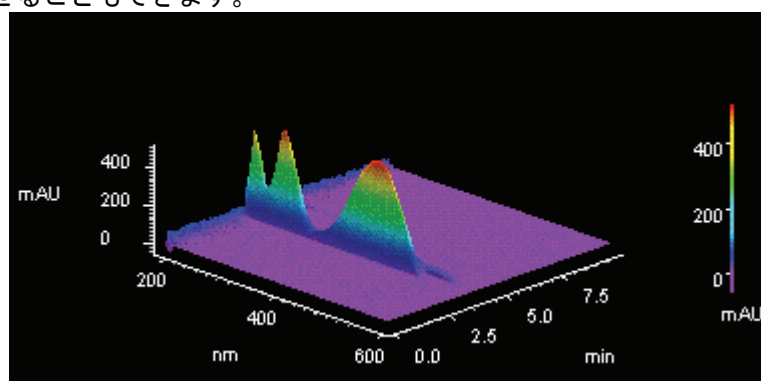
さまざまなクロマトグラムを含むマルチクロマトグラムを表示すると、[重ね書き]ボタンが表示されます。このボタンで、クロマトグラム重ね書き表示とクロマトグラム個別表示を切り替えます。

[アクション]をクリックすると、アクションメニューが開きます。

[オプション]をクリックすると、オプションメニューが開きます。

3D ビュー

3D は、吸光度、時間および波長の 3 次元表示を提供します。[3D]では、単一波長のプロットでは見ることができない、吸光度と波長の関係を容易に確認することができます。このプロットは、上昇させたり、またどの角度からでも表示軸を中心として回転させることもできます。



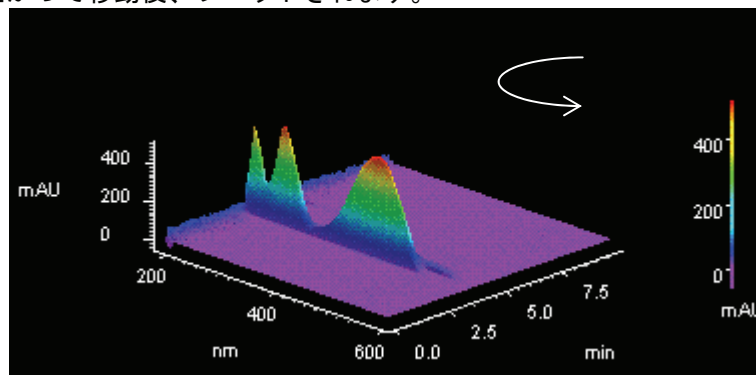
注: オンラインにて測定している時は、データ収集に伴う表示の更新は、手動で行う必要があります。自動更新はされませんので、注意してください。

プロットの回転および軸の設定等の機能にアクセスするためのポップアップメニューを表示するには、[3D]表示画面上で右クリックしてください。



3D プロット表示方法の選択

使用したいプロットの表示方法(上昇、ロール、回転、回転(XYZ)、あるいは軸回転)をクリックします。選択した表示オプションコマンド横にチェックマークが表示されます。オプションのうち 1 つが選択されると、カーソルは選択した表示方法にしたがって移動後、プロットされます。



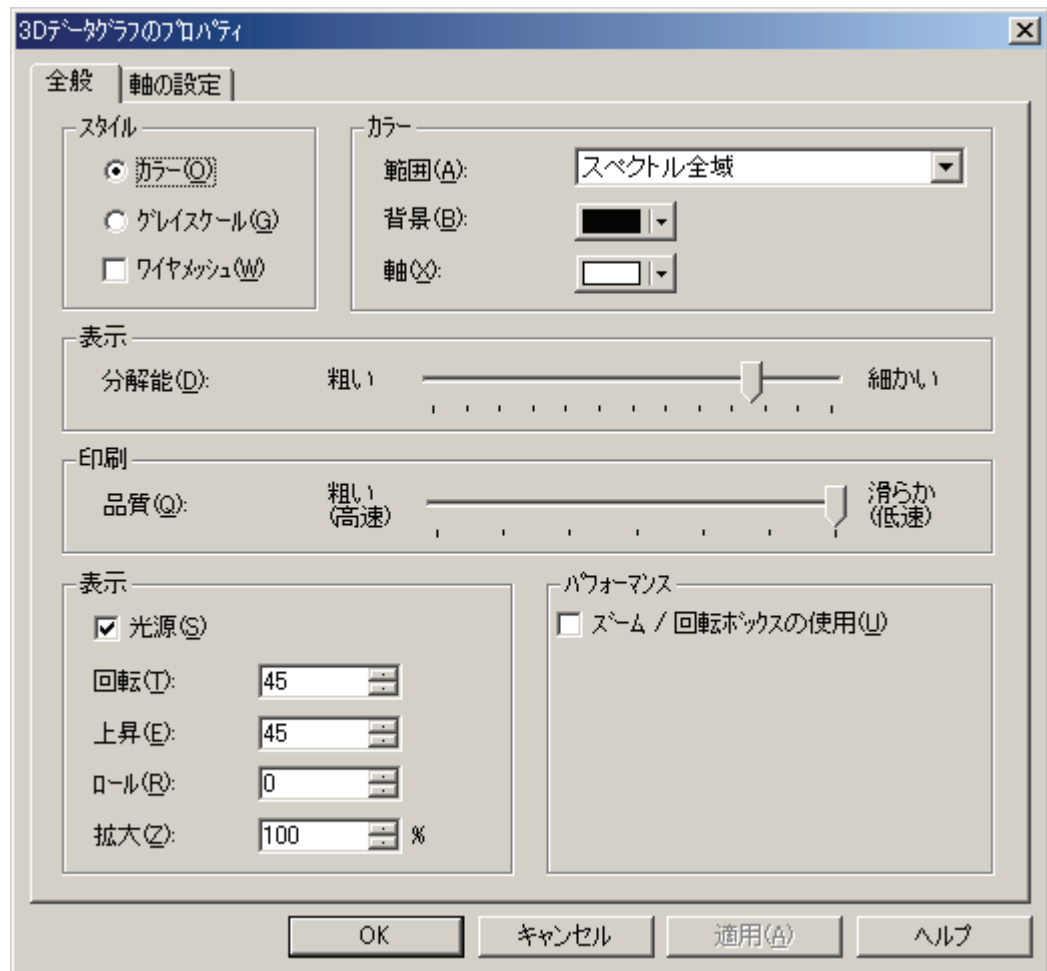
左マウスボタンをクリックしながら、プロットを移動させたい方向にカーソルを動かします。プロットは、カーソルを動かすことにより移動します。表示オプションは、ユーザーがオフにするまで有効のままとなります。終了後、右クリックしてから、表示オプションの選択を解除してください。元のビューに戻りたい場合には、[リセット]コマンドを選択します。

注: これらの数値は、[3D/プロパティ]ダイアログにより、確認したり変更したりすることができます。

3D プロパティの設定

このダイアログを使用することで、3D データ表示のプロパティの設定/変更を行います。

1. [表示]メニューから[PDA ビュー]を選択します。
2. [ミックスビュー]または 3D を含む他の表示を選択します。
3. 3D ビュー上でマウスを右クリックし、[プロパティ]を選択します。
4. [全般]タブをクリックし、3D プロットのプロパティを変更/入力します。
[軸設定]タブをクリックし、軸のパラメーターを設定/変更します。



スタイル

そのプロットについて、[カラー]または[グレースケール]を選択します。[ワイヤメッシュ]ボックスをチェックすると、線を連結した形式で表示されます。

カラー

範囲

プロット上の色付けを選択します。[明暗色範囲]を選択すると、濃淡色の縞で表示され、[スペクトル全域]を選択すると連続色で表示されます。

背景

プロットの背景色を選択します。

軸

プロット軸の色を選択します。

表示

表示される 3D プロットの相対的な分解能を指定します。分解能を粗くすると、プロットの描画速度が速くなります。

印刷

印刷する 3D プロットの相対的な印字品質を指定します。印刷品質を粗くすると、印刷速度が速くなります。

表示

このフィールドは、現在の回転設定を見たり、これを手動で設定するのに使用します。

光源

このオプションを選択すると、外部の光源から光があたっているように影を付けることができます。

回転

3D プロットの表示を左右回転させます。新しい数値を入力した場合、新しい数値を反映して再プロットされます。

上昇

3D プロットの表示軸を上下回転させます。新しい数値を入力した場合、新しい数値を反映して再プロットされます。

ロール

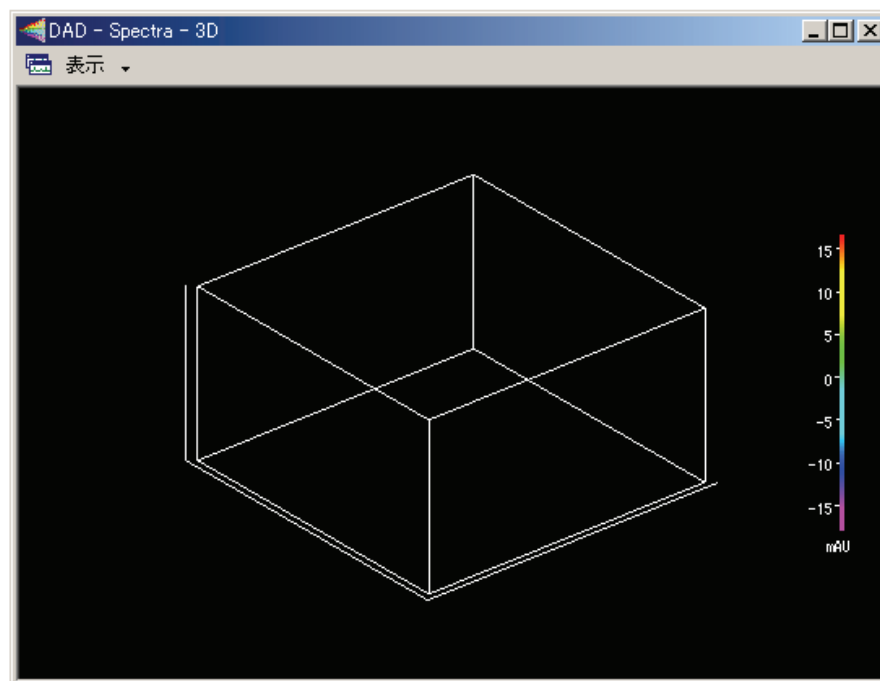
3D プロットの表示の側面から側面に回転させることができます。新しい数値を入力した場合、新しい数値を反映して再プロットされます。

拡大

3D プロットの表示を拡大/縮小表示させることができます。新しい数値を入力した場合、新しい数値を反映して再プロットされます。

パフォーマンス -ズーム/回転ボックスの使用

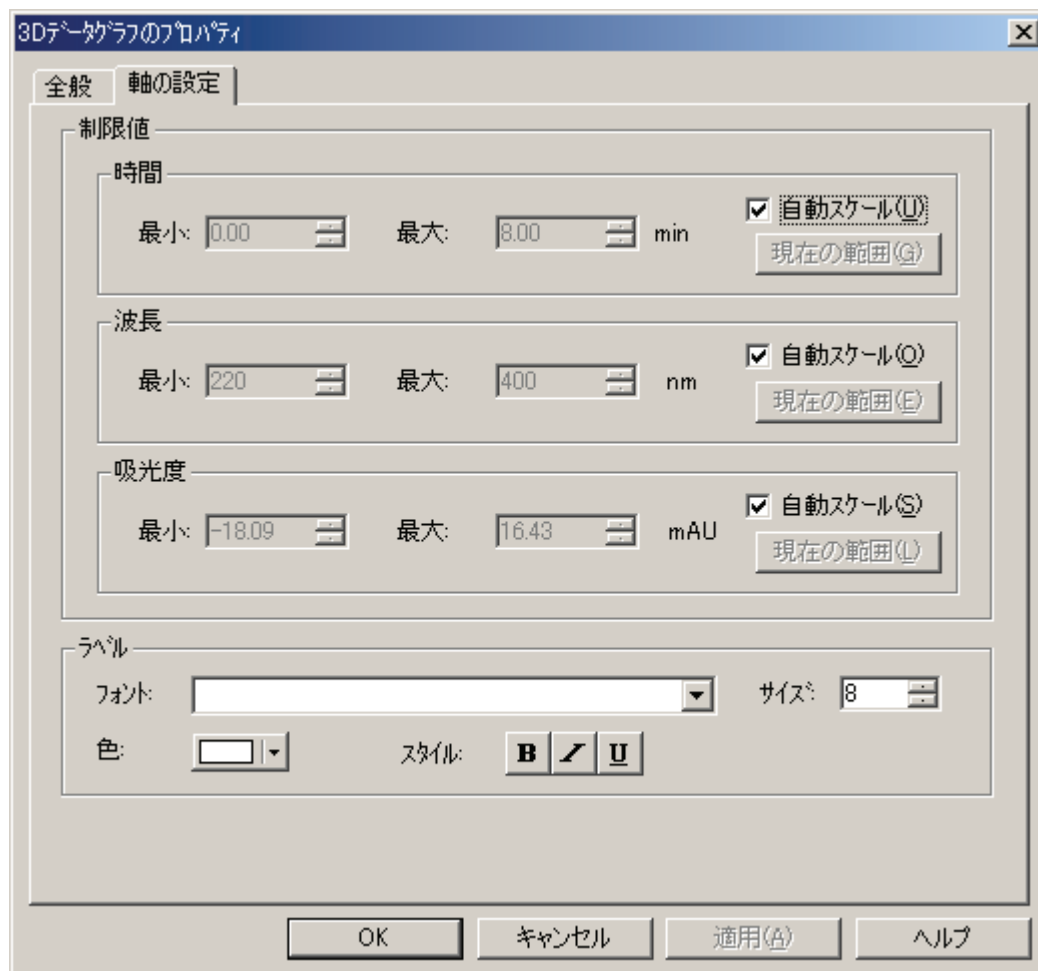
このボックスをチェックすると、ズームおよび回転動作時、表示が一時的にボックスに置き換えられます。この動作が完了すると、再表示されます。



3D プロパティ軸の設定

このダイアログを使用することで、3D プロットの軸のプロパティの設定を行います。

1. [表示]メニューから[PDA ビュー]を選択します。
2. [ミックスビュー]または 3D を含む他の表示を選択します。
3. 3D ビュー上でマウスを右クリックし、[プロパティ]を選択します。
4. [軸設定]タブをクリックし、3D プロットの軸プロパティを変更/入力します。



制限値

3D プロットの軸に関する制限値を入力します。

時間

3D プロットに関して、自動的に時間軸を最大値に設定する場合は、[自動スケール]ボタンをクリックします。手動で軸の範囲を入力するには、[自動スケール]ボックスの選択を解除し、任意の制限値を入力するか、[現在の範囲]ボタンをクリックして、現在の 3D プロットに表示されている制限値を入力します。

波長

自動的に波長軸を最大値に設定したい場合は、[自動スケール]ボタンをクリックします。手動で範囲を入力するには、[自動スケール]ボックスの選択を解除し、任意の制限値を入力するか、[現在の範囲]ボタンをクリックして、現在の 3D プロットに表示されている制限値を入力します。

吸光度

自動的に吸光度軸を最大値に表示したい場合は、[自動スケール]ボタンをクリックします。手動で範囲を入力するには、[自動スケール]ボックスの選択を解除し、任意の制限値を入力するか、[現在の範囲]ボタンをクリックして、現在の 3D プロットに表示されている制限値を入力します。

ラベル

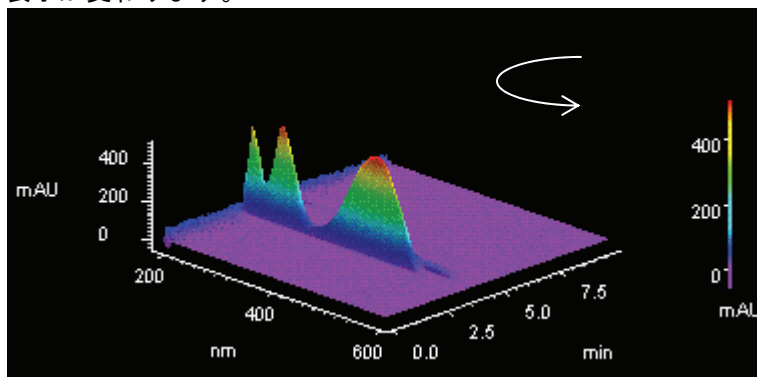
ラベルのパラメータを使用して、3D プロットのラベルをカスタマイズすることができます。表示されているオプションを使用して、フォント、サイズ、色およびスタイルを変更することができます。

3D プロットの回転

3D プロットでの右クリックにより、様々な回転のオプションを含むメニューが表示されます。これらの回転オプションの 1 つを選択すると、そのオプションの横にチェックマークが表示され、その回転オプションがプロット上で有効になります。



カーソルが、そのオプションが有効であることを示すため、選択したオプションに応じて表示が変わります。

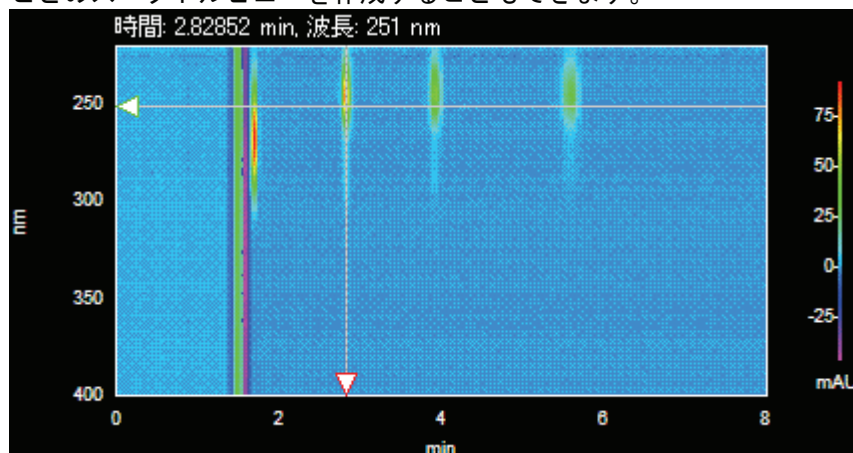


そのオプションが有効である間は、左マウスボタンをクリックしたまま、マウスをプロット上で希望の方向に移動させることにより、指定した方法でプロットを

動かすことができます。プロットを希望の位置に配置したら、右クリックし、このオプションを再度選択することにより、これを無効にします(チェックマークが取れます)。元のプロット表示状態に戻したい場合は、右クリックし、[リセット]を選択します。

等高線ビュー

等高線表示は、各波長と時間における試料の吸光度を表示します。等高線表示は、試料が容易に検出可能な吸光度を表示する波長に関する、迅速でわかりやすい情報を提供します。等高線表示により、各波長ごとのクロマトグラムビューや保持時間ごとのスペクトルビューを作成することもできます。



ポップアップメニューを表示するには、ウインドウ内で右クリックを行います。[等高線表示のプロパティ]ダイアログを表示させるには、[プロパティ]を選択します。

ミックスビューの等高線表示からクロマトグラムビューを作成します。

1. 等高線表示、クロマトグラムおよびスペクトルを表示するには、[表示]/[PDA ビュー]/[ミックスビュー]を選択します。
2. カーソルを等高線表示の左側の波長軸にある三角形のハンドルに移動させ、左マウスボタンを押します。
3. カーソルを上下させて希望の波長までドラッグし、マウスボタンを離します。
4. 指定された波長のクロマトグラムが、クロマトグラムビュー内に表示されます。

ミックスビューまたは 3D とミックスビューの等高線表示からスペクトルビューを作成します。

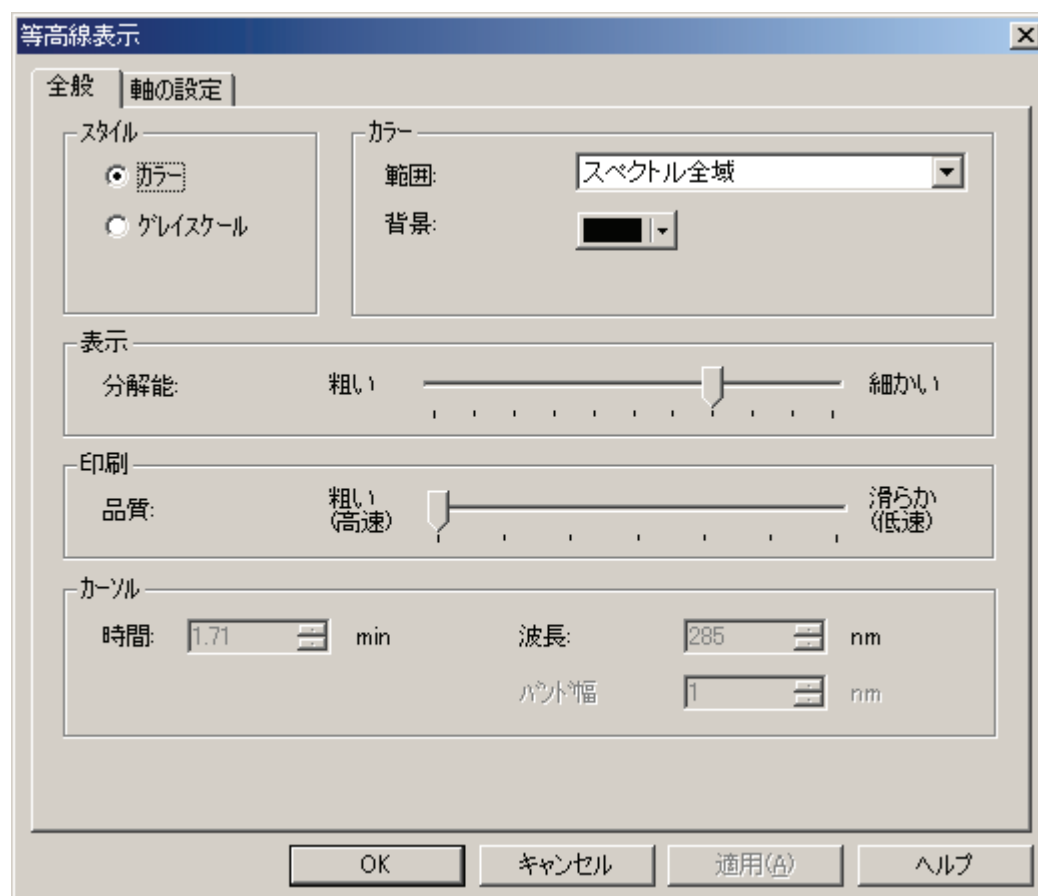
1. 等高線表示、クロマトグラムおよびスペクトルを表示するには、[表示]/[PDA ビュー]/[ミックスビュー]を選択します。
2. カーソルを等高線表示の左側の時間軸上にある三角形のハンドルに移動させ、左マウスボタンを押します。

3. カーソルを左右に移動させて希望のクロマトグラム(保持時間)までドラッグし、マウスボタンを離します。
4. 指定された保持時間のスペクトルが、スペクトルビュー内に表示されます。

等高線表示プロパティの設定

このダイアログを使用することで、等高線表示のプロパティの設定を行います。

1. 等高線表示プロット上の任意の場所でマウスを右クリックし、[プロパティ]を選択します。
2. [全般]タブをクリックし、等高線のプロパティを変更/入力します。



スタイル

プロットをどのように表示させたいか、[グレイスケール]または[カラー]を選択します。

カラー

範囲: プロット上の色付けを選択します。[明暗色範囲]を選択すると、濃淡色の縞で表示され、[スペクトル全域]を選択すると連続色で表示されます。

背景: プロットの背景色を選択します。

表示

表示される等高線プロットの相対的な分解能を指定します。分解能を粗くすると、プロットの描画速度が速くなります。

印刷

印刷する等高線プロットの相対的な印字品質を指定します。印刷品質を粗くすると、印刷速度が速くなります。

カーソル

このボックス内の数値は、現在の等高線表示上のカーソル位置に反映されます。数値を変更する場合は、このダイアログを終了したり、[適用]ボタンをクリックすることにより、プロット上のカーソルが指定した位置に移動します。

時間

カーソルの時間位置(X 値)を指定します。数値を入力した場合、このダイアログを終了させると、X 軸(時間軸)カーソルが新しい位置へと更新されます。

波長

カーソルの波長位置(Y 値)を指定します。数値を入力した場合、このダイアログを終了させると、Y 軸(波長軸)カーソルが新しい位置へと更新されます。

バンド幅

等高線表示プロットからクロマトグラムが抽出する時に平均される波長バンド幅を指定します。抽出されたクロマトグラムは、その波長範囲内での吸光度の平均値です。この波長範囲は、選択した波長のバンド幅の $\pm(1/2)$ に等しくなります。

等高線の軸の設定

このダイアログを使用することで、等高線プロットの軸の設定を変更することができます。

1. 等高線プロット上の任意の場所でマウスを右クリックし、[プロパティ]を選択します。
2. [軸設定]タブをクリックし、等高線プロットの軸のプロパティを設定/変更します。

[自動スケール]ボックスが選択されている場合、ソフトウェアが軸の設定パラメータを自動的に設定します。パラメータを手動で入力したい場合には、[自動スケール]ボックスの選択を解除し、表示範囲を入力するか、[現在の範囲]ボタンをクリックして現在のビューの制限値を入力します。

等高線表示

全般 軸の設定

制限値

時間

最小: 0.00 最大: 8.00 min ☒ 自動スケール

波長

最小: 220 最大: 400 nm ☒ 自動スケール

吸光度

最小: -18.09 最大: 16.43 mAU ☒ 自動スケール

ラベル

フォント: サイズ: 8

色: スタイル: **B** **I** **U**

OK キャンセル 適用(△) ヘルプ

時間

時間軸範囲を最大値に自動的に設定させたい場合は、[自動スケール]ボックスをクリックします。手動で範囲を入力するには、[自動スケール]ボックスの選択を解除し、任意の制限値を入力するか、[現在の範囲]ボタンを押して、現在の等高線表示グラフ上に表示させるための制限値を入力します。

波長

波長軸範囲を最大値に自動的に設定させたい場合は、[自動スケール]ボックスをクリックします。手動で範囲を入力するには、[自動スケール]ボックスの選択を解除し、任意の制限値を入力するか、[現在の範囲]ボタンを押して、現在の等高線表示グラフ上に表示させるための制限値を入力します。

吸光度

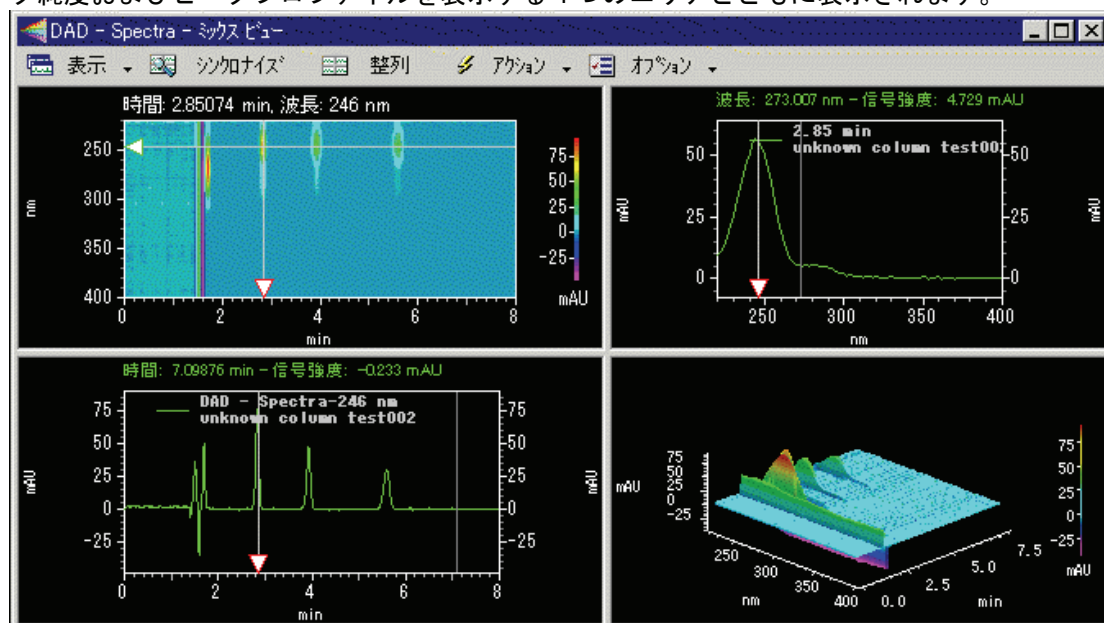
吸光度軸を最大値に自動的に設定させたい場合は、[自動スケール]ボックスをクリックします。手動で範囲を入力するには、[自動スケール]ボックスの選択を解除し、任意の制限値を入力するか、[現在の範囲]ボタンを押して、現在の等高線表示グラフ上に表示させるための制限値を入力します。

ラベル

ラベルのパラメータを使用して、等高線表示プロットのラベルをカスタマイズすることができます。表示されているオプションを使用して、フォント、サイズ、色およびスタイルを変更することができます。

ミックスビュー

等高線表示ビュー、クロマトグラムビューおよびスペクトルビューと類似度、ピーク純度およびピークプロファイルを表示する4つのエリアとともに表示されます。



等高線表示プロット、クロマトグラムまたはスペクトルのいずれかの一部をズームするには、左マウスボタンを押したまま、マウスを拡大したいエリアがハイライトされるまでプロット上を動かし、マウスボタンを離します。

前の倍率に素早く戻したい時は、プロット上でダブルクリックします。

複数の拡大動作を行った後、拡大を解除してプロット全体へと戻るには、<Ctrl>+<Z>キーを使用するか、ウィンドウ内で<Shift>キー+ダブルクリックするか、あるいはウィンドウ内の任意の場所で右クリックしてから、ポップアップメニューから[元の倍率に戻す]を選択します。

注: PDA ツールバー上の[シンクロナイズ]ボタンを使用することにより、軸および拡大の制限値をその他の2つのプロットと同期させることができます。等高線表示プロットを拡大すると、クロマトグラムの時間範囲およびスペクトルプロットの波長範囲が自動的にその等高線表示と同じ範囲に調整されます。拡大の同期を行うと、そのクロマトグラムとスペクトルプロットの X 軸のプロット制限値が変更されます。

これらのプロットをデータ制限値へと拡大を解除するには、[等高線表示プロットコンテキスト]メニューから[元の倍率に戻す]を選択する必要があります。

ミックスビューのオプションボタン

このボタンによりミックスビューの右下に表示する項目を下記から選択します。

- ・ 3D プロットの表示
- ・ ピーク類似度および検出感度表示
- ・ ピーク純度プロットの表示
- ・ スペクトル類似度テーブルの表示

ミックスビューのアクションボタン

このボタンで下記の操作が行えます。

検索ライブラリ...

スペクトルライブラリ検索ウィンドウを開きます。

オーバーレイスペクトラ...

重ね表示するスペクトルを選択できます。

類似度／ピーク純度表示のピークを選択...

類似度／ピーク純度表示するピークを選択できます。

マルチクロマトグラムテーブルへの追加...

PDA オプションのマルチクロマトグラムテーブルにクロマトグラム（波長、バンド幅）を追加できます。

スペクトルライブラリへの追加...

カレントで表示されているスペクトルから新しいスペクトルライブラリへ登録できます。スペクトルは、カレントで開かれているライブラリに追加されます（ライブラリを開くには、[ファイル]/[スペクトルライブラリ]/[開く]を選択します）。新しいライブラリに登録される成分名としては、“スペクトル@xx.xxmin” が使用されます。

3D とミックスビュー

PDA データの 3 次元プロットが含まれた 4 つの区画とともに等高線ビュー、クロマトグラムビュー、およびスペクトルビューを表示するには、[PDA 表示]から 3D とミックスビューを選択します。

クロマトグラムビュー

[クロマトグラムビュー(ワーキングクロマトグラム)]は、単独で使用することもできれば、ミックスビューや 3D とミックスビューの一部として使用することもできます。

等高線表示プロットからクロマトグラムを作成するには、目標のクロマトグラムの波長へ Y 軸をクリックしてドラッグします。

スペクトルプロットからクロマトグラムを生成するには、目標のクロマトグラムの波長へ X 軸をクリックしてドラッグします。

等高線またはスペクトルプロットからクロマトグラムを追加するには、上記で示したように選択した波長へクリックしてドラッグします。そして[アクション]/[マルチクロマトグラムテーブルの追加]を選択し[追加]/[閉じる]を選択します。

以下の操作はクロマトグラムを使用して実行できます。

ピークの[類似度/純度]表示を選択するには、CTRL キーを押し、マウスをクリックします。この機能は、最初に[分析]ボタンのクリックまたは[分析]メニューから[分析]を選択することにより分析されていなければなりません。

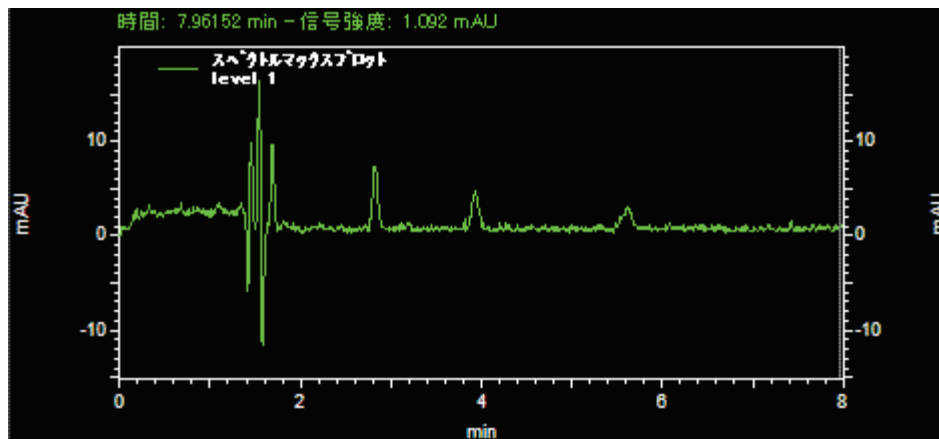
ポップアップメニューを表示するには、クロマトグラム内で右クリックします。このメニューには、すべての検出器タイプと共通した基本的なクロマトグラムウインドウのオプションが含まれており、さらに、これを使用することで、様々な波長のクロマトグラムを重ね表示させたり、表示方法を変更することができます。

マックスプロット

マックスプロットの表示は、ツールバーの[チャンネル選択]ボックスから、矢印をクリックし、[スペクトルマックスプロット]を選択します。

マックスプロットは、各保持時間において最大吸光度でプロットしたクロマトグラムのことです。このプロットは、各ピークの波長を最適化した時のクロマトグラムの外観を表示します。これは、各ピークの適切な分析チャンネルを選択するときに便利です。

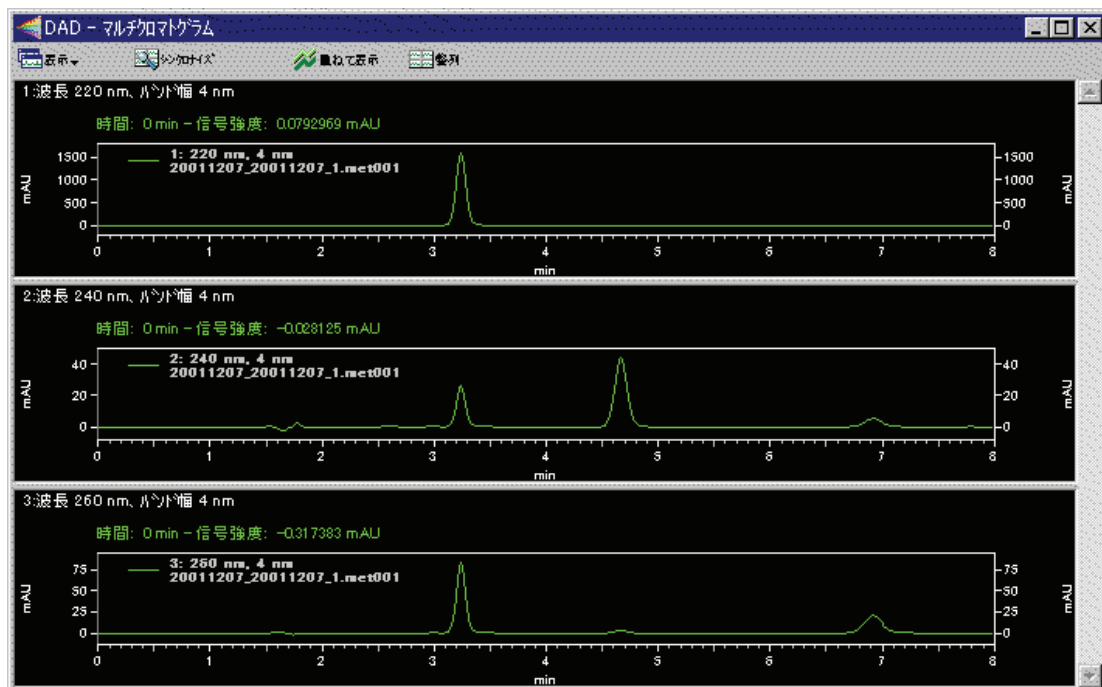
注: マックスプロットは分析チャンネルではありません。また、クロマトグラフデータの分析に使用されません。



マルチクロマトグラムビュー

複数の検出波長における吸光度と時間のクロマトグラムをプロットしたものを表示します。これは[PDAオプション]の[マルチクロマトグラム]タブで指定したすべてのクロマトグラムを表示します。

同じ軸上で各クロマトグラムと重ね書きされたクロマトグラムを切り替えるには、PDA ツールバーで[重ね書き]をクリックします。
ウィンドウで右クリックし、クロマトグラムウィンドウオプションのデータシステムメニューを表示します。



スペクトルビュー

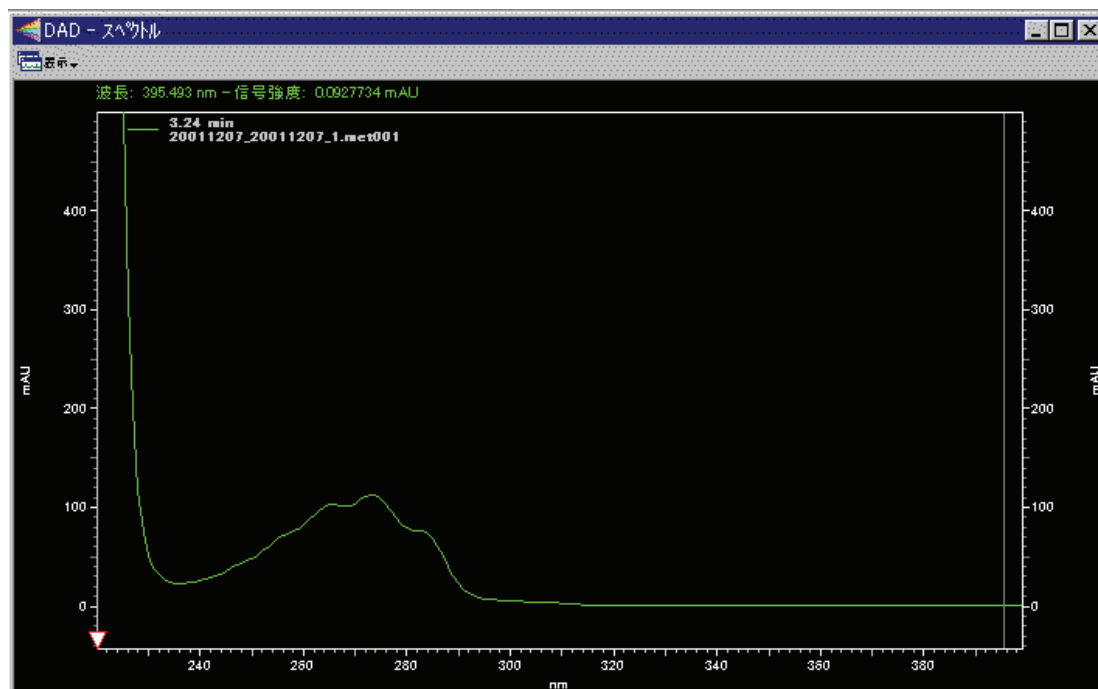
そのクロマトグラム上の時間カーソルで指定している保持時間におけるスペクトルを表示します。

表示されているスペクトルは変更することができます。

1. [表示]メニューから[PDA ビュー]/[ミックスビュー]または PDA ツールバーから [表示]/[ミックスビュー]を選択します。
2. 等高線プロット上で X 軸をドラッグし、表示されたスペクトルの保持時間までスライドします。

クロマトグラムは変更することができます。

1. [ミックスビュー]をクリックし、スペクトル画面で目的の波長までスライドします。
2. この波長と関連したクロマトグラムは、画面内で表示されます。



スペクトルのプロパティ

スペクトル画面でマウスを右クリックし、[プロパティ]を選択して、スタンダードデータシステムトレースプロパティダイアログにアクセスします。これにより、そのビューに別のトレースを追加したり、スケールを変更することができます。また、ビューからオーバーレイされているトレースを選択して削除することもできます。

スペクトルバックグラウンド補正

バックグラウンド補正は現在のスペクトルが面積計算されたピークから[抽出]されている場合に実行可能です。

1. [スペクトル]ウィンドウでマウスを右クリックし、[オペレーション]/[バックグラウンド補正]を選択します。
2. 計算するスペクトルをクリックして選択します。表示されたスペクトルのバックグラウンド補正は有効なクロマトグラムに対して行われます。バックグラウンド補正の行われたスペクトルは元のスペクトルとともに表示されます。[バックグラウンド補正]の詳細は[PDA分析および計算]を参照してください。

注: バックグラウンド補正はスペクトルに対し1回行うことができます。すでにバックグラウンド補正が行われているスペクトルに補正を行おうとした場合は、メッセージが表示され、処理は行われません。

スペクトルが、有効なクロマトグラムの面積計算されたピークから抽出されたものでない場合、このメニューの選択は無効となります。

バックグラウンド補正はスペクトルに対して最初に行われる必要があります。バックグラウンド補正が他の処理(PDAオプションのスペクトルタブでの操作)を行った後のスペクトルに適用された場合、メッセージボックスが表示されバックグラウンド補正の操作は無効になります。

スペクトルの補間

スペクトル補間は現在のスペクトルが面積計算されたピークから抽出されている場合に実行可能です。

スペクトルの補完が行えます。

1. [スペクトル]ウィンドウでマウスを右クリックし、[オペレーション]/[補間]を選択します。
2. 計算するスペクトルをクリックして選択します。10:1 の補間がスペクトルに対して行われます。新しいスペクトルは元のスペクトルとともに表示されます。スペクトルの補完の詳細は[PDA分析および計算]を参照してください。

スペクトルのエクスポート

スペクトルをエクスポートできます。

1. [スペクトル]画面で、マウスを右クリックします。[ユーティリティ]/[エクスポート]を選択します。[エクスポート]コマンドの横にチェックマークが表示されます。
2. ASCII ファイルとしてエクスポートされるスペクトルをクリックします。
3. [ファイルに名前を付けて保存] ダイアログボックスが表示されます。エクスポートされたスペクトルを保存するフォルダをブラウズします。[ファイル名]でファイルの名前を入力し[保存]をクリックします。

スペクトル重ね表示

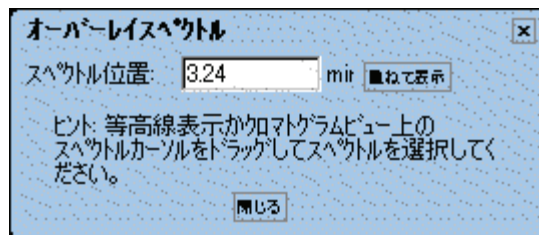
スペクトル画面で複数のスペクトルを重ね書きします。

1. [PDA]ツールバーから[アクション]/[スペクトル重ね書き]をクリックします。
2. 表示されているダイアログボックスで、表示されたスペクトルの保持時間を入力して[重ね書き]をクリックします。または、等高線あるいはクロマトグラムビュー上で、表示されたスペクトルの保持時間までカーソルをドラッグします。

ビューに加えたスペクトルを削除します。

スペクトル画面でマウスを右クリックし、[オーバーレイの消去]を選択します。

また、表示でマウスを右クリックしてプロパティを選択すると、トレース設定ダイアログを使用して選択したスペクトルを削除できます。

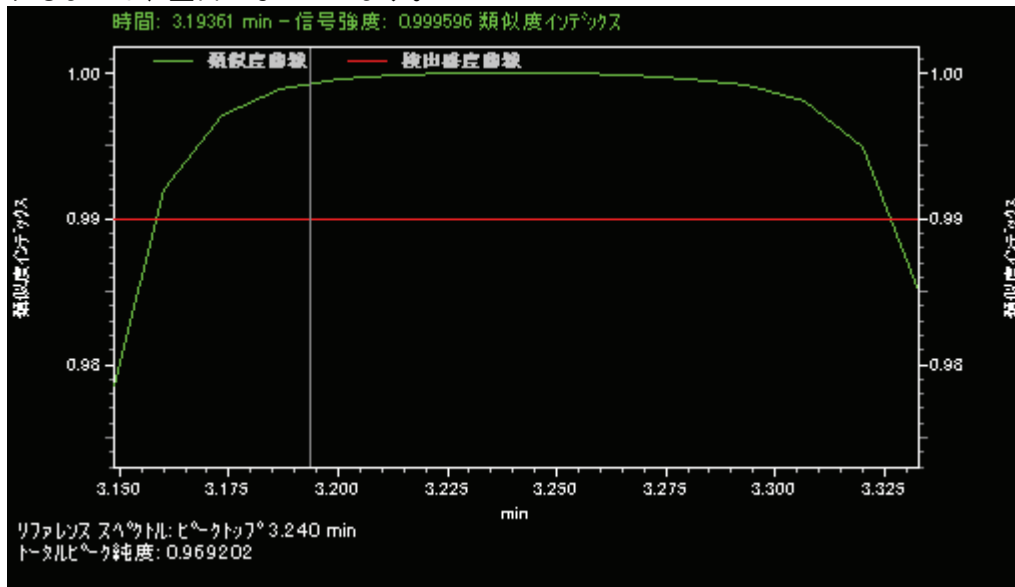


ピーク純度プロット

ミックスビューの4番目の画面でピーク純度を表示します。

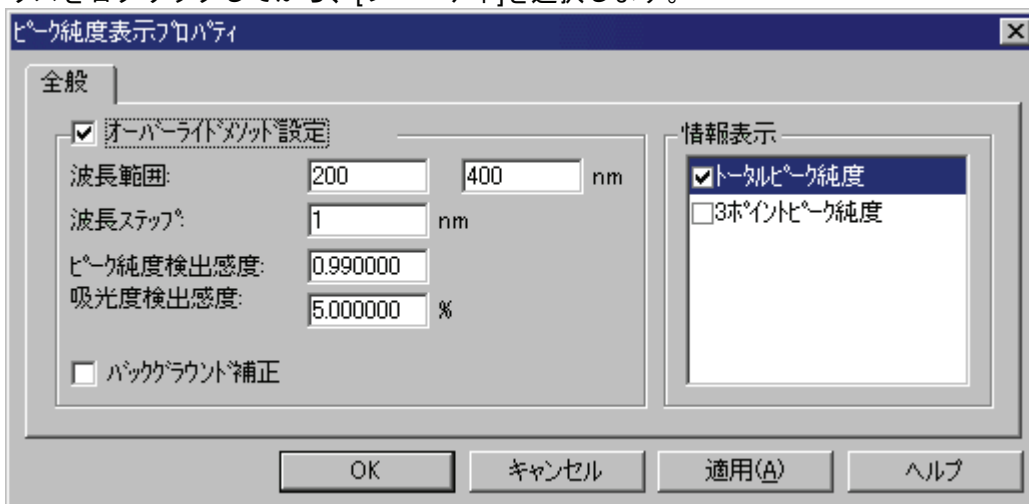
1. 表示メニューからPDAビュー/ミックスビューを選択します。
2. オプションをクリックし、ピーク純度プロット表示をクリックします。
3. アクションボタンをクリックし、純度表示するピークを、純度/類似度を表示するピークの選択から選択します。

トータルピーク純度ビューには、3D データから抽出されたクロマトグラムのピーク純度プロファイルが表示されます。このビューには、ミックスビューのクロマトグラム区画に表示されているマックスプロットクロマトグラムのピーク純度情報が表示されます。この区画は、データが解析され、ピーク純度計算用のピークが選択されるまでは、空白になっています。



ピーク純度表示プロパティ

ピーク純度表示のためのプロパティを設定するには、[ピーク純度表示]領域上で、マウスを右クリックしてから、[プロパティ]を選択します。



初期設定で、類似度ビューは[PDA オプション]の[純度]タブの現在のメソッド設定が使用されます。メソッド設定を無効にするには、オーバーライドメソッド設定ボックスをクリックし、設定したいパラメーターを入力します。

波長範囲

例えば 200nm から 400nm のように、ピーク純度計算を行う波長範囲を指定します。

波長ステップ

ピーク純度計算を行う時に使用する波長の間隔を(nm 単位で)指定します。

ピーク純度検出感度

2つのスペクトルの比較として、類似度インデックス(SI)が与えられ、この値が 1.00 に近いほど、類似度の高いスペクトルと言えます。ピーク純度検出感度は、適合していないスペクトルを排除するために使用されます。もし、SI がピーク純度検出感度より大きい値であれば、スペクトルは純度が高いと考えられます。一般的に、スペクトルの SI が 0.9900 以上の場合、スペクトルのピークトップは高い確率で同じであると考えられます。SI が 0.9000 以上で 0.9900 未満の場合、注意深く評価する必要があります。SI が 0.9000 未満の場合、類似していないと考えるべきです。

吸光度検出感度

ピーク純度計算に使用するスペクトル範囲を目的とするクロマトグラムのピーク高さ%で指定します。この値に到達していないスペクトルは、ピーク純度計算に使用されません。メソッドに設定することにより、溶離液による干渉のように、

目的ピークにおける低濃度領域のスペクトルをピーク純度計算から、除外することができます。

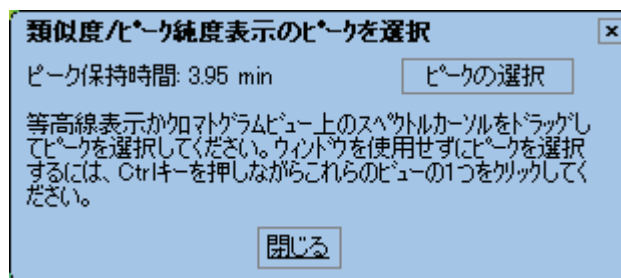
バックグラウンド補正

このボックスをチェックすると、ピーク純度計算に使用する前に、ピークベースラインを使用して、スペクトルのバックグラウンドが補正されます。

類似度/ピーク純度表示のピークの選択

ピーク純度計算のためのリファレンススペクトルを選択します。

1. 既にデータが解析されていることを確認してください。(確かではない場合は、ツールバー上の[解析]ボタンを押してください。)
2. [ミックスビュー]ツールバーから[アクション]/[類似度/ピーク純度表示のピークを選択]を選択します。
3. CTRL ボタンを押したまま、クロマトグラムまたは等高線画面でピークをクリックします。リファレンススペクトルの保持時間がピーク純度を示す数値とともに表示されます。
4. ピークの選択または変更を続けることができます。終わったら、[閉じる]ボタンをクリックします。



類似度表示プロパティ

類似度表示のプロパティを設定します。

ピーク類似度としきい値プロットで、マウスを右クリックして[プロパティ]を選択します。



初期設定で、類似度ビューは[PDA オプション]の[純度]タブの現在のメソッド設定が使用されます。メソッド設定を無効にするには、オーバーライドメソッド設定ボックスをクリックし、設定したいパラメーターを入力します。

波長範囲

例えば 200nm から 400nm のように、ピーク純度計算を行う波長範囲を指定します。

波長ステップ

ピーク純度計算を行う時に使用する波長の間隔を(nm 単位で)指定します。

ピーク純度検出感度

2つのスペクトルの比較として、類似度インデックス(SI)が与えられ、この値が 1.00 に近いほど、類似度の高いスペクトルと言えます。ピーク純度検出感度は、適合していないスペクトルを排除するために使用されます。もし、SI がピーク純度検出感度より大きい値であれば、スペクトルは純度が高いと考えられます。一般的に、スペクトルの SI が 0.9900 以上の場合、スペクトルのピークトップは高い確率で同じであると考えられます。SI が 0.9000 以上で 0.9900 未満の場合、注意深く評価する必要があります。SI が 0.9000 未満の場合、類似していないと考えるべきです。

吸光度検出感度

ピーク純度計算に使用するスペクトル範囲を目的とするクロマトグラムのピーク高さ%で指定します。この値に到達していないスペクトルは、ピーク純度計算に使用されません。メソッドに設定することにより、溶離液による干渉のように、目的ピークにおける低濃度領域のスペクトルをピーク純度計算から、除外することができます。

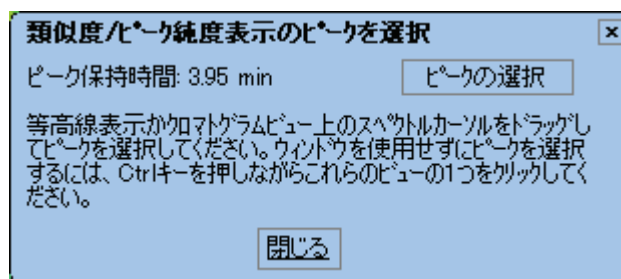
バックグラウンド補正

このボックスをチェックすると、ピーク純度計算に使用する前に、ピークベースラインを使用して、スペクトルのバックグラウンドが補正されます。

類似度/ピーク純度表示のピークの選択

ピーク純度計算のためのリファレンススペクトルを選択します。

1. 既にデータが解析されていることを確認してください。(確かではない場合は、ツールバー上の[解析]ボタンを押してください。)
2. [ミックスビュー]ツールバーから[アクション]/[類似度/ピーク純度表示のピークを選択]を選択します。
3. CTRL ボタンを押したまま、クロマトグラムまたは等高線画面でピークをクリックします。リファレンススペクトルの保持時間がピーク純度を示す数値とともに表示されます。
4. ピークの選択または変更を続けることができます。終わったら、[閉じる]ボタンをクリックします。



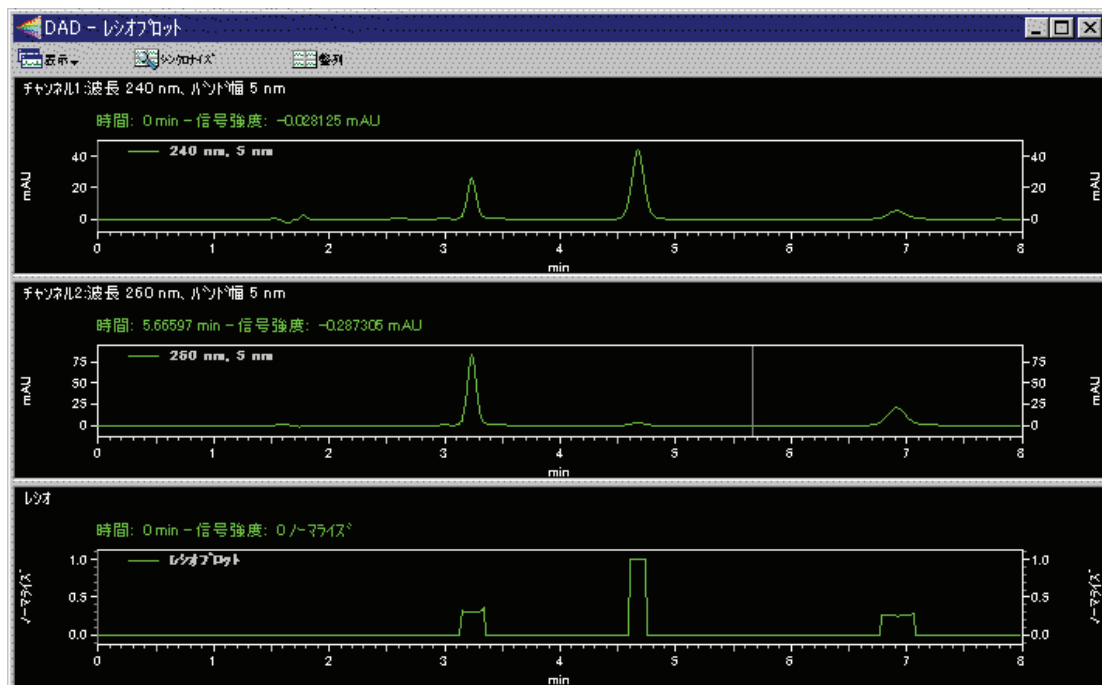
レシオプロットビュー

[表示]メニューから[PDA ビュー]/[レシオプロット]を選択します。

レシオプロットビューには、PDA データからの2つの波長チャンネルとこれら2つのチャンネルのレシオが表示されます。これらは、リアルタイムデータ収集時と測定解析時ともに確認することができます。レシオピーク上のフラットトップは、ピーク純度確認のための予備的な表示となります。

レシオの波長およびパラメータは、[メソッド]/[PDA オプション]/[レシオプロット]タブで設定します。

このレシオクロマトグラムのY軸は、最大値が1になるように自動スケールされます。



ポップアップメニューを表示するには、ウインドウ内で右クリックしてください。
メニューは、標準的なクロマトグラムグラフウインドウ用のものと同じです。

PDA ユーティリティ

ユーティリティメニューを使用します。

任意の PDA ビューでマウスを右クリックし、[ユーティリティ]を選択します。

[ユーティリティ]メニューにより、表示したスペクトルを印刷、コピー、保存またはエクスポートすることができます。以下のオプションがあります。

印刷

現在表示されているスペクトルを自動的に印刷するには、[印刷]を選択します。

クリップボードにコピー

表示されているスペクトルをクリップボードにコピーするには、[クリップボードにコピー]を選択します。クリップボードに貼り付けられたオブジェクトは、他のソフトウェアに貼り付けることができます。

ライブラリやレポートに含めるためにスペクトルを「.spc」という拡張子付きのファイルとして保存するには、「[トレースの保存]」を選択します。

メソッドでエクスポートを選択し、アイテムのエクスポートを有効にします。

スペクトル類似度テーブルは 4 番目の PDA ミックスビューでオプションにスペクトル類似度テーブルの表示が選択されている場合に表示されます。

スペクトルはミックスビューのスペクトル画面でスペクトルを追加・削除することにより自動的に追加・削除されます。

スペクトル名	類似度	スペクトルソース
2.85 min	0.0000	(現在のデータ)

スペクトルはミックスビューで**アクション**ボタンから**オーバーレイ**スペクトルを選択することによっても追加することができます。

リファレンススペクトルが選択されるまで、すべての類似度は0が表示されます。
計算の詳細は類似度計算の項を参照してください。

スペクトルソース

このカラムはスペクトルの出展を示します。(現在のデータ) はスペクトルが現在開かれているデータから抽出されたことを示します。スペクトルが保存されたデータから抽出された場合は抽出元のファイル名が表示されます。

リファレンスの設定

このボタンを押すと現在選択されているスペクトルがリファレンスペクトルとして選択されます。類似度は新たに選択されたピークに対して再計算されます。

印刷

このボタンを押すとテーブルがテキストとしてプリンタに出力されます。

プロパティ

このボタンを押すとスペクトル類似度計算のパラメータを示すダイアログが表示されます。

スペクトル類似度テーブルのプロパティ

類似度計算に用いる波長範囲と波長ステップを設定します。

1. スペクトル類似度テーブルから、[プロパティ]をクリックします。テーブルプロパティダイアログボックスが表示されます。
2. 類似度計算に使用する、波長範囲および波長ステップを入力します。



注: 解析において、この波長範囲をデータ収集した波長範囲より広く設定することができます。このとき実際の計算は測定した波長範囲で行われます。

クロマトグラムの抽出

ミックスビューまたは 3D とミックスビューの等高線表示からクロマトグラムビューを作成します。

1. 等高線表示、クロマトグラムおよびスペクトルを表示するには、[表示]/[PDA ビュー]/[ミックスビュー]を選択、または、[PDA ツールバー]から[表示]/[ミックスビュー]を選択します。
2. カーソルを等高線表示の左側の波長軸にある三角形のハンドルに移動させ、左マウスボタンを押します。
3. カーソルを上下させて希望の波長までドラッグし、マウスボタンを離します。

4. 指定された波長のクロマトグラムが、クロマトグラムビュー内に表示されます。

4. PDA オプション

PDA オプションを使用して、ご使用中の LC にダイオードアレイ検出器(DAD)を接続し、さまざまな分析オプションを設定できます。

1. [メソッド]メニューから[PDA オプション]を選択します。
2. データ解析を行い、パラメータを設定するタブをクリックします。

タブ	内容
ライブラリ	スペクトルライブラリを有効にし、検索パラメータを指定します。
純度	純度計算のためのパラメータを入力します。
スペクトル	フィルタリングとピークあたりのスペクトルパラメータを決定します。
マルチクロマトグラム	マルチ波長クロマトグラムを有効にします。
レシオ	レシオプロットを設定します。

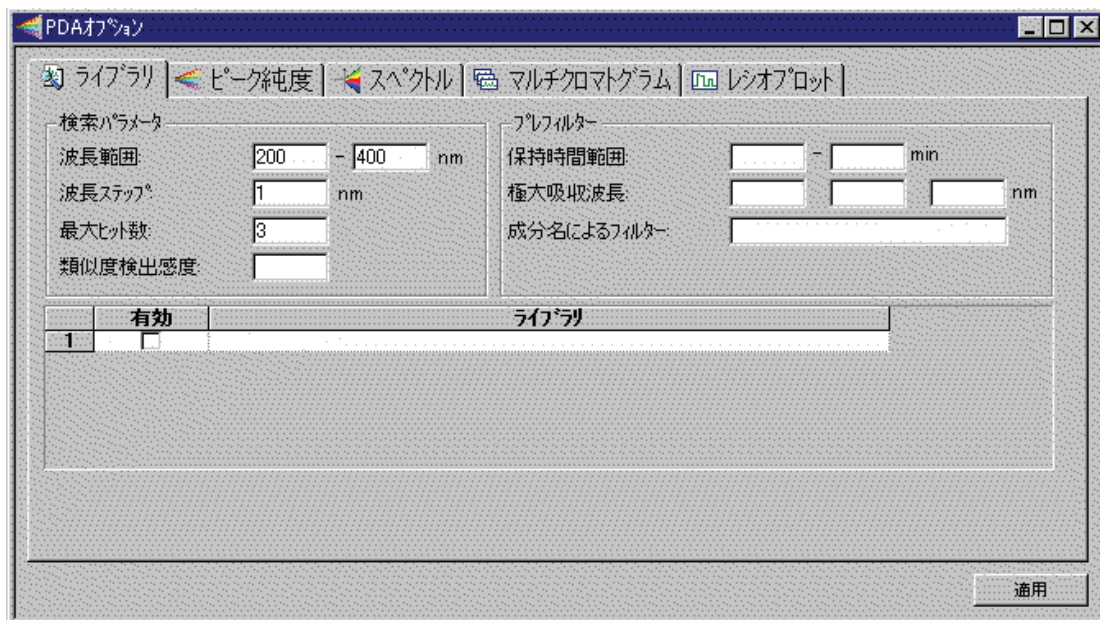
PDA オプションライブラリ

PDA オプションライブラリを設定します。

[メソッド]/[PDA オプション]/[ライブラリ]タブをクリックします。

このタブを使用すると、メソッドに保存されるスペクトルライブラリ検出用のライブラリパラメータを入力できます。

スペクトルライブラリー検出の[メソッドパラメーターの使用]を実行する場合に、このパラメーターは使用されます。



ライブラリ/有効

ライブラリからファイルボタンをクリックし、表示されたライブラリから、検出または選択されるスペクトルライブラリを指定します。

複数のライブラリが選択できます。[有効]をクリックすると、ライブラリが有効になります。このリストが空白の場合、または、有効にできるライブラリが無い場合は、検出できません。

パラメータ検出

ライブラリ検索用のパラメータを指定します。

波長範囲

ライブラリ検索用の波長範囲を指定します。

波長ステップ

ライブラリ検索用のステップ数(スペクトルデータポイントの間隔)を指定します。ステップ数を増やすと検出が早くなります。しかしステップ数を増やしすぎると、スペクトルの詳細が獲得できなくなります。

最大ヒット数

ライブラリ検索の結果で報告するヒット数を指定します。報告するヒット数を制限するパラメータとして、類似度検出感度パラメータと一緒に機能しますので注意してください。

類似度検出感度

類似度検出感度を指定します。ライブラリ検索結果には、未知のものとの類似度がこの数値を上回っているスペクトルのみが表示されます。報告するヒット数を

制限するためのパラメータとして、最大ヒット数パラメータと一緒に機能しますので注意してください。

プレフィルタータブ

このタブ上の項目により、ライブラリ検索の前に行うプレフィルターを指定することができます。すべてのプレフィルターが選択できます。

保持時間範囲

保持時間範囲を指定すると、PDA はライブラリ検索を、頂点が指定された保持時間範囲内にあるピークから得たライブラリスpekトルに制限します。このプレフィルターは選択可能です。

極大吸収波長

これらの波長を 1 つまたはそれ以上指定すると、ライブラリ検索は、極大吸収波長が指定されている波長に対して、 $\pm 5\text{nm}$ 以内のライブラリ入力値に限定されません。極大吸収波長にマッチしない入力値は、検索から自動的に除外されます(類似度計算は行われません)。極大吸収波長への数値入力を選択可能です。

成分名によるフィルター

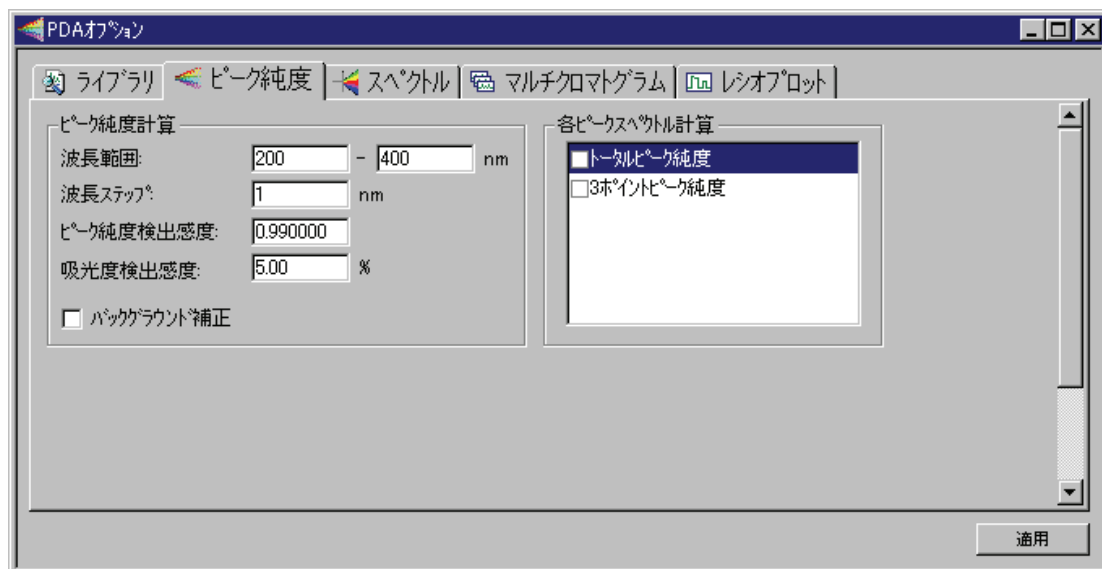
spekトルに含まれる成分名を指定します。その名前を含むspekトルだけが検索されます。

PDA オプションピーク純度

PDA オプションピーク純度を設定します。

[メソッド]/[PDA オプション]/[ピーク純度] タブをクリックします。

分析中のオンデマンドピーク純度計算およびピーク純度計算の実行に必要なパラメータを設定するために、純度タブを使用します。



波長範囲

例えば 200nm から 400nm のように、ピーク純度計算を行う波長範囲を指定します。

波長ステップ

ピーク純度計算を行う時に使用する波長の間隔を(nm 単位で)指定します。

ピーク純度検出感度

2つのスペクトルの比較として、類似度インデックス(SI)が与えられ、この値が 1.00 に近いほど、類似度の高いスペクトルと言えます。ピーク純度検出感度は、適合していないスペクトルを排除するために使用されます。もし、SI がピーク純度検出感度より大きい値であれば、スペクトルは純度が高いと考えられます。一般的に、スペクトルの SI が 0.9900 以上の場合、スペクトルのピークトップは高い確率で同じであると考えられます。SI が 0.9000 以上で 0.9900 未満の場合、注意深く評価する必要があります。SI が 0.9000 未満の場合、類似していないと考えるべきです。

吸光度検出感度

ピーク純度計算に使用するスペクトル範囲を目的とするクロマトグラムのピーク高さ%で指定します。この値に到達していないスペクトルは、ピーク純度計算に使用されません。メソッドに設定することにより、溶離液による干渉のように、目的ピークにおける低濃度領域のスペクトルをピーク純度計算から、除外することができます。

バックグラウンド補正

このボックスをチェックすると、ピーク純度計算に使用する前に、ピークベースラインを使用して、スペクトルのバックグラウンドが補正されます。

プレピークスpekトル計算

このボックスをチェックすると、表示された値はそれぞれのピークに基づいて分析中に計算されることを示します。この計算結果は、レポートおよびクロマトグラムの注釈として使用可能です。

未チェックの値は分析のスピードアップになりません。ボックスが未チェックでその欄がランレポートに表示されると、それはゼロとしてレポートされます。

ピーク純度

このボックスをチェックすると、ピーク純度がそれぞれのピークに基づいて分析中に計算されることを示します。この計算結果は、レポートおよびクロマトグラムの注釈として使用可能です。

ボックスが未チェックでその欄がレポートに含まれると、それはゼロとしてレポートされます。

3 ポイント純度

このボックスをチェックすると、3 ポイントピーク純度がそれぞれのピークに基づいて分析中に計算されることを示します。この計算結果は、レポートおよびクロマトグラムの注釈として使用可能です。

ボックスが未チェックでその欄がレポートに含まれると、それはゼロとしてレポートされます。

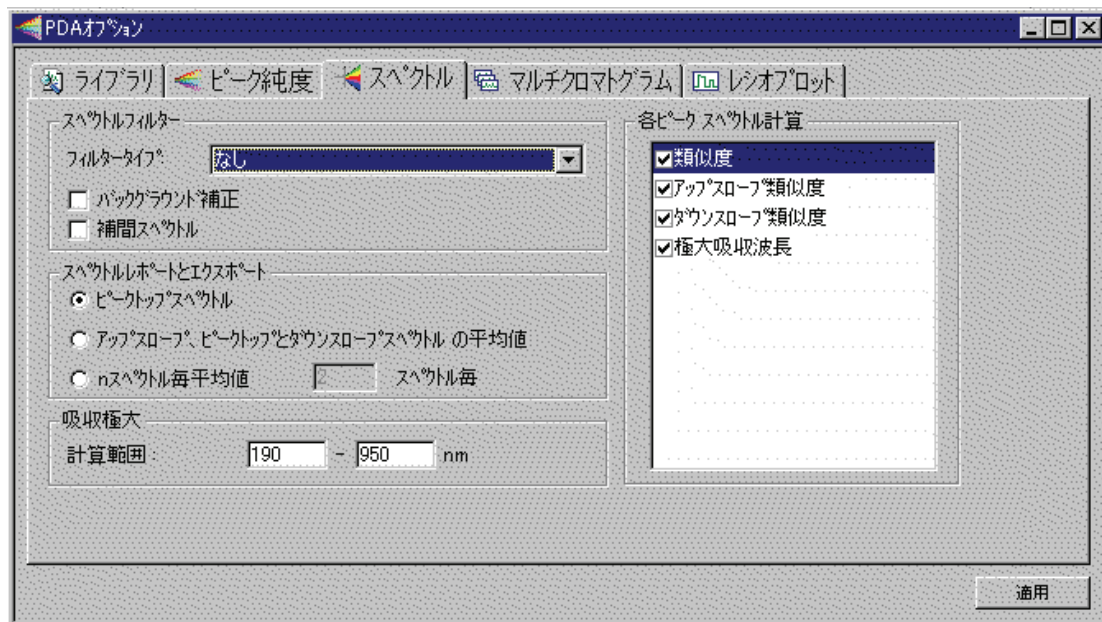
PDA オプションpekトル

PDA オプションpekトルを設定します。

[メソッド]/[PDA オプション]/[pekトル] タブをクリックします。

フィルタリングのタイプ、および、PDA pekトルビューに表示されたpekトルと 3D データ分析中に獲得されるpekトルに実行される処理を指定するために、pekトルタブを使用します。

注: このページで指定した処理は、表示、検索およびレポートを含むソフトウェアのpekトルの使用より優先して実行されます。



スペクトルフィルター

スペクトルのフィルター(を行う場合)をどのように行うかを指定します。

フィルタータイプ

スペクトルのプロットのためのフィルタータイプをなし、スムージング、一次微分、二次微分から選択します。これらのスムージング用アルゴリズムのうち1つを選択すると、スペクトルからノイズを除去することができます。

バックグラウンド補正

このボックスをチェックすると、表示前にスペクトルバックグラウンド補正が以下のように実行されます。

1. そのピークのベースライン開始時から停止時のスペクトルが、データから抽出されます。
2. そのピークの各スペクトルについて、ベースライン開始時から停止時までのスペクトル間の直線補完により、対応するバックグラウンドスペクトルを作成します。
3. このバックグラウンドスペクトルを、元のスペクトルから差し引きます。

注:バックグラウンド補正計算に使用されるベースライン開始時から停止時は、現在選択されているチャンネルで検出されたピークに基づきます。

補完スペクトル

3 次スプライン曲線の適合性を使用して、スペクトルウィンドウに表示されるスペクトルを 10:1 で自動補間するには、このボックスをチェックします。この補

間は、表示スペクトルにいずれかのフィルタ(一次微分、二次微分、スムージング)が適用された後に実行されます。

注: 補完スペクトルは、ライブラリに保存あるいは追加されません。

スペクトルレポートとエクスポート

3D データからのスペクトルの抽出と抽出あるいはスペクトルレポート時の平均化を規定します。

スペクトルの平均化とは、吸光度の平均を吸光度値とするスペクトル計算のことです。

ピークトップスペクトル

平均化されずに、ピークトップスペクトルが使用されます。

アップスロープ、ピークトップとダウンスロープスペクトルの平均値

これを選択すると、アップスロープスペクトル、ピークトップスペクトル、ダウンスロープスペクトルの3つのスペクトルが平均化されます。

n スペクトル毎平均値

選択すると平均化するスペクトル数が入力可能になります。ピークの開始点から終了点に渡りスペクトルが抽出されます。このスペクトルは平均化されて使用するスペクトルとなります。

各ピークスペクトル計算

これらのボックスのいずれかをチェックすると、解析時、チェックしたパラメータがピークごとに計算され、その結果が表示されます。この計算結果はその後、レポートまたはクロマトグラムのピーク情報として表示させることができます。あまり重要でないパラメータはチェックしないようにすると、解析時間がスピードアップされます。このボックスをチェックせず、このフィールドのパラメータが測定レポートに表示させるように設定している場合は、ゼロとして報告されます。

類似度

このボックスをチェックすると、解析時、ピークごとにベースラインスペクトルとピークトップ間の類似度が計算されます。この計算結果はその後、レポートまたはクロマトグラムのピーク情報として表示させることができます。ボックスがチェックされず、このパラメータが測定レポートに表示させるように設定している場合は、ゼロとして報告されます。

ピークトップ類似度は、同定ピークにのみ適用されます。これを使用するためには、ピークテーブルに、リファレンスペクトルを指定しておく必要があります。

アップスロープ類似度

このボックスをチェックすると、解析時、上り勾配(アップスロープ)の類似度がピークごとに計算されます。アップスロープ類似度は、ピークトップスペクトルを(ピークトップ左側の)上り勾配側のスペクトルと比較します。この計算結果はその後、レポートまたはクロマトグラムのピーク情報として、表示させることができます。このボックスがチェックされず、このパラメータが測定レポートに表示させるように設定している場合は、ゼロとして報告されます。

ダウンスロープ類似度

このボックスをチェックすると、解析時、下り勾配(ダウンスロープ)の類似度がピークごとに計算されます。ダウンスロープ類似度は、ピークトップスペクトルを(ピークトップ右側の)下り勾配側のスペクトルと比較します。この計算結果はその後、レポートまたはクロマトグラムのピーク情報として、表示させることができます。このボックスがチェックされず、このパラメータが測定レポートに表示させるように設定している場合は、ゼロとして報告されます。

極大吸収波長

このボックスをチェックすると、解析時、3D データから抽出されたそれぞれのマルチクロマトグラム中の各ピークについて、極大吸収波長(最大吸光度が生じる波長)が計算されます。この計算結果はその後、レポートまたはクロマトグラムのピーク情報として、表示させることができます。このボックスがチェックされず、このパラメータが測定レポートに表示させるように設定している場合は、ゼロとして報告されます。

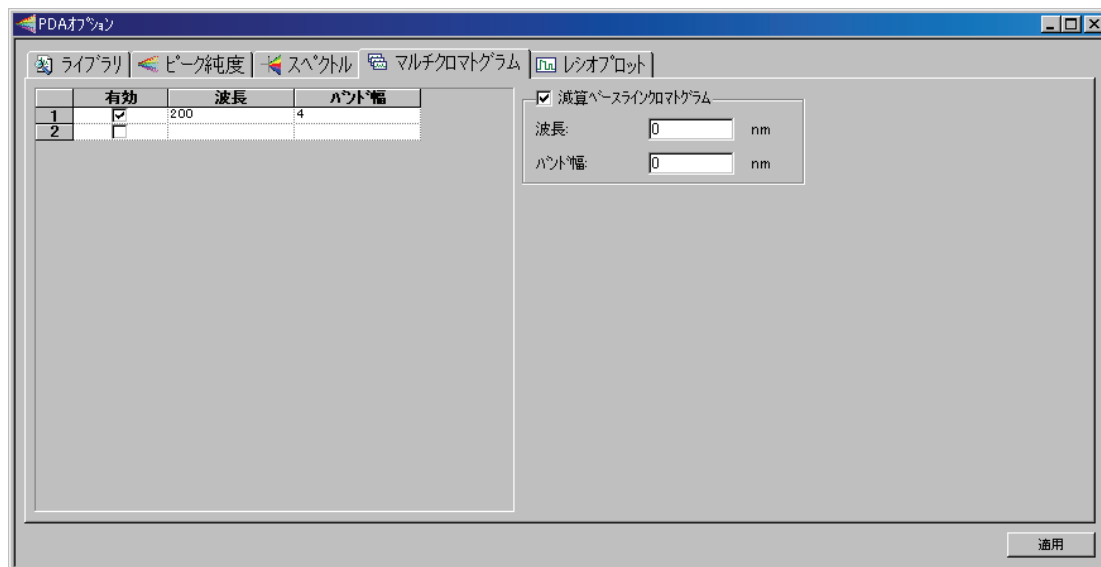
吸収極大 計算範囲

ここで極大波長計算を行う波長範囲を設定できます。

PDA オプションマルチクロマトグラム

PDA オプションマルチクロマトグラムを設定します。
[メソッド]/[PDA オプション]/[マルチクロマトグラム]タブをクリックします。

[マルチクロマトグラム]タブは、インテグレーションまたは定量を行うための 3D データ内のデータチャンネルを指定するために使用します。これにより、[マルチクロマトグラム]プロット上に表示する波長を選択することができます。[有効]ボックスを選択した場合は、1つのプロットに使用する波長とバンド幅を入力します。いくつかの波長を設定した後、チェックマークが表示されている[有効]ボックスをクリックすると、チェックマークが消え、これらを一時的に無効にすることができます。マルチクロマトグラムディスプレイは、[表示]から選択します。マルチクロマトグラムビューは、[マルチクロマトグラム]タブで 1 波長以上の設定が有効となっていない限り、機能しません。



有効

設定した波長を有効とするには、そのチェックボックスをクリックします。波長を無効にするには、そのチェックボックスを再度クリックしてチェックマークを外してください。有効なときだけ波長がマルチクロマトグラムビューに表示されます。

波長

マルチクロマトグラム表示またはクロマトグラムとして抽出したい波長を入力します。

バンド幅

各チャンネルごとに、アナログ信号を生成する際に平均化するための波長範囲 (nm)を設定します。

マルチクロマトグラムのデータは(設定波長-1/2 バンド幅)から(設定波長+1/2 バンド幅)のクロマトグラムが平均化されます。

たとえば波長 600nm、バンド幅 4nm が設定された場合、598, 599, 600, 601, 602 nm のクロマトグラムが加算され、5 で除算されます。

上記の例で検出器の測定波長範囲が 190 - 600nm であった場合は、598, 599, 600 nm のクロマトグラムが加算され 3 で除算されます。範囲は限界値を超えられません。

減算ベースラインクロマトグラム

指定のクロマトグラムの減算ベースラインがデータから抽出されるのを可能にするためには、これをクリックします。

波長

抽出したいクロマトグラムで使われるベースラインの波長を入力します。

バンド幅

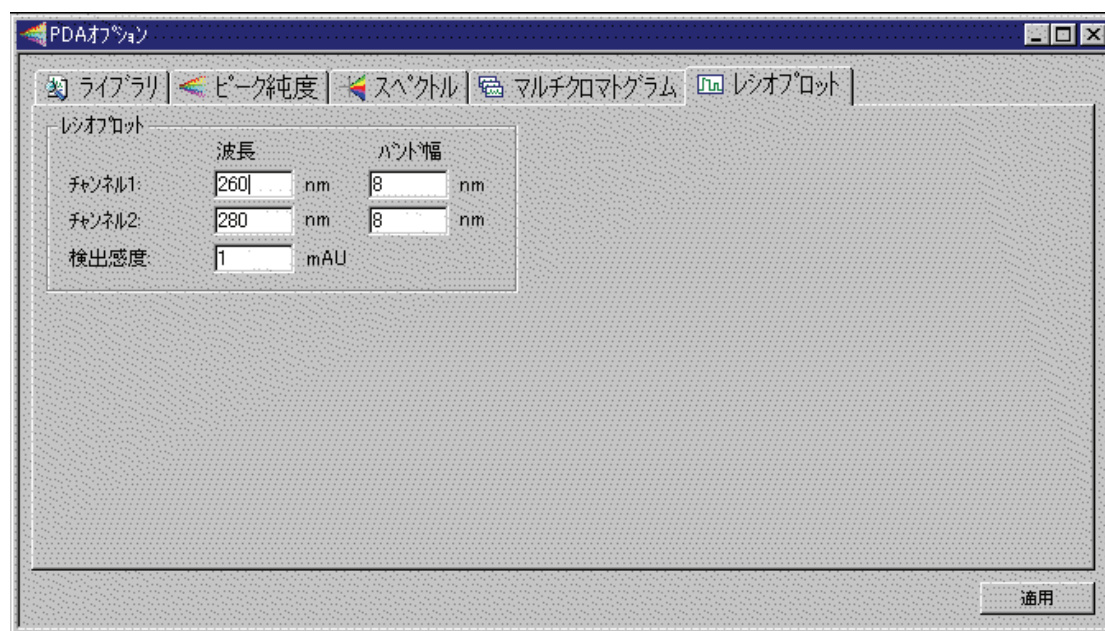
抽出クロマトグラムを生成する際に平均化するための波長範囲(nm)を設定します。

PDA オプションレシオプロット

PDA オプションレシオプロットを設定します。

[メソッド]/[PDA オプション]/[レシオプロット]タブをクリックします。

レシオプロットタブはレシオプロット表示の条件設定に用いられます。レシオ表示は2波長チャンネルのクロマトグラムとそれらチャンネルの比を表示します。この表示は分析中および分析後のいずれでも可能です。ピークにおける平坦なレシオ値はピークが単一物質であることの指標の一つになります。



レシオプロット

レシオプロットするためのマルチクロマトグラムチャンネルの波長を指定することにより制御されます。抽出したクロマトグラムは、指定した波長の中心となります。

チャンネル 1、チャンネル 2

波長

クロマトグラムチャンネルの各波長を入力します。

バンド幅

クロマトグラムチャンネルを生成する際に平均化される波長範囲(nm)を入力します。

検出感度

そのレシオプロットの検出感度を入力します。検出感度は、両方のチャンネルのクロマトグラムにおいて、レシオプロットを計算するための最小吸光度です。これは、ノイズと一緒に生じるものや微小な吸光度値の変化によるレシオ計算に影響を及ぼすものを排除する方法です。検出感度値が満足されない場合、レシオプロットはゼロとなります。

5. スペクトルライブラリ

スペクトルライブラリの定義

ライブラリを定義するためには、追加するスペクトルがスペクトルファイル(.spc)としてディスクに保存されている必要があり、保存されていないと現在の測定時に取得したスペクトルからライブラリを作成することはできません。

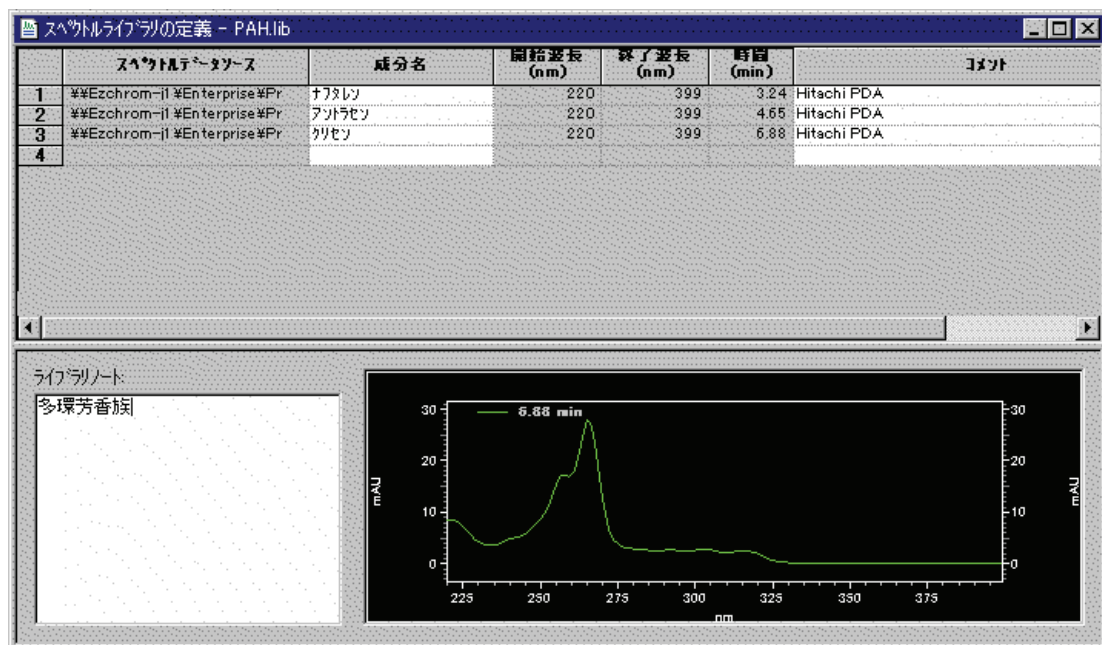
スペクトルライブラリを定義します。

1. [ファイル]/[スペクトルライブラリ]/[新規作成]コマンドをクリックします。
既存のスペクトルライブラリを修正するには、[ファイル]/[スペクトルライブラリ]/[開く]コマンドをクリックし、修正したいライブラリを選択して[開く]ボタンをクリックします。
2. [スペクトルデータソース]をクリックし、[現在のデータ]、[スペクトルファイル]、[同定ピーク]から選択します。

[現在のデータ]を選択すると、ライブラリに追加するためのスペクトルの保持時間を入力するダイアログボックスが表示されます。

[スペクトルファイル]を選択すると、ライブラリに追加するためのスペクトルファイルを選択するダイアログボックスが表示されます。

[同定ピーク]を選択すると、ライブラリに追加するためのスペクトルのピークを選択するダイアログボックスが表示されます。([同定ピーク]を使用するには、現在のクロマトグラムをまず解析しておかなければなりません。)



スペクトルデータソース

ライブラリに加えるスペクトルを選択するために使用する[現在のデータ]または[スペクトルファイル]を選択するには、このフィールド横の矢印をクリックします。

スペクトルファイルからスペクトルを加えるためには、そのスペクトルが、通常は、[スペクトル]表示画面においてポップアップメニューの[ユーティリティ]/[トレースの保存]機能を使用して、「.spc」という拡張子付きのファイルを前もって保存しておく必要があります。

「現在のデータファイル」からスペクトル入力を選択した場合は、ダイアログが表示されますので、選択したいスペクトルの保持時間を入力する必要があります。

成分名

そのスペクトルの成分名または説明を入力します。このフィールドは、[表示]および[成分名によるフィルター]による検索のキーワードとして使用されます。

波長範囲(開始波長、終了波長)

極大吸収波長を計算する際のスペクトルの波長範囲(開始波長および終了波長)が表示されます。

時間

スペクトルをクロマトグラムから抽出する場合、そのスペクトルの保持時間を自動的に判別し、その数値をこのフィールドに入力します。希望の場合は、このフィールドの値を編集することもできます。このフィールドは、プレフィルターによる検索用としても使用されます。

コメント

そのスペクトルのメモ的な説明について入力します。このフィールドは、表示およびドキュメント用としてのみ使用されます。

ライブラリノート

このフィールドは、例えば測定条件に関するドキュメント等、全体としてのライブラリに関する関連情報や、一般的な試料情報をドキュメント化するために使用します。

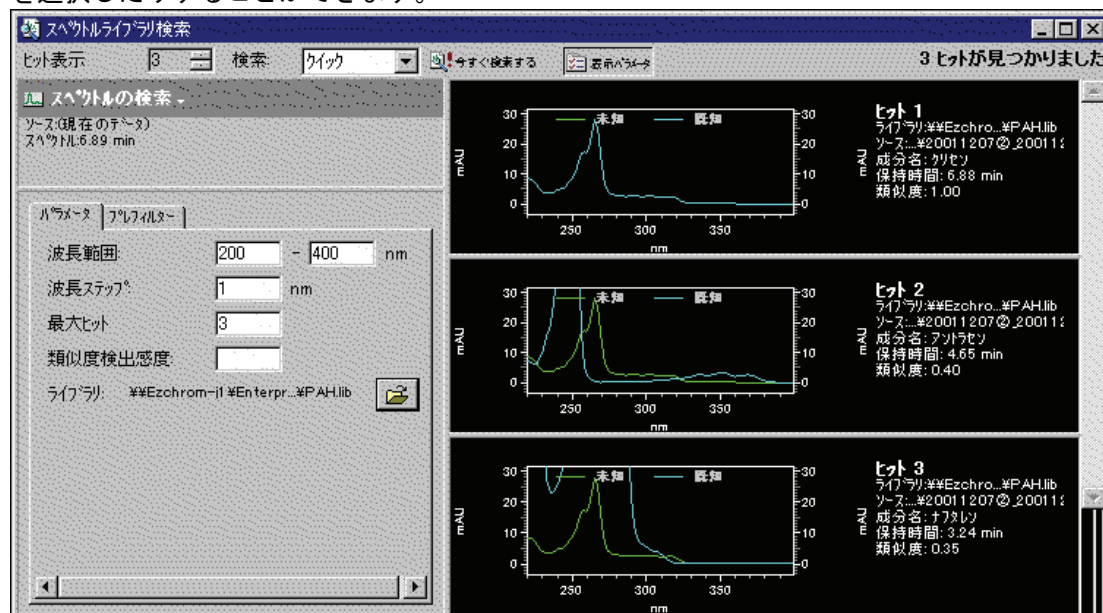
注: 既存のライブラリ入力でのフィールドは、カーソルでそのフィールドを選択することにより、編集することができます。必要に応じて、ライブラリテーブルの行を右クリックすることにより、ライブラリから行を切り取り、貼り付け、コピー、挿入および削除するために使用するためのポップアップメニューを表示させることができます。

スペクトルライブラリ検索

スペクトルライブラリ検索を開きます。

[ミックスビュー]ウィンドウから[アクション]/[ライブラリ検索]コマンドをクリックします。

等高線表示画面上で選択したスペクトルに関するライブラリ検索を行ったり、検索のために、現在のデータまたは格納されているスペクトルファイルからスペクトルを選択したりすることができます。



ヒット表示

ヒットしたスペクトルを一度に表示するための数を指定します。ヒット数は、類似度の高い順に表示されます。

検索

現在のメソッドのパラメータを使用して検索したい場合は[メソッド]を選択します。検索の前にご自分でパラメータを入力または変更したい場合は[クイック]を選択します。

表示パラメータ

そのパラメータを表示したい場合に、このボタンをクリックします。常にそのメソッドのパラメータを使用する場合は、検索時に表示することはありません。

今すぐ検索する

このボタンをクリックすると、ライブラリ検索はこのパラメータを使用して選択したスペクトルで行われ、指定されたヒット数分のスペクトルが表示されます。

スペクトルの検索

検索するために新しいスペクトルを選択するには、この矢印をクリックします。現在のデータや既に保存されているスペクトルファイルから選択することもできます。現在のスペクトルソースが表示されます。

パラメータ

このタブには、検索パラメータが含まれています。検索パラメータとして、「メソッド」を選択した場合は、[PDAオプション]/[ライブラリ]タブで、現在のメソッドに入っているパラメータが表示されます。[クイック]を選択した場合は、パラメータはデフォルトのパラメータとなります。

波長範囲

ライブラリ検索を行う波長範囲を指定します。

波長ステップ

ライブラリ検索を行う際に使用するスペクトルデータポイントの間隔を指定します。

最大ヒット数

ライブラリ検索の結果で報告するヒット数を指定します。報告するヒット数を制限するパラメータとして、類似度検出感度パラメータと一緒に機能しますので注意してください。

類似度検出感度

類似度検出感度を指定すると、ライブラリ検索結果には、未知のものとの類似度がこの数値を上回っているスペクトルのみが表示されます。報告するヒット数を制限するためのパラメータとして、最大ヒット数パラメータと一緒に機能しますので注意してください。

ライブラリ

指定されているメソッドからのライブラリを表示するか、[クイック]を使用すると、検索に使用するためのライブラリを選択することができます。

プレフィルター

検索モードとして[クイック]を選択すると、このタブ上の項目により、ライブラリ検索の前に行うプレフィルターを指定することができます。すべてのプレフィルターはオプションです。検索モードとして[メソッド]を選択した場合は、このタブ上の項目は、読み取り専用のもとなり、PDA オプションの[ライブラリ]タブ上のパラメータ数値が反映されます。

保持時間範囲

[保持時間範囲]を指定すると、ライブラリ検索は、保持時間が指定された範囲内に入るライブラリ入力値に限定されます。この範囲外の入力値は、この検索から自動的に除外されます(類似度計算は行われません)。ここに数値を入力することができます。

極大吸収波長

これらの波長を 1 つまたはそれ以上指定すると、ライブラリ検索は、極大吸収波長が指定されている波長に対して、 $\pm 5\text{nm}$ 以内のライブラリ入力値に限定されます。極大吸収波長にマッチしない入力値は、検索から自動的に除外されます(類似度計算は行われません)。極大吸収波長への数値入力は選択可能です。

成分名によるフィルター

ある成分名が指定されると、ライブラリ検索は、名前として指定された文字列が含まれたライブラリ入力値に限定されます。文字列にマッチしない入力値は、検索から自動的に除外されます(類似度計算は行われません)。成分名によるフィルターの入力はオプションです。

注:スペクトルライブラリ検索の結果を印刷するには、プロジェクトのデフォルトテンプレートフォルダにライブラリ検索結果ファイル(.rep)がなければなりません。このファイルは標準テンプレートと共に OpenLAB で提供されます。このファイルはインストール時にコピーすべきです。

スペクトル情報

ライブラリ検索に使用するスペクトルを検索します。

1. ミックスビューで、[アクション]/[ライブラリ検索]コマンドをクリックします。
2. [スペクトルの検索]をクリックします。
3. [現在のデータ]、[スペクトルファイル]、あるいは[同定ピーク]を選択します。
4. 検索に使用する保持時間、スペクトルファイル、あるいは同定ピークを入力します。



6. マニュアルライブラリ検索

1. ミックスビューウィンドウの等高線ウィンドウ枠内で、縦カーソルを検索したいピークトップにドラッグして、対応するスペクトルをスペクトルウィンドウ枠に表示させます。
2. [アクション]の[ライブラリ検索...]をクリックして[スペクトルライブラリ検索]ダイアログボックスを表示します。ツールバーの検索メニューから、メソッドのライブラリパラメータを使用する場合はメソッドを、検索パラメータを修正して使用する場合はクイックをクリックしてください。検索を行う前に、メソッドでライブラリが選択されていること、あるいはクイック検索を行うためのライブラリが開かれていることを確認してください。
3. [今すぐ検索]をクリックして、ライブラリ検索結果ウィンドウを表示させます。表示と同時に指定されたライブラリの中で最も近い相関を示す3つのスペクトルが表示されます。必要に応じて、[>>]ボタンまたは[<<]ボタンをクリックして、他の相関の近いスペクトルを表示してください。

7. マニュアルライブラリ用のスペクトルの収集方法

1. ライブラリに入れる既知の成分または標準試料を含む試料を使用して、データ収集を行います。

2. 適切なインテグレーションパラメータを使用して、解析を行います。([メソッド]/[PDA オプション]/[スペクトル]タブで[バックグラウンド補正]をチェックするのが理想的です。)
3. [ミックスビュー]ウインドウの等高線表示プロットを使用して、縦(時間軸)カーソルをピークトップ上にドラッグして、そのスペクトルビューに対応するスペクトルを表示させます(下図参照)。「等高線表示からのスペクトルおよびクロマトグラム」の抽出方法も参照してください。
4. そのスペクトルビュー内を右クリックしてから、[ユーティリティ]/[トレースの保存]を選択し、ダイアログにファイル名を入力します。この手順を繰り返すことにより、ライブラリにスペクトルを追加することができます。ファイルは、「.spc」という拡張子付きで自動的に保存されます。

注: 一次微分または二次微分したスペクトルのライブラリに追加するには、[メソッド]/[PDA オプション]/[スペクトル]タブで適切なフィルターを選択してから、ステップ 3 および 4 を繰り返します。

レポートとピークテーブル

8. PDA レポートアイテム

PDA オプションの設定が有効の時は、次のレポート項目が、ライブラリ検索レポート、ピーク純度レポート、ライブラリ定義レポートおよびスペクトルレポートをカスタムレポートに挿入することができます。

カスタムレポートグラフアイテム

PDA オプションの設定が有効の時は、[レポートの挿入]メニューには、3D データグラフおよび等高線表示が項目として追加されます。

3D データグラフ

3D 表示は、時間、波長、吸光度の 3 次元表示を提供します。吸光度と波長の関係については、単一波長のプロットでは確認できないこともあります。しかし、3D 表示では容易に確認することができます。この機能は、3D データグラフをレポートに自動的に入れたい場合を選択します。3D データ内で右クリックしてから、[プロパティ]を選択して、[3D データグラフのプロパティ]ダイアログを表示させ、適切な値に変更してください。

3D データは、上昇させたり、どの角度からでもその軸を中心として回転させることができます。これらの機能は、3D ウィンドウでの操作と同じです。

等高線表示の挿入

PDA データが含まれているデータファイルは、カスタムレポートに等高線表示を含めることができます。等高線表示(鳥瞰図とも呼ばれます)は、各波長と時間における試料の吸光度を表示します。等高線表示は、試料が容易に検出可能な吸光度を表示する波長に関する、迅速でわかりやすい情報を提供します。カスタムレポートでの等高線表示のパラメータの変更は、等高線表示ウィンドウでの操作と同じです。

9. カスタムレポート PDA パラメータ

カスタムレポートには、様々な PDA 情報を入力することができます。以下の項目は、カーソルをその項目を挿入したい位置に置くことによりレポートに挿入され、その後、右クリックすることにより、カスタムレポートメニューにアクセスできます。

ライブラリ検索レポート

カスタムレポートに、ライブラリ検索レポートが作成または挿入されます。

1.  カスタムレポートの編集をクリックして、カスタムレポートを開きます。
2. カスタムレポートで右クリックし、[レポートの挿入]/[ライブラリ検索レポート]を選択します。ライブラリ検索レポートのテンプレートは、カスタムレポートのカーソルの位置に挿入されます。

このレポートのパラメータを変更するには、レポートテーブル上で右クリックし、[プロパティ]を選択します。次のダイアログが表示されます。



ライブラリを検索

レポートとして、どのピークを検索するかを指定するものです。[ピークトップスペクトル]を選択した場合、[特定スペクトル]ボタンは無効となります。[特定スペクトル]を選択した場合は、このグループのその他のボタンが無効となります。

ピークトップスペクトル

選択基準で検出されたピークトップスペクトルに基づいて、検索を有効にします。

検出

検索されるピークの検出基準を選択します。

全マルチクロマトグラム、全 PDA トレース、ピークトップスペクトル、または、有効な波長チャンネルから選択してください。

同定ピークのみ

同定ピークのみをライブラリ検索の対象とします。

時間範囲に限定

ピーク選択(上記で設定)を時間範囲に限定できます。チェックすると、指定時間範囲内のピークだけを検索します。チェック無しでは、[時間範囲]編集フィールドは無効です。

特定スペクトル

検索するスペクトルを指定します。 ボタンをクリックし、スペクトルソースを選択します。メニューは、現在のデータ、名前を付けたファイルおよびスペクトルピークです。

スペクトル表示

検索結果グラフのレイアウトが定義されます。

グラフの高さ

検索結果グラフの相対的な高さを指定します。”100%”が、標準的なグラフのサイズに対応します。より詳細なプロットを表示させたい場合は、さらに大きな数値を選択することもできます。

グラフのプロパティ

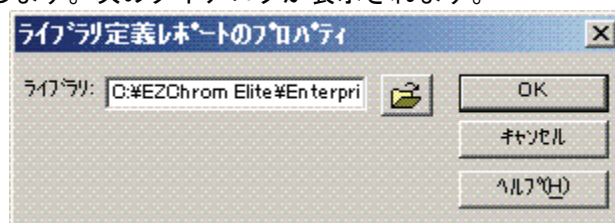
標準的なスペクトルグラフのグラフプロパティダイアログが表示されます。

ライブラリ定義レポート

カスタムレポートに、ライブラリ定義レポートが作成または挿入されます。

1.  [カスタムレポートの編集]をクリックして、カスタムレポートを開きます。
2. カスタムレポートで右クリックし、[レポートの挿入]/[ライブラリ定義レポート]を選択します。ライブラリ定義レポートのテンプレートは、カスタムレポートのカーソルの位置に挿入されます。

このレポートのパラメータを指定するには、レポートテーブル上で右クリックし、[プロパティ]を選択します。次のダイアログが表示されます。



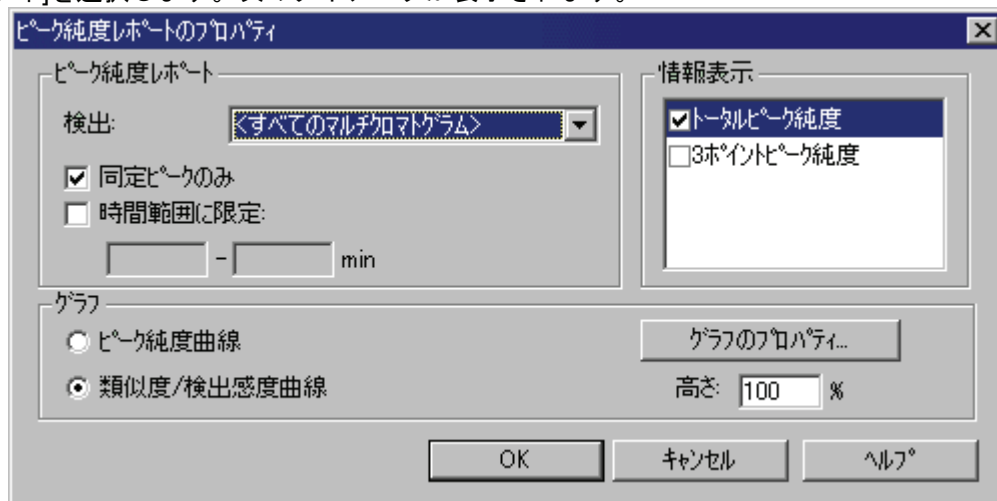
レポートに含みたいライブラリを入力または選択し、OK をクリックします。

ピーク純度レポート

カスタムレポートに、ピーク純度レポートが作成または挿入されます。

1. [ カスタムレポートの編集] をクリックして、カスタムレポートを開きます。
2. カスタムレポートで右クリックし、[レポートの挿入]/[ピーク純度レポート] を選択します。純度レポートのテンプレートは、カスタムレポートのカーソルの位置に挿入されます。

このレポートのパラメータを指定するには、レポートテーブル上で右クリックし、[プロパティ] を選択します。次のダイアログが表示されます。



検出

ピークを検出するチャンネル(1 つまたは複数)を選択することができます。

同定ピークのみ

同定ピークのみをライブラリ検索の対象とします。

時間範囲に限定

ピーク選択(上記で設定)を時間範囲に限定できます。チェックすると、指定時間範囲内のピークだけを検索します。チェック無しでは、[時間範囲]編集フィールドは無効です。

グラフ

表示させたいグラフとして、ピーク純度曲線または類似度／検出感度曲線のいずれかをラジオボタンで選択します。

高さ

検索結果グラフの相対的な高さを指定します。「100%」が、標準的なグラフのサイズに対応します。より詳細なプロットを表示させたい場合は、もっと大きな数値を選択することもできます。

グラフのプロパティ...

このボタンを押すと、標準的なグラフで見られるようなグラフプロパティのダイアログが表示されます。

スペクトルレポート

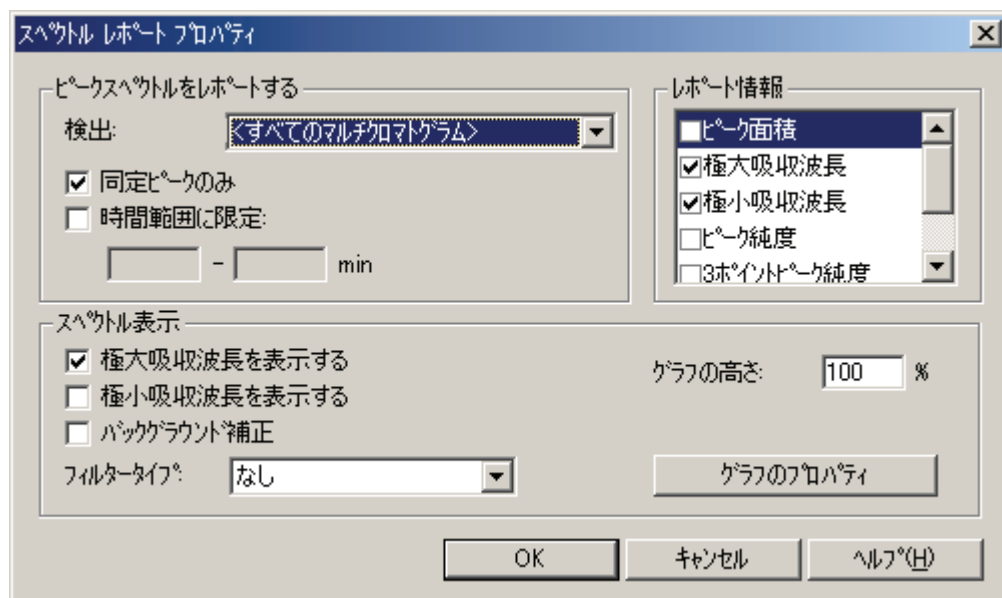
カスタムレポートに、スペクトルレポートが作成または挿入されます。

1. [ カスタムレポートの編集] をクリックして、カスタムレポートを開きます。
2. カスタムレポートで右クリックし、[レポートの挿入]/[スペクトルレポート] を選択します。純度レポートのテンプレートは、カスタムレポートのカーソルの位置に挿入されます。

レポートは、クロマトグラムピークから抽出されたスペクトルテーブルを表示します。

PDA オプションのスペクトルタブの選択に基づいて、ピークスペクトル、アップスロープおよびピークトップとダウンスロープスペクトルの平均値、または複数の普通のスペクトルがレポートに含まれます。

このレポートのパラメータを指定するには、レポートテーブル上で右クリックし、[プロパティ] を選択します。次のダイアログが表示されます



ピークスペクトルをレポートする

検出

ピークを検出するチャンネル(1 つまたは複数)を選択することができます。

同定ピークのみ

同定ピークのみをライブラリ検索の対象とします。

時間範囲に限定

ピーク選択(上記で行った)をある時間範囲に限定することができます。ここにチェックすると、指定の時間範囲に入るピークのみが検索されます。このボックスにチェックしない場合には、[時間範囲]編集フィールドは無効となります。

時間範囲

ピーク選択(上記で行った)をある時間範囲に限定することができます。[時間範囲に限定]ボックスにチェックしない場合は、このフィールドでの設定は無効となります。

レポート情報

これらのいずれかをチェックすると、表示されている数値が計算され、グラフの右に印刷/表示されます。重要でないパラメータはチェックしないようにすると、解析がスピードアップされます。

ピーク面積

これにチェックすると、ピーク面積がスペクトルグラフの右に印刷されることが表示されます。

極大吸収波長

これにチェックすると、極大吸収波長の 3 点がスペクトルグラフの右に印刷されることが表示されます。

極小吸収波長

これにチェックすると、極小吸収波長の 3 点がスペクトルグラフの右に印刷されることが表示されます。

ピーク純度

これにチェックすると、ピーク純度がスペクトルグラフの右に印刷されることが表示されます。

3 ポイントピーク純度

これにチェックすると、3 ポイントピーク純度がスペクトルグラフの右に印刷されることが表示されます。

類似度

これにチェックすると、ピークトップスペクトルとリファレンススペクトルとの類似度がスペクトルグラフの右に印刷されることが表示されます。この数値を使

用するためには、リファレンスペクトルがピークテーブルに設定されている必要があります。詳細については、「PDA 解析と計算」もご参照ください。

スペクトル表示

このグループから選択されたものにより、スペクトルグラフの内容とラベルが定義されます。

極大吸収波長を表示する

このボックスをチェックすると、ラムダ最大吸光度の 3 大値により、各スペクトルグラフが注釈されます。

極小吸収波長を表示する

このボックスをチェックすると、ラムダ最小吸光度の 3 大値により、各スペクトルグラフが注釈されます。

バックグラウンド補正

これにチェックすると、各ピークトップスペクトルが、解析で使用される前に、クロマトグラフのベースラインを使用して、バックグラウンド補正が行われます。使用する公式等の詳細については、「PDA 解析および計算」の項を参照してください。

フィルタータイプ

レポート出力のためのスペクトルのフィルタータイプを選択します。オプションとしては、なし、スムージング、一次微分、二次微分があります。これらのスムージング用アルゴリズムのうち 1 つを選択すると、スペクトルからノイズを除去することができます。各フィルターで使用する公式等の詳細については、「PDA 解析および計算」の項を参照してください。

グラフの高さ

検索結果グラフの相対的な高さを指定します。「100%」が、標準的なグラフのサイズに対応します。より詳細なプロットを表示させたい場合は、もっと大きな数値を選択することもできます。

グラフのプロパティ

このボタンを押すと、標準的なグラフで見られるようなグラフプロパティのダイアログが表示されます。

10. ピークテーブル

PDA オプションを使用した場合、DAD(ダイオードアレイ検出器)からのピークを解析するための条件をピークテーブルに追加することができます。

同定方法

ピーク同定方法を選択します。[保持時間]を選択した場合は、保持時間のみがピーク同定方法として使用されます。[保持時間およびスペクトル確認]を選択した場合は、保持時間およびそのピークスペクトルの指定されたリファレンススペクトルのスペクトルとの類似度によってピーク同定されます。

スペクトル

類似度をピーク同定方法として使用したい場合は、このフィールド右の矢印をクリックして、比較用として保存されているリファレンススペクトルを指定します。ピーク同定時、このリファレンススペクトルがピークトップスペクトルと比較され、類似度が計算されます。この計算された類似度が、ピークテーブルの類似度の列に指定されている数値に達していれば、ピークは同定されたものとみなされます。

類似度がピーク同定として指定されていない場合は、このフィールドでの設定は無視されます。

類似度

類似度がピーク同定方法として指定された場合は、このフィールドで、ピークが同定するために必要な最低の類似度値を入力します。ピーク同定時に、リファレンススペクトル(前項参照)がピークトップスペクトルと比較され、類似度が計算されます。この計算された類似度が、このフィールドに指定された数値に達していれば、ピークは同定されたものとみなされます。

類似度がピーク同定として指定されていない場合は、このフィールドでの設定は無視されます。

解析チャンネル

ダイオードアレイ検出器を使用した場合、その波長チャンネルを使用して、ピークの解析を行うか指定します。[機器設定]/[DAD]で選択します。

11. PDA 解析と計算

本項では、PDA データに関連する様々な計算方法と、そのデータ解析方法について述べます。

全般

精度を維持するため、すべての計算は、倍精度浮動小数点数を使用して行われます。

[Analysis spectra](#)
[Background correction](#)
[Calculating total purity](#)
[Chromatograms extracted from the 3D data](#)
[Lambda max/min calculations](#)
[Library search calculations](#)
[Multi-chromatogram channels](#)
[Peak purity calculations](#)
[Pre-filters](#)
[Ratio chromatogram calculation](#)
[Similarity calculations](#)
[Spectra extracted from the 3D data](#)
[Spectrum derivatives](#)
[Spectrum interpolation](#)
[Spectrum operations](#)
[Spectrum smoothing](#)
[Three-point purity calculations](#)
[Upslope and downslope spectra](#)
[Working chromatogram](#)
[Working spectrum](#)

等高線ビューから抽出されたクロマトグラム

次の 2 つのタイプのクロマトグラムを、3D データから抽出することができます。

- マルチクロマトグラムチャンネル
[PDA オプション]の[マルチクロマトグラム]タブで定義される 1 つまたはそれ以上のクロマトグラム。
- ワーキングクロマトグラム
ミックスビューディスプレイで等高線表示から抽出された単一波長のクロマトグラム。(このクロマトグラムは、クロマトグラムビューに表示されます。)

ミックスビューまたは 3D とミックスビューの等高線表示からクロマトグラムビュー(クロマトグラムの抽出)を作成します。

1. 等高線表示、クロマトグラムおよびスペクトルを表示するには、[表示]/[PDA ビュー]/[ミックスビュー]を選択します。
2. カーソルを等高線表示の左側の波長軸にある三角形のハンドルに移動させ、左マウスボタンを押します。
3. カーソルを上下させて希望の波長までドラッグし、マウスボタンを離します。
4. 指定された波長のクロマトグラムが、クロマトグラムビュー内に表示されます。

マルチクロマトグラムチャンネル

マルチクロマトグラムチャンネルには、以下のものが適用されます。

- [チャンネル選択]ドロップダウンリストで、各マルチクロマトグラムチャンネルには、そのチャンネルの波長およびバンド幅が含まれた固有の識別子が付きます。
- 各マルチクロマトグラムチャンネルは、これに関連する個々のインテグレーションイベントテーブル、インテグレーションテーブル、エクスポートテーブル、およびカラム性能テーブルを備えています。
- すべてのマルチクロマトグラムチャンネルは、共通のピークおよびグループテーブルを使用します。このピークおよびグループテーブル内であれば、どのチャンネルでも、定量用情報のための解析チャンネルとして選択することができます。
- ある解析が行われる時は、すべてのマルチクロマトグラムチャンネルの解析が自動的に行われます。
- 各マルチクロマトグラムチャンネルは、波長範囲の各波長でモニターされる吸光度の平均値です。この波長範囲は、選択した波長 $\pm$ バンド幅の 1/2 に等しくなります。

ワーキングクロマトグラム

ワーキングクロマトグラムには、以下のものが適用されます。

- [チャンネル選択]ドロップダウンリストで、そのチャンネルをワーキングクロマトグラムに適用するものとして識別ための入力値を追加します。
- このチャンネルは、これに関連する個々のインテグレーションイベントテーブル、マニュアルインテグレーションテーブル、エクスポートテーブル、およびカラム性能テーブルを備えています。
- ある解析が行われる時は、ワーキングクロマトグラムの解析が自動的に行われます。
- ワーキングクロマトグラムは、波長範囲の各波長でモニターされる吸光度の平均値です。この波長範囲は、選択した波長 $\pm$ そのバンド幅の 1/2 に等しくなります。
- ワーキングクロマトグラムは、カスタムレポートのトレースとしては利用できません。

3D データから抽出されたスペクトル

次の 2 つのタイプのスペクトルを、3D データから抽出することができます。

- 解析スペクトル

解析時に 3D データから自動的に抽出され、ピーク同定、類似度および/またはライブラリ検索に使用されるスペクトル。

- ワーキングスペクトル
ミックスビューディスプレイで等高線表示から抽出されたスペクトル。(このクロマトグラムは、スペクトルビューに表示されます)。

ミックスビューまたは 3D とミックスビューの等高線表示からスペクトルビュー(クロマトグラムの抽出)を作成します。

1. 等高線表示、クロマトグラムおよびスペクトルを表示するには、[表示]/[PDA ビュー]/[ミックスビュー]を選択します。
2. カーソルを等高線表示の左側の波長軸にある三角形のハンドルに移動させ、左マウスボタンを押します。
3. カーソルを上下させて希望のピークまでドラッグし、マウスボタンを離します。
4. 指定された波長のクロマトグラムが、スペクトルビュー内に表示されます。

解析スペクトル

解析スペクトルには、次のものが適用されます。

解析される前に、3D データから抽出されるすべての解析スペクトルは、[PDA オプション]の[スペクトル]タブ上での設定に従いフィルターされます。

ワーキングスペクトル

ワーキングスペクトルクロマトグラムには、次のものが適用されます。

- 3D データから抽出されたワーキングスペクトルは、PDA オプションの[スペクトル]タブでの設定にしたがってフィルターされません。
- ワーキングスペクトルは、カスタムレポートのトレースとしては利用できません。

バックグラウンド補正

バックグラウンド補正は、[PDA オプション]の[スペクトル]タブで設定、[PDA オプション]の[ピーク純度]タブでの設定、および[ピーク純度]表示で設定することにより実行できます。

バックグラウンドの除算は常に、スペクトルで行われる最初の演算です。別の演算([PDA オプション]の[スペクトル]タブで指定された演算を含めて)がすでに実行され

たスペクトルでバックグラウンド補正されると、メッセージボックスが表示され、バックグラウンド補正の要求は無視されます。

バックグラウンドの除算は、1つのスペクトルに対して1回のみ行うことができます。あるスペクトルで、演算([PDA オプション]の[スペクトル]タブで指定された演算を含めて)が既に行われた後で、2回目のバックグラウンド補正が試みられると、メッセージボックスが表示され、バックグラウンド補正の要求は無視されます。

バックグラウンド補正は、次のように行われます。

1. そのピークのベースライン開始から終了までの時間のスペクトルを、3D データから抽出します。使用するピークの決定には、マックスプロットを使用します。
2. そのピーク中の各スペクトルについて、ベースライン開始から終了までのスペクトルを直線補間することにより、対応するバックグラウンドスペクトルを作成します。
3. 該当するスペクトルから、バックグラウンドスペクトルを差し引きます。

注: バックグラウンド補正により、より正しい純度計算が行えます。しかし、データの再解析には長い時間がかかることがあります。

スペクトル補間

スペクトルの補間は、[PDA オプション]の[スペクトル]タブの設定、あるいは[スペクトル]メニュー から[オペレーション]/[スペクトル補間]を選択することにより、行われます。

補間は、1つのスペクトルで1回のみ行うことができます。あるスペクトルで、演算([PDA オペレーション]の[スペクトル]タブで指定された演算を含めて)が既に行われた後で、2回目のバックグラウンド補正が試みられると、メッセージボックスが表示され、バックグラウンド補正の要求は無視されます。

補間されたスペクトルは、スペクトルライブラリに格納することはできません。

この計算は、3次スプライン曲線のフィッティングを使用して、スペクトルデータポイントの 10:1 の補間を行うことにより、行われます。この補間は、スペクトルにいずれかのスペクトルフィルターオプション(一次微分、二次微分、またはスムージング)が適用された後で行われます。

アップスロープスペクトルとダウンスロープスペクトル

あるピークのアップスロープスペクトルとダウンスロープスペクトルは、そのピークが含まれるクロマトグラムの一部について、二次微分を計算することにより、識別されます。二次微分プロットがゼロと交わる2つの時点が、変曲点として知られています。普通のピーク(すなわち、負でないピーク)では、アップスロープスペクトルは、最初の変曲点により表わされる点でのスペクトルであるのに対し、ダウンスロープスペクトルは、第2の変曲点により表わされる点でのスペクトルとなります。

スペクトルの演算

下表は、どのタイプのスペクトルでどのような演算で行われるかを示したものです。

	生スペクトル (フィルター/演算 なし)	スムージング、 一次微分、二次 微分スペクトル	補間スペクトル
ライブラリ検索	○		
類似度	○		
スペクトルによるピーク同定	○	カレントメソッドにマッチしていないリファレンススペクトルの場合、エラーとなります。	
レポート出力	○		○ どのような処理がされたか表示
ピーク純度	○		×
スペクトルライブラリへの追加	○		×

スペクトルのスムージング

スペクトルのスムージングは、[PDA オプション]の[スペクトル]タブの設定、あるいは[スペクトル]メニューから[オペレーション]/[スムージング]を選択することにより、行われます。

補間は、1つのスペクトルで繰り返し行うことができます。

この計算は、スペクトルデータポイントで 9 ポイントの Savitsky-Golay 法によるスムージングを行うことにより、実行されます。

スペクトルの微分

スペクトルの一次微分および二次微分の計算は、[PDA オプション]の[スペクトル]タブの設定、またはスペクトルビュー上で右クリックしてから、[オペレーション/スムージング]によって得られたスペクトルについて実行されます。

微分は、スペクトル上で繰り返し計算されます。

スペクトルの一次微分された吸光度値は、新しいスペクトルを作成するために、近接した吸光度値との差によって計算されます。スペクトルの二次微分は、一次微分されたスペクトルをさらに一次微分したものと定義されます。

ライブラリ検索による計算

全般

解析時、1 つまたはそれ以上のライブラリ検索を[PDA オプション]の[ライブラリ]タブで定義した場合、自動によるライブラリ検索は、すべての PDA 解析チャンネルにおけるインテグレーションされたピークについて行われます。

注: ライブラリ検索結果の対象がそのメソッドのカスタムレポートの一部でない限り、解析実行時に、自動によるライブラリ検索は行われません。

本項で、待ち行列スペクトルは、検索の対象である未知のスペクトルと定義されます。リファレンススペクトルは、スペクトルライブラリファイルに入っているスペクトルと定義されます。

検索時、待ち行列スペクトルのリファレンススペクトルとの類似度を調べるため、ピークトップスペクトル(待ち行列スペクトル)を、ライブラリに入っている各スペクトル(リファレンススペクトル)と比較します。この類似度は、各待ち行列/リファレンスペアの類似度の計算により、定量されます。類似度は、最もマッチする入力値のヒットリストを作成するために使用されます。完璧なマッチでは、類似度は 1.0000 となります。類似度が 1 未満の場合は、スペクトルのパターンに相違があることを示します。

待ち行列スペクトルとリファレンススペクトルが波長範囲と異なる場合は、この 2 つのスペクトルの波長範囲の共通部分におけるデータが類似度の計算に使用されます。

待ち行列スペクトルとリファレンススペクトルが波長ステップと異なる場合は、類似度計算で使用するリファレンススペクトルとマッチさせるため、より高分解能(ステップ間隔の狭い方)のスペクトルに基づいて計算がされます。

プレフィルター

プレフィルターは、スペクトルの類似度計算を実行する前に検索するリファレンススペクトルを限定するための基準値です。

検索パラメータでは、1つまたはそれ以上のプレフィルターを組み合わせで指定することができます。複数のプレフィルターを指定した場合、すべてのプレフィルター項目を満足したものに対してのみ、類似度計算が行われます。

すべてのプレフィルター基準値を満足していないリファレンススペクトルは、類似度計算やヒットリストの対象から、自動的に除外されます。このようなスペクトルの類似度計算は行われません。

次のようなプレフィルターがサポートされます。

- 保持時間範囲
[保持時間範囲]を指定すると、ライブラリ検索は、保持時間が指定された範囲内に入るライブラリ入力値に限定されます。この範囲外の入力値は、この検索から自動的に除外されます(類似度計算は行われません)。保持時間範囲の数値入力を選択可能です。
- 極大吸収波長
これらの波長を1つまたはそれ以上指定すると、ライブラリ検索は、極大吸収波長が指定されている波長に対して、 $\pm 5\text{nm}$ 以内のライブラリ入力値に限定されます。極大吸収波長にマッチしない入力値は、検索から自動的に除外されます(類似度計算は行われません)。極大吸収波長への数値入力は選択可能です。
- 極大吸収波長
極大吸収波長ある成分名が指定されると、ライブラリ検索は、名前として指定された文字列が含まれたライブラリ入力値に限定されます。文字列にマッチしない入力値は、検索から自動的に除外されます(類似度計算は行われません)。成分名によるフィルターの入力は選択可能です。

レシオクロマトグラムの計算方法

レシオクロマトグラムプロットは、次のように計算されます。

$$\text{Ratio Pt.} = \text{abs}_1 / \sqrt{\text{abs}_1^2 + \text{abs}_2^2}$$

ここで、 abs_1 = この波長でのクロマトグラム 1 の吸光度

abs_2 = この波長でのクロマトグラム 2 の吸光度

クロマトグラム 1 またはクロマトグラム 2 のいずれかのポイントの吸光度が検出感度値を下回る場合、レシオプロットは「0」になります。

類似度計算

類似度計算は、[メソッド]/[PDA オプション]/[ライブラリ]で定義される波長範囲を通る 2 つのスペクトルを比較するものです。

ライブラリ検索は、次のように定められる類似度計算式を使用して行われます。

スペクトルは、各波長での吸光度の集まりとみなされます。

$$(a(\lambda_1), a(\lambda_2), \dots, a(\lambda_n))$$

ここで、 $a(\lambda_i)$ は、 λ_i での吸光度です。

スペクトルは、次のように、各吸光度がそのベクトルの 1 つの次元に対応している、 n 次のベクトルとしても表わされます。

$$S = (a(\lambda_1), a(\lambda_2), \dots, a(\lambda_n))$$

同じ化合物から 2 つのスペクトルが得られた場合、 S_1 と S_2 における対応する成分間のレシオは一定となります。そのため、これらのベクトルは同じ方向となります。この場合、2 つのベクトル間の角度は「0」となります。原則として、2 つのベクトル間の角度が大きくなるほど、それらのもつ類似度は悪くなります。この関係は、次のように計算されます。

$$SI = \cos(\theta)$$

ここで

$$\theta = 2 \text{ つのベクトル間の角度}$$

SI の数値が 1 に近いほど、2 つのスペクトルの類似度は高いと判断されます。そのため、2 つのスペクトルの SI 値が 1 に近くなると、同一成分であると判断されます。

極大吸収波長/極小吸収波長の計算

極大吸収波長(極小吸収波長)は、あるスペクトルの吸光度値の極大(極小)と定義されます。そのためには、計算を行う波長範囲を定義する必要があります。

あるスペクトルについて、n という極大吸収波長(極小吸収波長)を計算するためには、EZChrom *Elite* では、最大(最初)の吸光度値を使用して n 極大値(極小値)を検出します。

極大吸収波長/極小吸収波長の計算範囲は、グラフの[軸の設定]メニュー項目で設定したグラフの X 軸(波長)の設定値に基づきます。

ピーク純度の計算

あるクロマトグラフピークの純度を調べるために、3D データからのスペクトルがピーク純度計算に使用されます。そのスペクトルの均一性の度合いを計算するため、そのピークからのスペクトルがピークトップスペクトルと比較されます。

ピーク純度は、すべてのピーク純度の度合いを示す数値として報告することができます。また、あるピークに対して、保持時間に対するピーク純度をプロットしたグラフとして表すこともできます。

トータル純度の計算

トータル純度は以下の方法で算出されます。

1. 閾値以上の吸光度をもつスペクトル数が計算されます。
2. 上記スペクトルとピーク頂点のスペクトルの類似度 (S I) が計算されます。
3. 純度閾値以上の類似度を持つスペクトルをピーク頂点スペクトルとの類似スペクトルとします。
4. 類似と判定されたスペクトル数が計算されます。
5. 類似と判断されたスペクトルの高さの和を全スペクトルの高さの和で除算し数値を導きます。
6. この数が純度インデックス (P I) としてレポートされます。
7. 純度インデックスの範囲は 0.000000 から 1.000000 です。

3 ポイントピーク純度

3 ポイントピーク純度は、あるピークトップでのスペクトル(ポイント 1)を上り勾配(アップスロープ)でのスペクトル(ポイント 2(up))および下り勾配(ダウンスロープ)でのスペクトル(ポイント 3(Down))と比較することにより、計算されます。

アップスロープスペクトルは、そのピークのピーク幅の開始点から 20%の時間のスペクトルと定義されます。

ダウンスロープスペクトルは、そのピークのピーク幅の終了点から 20%の時間にあるスペクトルと定義されます。

$$\begin{aligned}\text{Time}_{\text{up}} &= \text{Time}_{\text{start}} + (\text{Time}_{\text{apex}} - \text{Time}_{\text{start}}) * 1/5 \\ \text{Time}_{\text{down}} &= \text{Time}_{\text{apex}} + (\text{Time}_{\text{end}} - \text{Time}_{\text{apex}}) * 4/5\end{aligned}$$

類似度は、ピークトップと比較して、アップスロープスペクトルとダウンスロープスペクトルについて作成されます。純粋なピークは、どのポイントで取得したスペクトルであっても同一に見えるため、これらの類似度は高くなります。類似度が 1.0000 に近くなるほど、ピークの類似度またはピーク純度は高くなると判断されます。

ピーク純度値が非常に低い(0.0000-0.8900)ピークは純粋でないことを決定するのは容易ですが、純度値が 0.9000 から 0.9500 のピークが実際に他の成分と重なっているかどうか決定するのはやや困難です。これを決定するためにはユーザーの判断が必要であり、ユーザーが判断するためには、スペクトルを重ね書きしたり、一次微分と二次微分の比較のようなピーク純度を決定するための別の方法が必要になることもあります。

3

3D.....	9
3D データから抽出されるスペクトル	61
3D とミックスビュー	21
3D プロット回転のオプション	15
3D プロパティ 軸の設定	13
3D プロパティ 全般	10
3 ポイントピーク純度	68

P

PDA ビュー	8
PDA ユーティリティ	32

あ

アップスロープスペクトルとダウンスロー プスペクトル	64
-------------------------------------	----

え

エクスポート	26
--------------	----

か

解析スペクトル	62
---------------	----

き

極大吸収波長/極小吸収波長の計算	67
------------------------	----

く

クロマトグラムビュー	22
------------------	----

す

スペクトル重ね表示	26
スペクトル情報	49
スペクトルの演算	64
スペクトルのスムージング	64
スペクトルの微分	65
スペクトルのプロパティ	25
スペクトルバックグラウンド補正	25
スペクトルビュー	24
スペクトル補間	26, 63
スペクトルライブラリの定義	45
スペクトル類似度テーブル	33

スペクトル類似度テーブルのプロパティ	34
--------------------------	----

と

等高線表示	16
等高線表示のセットアップ	18
等高線表示のプロパティ	17
トータル純度の計算	68

は

バックグラウンド補正	62
------------------	----

ひ

ピーク純度の計算	68
ピーク純度プロット	27
ピークテーブル	58

ふ

プレフィルター	66
---------------	----

ま

マックスプロット	22
マルチクロマトグラムチャンネル	61
マルチクロマトグラムビュー	23, 28, 29

み

ミックスビュー	20
ミックスビューのアクションボタン	21
ミックスビューのオプションボタン	21

ら

ライブラリ検索による計算	65
ライブラリ用のスペクトルの収集方法 ..	50

る

類似度計算	67
-------------	----

れ

レシオクロマトグラムの計算方法	66
レシオプロットビュー	31

わ

ワーキングクロマトグラム	61
ワーキングスペクトル	62

