

Agilent EZChrom *Elite*





Notices

Copyright © Scientific Software, Inc 1997-2005 © Agilent Technologies, 2006-2008.

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

January, 2008

Document Revision 3.3

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 merchant-ability 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	このガイドの使い方8
	はじめに
	このガイドの対象者8
	表記規則8
2	基本操作9
3	機器ウィザード9
	解析専用機器ウィザード10
4	クライアント/サーバーの操作12
5	ナビゲーションウィンドウ12
6	機器ウィンドウのナビゲーションウィンドウ14
7	Agilent Instrument Controllersによるデータ収集15
	実行中の測定へのユーザーのアクセス15
	サーバー機器を閉じる16
8	プログラム構造とデータ構造17
	メソッドファイル17
	データファイル構造17
9	GLPと拡張セキュリティ19
	拡張セキュリティを有効にする19
	拡張セキュリティ19

メソッド履歴の表示	19
10 ファイルのオープン/クローズ	22
データファイルを開く	22
データファイルを開くためのオプション	23
メソッドファイルあるいはシーケンスファイルを開く	25
データファイルを保存する	26
11 CDFファイルの読み込み	28
12 機器ウィンドウ	29
機器を起動する	29
機器ログイン	29
機器アクティビティログを表示する	31
機器ウィンドウ	32
表示オプションの変更	33
表示オプション - 全般	33
表示オプション - ファイル	34
13 クロマトグラムウィンドウ	36
クロマトグラムウィンドウについて	36
データを並べて表示または重ねて表示する	37
ズーム(拡大)	37
クロマトグラムのスクロール	38
トレースの追加 (複数のクロマトグラムの表示)	38
複数のトレースの追加	41
クロマトグラムのピーク情報	43

クロマトグラムのデザイン	45
軸のプロパティ	49
データグラフのプロパティ	51
トレースの設定	52
トレースの削除	55
X軸およびY軸の範囲の設定	56
14 クロマトグラムのオペレーション	59
クロマトグラムのオペレーション	59
トレースの移動	61
トレースのオフセット表示	61
アライン	63
ストレッチ	64
ノーマライズ	65
数学的な演算	66
平滑化(スムージング)	67
微分計算	67
たし算	69
ひき算	69
かけ算	70
わり算	70
ユーティリティ	71
ユーティリティ	71
トレースの印刷	72
クリップボードヘコピー	72

ユーザーガイド

	トレースの保存72
15	グラフィカルプログラミング73
	グラフィカルプログラミング73
16	データ収集およびコントロール77
	データ収集およびコントロール77
	シングルランによるデータ収集77
	シーケンスランによるデータ収集81
	実行中の測定を終わらせる85
	分析時間の延長86
17	GPIBの停止
18	チュートリアル
	チュートリアルの概要89
19	チュートリアル - データ収集と解析91
	機器およびメソッドウィザード91
	データ収集用メソッドの作成92
	データ収集のための設定93
	メソッドを保存する94
	予備試料を測定する95
	クロマトグラムを見ながらインテグレーションパラメ 一タを設定する96
	キャリブレーションの設定
	保存されたデータファイルを使ったキャリブレーショ ン103

サンプルシーケンスの作成と実行	, 104
-----------------	------------------

シーケンスファイルを実行する......109

20 チュートリアルファイルを使用した操作......111

多点検量線を表示させる1	11
ピークテーブルを調べる1	12
カスタムレポートを調べる1	13
条件により、インテグレーションパラメータを変更する.1	15

1 このガイドの使い方

はじめに

このガイドは、Agilent EZChrom *Elite* データシステムの基本的な操作方法とチュートリアルを記載しています。

このガイドの対象者

このガイドは、データの収集や結果の解析を初めて行うユーザ ーを対象としています。

表記規則

本書で使用される表記規則を下表に示します。

表記	説明
太字	データベース名、テーブル名、カラム 名、メニュー、コマンド、ダイアログボ ックスオプション、およびテキストなど 入力が必要なもの
斜体	ユーザーが入力すべき情報が別にある場合、例えば、ユーザーが ServerName を入力する場合、イタリックの表記部分の代わりに、実際の名称を入力してください。
等幅フォント	プログラミングコードのサンプルとテキ ストの表示
大文字	キーボードの入力キー。プラス記号(+)と の組合せがある場合は、その二つ以上の キーを一緒に押してください。例えば、 SHIFT+TAB を押してください。

2 基本操作

この章では EZChrom *Elite* 基本操作(ファイル構造、アプリケーション及びクロマトグラムの特徴)について記載します。

3機器ウィザード

メインウィンドウから機器アイコンをダブルクリックして、機器アプリケーションを起動すると、機器ウィザードが表示されます。このウィザードは、機器ウィンドウの基本機能を案内するためのものです。

機器ウィザート゛	- 汎用機器	×
	メンッドの作成/変更	<u>ок</u> ^и/7°(<u>H</u>)
	シーケンスの作成	
	1つのサンプルを測定	
Ē	サンプルシーケンスに従って測定	
▶ 機器起動	時に表示	

メソッドの作成/変更

このボタンは、**メソッドウィザード**を起動します。こ のウィザードを使うと、メソッドを作成したり、変更 したりすることができます。

シーケンスの作成

このボタンは、**シーケンスウィザード**を起動します。 このウィザードを使うと、データ収集シーケンスやデ ータ再処理シーケンスを作成することができます。

1つのサンプルを測定

このボタンは、保存されたメソッドを使って1つのサ ンプル(試料)を測定するためのダイアログを開きます。

サンプルシーケンスに従って測定

このボタンは、保存されたシーケンスを使ってデータ 収集を開始するための[**シーケンスラン**]ダイアログを 開きます。

機器起動時に表示

このボックスを選択すると、この機器を起動するたび に機器ウィザードが表示されます。

解析専用機器ウィザード

機器を解析専用(オフライン)で使用している場合、機器ウィザ ードには、下図のような画面が表示され、メソッドの作成/変 更、シーケンスの作成および保存シーケンスの処理ができます。



4 クライアント/サーバーの操作

クライアント/サーバーモードで使用する場合、クライアント ワークステーションと Agilent Instrument Controller をネット ワークに接続します。すべての機器は、Agilent Instrument Controller (AICs) に物理的に接続され、Agilent Instrument Controller では実際のデータ収集と機器の制御が行われます。 クライアント/サーバー ソフトウェアを実行するクライアント ワークステーションは、システムのユーザーがメソッドおよび シーケンスを開発したり、データ収集やシーケンス処理を Agilent Instrument Controller に指示する操作を含んだすべての 操作を実行するマシンです。

5 ナビゲーションウィンドウ

デフォルト設定では、ナビゲーションウィンドウは機器ウィン ドウの左側に表示されます。ナビゲーションウィンドウでは、 機器ウィンドウの主要な機能へ素早く切り換えることができま す。またナビゲーションウィンドウの下部にあるファンクショ ンバーをクリックしても、各機能へアクセスすることができま す。



ユーザーガイド

ナビゲーションウィンドウを表示する

- [表示]/[ナビゲーションウィンドウ]コマンドをクリック します。
- ナビゲーションウィンドウを閉じる
 - 1. ナビゲーションウィンドウの上部にある[X]ボタンをク リックします。

ナビゲーションウィンドウを機器ウィンドウの左側に常駐させ、 作業スペースを確保することもできます。ナビゲーションウィ ンドウを常駐させると、マウスを左端へ移動させるだけでナビ ゲーションウィンドウが再表示され、マウスを作業スペースに 戻すとナビゲーションウィンドウが隠れるようになります。

ナビゲーションペインを常駐させる

 ナビゲーションウィンドウの上部にあるピンのボタン をクリックします。

6 機器ウィンドウのナビゲーションウィンド ウ

機器ウィンドウのナビゲーションウィンドウでは、クリックす るだけでメソッド、シーケンス、レポート、コントロール、オ プション表示へアクセスできます。また、ナビゲーションウィ ンドウの下部にあるナビゲーションボタンは、機器ウィンドウ のメニューバーで使用できるものと同じコマンド階層を提供し ます。

ナビゲーションボタン	表示
メソッド	メソッドコマンド、マニュアルインテグ レーション、ウィンドウコマンド
シーケンス	編集、プロパティ
レポート	レポート、レポートテンプレートのプロ パティ
コントロール	機器条件、ランキュー、機器ステータス

ユーザーガイド

ナビゲーションボタン	表示
表示	データ表示オプション、マニュアルイン テグレーション、ベースラインチェック ステータス

7 Agilent Instrument Controllers によるデー タ収集

クライアントワークステーションから測定(シングルラン)また はシーケンスランを実行すると、機器が接続された Agilent Instrument Controllers(AIC)に対して、測定またはシーケンス ランの処理を依頼します。測定またはシーケンスランの処理を AIC に依頼すると、データ収集および機器制御に対する制御は AIC が担います。ランキューアイテムが AIC に送られると、す べてのメソッドおよびシーケンスは、AIC にコピーされます。 もしネットワークがダウンした場合でも、EZ サーバーは自分 のハードディスクに保存しているファイルを使用して処理を継 続します。

実行中の測定へのユーザーのアクセス

測定またはシーケンスランを設定したユーザーは、[分析中止]、 [分析時間の延長]または[シーケンスの中止]機能にアクセスす ることができます。測定またはシーケンスランを依頼したユー ザー以外の場合は、機器のアクセス権を持っていれば、測定を 見ることはできます。しかし、別のユーザーが開始した測定ま たはシーケンスを停止することはできません。システム管理者 または機器管理者の権利を持つユーザーは、シングルランおよ びシーケンスラン機能に制限なくアクセスすることができます。

クライアントワークステーションから、一旦 EZ サーバーに測 定またはシーケンスランを依頼すると、メソッドを修正するこ とができます。このメソッド変更後に、このメソッドを使用す るシーケンスランに変更を反映させるには、[ファイル]/[メソ ッド]/[保存]でファイルを保存する必要があります。2台以上の クライアントでメソッドが変更・保存された場合、最後にクラ イアントで変更された内容が保存され、ほかのクライアントで 行った変更はすべて失われます。あるメソッドを使用して次の シーケンスランを開始する前にそのメソッドが保存されない場 合、クライアントでの変更は次のシーケンスランが開始された ときに失われます。

シーケンスを AIC に依頼したユーザーは、クライアントワー クステーションから依頼したシーケンスに測定を追加または削 除することができます(そのユーザーに適切な権利が与えられ ている場合)。シーケンスの変更を有効にするには、[ファイ ル]/[シーケンス]/[保存]により、シーケンスを保存する必要が あります。シーケンスが保存されると、他のすべてのクライア ントは変更の通知を受け、シーケンスの次の測定が、変更され たシーケンスから実行されます。

サーバー機器を閉じる

Agilent Instrument Controller で機器アプリケーションを起動す ると、すべての測定が終わった後でも開いたままになります。 サーバー機器を閉じなければならない場合(例えば、機器の構 成をやり直す場合)、機器管理権を持つユーザーは、クライア ント/サーバーメインウィンドウで機器アイコンを右クリック し、[サーバーを閉じる]コマンドを選択することにより、サー バー機器を閉じることができます。閉じることを確認するメッ セージが表示されます。

[はい]を選択すると、測定を終了し、全クライアントを切り離したあと、サーバー機器を閉じます。

8 プログラム構造とデータ構造

メソッドファイル

データファイルの取り込みまたは再解析を行うときはいつでも、 メソッドが使用されます。メソッドには、データ収集条件(分析 時間、サンプリング間隔など)、インテグレーション、キャリブ レーション、ピーク情報、レポート、さらには、データエクス ポートやユーザプログラムなどのオプション機能を実行するた めの命令が含まれます。各メソッドは、1つのクロマトグラフか ら複数の独立したチャンネルのデータを取り込むことができま す。各チャンネルにはそれぞれ独立したパラメータ(サンプリン グ間隔、分析時間、インテグレーションイベント、外部イベン ト、キャリブレーションおよびレポート作成を含む)を設定でき ます。

メソッドファイルは独立したファイルですが、メソッドに含ま れる情報は、データ収集の際に、生データファイルに保存され ます。これにより、たとえメソッドファイルが修正されても、 元のメソッドを再現することができます。

データファイル構造

データ収集を行ったり、あるいは[名前を付けて保存]コマンド を使ってデータファイルを保存したりすると、データファイル が指定のドライブに作成されます。このファイルには、次の情 報が含まれます。

ファイル情報ヘッダー。取り込み日時などの情報が含まれます。

データを収集して処理するために使われるメソッドパラメー タ(データ収集時にのみ保存されるオリジナルメソッド)。1台 のクロマトグラフで同時に複数のチャンネルのデータを取り込 めるため、メソッド部には2つ以上のチャンネルに対する全パ ラメータが含まれる場合があります。

保存された測定の生データポイント。1つのデータファイルに 複数のクロマトグラムがある場合、それぞれのクロマトグラム は、その測定に対して取り込まれた検出器チャンネルを表しま す。生データポイントはバイナリー形式で保存されます。 **解析結果。**オリジナルの解析結果はファイルに保存され、あ とでファイルを開くときに呼び出すことができます。さらに、 最新の解析結果およびメソッドもデータファイルに保存され、 分析を行うたびに更新されます。結果のサンプル ID もマニュ アルインテグレーションテーブルも同様に保存されます。

ファイルメモ。ファイルのメモを入力すると、このテキスト情報はファイルといっしょに保存され、[データ]/[プロパティ]または[ファイル]/[データ]/[開く]のダイアログで確認することができます。

機器の構成情報。データファイル取り込みに使用した機器の構 成条件が保存されます。

データファイルの履歴。データファイルの履歴は、いつでもデ ータファイルに保存され、データの解析記録をたどることがで きます。データファイルは、データ収集開始時に指定するファ イル名と拡張子で保存されます。ファイル名の長さは、パスを 含めて 255 文字以内です。

データファイルのチェックサム。[拡張セキュリティ]が有効な 場合、データファイルを閉じるときはいつでも、全部のファイ ルについてサム値が計算されます。ファイルを開くときはいつ でも、最初にそのサム値が確認されます。このサム値のチェッ クが不合格の場合、ファイルは開かれず、機器アクティビティ ログにエラーメッセージが表示されます。サム値の確認は、エ ンタープライズ全体に働きます。検査機能は、メインメニュー の[**エンタープライズ**]ダイアログの[**拡張セキュリティ**]で有効 にすることができます。

9 GLPと拡張セキュリティ

拡張セキュリティを有効にする

GLP(Good Laboratory Practices)を堅守するため、このソフト ウェアではデータファイルの上書きをしません。現在のデー タファイルへ上書きしようとした場合、システムはエラーメッ セージまたは誤ったオペレーションであることを通知します。 何らかの理由で GLP を無視してデータファイルの上書きを行 う場合、そのファイルは[public]という文字を含むパスに存在 しなければなりません。例えば、データファイルが [C:\Public\Data]という名前のディレクトリに保存されている場 合、このディレクトリに保存されたこのソフトウェアのファ イルは上書きできます。

拡張セキュリティ

拡張セキュリティを有効にするには、

- メインメニューの[ツール]/[オプション]コマンドをクリ ックし、[全般]タブをクリックします。
- 2. [拡張セキュリティ]ボックスがオフの場合はオンにします。

拡張セキュリティは、デフォルト設定では有効です。 このオ プションが選択されると、データファイルを閉じるときはいつ でも、サム値(検査値)が計算されます。 その後、ファイルを開 くときはいつでも、そのサム値が計算されます。 このサム値 のチェックが不合格の場合(計算されたサム値が前に計算され たサム値と一致しない)、ファイルは開かれず、機器アクティ ビティログにエラーメッセージが表示されます。 サム値の確 認はエンタープライズ全体に働きます。

メソッド履歴の表示

各メソッドファイルに対して、履歴を有効にすることができま す。履歴を有効にする場合、メソッドに対する変更がファイル に記録され、これを削除したり上書きしたりすることができま せん。あるメソッドについて履歴に記録された変更を見るには、 [ファイル]メニューから、[メソッド/履歴]コマンドを 使って現在のメソッドの履歴リストを表示させます。 履歴オプションが現在のメソッドについて有効の場合、 このボックスには、そのメソッドに対して記録された 変更情報が表示されます。

System 2001/12/07 午後 2:24:00 FLORA350DV6 新しいメソットが作成されました。	

ユーザー:変更が行われたときにシステムにログインしていたユーザー名
 日時:変更がシステムに記録された日時
 変更場所:メソッドの変更場所(例えば、ピークテーブル)
 内容:行われた変更内容

理由:変更が行われた場合は、その変更の理由

各項目の詳細を表示するには、その項目をクリックしていイライトし、マウスの右ボタンをクリックします。
 [詳細表示]コマンドをクリックすると、ハイライトされた項目の詳細内容が表示されます。

■ メンッドの履歴				
ユーザー	日時	変更場所	内容	理由
System 2	2001/12/07 午後 2:24:00	FLORA350DV6	<u>新しいでからが作成さ</u> れました。 細表示(<u>D</u>)	
		्र ग्र	べてEP刷(P) 観天範囲のEP刷(S)	
•				

10 ファイルのオープン/クローズ

データファイルを開く

EZChrom Elite クライアント/サーバーを使用してファイルを開 く場合は常に、ファイルを開くだけでなく、ファイル内容を閲 覧したり、ファイルを検索したりするためのパラメータを指定 することが可能なダイアログボックスが表示されます。ツール バーの[開く]ボタンをクリックすると、データを開くため のメニューが表示されます。

開きたいファイルの種類を選択すると、ハードディスク上から ファイルを選択することができるダイアログが表示されます。

[データファイルを開く]ダイアログでは、ファイルを検索した り、開くためのほとんどのオプションが含まれています。リス トには、ファイルの種類で選択したファイルが表示されます。 ほとんどの Windows アプリケーションと同様に、これらをリ ストとして見ることができ、ウィンドウの右上にある[詳細]ボ タンをクリックして、詳細情報を表示させることもできます。 さらに、[**プレビュー**]ボタンをクリックしてデータファイル中 のクロマトグラムを確認したり、あるいは[メモ]ボタンをクリ ックしてファイルのメモを見たりすることができます。また、 ワイルドカード文字「*」を使って特定の種類のファイルリスト を見ることもできます。アドバンスドファイルセキュリティが 有効なシステムでは、ダイアログの表示と振る舞いは少し違い ます。ユーザーは、エンタープライズ共通フォルダと現在のプ ロジェクトフォルダに保存するファイルに制限を受けます。ダ イアログのフォルダバーはフォルダ選択を容易にする手助けを します。

デージファイルを開く	? ×
ファイルの場所型: 🚔 Data 🔽 🔶 🖆 🎟 🗏 🛄	
multi calibration level 1.dat m PAH-STD(10u).DAT m PAH-STD[2nd].DAT m multi calibration level 2.dat m PAH-STD(1u).DAT m PAH-STD[3rd].DAT m multi calibration level 3.dat m PAH-STD(20u).DAT m multi calibration level 4.dat m PAH-STD(2u).DAT m multi calibration level 5.dat m PAH-STD[5t].DAT m multi calibration level 6.dat m PAH-STD[1st].DAT	開K(Q) キャンセル ヘルブ(<u>H</u>)
	F
ファイル名(N): ファイルの種類(D): すべてのファイル(*.*) マ	
次の条件で検索します: サソフル ID(5):	★ 検索開始(E)
「分析者(A): ■ 更新日(M): ■すべて - わちなン	新規検索(₩)
パット*(四): 結果から マ	
86果(位): 最新	
検索結果	

データファイルを開くためのオプション

[オプション]ボックスを使うと、データファイルを開くときに 追加情報を設定でき、時間を節約することができます。

メソッド

[現在]を選択すると、データファイルを開いたとき、 現在のメソッドは変更されません。ほかの項目を選択 すると、データファイルを開いたとき、選択したメソ ッドに置き換えられます。[結果から]は、データファ イルの最新の結果を作成するために使用されたメソッ ドに置き換えます。[オリジナル/分析]は、データファ イルを取り込むために使用されたメソッドに置き換え られます。このメソッドは、現在使用中のメソッドに 代わります。

結果

[結果]で項目を選択すると、選択した解析結果ととも にデータファイルを開きます。解析結果とともにデー タファイルを開くと、クロマトグラムが画面に表示さ れたときに、インテグレーションの状態とベースライ ンも自動的に表示されます。[最新]を選択すると、デ ータファイルは、クロマトグラムが最後に解析された ときの結果とともにデータファイルが開かれます。[全 ての解析結果を保存する]オプションが有効([エンター プライズオプション/全般]タブ)をクリックして設定)な 場合、全分析結果のリストをファイルとともに開くこ とができます。

[前処理ファイル付]

このボックスを選択すると、データファイルを開いた とき、データ収集時に使用された前処理ファイル(適用 可能な場合)も一緒に開かれます。

データファイルの検索

目的のデータファイルだけ表示させるオプションがあ ります。[次の条件で検索します]という領域を使って、 特定の情報を含むファイルを検索することができます。 [サンプル ID]の全部または一部を指定することができ ます。指定された[分析者]によって取り込まれたファ イルを検索することができます。[昨日]、[過去7日間]、 [今日]などのようにデータが取り込まれた日時でファ イルを検索することができます。また、特定の時期に 修正されたファイルを検索することもできます。これ らの基準は、個別にまたは組み合わせて検索すること ができます。

検索するファイル名の一部としてワイルドカード文字 「*」を含めることもできます。検索を行うには、検索す るファイルについて目的のフィールドに入力し、[検索 開始]ボタンをクリックします。例えば、[サンプル ID] フィールドに「Tester*」と入力して、[検索開始]ボタン をクリックすると、[Tester]で始まるサンプル ID を持 つすべてのファイルが表示されます。検索条件をクリ アして、新しい検索条件を指定したい場合は、[新規検 索]ボタンをクリックします。

注

検索をするときは、Windowsの登録されているファイルの拡長れまましたい。 オフにするには、マイコンピュータの(ツール)/[フォルダオプション] をクリックし、[表示タブをクリックしてください。

メソッドファイルあるいはシーケンスファ イルを開く

メソッドファイルあるいはシーケンスファイルを開くには、

- [ファイル]メニューの[メソッド]または[シーケンス]を クリックし、[開く]コマンドをクリックします。
- メソッドファイルとシーケンスファイルを開くダイア ログボックスは全く同じです。ダイアログの外観はア ドバンストファイルセキュリティを実行している場合 は異なります。この場合、アクセスは現在のプロジェ クトフォルダおよびエンタープライズ共通フォルダの 範囲内に制限されます。ダイアログに含まれるフォル ダバーは、ナビゲーションを容易にします。

パットファイルを開く				? ×
ファイルの場所型: 🔄	Methods	📃 🗭 🗈	📸 🎫 🖉	
a) 0007-5.met	0314_LaChrom0	5.met	a 052801.met	■■ (()))))))))))))))))
iand 0311 Test.met and 0314_LaChrom01.met	ian 0314_LaChrom0 an 0314SS420×.me	6.met t	■ 052802.met ■ 0529.met	キャンセル
0314_LaChrom02.met	■ 0315_01.met		■ 0530.met	へルプ(H)
a 0314_LaChrom04.met	and 0310_02.met		a 0606.met	
ファイル名(10)				
ファイルの種類(1): メソット	`ファイル(*.met)			
次の条件で検索します:				
xŧ@)	→ 作成日(4) す	Κ ζ		検索開始(<u>F</u>)
分析者(A)	更新日(処) す	<u>ντ</u>		新規换索(<u>W</u>)
《案結果				

メソッドファイルおよびシーケンスファイルの検索

特定のメソッドファイルおよびシーケンスファイルを 検索するために使用できる項目には、ファイルのメモ に含まれる特定のメモ、分析者、作成日および更新日 があります。 注

検索をするときは、Windowsの登録れているファイルの拡長れますしたい。 オフにするには、マイコンピュータの(ツール)/[フォルダオプション] をクリックし、[表示タブをクリックしてください。

データファイルを保存する

データファイルを保存するには、

- [ファイル]/[データ]/[名前を付けて 32 ビットで保存]コ マンドをクリックします。
- [名前を付けて保存]ダイアログが表示され、ファイルの保存先やファイルの種類が確認できます。

このコマンドはデータファイルと現在のメソッドを1つのファ イルとして保存します。このコマンドは、データファイルが 32 ビット Elite データフォーマットではないときだけ有効です。 GLP(Good Laboratory Practices)に遵守するため、既存のデー タファイルが Public ディレクトリにある場合を除き、[名前を 付けて 32 ビットで保存]コマンドを実行することはできません。 Public ディレクトリとは、パスに[public]という言葉が含まれ るディレクトリのことです。その他のすべてのデータファイル は、上書きできないように保護されています。ユーザーは、現 在のプロジェクトフォルダまたはエンタープライズフォルダの 内部でファイル表示を制限できます。ダイアログに含まれるフ ォルダバーは、ナビゲーションを容易にします。

前を付けて保存				?
保存する場所①:	🚖 Data			
fullti calibration multi calibration multi calibration multi calibration multi calibration multi calibration	level 1.dat level 2.dat level 3.dat level 4.dat level 5.dat level 6.dat	 pda estd unknown 001001.dat pda estd unknown 002002.dat QC001.dat QC002.dat STD001.dat STD002.dat 	 SysSuit001.dat SysSuit002.dat SysSuit003.dat SysSuit004.dat SysSuit005.dat SysSuit006.dat 	(保存(<u>5</u>) キャンセル ヘルブ(<u>H</u>)
<u>(</u>				
ケイル名(N):			<u>· · ·</u>	
ァイルの種類(工):	データファイル(*.dat)	▼ □ データの圧縮	
			-	
(T				1
			· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
F				

現在のデータを新しいデータファイルとして保存するには、新 しいデータファイルの名前を[ファイル名]フィールドに入力し、 [保存]をクリックします。ハイライトされたファイルの詳細ま たはメモを見る場合は、ダイアログボックスの右上のボタンを 使います。[<FILENAME>]と入力すると、保存されたファイル に最初の入力として保存されます。

[データの圧縮]ボックスを選択すると、ファイルは圧縮形式で 保存されます。圧縮形式で保存されたファイルは、開かれると 自動的に圧縮が解凍されますが、圧縮を解凍した形式で再度保 存するためには、[名前を付けて保存]コマンドを実行しなけれ ばなりません。

11 CDF ファイルの読み込み

CDF ファイルを開くと、ソフトウェアは以下の Y 軸ラベルか ら 1 つを探します。

"microvolts", "uvolts", "uv", "uau" "millivolts", "mvolts", "mv", "mau"

これらのY軸ラベルが見つからなかった場合、ソフトウェア はAIA.iniファイルからのY軸ラベルの読み込みを試みます。 AIA.iniファイルは、非標準ファイルのための乗数を得るのに 用いられます。AIA.iniファイルが存在しない場合、ソフトウ ェアは、値の範囲から判断しようと試みます

読まれているファイルが非標準ならば、AIA.iniファイルを作成し、それをデータシステムのプログラムフォルダに置く必要があります。 AIA.iniファイルにはY軸ラベルと乗数が含まれるべきです。

12 機器ウィンドウ

機器を起動する

メソッドやシーケンスの開発、カスタムレポートの作成および データ収集ができる機器ウィンドウにアクセスするには、メイ ンメニューで、起動したい機器アイコンをダブルクリックしま す。起動するときにログインが必要な場合があります。詳細は 機器ログインを参照してください。

機器ログイン

[ユーザーログインとアクセス権を有効]オプションが有効な場合、機器アプリケーションを起動する時にログインするように 要求されます。

µ717	_			
	ユーザー名:	Agilent		
	<i>∧*</i> スワート:			
, v	ጋ°ロ シ°ェクト:	Default		•
		ロゲイン	キャンセル	^//,7°(<u>H</u>)

指示に従って必要な情報を入力し、[ログイン]ボタンをクリッ クします。

ユーザー名

ネットワーク上で割り当てられたユーザー名を入力し ます。

パスワード

割り当てられたネットワーク用パスワードを入力しま す。

パスワードの保存

システム管理者が[パスワードを保存する]オプション を有効とした場合、[パスワードの保存]のチェックボ ックスが表示されます。

ロゲ	心		
	ar	ユーザー名: パフロード	Agilent
	* *	7 X7-F:	□ パスワードの保存
		ንግንጉንት፡	

このチェックボックスを選択した場合、[ログイン]ボ タンをクリックすると、ログイン時に入力するパスワ ードが保存されます。パスワードが保存されると、機 器にログインするときは、いつでも保存されたパスワ ードが使われます。

注

パスワードは、ログインの成力、失敗こかかわらず、[ログ イン]ボタンをクリックすると保存されます。

ドメイン

ドロップダウンリストから、アクセス権のあるドメインを選択するか、または正しいドメイン名を入力します。(ドメインコントローラを使用していない場合は表示されません。)

プロジェクト

ログインするプロジェクトを選択します。このプロジ ェクトが、機器のメソッド、データおよびシーケンス のデフォルトプロジェクトのパスになります。ただし、 指定されたプロジェクトにログインしても、ほかの場 所にファイルを作成したり、保存することができます。

機器にログインし、プロジェクトを選択した後は、新 しいプロジェクトを指定しない限り、そのプロジェク トのメソッド、データ、シーケンスおよびテンプレートのパスが使われます。選択したプロジェクトを変更するには、[ファイル]/[プロジェクトの選択]コマンドを使います。

機器アクティビティログを表示する

データを収集するためにメソッドを使用すると、現在の機器に よる動作記録(アクティビティログ)が作成されます。この記録 を見るには、[ファイル]/[機器アクティビティログ]/[ログの表 示]コマンドを選択します。機器アクティビティログのウィン ドウが表示され、機器を使用したユーザー名、その動作が記録 された日時および動作の内容が表示されます。

,	装置アクティビティログ							
	1-7*-		BE	Ē	変更簡	F	内吉	
	⊞ <u>e</u> r a trans	2001/1	1/301	1:40:04	EZCHROM-J2		ラソ キュー 一追加 シーケンス ラソー ¥¥Ezchrom-j1 ¥Enterprise¥Projects¥De	
	⊞ 中	2001/1	1/301	1:39:49	EZCHROM-J2		エラー: デババスに接続できませんでした。別の装置が使用しています。	
	田中	2001/1	1/301	1:39:43	EZCHROM-J2		ラン キュー 完了 シンクル ラント	
: :::::	⊞ 中	2001/1	1/301	1:39:41	EZCHROM-J2		テ~タファイルが指定されていません。分析は実行されません。	
	田中	2001/1	1/301	1:39:40	EZCHROM-J2		ラン キュー 一開始 シンク乳 ランー	
	田中	2001/1	1/301	1:39:39	EZCHROM-J2		ラン キューー 追加 シングル ランー	
()	田中	2001/1	1/301	1:38:33	EZCHROM-J2		ロがインします。	
10000	lщњ	2001/1	1/301	141456	EZCHROM12		ጋ~ተኛ~ጠበላማሳኑ	

機器アクティビティログ中の任意の行について、詳細情報を見 るには、その行をクリックしてハイライトさせ、スプレッドシ ート内で右クリックします。このポップアップメニューから、 ハイライトされた行の詳細を見たり、これを印刷したり、動作 記録の全体を印刷したりできます。さらに、動作記録をエクス ポートしたりパージ(消去)したりもできます。

	装置)	የሳታለሮንጠሳ				
	: :	1-サー 日時	<u> </u>	笛 所	内喜	
	田中	2001/11/3011:40:04	EZCHROM-J2	ラン キューー 追加 シークンス ラソード	¥¥Ezchrom-j1 ¥En terprise¥F	Projects¥De
	田中	2001/11/3011:39:49	EZCHROM-J2	エラー: デババスに接続できませ,	んでした。別の装置が使用し	ています。
	田中	2001/11/3011:39:43	EZCHROM-J2	ラン キュー 一完了 シンクルラン ー	·	
	田中	2001/11/30 11:39:41	EZCHROM-J2	テータファイルが指定されていま	詳細表示(D)	•
	田中	2001/11/3011:39:40	EZCHROM-J2	開始 シンクルラソー		
	田中	2001/11/3011:39:39	EZCHROM-J2	ラン キューー 追加 シンクルランー	7ニュアル入力(M)	
	田中	2001/11/30 11:38:33	EZCHROM-J2	ログインします。		
1	一曲山	2001/11/30 11:11:56	EZCHROM 12	ን – ተኛ– ጠበላ ማሳት	エクスホ [®] ート(<u>E</u>)	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
					7ーカイフ [*] (A)	in the second second
					0%-53(10)	1 . S
				H	×1 × <u>\</u> <u>∪</u> ×	
					すべて60局I(P)	
					選択範囲の印刷(2)	

機器アクティビティログファイルは時間とともに容量が増 えますので、ファイルを定期的こフロッピーまたはその他の場所にア ーカイブした後で、パージすることをお着めします。

機器ウィンドウ

注

機器を(オンラインで)開くと機器ウィンドウが表示されます。 機器ウィンドウでは、機器を使って以下のすべてが実行できま す。

- メソッドの開発
- キャリブレーション
- シーケンスの開発
- 機器の制御とデータ収集
- データの解析とレビュー
- レポート
- データのエクスポート

ユーザーは必要に応じてツールバーやステータス情報を表示し たり削除したりできます。しかし、これらはシステムをより使 いやすくするため、大部分のユーザーはこれらが表示されるこ とを好みます。



表示オプションの変更

機器ウィンドウの表示オプションを変更するには、

- 1. [表示]/[表示オプション]コマンドをクリックします。
- [全般]タブをクリックし、機器ウィンドウの表示オプションを変更します。

表示オプション - 全般

このタブを使って、機器ウィンドウの全般の表示オプションを 設定します。

ツールバーオプション

リストに表示されたウィンドウの各エリアについて、 ツールバーおよびヒントを有効/無効にすることができ ます。カーソル位置のツールバーボタンの説明を画面 上に表示したい場合は、[ヒント]ボックスにチェック マークを付けて有効にします。

≧般 ファイル	
ーツールバーオフジョン メイン インテクレーションイベン シーカンス ポープ	▶ □ ツールパーを表示する
xy9*	
- ステータスパーオフジョン	
- ステータスパーオフジョン ▼ ステータスパーオフジョン ■ カリークスパーク表	長示する
- ステータスパーオフジョン マ ステータスパーオフジョン マ ステータスパーを表 時間の単位 ○ s(S)	表示する ● min(<u>M</u>)

ステータスバーオプション

ステータスバーを有効にするには、このチェックボッ クスを選択します。ステータスバーが有効の場合、動 作情報が機器アプリケーションウィンドウの下部に表 示されます。

時間の単位

クロマトグラフ情報を表示する際の保持時間の単位を 選択します。

表示オプション - ファイル

このタブを使って、[ファイル]メニューに表示される、最近使ったファイルの表示数を設定します。

- 1. [表示]/[表示オプション]コマンドをクリックします。
- 2. [ファイル]タブで[ファイル]メニューの表示を設定しま す。
- [ファイル]メニューに表示する最近使ったファイルの 最大数を入力する場合は、ファイルの種類を選択し、 [ファイル数]ボックスに表示したい最大ファイル数を 入力します。
- [ファイルを削除]ボタンは、選択したファイルの種類 について最大ファイル数をクリアします。

5. [全てのファイルを削除]ボタンは、すべてのファイル の種類について最大ファイル数をクリアします。

最近のメノットファイル 最近のデータファイル 最近のシークンスファイル	最大ファイル数: 5 ファイル数: 1
蔵近の前処理771ル	全てのファイルを削除

画面のロック

不正ユーザーから画面をロックするためには、[ウィンドウ/ロック]コマンドを選択します。このコマンドが選択されると、 [ウィンドウ]および[ヘルプ]メニューを除いたメニュー項目は すべてロックされます。ロックが解除されるまで、ロックされ たコマンドにアクセスすることはできません。このコマンドは、 複数ユーザーがいる研究所では便利で、一時的にコンピュータ を離れている間、現在の作業状態に固定できます。

画面のロックを解除するには、[ウィンドウ/ロック]コマンドを 再度クリックします。この場合、ユーザー名とパスワード(機 器にログインしていて、プロジェクトマネージメントが有効で ある場合)のログインが必要となります。

97) 1	小りロックの解除		
	4	ユーザー名: パスワード:	Agilent
			解除 キャンセル ヘルフ ^(H)

13 クロマトグラムウィンドウ

クロマトグラムウィンドウについて

データはクロマトグラムウィンドウに表示されます。通常1つ のクロマトグラムがクロマトグラムウィンドウに表示され、マ ルチチャンネルのデータは1クロマトグラム毎に複数のクロマ トグラムウィンドウに表示されます。しかし、複数のクロマト グラムトレースを1つのクロマトグラムウィンドウに表示させ、 比較や算術計算を行うことができます。クロマトグラムウィン ドウの特殊コマンドを選択するには、クロマトグラムウィンド ウの中でマウスの右ボタンをクリックします。これらのコマン ドを使って、グラフやクロマトグラムをウィンドウに追加した り、表示、ピーク情報および軸の設定を変更したり、クロマト グラムの数学的な処理を行ったり、ウィンドウ内にあるトレー スのプロパティを表示または変更したりすることができます。



収集中のデータもクロマトグラムウィンドウに表示されます。 測定終了時、そのデータが[現在のデータ]になります。クロマ トグラムの表示を変更することや、ピーク情報、フォントおよ びラベルを選択することができます。現在のウィンドウ表示を 印刷したり、クリップボードにコピーしたり、あるいはファイ ルに保存したりするユーティリティを使用できます。
データを並べて表示または重ねて表示する

複数のチャンネルメソッドのデータを表示する場合、[表示]/[データを並べて表示]コマンドを選択すると、各チャンネルを別々のウィンドウに表示することができます。 あるいは、 [表示]/[重ねて表示]コマンドを選択すると1つのウィンドウに 全チャンネルを重ねて表示することもできます。 すべてのチャンネルを1つのウィンドウに重ね表示しても、クロマトグラムの拡大、各チャンネルの表示形式を変更することができます。

並べて表示モードにすると、[ウィンドウ/重ねて表示]、[ウィ ンドウ/上下に並べて表示]、または[ウィンドウ/左右に並べて 表示]コマンドを使って、ウィンドウの表示方法を選択するこ とができます。

ズーム(拡大)

クロマトグラムの詳細を確認したり、クロマトグラムの一部を 拡大することができます。この操作を行うには拡大したい部 分をマウスの右ボタンを押したままドラッグして囲み、マウス を放します。前のレベルのズームに戻すには、クロマトグラ ム上でダブルクリックします。何度もズームを行った後でク ロマトグラム全体を表示したい場合には、クロマトグラムウィ ンドウ上でマウスの右ボタンをクリックし、[元の倍率に戻す] コマンドをクリックします。あるいは、CTRL-Zキーを押すか、 クロマトグラムウィンドウ内で SHIFT キーを押しながらダブ ルクリックすることでも元の倍率に戻すことができます。拡 大したクロマトグラムをスクロールできます。詳しくは[クロ マトグラムをスクロール]を参照してください。

クロマトグラムの上部には[時間]と[レスポンス]が表示されま す。これらの値はカーソルを移動すると変わり、カーソル位 置のトレースの時間とレスポンスを示します。 複数のトレー スがある場合は、クロマトグラムのトレースをマウスでクリッ クすることにより、別のトレースに表示を変更することができ ます。 各トレースが別の色で表示されている場合、[時間]と [レスポンス]の色は表示されたトレースの色に対応します。

クロマトグラムのスクロール

拡大したクロマトグラムをそのまま左右にスクロールすること ができます。CTRL+SHIFT キーを押したままマウスをクリッ クすると、カーソルが[手]の形に変わるので、そのまま左また は右方向にドラッグします。

範囲外の内容を表示するために、X軸またはY軸をスクロール させることもできます。この場合は、CTRL+SHIFT キーを押 したまま、カーソルをグラフの領域外で目的とする軸の近くに 持っていきます。マウスをクリックするとカーソルが、Y軸付 近では上下方向の矢印に変わり、X軸付近では右左方向の矢印 に変わります。このモードでマウスを動かすと、グラフが上下 方向または右左方向へスクロールできます。

元の表示に戻すには、クロマトグラムウィンドウでマウスの右 ボタンをクリックし、次に[元の倍率に戻す]コマンドをクリッ クします。

トレースの追加 (複数のクロマトグラムの表 示)

クロマトグラムウィンドウには、機器ウィンドウの現在のデー タ(リアルタイム)、またはディスクから呼び出されたデータの いずれかが表示されます。必要に応じて、1つのクロマトグラ ムウィンドウに複数のクロマトグラムを表示することができま す。この機能は、例えば、過去のデータと現在のデータを比 較したり、オーブンやポンプのプロファイルを重ねて表示した りする場合に便利です。

クロマトグラムウィンドウに新しいトレースを追加するには、

 クロマトグラムウィンドウでマウスの右ボタンをクリ ックします。ポップアップメニューが表示されます。



2. [トレース追加]コマンドを選択します。 ダイアログボ ックスが表示されます。

1	新しいトレースのフロハディ	4	×
	新しいトレース ピーク	青幸服 テ [*] ザイン	
	デーカリーフィ	(明大小学)) (231)	
	ノ ニッノニス・ チャンネル(T)・		
	フカール(C):		
	Y最小0:		
	Y最大(<u>M</u>):		
	単位(<u>U</u>):	Volts	
	Xオフセット(<u>O</u>):	0	
	XH2 😒:	1	
	Yオフセット(<u>E</u>):	0	
	Y比(Y):	1	
			-1
		OK ギャンセル適用(<u>A</u>)ヘルブ	

 [新しいトレース]タブを選択します。クロマトグラム ウィンドウにトレースを追加するために、各フィール ドにデータを入力し、そのプロパティを設定します。 設定したプロパティは選択されるトレースにのみ適用 され、メソッドの一部としては保存されません。[新 しいトレース]を開くと、プロパティはデフォルト値 (ノーマライズ)に設定されます。

データソース

トレースを取り出したいファイルの名前を入力します。 このフィールドの横にある[ファイル]ボタンをクリッ クして、データソースを選択することもできます。

現在のデータ

現在のクロマトグラフィーデータからトレースを選択 できます。

現在のメソッド

現在のメソッドからトレースを選択できます。 例えば、 HP5890 機器メソッドからオーブン温度プログラムを 読み込むことができます。

データを開く

保存されているデータファイルを選択し、その中から トレースを選んで表示できます。

トレース

表示するトレースを選択します。 ボタンをクリックす ると、選択可能なトレースが表示されます。

スケール

スケール設定を選択します。

トレースX: ウィンドウの別のトレースに合わせ ます。

最大ピークに合わせる:最大ピークが表示される スケールを基準にします。

2番目に大きいピークに合わせる:2番目に大きい ピークが表示されるスケールを基準にします。

3番目に大きいピークに合わせる:3番目に大きい ピークが表示されるスケールを基準にします。

ユーザー定義: Y 軸の最大値と最小値を入力しま す。 ノーマライズ:トレースを正規化してグラフにフィットさせます(デフォルト値)。

Y最小

スケールで[ユーザー定義]を選択した場合、Y 軸の最小 値を入力します。

Y 最大

スケールで[ユーザー定義]を選択した場合、Y 軸の最大 値を入力します。

単位

表示単位を入力します。

Xオフセット

X軸のオフセット値を入力します。

X比

必要に応じてトレース全体に適用する係数を入力しま す。

Yオフセット

Y軸のオフセット値を入力します。

Y比

必要に応じてトレース全体に適用する係数を入力しま す。

複数のトレースの追加

画面表示に複数のクロマトグラムを素早く追加することができます。

 クロマトグラムウィンドウでマウスの右ボタンをクリ ックし、次に[複数のトレース追加]をクリックします。
 [データファイルを開く]ダイアログボックスが表示され、表示するトレースをファイルリストから選択する ことができます。 ファイルを追加するには、ファイル名をクリックして、 次に[追加]ボタンをクリックするか、あるいはリスト のファイル名をダブルクリックします。

ファイルの場所の: ● Data ◆ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	データファイルを開く			? ×
multi calibration level 1.dat multi calibration level 2.dat multi calibration level 2.dat multi calibration level 3.dat multi calibration level 4.dat multi calibration level 4.dat multi calibration level 4.dat multi calibration level 6.dat multi calibration level 6.da	ファイルの場所 Ф: 🔂 Data	•	- 🗈 💣 🎟 🗐 📠	
	multi calibration level 1.dat multi calibration level 2.dat multi calibration level 3.dat multi calibration level 4.dat multi calibration level 5.dat multi calibration level 6.dat	STD(10ul).DAT STD(1ul).DAT STD(20ul).DAT STD(20ul).DAT STD(20ul).DAT STD(50ul).DAT STD[1st].DAT	PAH-STD[2nd]DAT PAH-STD[2nd]DAT PAH-STD[4th]DAT PAH-STD[4th]DAT PAH-STD[5th]DAT PAH-STD[5th]DAT pda estd level 1	開く(Q) キャンセル ヘルブ(出)
サン7% ID(2): 作成日(2): ずべて ・ 更新日(2): ずべて ・ 新規検索(2): 丁~2 7×4& 1				
す す 注 1 1 1 2 1 1 3 1 1	サンプル ID(S): 分析者(<u>A</u>):	 ▼ 作成日(C): ▼ 更新日(M): 	すべて すべて	 ★ 検索開始(E) ★ 新規検索(W)
	<u>Ţ</u> ² ~2 774A <u>2</u> 3		HL~Z	▲ <u>追加</u>

- データファイルがリストに追加されると、[トレース] フィールドをクリックし、次に下向き矢印ボタンをク リックしてチャンネルを選択することができます。そのファイルに複数のチャンネルがある場合は、マウス で目的のチャンネルをクリックして選択します。
- 表示リストからトレースを削除するには、その名前または番号をクリックし、[削除]ボタンをクリックします。
- 5. 複数のトレースを開く準備ができたら、[開く]ボタン をクリックします。選択されたファイル/チャンネル がクロマトグラムウィンドウに表示されます。



クロマトグラムのピーク情報

クロマトグラムのピーク情報を変更するには、

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、 [ピーク情報]コマンドを選択します。
- [プロパティ]ボックスの[ピーク情報]タブをクリックします。これによりダイアログが表示され、追加しようとしているトレース(クロマトグラム)にどのような情報を加えるか指定できます。

ビーク情報のフロハティ				×
ヒ゜ーク情報				
チャンネル(工): 1:(現在のデータ)・	- Channel A		.	
t^				
選択可能なピーク情報(⊻):		次のピーク情報を表示	. (<u>S</u>):	
Pk # 而積	_	名前 保持時間		
高さ% FSTD 連度				
ISTD 濃度		J		
ドーカ幅	–	小数点桁数(D):	2	
-その他(<u>Q</u>)				
▼ ペースライン	□ RT許容幅			
□ USPt"-/n幅	☑ 未同定ピーウ名を表	示		
			1001	4
OK A	やンセル 道用			

- ドロップダウンリストからトレースを選択します。次に、追加したいピーク情報を選択します。通常は[ピーク]を選択しますが、[SEC]オプションがインストールされている場合は、[SEC]を選択して、SEC についてピーク情報を付けることができます。
- 選択したトレースについて、使用したいピーク情報に応じて[ピーク]または[グループ]をドロップダウンリストから選択します。
- [選択可能なピーク情報]でピーク情報として表示したい項目をクリックします。ハイライトされた項目は、緑色の矢印キー(右向き)をクリックして表示するピーク情報に加えることができます。これは、表示したい項目をダブルクリックすることでも実行できます。
- ピーク情報によっては、小数点以下の表示桁数を指定 することもできます。ハイライトされた項目に対して、 その値を[小数点桁数]ボックスに入力します。
- トレース上にベースライン、USP 幅、RT 許容幅、未 同定ピーク名、グループ範囲を表示させるには、それ ぞれのチェックボックスをクリックします。 SEC オ プションがインストールされている場合は、SEC に関 する項目も表示されます。

注

選択できるピーク「静阪ある」リファレンスピークの言容幅 は、ピークテーブルで設定れた言容があまれます。この言容幅は 、相切保守間に対して調整れません。

- 表示したいピーク情報をすべて選択します。選択が終 了したら[OK]ボタンをクリックします。
- 既に表示しているトレース(クロマトグラム)のピーク 情報を選択または変更するには、クロマトグラムウィ ンドウでマウスを右クリックし、次に[ピーク情報]コ マンドを選択します。選択した内容は、[OK]または [適用]ボタンをクリックされると更新され、それが変 更されるまでこのチャンネルで開くすべてのトレース に対して適用されます。ピーク情報の変更内容を全チャンネルに適用する場合は、[すべてに適用]ボタンを クリックします。ピーク情報はメソッドの一部として

は保存されず、機器アプリケーションの機能とみなさ れます。 メソッドを閉じ、再度開くと、現在の設定が 適用されます。

クロマトグラムのデザイン

[プロパティ]ボックスの[デザイン]タブで、クロマトグラムま たはトレースのデザイン(線の種類や色など)を変更することが できます。

クロマトグラムまたはトレースのデザインを変更するには、

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、 [プロパティ]コマンドを選択します。
- クロマトグラムのプロパティ X トレースの設定|軸の設定 デザイン| デザイン(日): ▼ 保存(A)... 削16余(D) ፖイテムወ፡ サブアイテム(U): ► NU-X 1: (現在のデータ) - Channel A -線の種類(L): サイズ(Z): ・ 細 主 色(<u>C</u>): - I -実線 色(Q): 角度(N): --B Z U ARE OK. キャンセル 適用(A) ヘルプ
- 2. [デザイン]タブをクリックします。

デザイン

以前にトレースの表示形式をディスクに保存したこと がある場合、このボックスからそれを選択することが できます。[保存]ボタンを使うと、ディスクにある既 存のデザインに名前を付けて保存することができます。 [削除]ボタンは、デザインを削除し、はじめからやり 直す場合に使用します。 アイテム

このドロップダウンリストでは、クロマトグラムウィ ンドウのどの部分のデザインを変更したいかを選択し ます。グラフそのもの(背景および凡例を含む)と使用 可能なトレースが選択できます。

サブアイテム

修正したいサブアイテムを選択します。選択できるサ ブアイテムは、選択したアイテムによって異なります。 例えば、[アイテム]フィールドで[グラフ]を選択すると、 グラフの背景、軸およびラベルを含むサブアイテムの デザインを設定できます。また、クロマトグラムデー タチャンネルを選択すると、ベースライン、ピークの 開始点/終了点やピーク情報などのサブアイテムのデザ インを設定できます。テキストを選択すると、[フォン ト]に関するコマンドにもアクセスできます。

サブアイテムを選択すると、そのアイテムに関連する フィールドにアクセスできます。例えば、サブアイテ ムとして[ベースライン]を選択した場合、色や線の種 類が選択できます。サブアイテムとして[ピーク情報] を選択した場合は、フォントや色が選択できます。



新しいトレースを追加せずに任意のトレースのデザインを変更 するには、クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、 次に[デザイン]コマンドを選択します。このコマンドを選択す

ると、[デザイン]タブをクリックした場合と同じダイアログが 表示されます。

[デザイン]タブで使用できるサブアイテムは以下の通りです。

アイテム	サブアイテム	説明
グラフ	背景	グラフの背景色を選択します。デフォルトは黒で す。
グラフ	タイトル	グラフのタイトルの色とフォントを選択します。グ ラフのタイトルをウィンドウに表示するためには、 [軸の設定]タブで[グラフタイトル]を定義する必要が あります。
グラフ	左丫軸	グラフの左 Y 軸の色を選択します。
グラフ	左Y軸大目盛	左Y軸の大きい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	左丫軸小目盛	左Y軸の小さい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	左Y軸オン/オフ	左Y軸をオン/オフします。
グラフ	右丫軸	右Y軸の表示色を選択します。
グラフ	右Y軸大目盛	右Y軸の大きい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	右Y軸小目盛	右Y軸の小さい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	右Y軸オン/オフ	右Y軸をオン/オフします。
グラフ	X 軸	X軸の表示色を選択します。
グラフ	 X 軸大目盛	X軸の大きい目盛りの表示色を選択します。
グラフ	X軸小目盛	X軸の小さい目盛りの表示色を選択します。

ユーザーガイド

アイテム	サブアイテム	説明
グラフ	X 軸オン/オフ	X 軸をオン/オフします。
グラフ	凡例	グラフの凡例の表示色やフォントを選択します。凡 例は、ウィンドウに現在表示されているトレースの 種類を示します。凡例の表示は[軸の設定]タブでオ ン/オフします。
グラフ	グリッド	グリッド線の表示色を選択します。この線の表示は [軸の設定]タブからオン/オフします。
データ	トレース	選択したトレースの表示色や線の種類を選択しま す。
データ	ピーク情報	トレースのピーク情報の表示色やフォントを選択し ます。トレースのピーク情報は[ピーク情報]タブで 選択します。
データ	ベースライン	ベースラインの表示色や線の種類を選択します。
データ	ピーク開始点	ピークの開始点の表示色や線の種類を選択します。
データ	ピーク終了点	ピークの終了点の表示色や線の種類を選択します。
データ	USP ピーク幅	USP ピーク幅を計算する場合、その表示色や線の種 類を選択します。
データ	RT 許容幅	指定されたピークの予想保持時間許容幅の、表示色 や線の種類を選択します。
データ	RT 許容幅(未同定)	同定されなかったピークの予想保持時間許容幅の表 示色を選択します。

軸のプロパティ

[軸の設定]タブを使って、クロマトグラムの軸の表示形式を設定することができます。この設定は、アクティブトレースに適用されます。

軸の表示形式を設定するには、クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリック/(軸の設定)コマンドを選択します。

軸のプロ ペティ	×
軸の設定	
<u> </u>	
X##	
● 自動(S)	
○ 範囲指定(<u>R</u>):	
最小(<u>M</u>): 0 最大⊗: 0 min	
現在の範囲(位)	
上(江): 10 % 下(图): 10 %	
──般打ション(1)	
☑ 凡例を表示 ▲ ● ● 縦(P) ● 横(L)	
OK キャンセル 適用(金) ヘルプ	

グラフタイトル

グラフにタイトルを付けたいときはここに入力します。 このタイトルはグラフの上部に表示されます。

軸

ドロップダウンリストから目的の軸([左 Y 軸]、[右 Y 軸]、または[X 軸])を選択します。次に、軸の範囲を選択します。

Y軸を選択した場合は、[トレースする範囲]を選択して ウィンドウのトレースの1つから範囲を取り込むこと ができます。あるいは、[トレースする範囲をマニュア ル設定]ボックスを選択し、任意のY軸範囲を設定する こともできます。 [なし]を選択すると、Y 軸値は表示 されません。

X軸については、[自動]も選択できます。この場合、X 軸は最も長いトレースに設定されます。あるいは、[範 囲指定]ボタンをクリックし、次に、そのトレースのX 軸に対する最小および最大値を入力して、X軸の範囲 を設定することもできます。現在のトレースからX軸 範囲を取得するには、[現在の範囲] ボタンをクリック します。

余白

グラフの上部および下部のトレースマージンの値を% で入力します。

一般オプション

グラフのピーク情報の表示をオン/オフするには、その チェックボックスを選択します。凡例表示ボックスを 選択すると、トレースの凡例の表示を[トレースオプシ ョン]のスプレッドシートからオン/オフすることがで きます。



凡例とグリッドを表示したクロマトグラムウィンドウ



凡例とグリッドを表示していないクロマトグラムウィンドウ

向き

該当するボタンをクリックしてグラフの向き(縦書き (ランドスケープ)または横書き(ポートレート))を選択 します。

データグラフのプロパティ

クロマトグラムウィンドウのクロマトグラムまたはトレースの プロパティを設定するには[クロマトグラフのプロパティ]タブ を使います。[トレースの設定]タブ、[軸の設定]タブ、[デザイ ン]タブがあります。これらのタブを使って、クロマトグラム の色、ピーク情報およびデザインを変更したり、表示するクロ マトグラム時間/電圧範囲を設定したりするのに使用します。

プロパティを変更するには、

- クロマトグラムウィンドウで右クリックし、[プロパティ]コマンドを選択します。
- 2. 以下のタブから変更したいプロパティのタブをクリックします。



ユーザーガイド

プロパティタブ	用途
トレースの設定	トレースの追加や削除、凡例やスケール の設定
軸の設定	グラフタイトル、軸、余白、向き、凡例 やグリッドなどの設定
デザイン	色、線の種類、フォントの設定

トレースの設定

このタブでトレースの追加/削除およびトレースのスケールオ プションの設定ができます。スプレッドシートの各行には、ク ロマトグラムウィンドウに現在表示されているトレースがそれ ぞれ示されます。ハイライトされたトレースの詳細が、ダイア ログボックス下部のトレースプロパティボックスに表示されま す。

クロマトクラムのプロパティ	<u>× </u>
「トレースの設定」軸の	設定(デザイン)
# 表 凡 1 ☑ ☑ 2 □ □	<mark>データソース トレース</mark> (現在のデータ)▶ Channel A ▶ ノ-
↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓↓	
データソース:	(現在のデータ)
チャンネル(工):	Channel A
スケール(<u>C</u>):	/-マライズ
Y最小①:	0 Y最大(<u>M</u>): 0
単位(<u>U</u>):	Volts
Xオフセット(<u>O</u>):	0 XE2⊗: 1
Yオフセット(<u>E</u>):	0 YEE(Y): 1
	ビーケ情報 詳細の非表示(H) スケールリセット
	OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

表示

クロマトグラムウィンドウにトレースを表示する場合 に、このボックスをクリックします。画面からトレー スを消去する(ただし、ウィンドウは開いたままにして おく)には、このボックスの選択を解除します。これは、 表示ウィンドウからトレースを一時的に削除する場合 に便利な方法です。

凡例

トレースの凡例を表示する場合に、このボックスをク リックします。ウィンドウの右上部に凡例が表示され、 トレース名を表示します。クロマトグラムウィンドウ にトレースの凡例を表示させない場合は、このボック スの選択を解除します。凡例の表示形式(色など)の設 定には、[クロマトグラム]項目の[デザイン]タブでセッ トアップします。

注

[軸の記定ダイアログで凡例表であオンにしていない場合、 このボックスの記述は無次す。

データソース

トレースを取り出したいデータが入っているファイル の名前を入力します。このフィールド横のボタンをク リックして、データソースを選択することもできます。 データソースはクロマトグラムでも、温度または流量 プログラムなどの保存プロファイルでも選択すること ができます。

現在のデータ

現在のクロマトグラフィーデータからトレースを選択 することができます。

データを開く

保存されているデータファイルを選択し、その中から トレースを選択することができます。

現在のメソッド

現在のメソッドからトレースを選択することができま す。メソッドからのトレースには、例えば、機器制御 時に取得した温度プロファイルなどがあります。

トレース(チャンネル)

表示するチャンネルを選択します。

スケール

スケールオプションを以下の中から選択します。

トレースX: ウィンドウ内の他のトレースにスケールを合わせます。

最大ピークに合わせる:最大ピークが表示される スケールを基準とします。

2番目に大きなピークに合わせる:2番目に大き いピークが表示されるスケールを基準とします。

3番目に大きなピークに合わせる:3番目に大き いピークが表示されるスケールを基準とします。

ユーザー定義:Y軸の最大値と最小値を入力する ことができます。

ノーマライズ:トレースを正規化してグラフにフィットさせます。

Y最小

ユーザー定義スケールを選択した場合、Y軸の最小値 を入力します。

Y 最大

ユーザー定義スケールを選択した場合、Y軸の最大値 を入力します。

単位

表示単位を入力します。

Xオフセット

X軸のオフセット値を入力します。

X 比

必要に応じて、トレース全体に適用する係数を入力し ます。

Yオフセット

Y軸のオフセット値を入力します。

Y比

必要に応じて、トレース全体に適用する係数を入力し ます。

注

マウスを右フリックして[軸の記録メニューを選択すると、 X軸の範囲を設定できます。

ピーク情報

このボタンをクリックすると、[ピーク情報のプロパティ]ダイアログが表示されます。

詳細の非表示

このボタンをクリックすると、現在のトレースの詳細 が非表示となり、スプレッドシートのみ表示されます。

スケールリセット

このボタンをクリックすると、スケール値が元の値に リセットされます。

トレースの削除

クロマトグラムウィンドウに複数のトレースがあり、いずれか を削除するには、ウィンドウ内でマウスの右ボタンをクリック して[プロパティ]コマンドを選択します。現在、表示されてい るトレースを示すスプレッドシートが表示されます。

トレースをクロマトグラムウィンドウから完全に削除するには、 [#]番号をクリックして行を選択し、次にキーボードの DELETE キーを押すか、または[編集]/[削除]コマンドを選択し ます。トレースをウィンドウから一時的に削除する場合は、 [表示]フィールドのチェックボックスの選択を解除します。

55

[OK]ボタンをクリックすると、クロマトグラムウィンドウに戻 ります。

X軸およびY軸の範囲の設定

X軸、Y軸、あるいは両方の絶対的な範囲を設定するには[クロ マトグラムのプロパティ]タブを使います。X軸およびY軸の 範囲を設定するには、

- クロマトグラムウィンドウで右クリックし、[プロパティ]コマンドをクリックします。
- 2. Y軸範囲は、[トレースの設定]タブで各クロマトグラム について設定します。すべてのクロマトグラムについ て絶対的な電圧範囲を設定するには、[スケール]フィ ールドの[ユーザー定義]オプションを使います。次に、 各クロマトグラムについて[Y最小](Y軸最小値)と[Y最 大](Y軸最大値)を入力します。クロマトグラムをすべ て同じ電圧スケールで表示する場合は、全クロマトグ ラムについて同じ値を入力します。

加マM	かうムのプロパティー					×
(TV)	-スの設定】軸の調	段定 デザイン				
	# 7	パケール	Y 最小	Y最大	単	位
	1 ユーザー定義	€ ▼	-0.002	0.01	Volts	
ŀ	2					
Ŀ						•
Γ.	トレース1 詳細 ―― ジーかん っ	何まかやいか				
1	7 - 797 - 725 7 - 12 - 54 / 775	Channel A				
	ナヤノイルヘ <u>ー</u> パ マカ、ルイヘン					
		ユーザー定義		-/M0. 0.01		1
	『取小型: 第75705	-0.002	·昄/	(<u>w</u>): <u> </u> 0.01		
	単1辺\ <u>U</u> /: Vオコト→L/O\			A. 1		
	M / ゼット <u>ロ</u> /: Vオコモット/F2			γ: Δ. 		
	14729PN <u>E</u> 7	lo		/: <u> </u>		
		<u> ピ</u> ーケ1	情報 詳	細の非表示(<u>H</u>)	スケール	リセット
		ОК	キャンセノ	レ 道用		ヘルプ

- X軸の絶対的な範囲を設定するには、[軸の設定]タブを 使います。X軸範囲が最も長いクロマトグラムの範囲 に自動的に設定される[自動]を選択するか、または[範 囲指定]をクリックして絶対的な範囲を分単位で入力し ます。[現在の範囲]ボタンは、現在のクロマトグラム ウィンドウからX軸の範囲を取り込みます。これによ り、ズーム機能を使って好みの大きさに設定したクロ マトグラムの範囲を自動的に入力することができます ので、便利です。
- 絶対的な範囲を設定すると、その設定を変更またはリ セットするまで、クロマトグラムは常にその設定で表 示されます。
- すべてのクロマトグラムのスケールをデフォルト値に リセットするには、[トレースの設定]タブで[スケール リセット]ボタンをクリックします。

クロマトクラムのプロパティー	×
トレースの設定 (軸の設定) デザイン	
ゲラフ \$イトル(<u>H</u>):	
× ≢	
● 自動⑤	
○ 範囲指定(<u>R</u>):	
最小(<u>M</u>): 0 最大⊗: 0 min	
現在の範囲(G)	
上①: 10 % 下图: 10 %	
┌一般オフション(№)	
 ☑ 凡例を表示 ☑ 凡例にサソフ% ID を含める □ 凡例にデータファイル名を含める 	
OK キャンセル 適用(A) ヘルプ	

14 クロマトグラムのオペレーション

クロマトグラムのオペレーション

クロマトグラムウィンドウから使用できるクロマトグラムの比 較および数学的な操作には多くの種類があります。これらは、 マウスの右クリック/[オペレーション]コマンドを使って実行で きます。



オペレーション	アクション
---------	-------

ユーザーガイド

オペレーション	アクション
トレースの移動	クロマトグラムウィンドウのトレースを 移動させます。
オフセット表示	トレースのオフセットを変更します。
アライン	2番目のクロマトグラムでクリックしたピ ーク(または点)が最初のクロマトグラムで クリックしたピーク(または点)に合うよ う、2番目のクロマトグラムをアライン (位置合わせ)します。
ストレッチ	クロマトグラムを別のクロマトグラムに 合わせて2点間で縮めたり引き延ばした りします。
ノーマライズ	1 つまたは複数のクロマトグラムを最初の クロマトグラムの高さに合わせてノーマ ライズ(正規化)します。
スムージング	選択されたデータファイルに対して9点 の Savitsky-Golay スムージングを行いま す。
一次微分	選択したトレースに対して一次微分した 結果を表示します。
二次微分	選択したトレースに対して二次微分した 結果を表示します。
たし算	2 つのトレースをたし算します。
ひき算	2 つのトレースをひき算します。
かけ算	2 つのトレースをかけ算します。
わり算	2つのトレースをわり算します。

トレースの移動

マウスでトレースをつかんで移動させることができます。

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、 [オペレーション]/[トレース移動]コマンドをクリックし ます。
- カーソルをトレース上に移動すると、カーソルが[移 動]アイコンに変わります。
- マウスを左クリックし、クロマトグラムを新しい場所 ヘドラッグすることでトレースを移動することができ ます。マウスのボタンを離すと、クロマトグラムはそ の時のカーソル位置に置かれます。
- [トレースの移動]がウィンドウの右上隅に表示されている間は、トレースの移動を続けられます。トレースの移動が終了したら、再度マウスを右クリックし、[オペレーション]/[トレースの移動]コマンドを選択してトレース移動動作を終了します。

トレースのオフセット表示

以下の手順でトレースのX軸およびY軸オフセットをすばや く変更することができます。

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、 [オペレーション]/[オフセット表示]コマンドをクリック します。
- 追加トレースのX軸オフセット値とY軸オフセット値 を入力し、次に[OK]ボタンをクリックします。入力さ れたオフセットで、クロマトグラムが再描画されます。







オフセット設定変更後のクロマトグラム

これらのオフセットを削除には

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、 [プロパティ]コマンドをクリックしてトレーススプレ ッドシートを表示させます。
- [トレースの設定]タブをクリックし、X軸およびY軸 オフセットフィールドが現れるまで右にスクロールし、 その設定を削除または変更します。
- 設定をすべて元の値に戻すには[スケールリセット]ボ タンをクリックします。あるいは、再度[オフセット表 示]コマンドを使って、X、Yの両方のオフセットパラ メータに[0]を入力することでも対応できます。

アライン

クロマトグラムを別のクロマトグラムにアライン(位置合わせ) する手順は以下の通りです。

- マウスの右ボタン/[オペレーション]/[アライン]をクリ ックします。合わせる基準となる最初のクロマトグラ ムの点をクリックし、次に、そこに合わせたい2番目 のクロマトグラムのピーク(または点)をクリックしま す。2番目にクリックしたピーク(または点)が最初に クリックした点に合うように2番目のクロマトグラム が調整されます。
- アラインを取り消すには、マウスを右クリック/[プロ パティ]コマンドを使って、トレーススプレッドシート を表示させます。 [トレースの設定]タブをクリックし、 次に、X軸およびY軸のオフセット欄が現れるまで右 にスクロールしてから、その設定を削除または変更し ます。すべての設定を元の値に戻すには、[スケール リセット]ボタンをクリックします。



アライン(位置合わせ)する前のクロマトグラム



最初のピーク同士をアライン(位置合わせ)した結果

ストレッチ

ストレッチ機能では、クロマトグラムを別のクロマトグラムに 合わせて2点間で縮めたり、引き延ばしたりすることができま す。ストレッチする手順は以下の通りです。

- クロマトグラムウィンドウで右クリックし、[オペレー ション]/[ストレッチ]コマンドをクリックします。
- 2. 引き延ばす(または縮める)基準となる最初のクロマト グラムの2点(または2ピーク)を選択します。
- 2番目のクロマトグラム上の2点を選択します。これ らの2点間のクロマトグラムが、元のクロマトグラム で指定された2点に合わせて引き延ばされるかまたは 縮められます。

ストレッチ設定を取り消すには、

 クロマトグラムウィンドウで右クリックし、[プロパティ]コマンドをクリックします。[トレースの設定]タブ をクリックし、X軸およびY軸オフセット欄が現れる まで右にスクロールし、その設定を削除または変更し ます。すべての設定を元の値に戻すには[スケールリセ ット]ボタンをクリックします。







下のクロマトグラムを上のクロマトグラムに合わせて 引き延ばした結果

ノーマライズ

この機能を使って、複数のクロマトグラムを最初のクロマトグ ラムの高さに合わせてノーマライズ(正規化)することができま す。この場合、選択されたピークの高さが、最初のトレースで 選択されたピークの高さと一致するように調整が行われます。 このコマンドを選択すると、最初のトレースでピークの始点と 頂点を選択するよう指示があります。次に、正規化するトレー スでピークの始点と頂点をクリックするよう指示があります。

設定を取り消すには、マウスを右クリックし、[プロパティ]コ マンドを使ってトレーススプレッドシートを表示させます。 [トレースの設定]タブをクリックし、X軸およびY軸オフセッ ト欄が現れるまで右にスクロールし、その設定を削除または変

更します。すべての設定を元の値に戻すには、[スケールリセット]ボタンをクリックします。



ノーマライズ実行前のクロマトグラム



ノーマライズ実行後クロマトグラム

数学的な演算

クロマトグラムウィンドウからトレースの数学的な演算ができ ます。数学的な演算を実行するには、

- 1. マウスを右クリックし、[オペレーション]メニューか ら実行したいコマンドを選択します。
- 2. 演算を実行するためのウィンドウが表示されます。 演算結果はウィンドウに反映されます。

実行可能な数学的な演算についてはクロマトグラムのオペレー ションを参照してください。

平滑化(スムージング)

選択されたデータファイルに対して 9 点の Savitsky-Golay ス ムージングを行うには、

- クロマトグラムウィンドウでマウスを右クリックし、 [オペレーション]/[スムージング]コマンドをクリックし ます。[トレースをクリックしてください]という指示 がウィンドウに表示されます。
- 2. 平滑化するクロマトグラムをクリックします。その結果で得られたトレースがウィンドウ内に表示されます。



平滑化前のクロマトグラム



平滑化されたトレースが元のトレースとともに表示されたところ

微分計算

クロマトグラムを一次微分または二次微分するには、

- マウスを右クリックし、[オペレーション]/[一次微分]ま たは[二次微分]コマンドをクリックします。[トレース をクリックしてください]という指示がウィンドウに表 示されます。
- 計算を行いたいクロマトグラムをクリックします。計算されたトレースがウィンドウ内に表示されます。



ー次微分前のトレース



次微分トレースが元のトレースとともに表示されたところ



二次微分トレースが元のトレースとともに表示されたところ

たし算

クロマトグラムウィンドウで2つのトレースをたし算するには、

- マウスの右ボタン/[オペレーション]/[たし算]をクリックします。
- [最初のトレースをクリックしてください]という指示 がウィンドウ内に表示されます。マウスでクロマトグ ラムをクリックして最初のトレースを選択します。
- [2番目のトレースをクリックしてください]という指示 が表示されます。マウスでクリックして最初のトレー スに足すトレースを選択します。計算された結果のト レースがウィンドウ内に表示されます。

注

この演算は、両トレースのサンプリング周戌が同じてないればなりません。

ひき算

クロマトグラムウィンドウで2つのトレースをひき算するには、

- マウスの右ボタン/[オペレーション]/[ひき算]をクリックします。
- [最初のトレースをクリックしてください]という指示 がウィンドウ内に表示されます。マウスでクロマトグ ラムをクリックして最初のトレースを選択します。

 [2番目のトレースをクリックしてください]という指示 が表示されます。マウスでクリックして最初のトレー スから引くトレースを選択します。計算された結果の トレースがウィンドウ内に表示されます。

注

この演算は、両トレースのサンプリング周囲が同じでないればなりません。

かけ算

クロマトグラムウィンドウで2つのトレースをかけ算するには、

- マウスの右ボタン/[オペレーション]/[かけ算]をクリックします。
- [最初のトレースをクリックしてください]という指示 がウィンドウ内に表示されます。マウスでクロマトグ ラムをクリックして最初のトレースを選択します。
- [2番目のトレースをクリックしてください]という指示 が表示されます。最初のトレースとかけ算するトレー スをマウスでクリックします。計算された結果のトレ ースがウィンドウ内に表示されます。かけ算した結果 のトレースの単位は、[最初のトレースの単位]と[2番 目のトレースの単位]の積となります。

わり算

クロマトグラムウィンドウで2つのトレースをわり算するには、

- マウスの右ボタン/[オペレーション]/[わり算]をクリックします。
- [最初のトレースをクリックしてください]という指示 がウィンドウに表示されます。マウスでクロマトグラ ムをクリックして最初のファイルを選択します。
- [2番目のトレースをクリックしてください]という指示 が表示されます。マウスでクリックして最初のトレー スで割るトレースを選択します。計算された結果のト レースがウィンドウ内に表示されます。この結果は以 下の計算式で行われます。

$$p = \left(\frac{y_1}{y_1^2 + y_2^2}\right) \div y_{mult}$$

ここで、

p = 時間 t における結果のトレースに対して計算された点
 y1 = 時間 t における最初のトレースの点
 y2 = 時間 t における 2 番目のトレースの点
 ymult = トレースを µ V から表示単位へ変換するトレースの y
 乗数

ユーティリティ

ユーティリティ

[ユーティリティ]メニューで、現在のクロマトグラムウィンド ウを保存、コピー、印刷することができます。これらの機能を 使うには、マウスを右クリックして[ユーティリティ]メニュー を使います。



ユーティリティ	アクション
印刷	現在のクロマトグラムの表示をプリン タへ送信します。

ユーザーガイド

ユーティリティ	アクション
クリップボードヘコピー	現在のクロマトグラムウィンドウをメ タファイルとしてクリップボードへコ ピーします。
トレースの保存	トレースをクリックし[名前を付けて保 存]ダイアログを開きます。

トレースの印刷

このコマンドは現在のクロマトグラムウィンドウの表示をプリ ンタへ送信します。

クリップボードヘコピー

クロマトグラムウィンドウの内容をクリップボードへコピーす るには、クロマトグラムウィンドウで右クリックし、[ユーテ ィリティ]/[クリップボードへコピー]コマンドを選択します。

このコマンドは、現在のクロマトグラムウィンドウをメタファ イルとしてクリップボードへコピーします。 コピーしたメタ ファイルは、Microsoft Word や、クリップボードをサポートし ているその他のアプリケーションに貼り付けできます。 なお Microsoft Word に貼り付けるときは、[編集]/[形式を選択して貼 り付け]/[図]コマンドを使用してください。

トレースの保存

トレースを保存するには、

- 1. [ユーティリティ]/[トレースの保存]コマンドを選択しま す。
- 2. 保存したいトレースをクリックします。
- [名前を付けて保存]ダイアログが表示され、ファイルの保存先やファイルの種類が確認できます。
15 グラフィカルプログラミング

グラフィカルプログラミング

グラフィカルプログラミングメニューでは、表示したクロマト グラムをクリックすることでインテグレーションテーブルやピ ーク/グループテーブルを設定できます。これらのコマンドは、 機器ウィンドウの下部にあるグラフィカルプログラミングツー ルバーからも利用することができます。グラフィカルプログラ ミングツールバーを表示するには、

- メニューの[表示]/[表示オプション]コマンドをクリック します。
- 2. [インテクレーションイベント]を選択し、[ツールバー を表示する]ボックスをオンにします。

グラフィカルプログラミングでは以下のコマンドが使用できま す。

コマンド	動作
ピーク幅	クロマトグラム上で選択した 点のピーク幅をテーブルへ挿 入します。
検出感度	クロマトグラム上で選択した 点の検出感度をテーブルへ挿 入します。
肩ピーク処理	クロマトグラム上で選択した 点の肩ピーク処理をテーブル へ挿入します。
解析オフ	クロマトグラム上で選択した 点の解析オフをテーブルへ挿 入します。

コマンド	動作
谷渡り処理	検出されたベースラインに対 して谷渡り処理を設定しま す。
ベースライン水平処理	クロマトグラム上で選択した 点に対してベースライン水平 処理を実行します。
後方ベースライン水平処理	クロマトグラム上で選択した 点に対して後方ベースライン 水平処理を実行します。
最下点ベースライン水平処理	クロマトグラム上で選択した 点に対して最下点ベースライ ン水平処理を実行します。
テーリング処理	テーリング処理を実行しま す。
リーディング処理	リーディング処理を実行しま す。
最小ピーク面積	検出されたピークに対して最 小ピーク面積を設定します。
反転ピーク処理	検出されたピークに対して反 転ピーク処理を設定します。
簡易グルーピング	検出されたピークに対して簡 易グルーピングを設定しま す。

コマンド	動作
同定ピークの変更	同定されたピークの代わりに 別のピークを、キャリブレー ションされたピークとして設 定します。
マニュアルベースライン	ベースラインをマニュアル設 定します。
マニュアルピーク	ピークの開始点と終了点をマ ニュアルで定義します。
垂直分割	ピークの垂直分割を実行しま す。
ピーク開始点変更	ピークの開始点を変更しま す。
ピーク終了点変更	ピークの終了点を変更しま す。
ベースライン移動	ベースラインをマニュアルで 移動します。
ベースラインリセット	ベースラインをリセットしま す。
谷渡りベースラインリセット	谷渡りベースラインリセット を実行します。
ピーク保持時間調整	ピークの保持時間を調整しま す。
グループ範囲調整	グループ範囲を調整します。

コマンド	動作
シングルピーク設定	ピークをピークテーブルへ追 加します。
ピーク指定	複数のピークをピークテーブ ルへ追加します。
グループ指定	グループをグループテーブル へ追加します。
サンプリング間隔	クロマトグラムのサンプリン グ間隔を設定します。

16 データ収集およびコントロール

データ収集およびコントロール

[コントロール]メニューのコマンドは、データ収集と機器のコントロールに関したものです。一般に、データ収集には2つの方法があります。1) シングルラン: 1回の注入に対するデータ収集を行います。2) シーケンスラン: 注入回数、メソッド、データファイル名およびキャリブレーションを定義したシーケンステーブルをあらかじめ作成しておき、それを使って一連のデータ収集を自動的に行います。なお、[コントロール]メニューに追加されるコマンドは機器構成に依存します。

シングルランによるデータ収集

データを収集する方法は2つのあります。1つはシーケンス ラン(複数試料の測定)、もう1つはシングルラン(単独試料の測 定)です。データ収集のためにシングルランを行うには、分析 に使用するメソッドと収集したデータを保存するためのファイ ル名を指定する必要があります。

注

データ収集に使用するメソッドは、その機器件において、データを収集するようにチャンネルを選択し、サンプリング速度 分析時間が指定されていなければなりません。

シングルランを行うには、[シングルラン]ボタン クするか、メニューから[コントロール]/[シングルラン]コマン ドを選択します。以下のダイアログが表示されます。

シンクプルラン			×
→分析情報 サンフル ID: メソット ¹ : テ [*] ータハ*ス: テ [*] ータハ*ス: テ [*] ータハ*ス: 繰り返し回数:	CVEZChrom Elite¥Methods¥multilevel calibration me CVEZChrom Elite¥Data CVEZChrom Elite¥Data アカスタムルポートEDBI		スタート(S) キャンセル(Q) ヘルフ*(<u>H</u>)
定量結果の補正 サンパル量: 内部標準物質量 補正係数: 希釈係数:		□ ヘ [~] -スラインチェック ラン開始 回時	奼

分析情報

この部分では、測定に使用するファイルを指定します。

サンプル ID

測定する試料のサンプル ID を入力します。これにはテ キストおよび数字を含めることができ、データファイ ルとともに保存されます。このフィールド横にある矢 印ボタンをクリックして、あらかじめ定義されている ID の番号の中から選択することもできます。

メソッド

データ収集と解析に使用するメソッドのファイル名を 入力します。そのメソッドがデフォルトのディレクト リ内にない場合は、メソッドのパス名をすべて入力し てください。このフィールド横にある[ファイル]ボタ ンをクリックして、ディスク上で使用可能なメソッド リストからメソッドを選択することもできます。

データパス

測定でデータ収集されるデータを保存するためのパス 名を入力します。ファイルオープンボタンをクリック して、ディスク上のリストからパスを選択します。

データファイル

ディスクにデータを保存するためのファイル名を入力 します。このフィールド横にある矢印ボタンをクリッ クすることより、あらかじめ指定されている名前を選 択することもできます。既存のファイルが[public]とい う語を含むパスを持つディレクトリに保存されている 場合を除き、既存のファイル名と同じ名前は使用でき ません。例えば、データファイルを[C:\Public\Date]と いう名前のディレクトリ内に保存すると、このディレ クトリに保存されているデータファイルは上書きでき ます。ソフトウェアは自動的に[.dat]という拡張子を付 けます。

分析回数

測定したい回数を入力します。測定は、指定した通り にデータファイル名に番号をつけながら、試料測定が 終了するまで確認することなしに自動的に続けられま す。シングルランのシーケンスが中止され、どのパラ メータも変更せずにシングルのデータ収集を繰り返す と、測定番号は、続きの番号から開始されます。例え ば、測定番号 101 から開始して4回の測定を設定し、 次に 102 回目の測定中に中止したとします。測定を再 開すると、次の測定番号は 105 となります。サンプル ID も自動繰上げ番号を設定している場合、同様に自動 的に繰り上げられます。

カスタムレポート印刷

このボックスをチェックすると、測定終了時にメソッドカスタムレポートが印刷されます。

定量結果の補正

この部分では、濃度の計算方法に影響する数値を入力 することができます。メソッドをキャリブレーション する前に、シングルランでデータを収集する場合は、 これらの数値をデフォルトのままにしておきます。

サンプル量

この数値は、濃度を計算するときに除数として使用されます。これは、計量による試料間の誤差を補正する ために使用したり、注入で検出された量を求めるので はなく試料の総量に対するパーセント値を求めたりし たい場合に使用します。

内部標準物質量

キャリブレーション測定を行う場合、[内部標準物質 量]はメソッドのピークテーブルから採用されます。未 知試料の測定の場合には、未知試料内の内部標準物質 の量を入力します。

補正係数

測定で使用される 1~3 個の乗数を入力します。定量 されたすべてのピークには、これらの係数が掛けられ ます。

希釈係数

測定で使用される 1~3 個の除数を入力します。定量 されたすべてのピークは、これらの係数で割られます。

キャリブレーションを行う

試料をキャリブレーション用試料として使用する場合 は、このボックスを選択します。このボックスをクリ ックすると、以下のフィールドおよびオプションが使 用可能となります。

キャリブレーションレベル

このキャリブレーション試料の濃度レベルを入力しま す。これが1点検量線の場合には1を入力します。

検量線をすべて削除(CCA)

試料を測定する前に、使用するメソッドから既存のキ ャリブレーションファクターをすべて削除したい場合 は、このボックスをクリックします。

このレベルの検量線を削除(CCL)

試料を測定する前に、このレベルに対する既存のレス ポンスファクターを削除したい場合は、このボックス をクリックします。

検量線を印刷(CPT)

試料の測定後にキャリブレーションレポートを印刷したい場合は、このボックスをクリックします。

繰り返し測定値を削除(CRP)

試料を測定する前に、既存のキャリブレーションレベ ルから既存の繰り返し測定値をすべて削除したい場合 は、このボックスをクリックします。

繰り返し測定値の平均(APR)

このキャリブレーションレベルに対する測定値の平均 値を取りたい場合は、このボックスをクリックします。

ベースラインチェック

このボックスは機器構成で[ベースラインチェック]オ プションを選択した場合に表示されます。このボック スをチェックすると分析ラン実行時にベースラインテ ストが実行されます。

ラン開始

初期値では分析はすぐに実行されます。ランの実行開 始時間を設定したい場合には
の ボタンをクリックし ます。 [スケジュールラン]ダイアログが表示され、開 始時間の設定が行えます。

スタートアップ/シャットダウン

機器がこの機能をサポートしている場合、スタートア ップ/シャットダウンが表示されます。このボックスに より分析ランをスタートアップ試料あるいはシャット ダウン試料として設定できます。これらのボックスが チェックされると、それは機器のスタートアップ/シャ ットダウン ルーチンのトリガーとなります。詳細は機 器コントローラの取扱説明書を参照してください。

[シングルラン]ダイアログの設定が完了したら、[スタート]ボ タンをクリックしてデータ収集を開始します。データが収集さ れ、ディスクに保存される間、現在のデータはクロマトグラム ウィンドウに表示されます。測定終了後、メソッドのパラメー タにしたがってクロマトグラムが解析され、指定してあればレ ポートが作成されます。データ収集が終了しても解析が行われ ない場合、解析結果を見るには[解析]ボタンをクリックします。

シーケンスランによるデータ収集

シーケンスを作成し、保存すると、これを使用して、データの 収集、解析ができるようになります。 シーケンスを使ってデ ータ収集を開始するには、

- 機器ウィンドウで[シーケンスラン]ボタン をクリ ックするか、[コントロール]/[シーケンスラン]コマンド を選択します。
- 使用するシーケンスを入力または選択し、実行範囲、 モード、印刷と確認のオプションを設定し、[スター ト]ボタンをクリックします。

ユーザーガイド

シーケンスラン		×
- シーゲンス情報 - シーゲンス名: Enterprise¥Projects	¥Default¥Sequence¥multilevel calibration.seq 📓	スタート(<u>S</u>) キャンセル(<u>C</u>)
 「実行範囲」 「すべて(A) ○ 選択(E) ○ 範囲(R) 	モード ケー・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	<u>^⊮フ°(H)</u>
 ・日刷 カスタムレホペートE印刷 「	 □ 確認 ○ 1回ごとに一時停止 ○ キャリアレーションセットごとに一時停止 	
ラン開始 回時	電子大ル受信者 「スケー時 」 終了またはエラー時 宛先 」	

シーケンス情報

使用する[シーケンス名]を入力するか、[ファイル]ボタンをクリックすることにより、利用可能なシーケンスのリストからシーケンスファイルを選択します。

実行範囲

シーケンスを実行したい範囲を選択します。

すべて

シーケンス中のすべての測定を実行する時にはこれを クリックします。

選択

シーケンススプレッドシート内の一連の測定をハイラ イトして選択してあり、その部分だけを実行する時に はこれをクリックします。

範囲

実行したい測定範囲を入力します。例えば「4-6」と入 カすると、シーケンスの4、5、6行が測定されます。 「4-」と入力すると、4行目から最後の行までが測定されます。

モード

タワー、処理モード、ブラケットキャリブレーション について選択します。 タワー

機器として[デュアルタワー]が設定されている場合は、 シーケンスラン用としてタワーモードを選択すること ができます。[デュアル]、[フロント]および[リア]が選 択できます。

処理モード

データを処理するためのモードを選択します。選択で きるオプションは機器構成に依存します。機器がその 機能をサポートしていない場合、そのオプションはグ レーで表示され選択できません。オートサンプラによ っては[サンプル前処理モード]も選択できます。 詳細 な情報や制約についてはサンプル前処理モードの項を 参照してください。

ブラケットキャリブレーション

ブラケット(挟み込み)キャリブレーションを実行した い場合は、ブラケットキャリブレーションのモードを 選択します。 詳細についてはブラケット(挟み込み)キ ャリブレーションの項を参照してください。

なし ブラケットキャリブレーションを行いません。

標準 標準モードのブラケットキャリブレーションを実 行します。

標準/検量線削除 各キャリブレーションセットの処理 が開始される前に検量線を削除して、標準モードのブ ラケットキャリブレーションを実行します。

シーケンスシーケンスモードのブラケットキャリブレ ーションを実行します。

シーケンス/再計算 シーケンスモードのブラケットキャリブレーションを実行し、さらに戻ってキャリブレーションを計算します。

確認

1回ごとに一時停止

各行の間のシーケンスを一時停止させて解析結果を確 認する場合にクリックします。

83

キャリブレーションセットごとに一時停止

各キャリブレーションセットの後で、シーケンスを一 時停止させたい場合にクリックします。 キャリブレー ションセットとは、あるシーケンス中に生じる1つま たはそれ以上のキャリブレーションランと定義されま す。

印刷

カスタムレポート印刷

シーケンスの各行に対して、メソッドカスタムレポートを印刷させたい場合にクリックします。

シーケンスレポート印刷

シーケンスレポートを印刷したい場合にクリックします。

ラン開始

初期設定では、分析は即時実行されます。 シーケンス をスタートする日時を設定したい場合は 🕜 ボタンを クリックします。 [スケジュールラン]ダイアログが表 示され、分析開始時刻の設定が行えます。

電子メール受信者

このフィールドは指定されたアドレスへの E-Mail 通知 を有効にするために使用します。

シーケンススタート時に E-Mail 通知を行うには[スタ ート時]を選択します。

シーケンス停止またはエラー発生時に E-Mail 通知を行うには終了またはエラー時を選択します。

ダイアログボックスへの設定が完了したら、[スタート]ボタン をクリックしてシーケンスランを開始します。 ランが始まる とクロマトグラムウィンドウにリアルタイムでクロマトグラム が表示されます。

実行中の測定を終わらせる

実行中の測定を終わらせるには、

- 測定中にツールバー上に表示される[分析中止]ボタン をクリックするか、[コントロール]/[分析中止]コマンド をクリックします。
- 測定をどのようにして中止するかを選択します。
 Agilent Instrument Controller に接続して測定中の場合、
 その測定を実行したユーザーでなければ中止することはできません。

注

[分析中山ボタンを使用する際には、「分析中山ボタンのア イコン表示が聴れた状態に変つるまで、マウスボタンを押したまま にしてください。

分析中止		×
\$	 この分析のみを中止する この分析およびシーケンスランを中止する 現在の分析が完了後にシーケンスランを中止する このユーザーによるランキューアイテムを中止する すべてのランキューアイテムを中止する 	
	OK キャンセル ヘルフ°(<u>H</u>)	

この分析のみを中止する

このコマンドを選択すると、現在進行中の測定を終了 します。それが現在ランキュー内にあるシーケンスの 一部であれば、そのシーケンスが次の測定を続行しま す。

この分析およびシーケンスランを中止する

このコマンドを選択すると、現在進行中の測定を中止 し、それを含むシーケンスを終了します。ほかのラン キューアイテムは続行されます。

現在の分析が完了後にシーケンスランを中止する

このコマンドを選択すると、現在の分析の完了後にシ ーケンスラン終了します。

このユーザーによるランキューアイテムを中止する

このコマンドを選択すると、現在の分析の完了後、ユ ーザーによって追加されたすべてのランキューアイテ ムが終了します。他のユーザーによって追加されたラ ンキューアイテムは実行されます。

すべてのランキューアイテムを中止する

このコマンドを選択すると、現在進行中の測定を中止し、同時にランキュー中のすべての項目を終了します。

注

測定が中止されると、それまでのデータはデータファイル に保存れます。ただし、そのデータの解析おうれません。中止し た測定のレポートを作成したり、解除また見たりしたい場合は、そ のデータファイルを解抗しなければなりません。

注

ランキューアイテムシングルラン、シーケンスラン、解析 を追加たユーザーではない場合、あるいは解析専用機を使用して いる場合、「分析中山ボタンにコンクセスできません。

分析時間の延長

測定中にデータ収集時間を延長することができます。

- メニューから[コントロール]/[分析時間の延長]コマンド をクリックします。
- 延長する時間を入力するための下図のようなダイアロ グが表示されます。
- 延長する時間を分単位で入力し、[OK]ボタンをクリックします。



ランキューアイテムシングルラン、シーケンスラン、解析 を追したユーザーではない場合、あるいは解神専用線を使用して いる場合、「分析時間の延長コマンドにはアクセスできません。

注

17 GPIB の停止

GPIB 基板が付属した2つの機器を使用する場合に重要なこと は、機器の電源を切る前に機器アプリケーションを閉じる(も しくは機器ウィンドウを閉じてからサーバーを閉じる)ことで す。そうしないと、もう一方の機器の GPIB 基板がフリーズす る可能性があります。

18 チュートリアル

ここでは、EZChrom Elite の操作方法の基礎を説明します。メ ソッドを設定し、データファイルを取り込みます。次に、イン テグレーションを行う上で適切なものにメソッドを最適化し、 キャリブレーションを行うという、各段階の練習を行ってくだ さい。チュートリアルファイルを使ってこのソフトウェアを操 作し、その使用法を十分に理解してください。データファイル 構造、アプリケーションウィンドウ機能、ファイルの開き方や 保存方法の詳細は、[基本操作]に記載されています。

注 このチュートリアルは、EZChrom *Eliteと、SS420xを使用*るためのアナログ機器がインストールされ ており、すべての機器が取り付けられ、正く設定れていることを 前提しています。デジタル機器を設定するには、オンラインへルプ を参照してデータ収集のための設定を完させてください。

チュートリアルの概要

チュートリアルの内容を以下に示します。初めて EZChrom Elite を使用する場合は、チュートリアルのすべてのステップ を実行してください。EZChrom Elite の前のバージョンからの アップグレードの場合は、チュートリアルに従って、以前使用 していたものとの違いを理解してください。

Step 1: データ収集用メソッドを作成する(オプション)

- データ収集時間およびサンプリング 間隔を設定する
- メソッドを保存する
- 予備試料を測定する
- インテグレーションパラメータをグ ラフィカルに設定する

Step 2: シングルレベルキャリブレーションを設 定する

- キャリブレーションしたいピークに 名前を付ける
- シングルキャリブレーションを実行 する

Step 3: サンプルシーケンスを作成して、実行す る

Step 4: チュートリアルファイルを使う

- マルチレベルキャリブレーションを 見る
- ピークテーブルを調べる
- カスタムレポートを検討する
- 条件により、インテグレーションパ ラメータを変更する

19 チュートリアル - データ収集と解析

ここでは、データシステムを使用してデータを収集し、インテ グレーションパラメータを最適化し、キャリブレーション用標 準試料をセットして分析を行い、さらにサンプルシーケンスを 作成および実行します。高度な操作方法については、このマニ ュアルの後半で説明します。

機器およびメソッドウィザード

内蔵された機器およびメソッドウィザードを使用することによ り、システムを簡単に使用することができます。これらのウィ ザードにより、メソッドを作成または変更するのに必要なダイ アログを簡単に呼び出すことができます。メソッドウィザード を使用してチュートリアルメソッドを作成する場合は、ウィザ ードボタンによってその時のチュートリアル手順と関連したダ イアログを表示させてください。

メソッドウィザードは、機器ウィザードボックスで[メソッドの作成/変更]と表示されたボタンをクリックすることにより、 起動することができます。



このボタンをクリックすると、メソッドウィザードが表示され、 このウィザードの使用方法を選択できます。

メソット・ウィザート	* - 汎用機器	×
	新しいメソットを作成する 現在のメソットを変更する ディスクのメソットを変更する	<u>₹₹₽₽₽₩©</u> ₽ ^µ7°(<u>H</u>)

「新しいメソッドを作成する」ボタンを選択して、チュートリア ルメソッドの作成を開始します。

このボタンを選択すると、メソッドウィザードにより、アプリ ケーションウィンドウにボタンが設定されます。このボタンで メソッド作成に関するすべてのダイアログを表示させることが できます。また、保存ボタンも提供してくれます。

データ収集用メソッドの作成

データファイルを取り込むための最初のステップは、データ収 集用メソッドを作成することです。この時点では、その方法に ついて、最後のピークが検出されるまでどのくらいの分析時間 が必要であるかを確認するだけで十分です。サンプリング間隔 は、デフォルト値(高速キャピラリー測定以外では、ほとんど のサンプルに対して十分な値)を使います。



現白機を制御していない場合、この工程をスキップして、、行風のデータおよびメソッドファイルを使用することもできます。

データ収集のための設定

データ収集時間およびサンプリング間隔の設定は、[機器条件] ダイアログで行います。このダイアログは、メソッドウィザー ド使用時、最初に表示されるダイアログです。あるいは、[メ ソッド/機器条件]をクリックするか、ツールバーの[機器条件] ボタンをクリックします。ダイアログボックスが表示されまし たら、必ず[データ収集]の左横のボックスをクリックして、こ のチャンネルのデータ収集を有効にしてください。

注

機
おントロールオプションを使用している場合、指定した機
おプションが提供るタブが、機
除件
画面に表示されます。
詳細
はオンラインヘルプを参照してください。

····································	200		요 한 한 것
サンフリング 💿 周波数:	12.52	Hz Hz	
○ 間隔:	-	ms 👘	1.
このサンフリング条件に適した最小ビーク幅:		0.027 min	
分析時間	20.00	min	
· 遅れ時間:	0	min	

[周波数]によるデータサンプリングの場合、データ速度は Hz(サンプル数/min)で選択されます。[間隔]によるサンプリン グの場合、データ間の秒数(sまたはms)を選択できます。デフ ォルトは[周波数]で、ほとんどのクロマトグラフィーアプリケ ーションは周波数で設定されています。

分析時間が十分で、最後のピークを検出できることを確認して ください。溶出にかかる時間がわからない場合は、分析時間を 例えば 100min のような長い分析時間に設定してください。 (最後のピークが溶出されれば、測定を手動で停止させること

ユーザーガイド

ができます。)最初の測定が終了すれば、分析時間をより適切 な値に調整することができます。

使用する機器にリモートスタートを取り付けた場合は、[**トリ** ガー]タブをクリックし、そのタイプに合わせて、トリガーの タイプを選択します。(トリガーが設定されていない場合、こ のタブは表示されません。)各機器のトリガーは、機器の構成 で設定されます。

■ 装置条件	
● 検出器 タイフ [%] 外部: マニュアル:	1 ♪ トリカー 外部 アニュアル オーマブノフェルにはマニコフルインジェクタからのスタート信号を使用して分析を開始する時はこのタイフを選択します。 「Enter」キーを押して分析を開始します。シークンスランでは分析と分析の間で一時停止します。
	[開始]を外ックをすると同時に取り込みを開始します。 シーケンスランでは分析と分析の間で一時停止しません。

外部 外部トリガーによりサンプリングを開始します。

マニュアル オペレーターがサンプリングを開始しなけれ ばなりません

なし [スタート(開始)]をクリックすると同時にデータ 収集を開始します。

機器条件の設定が完了したら、タブウィンドウ右上隅の[X]ボ ックスをクリックして、ダイアログを終了します。

メソッドを保存する

データ収集用パラメータを設定したら、名前を付けてメソッド を保存します。[**ファイル/メソッド/名前を付けて保存**]をクリ ックすると、下図のようなダイアログボックスが表示されます。

画 Food Analysis.met 画 pda estd.met 画 Ion Analysis.met 画 Vitamin Analysis.met 画 multilevel calibration.met 画 multilevel calibration1.met 画 multilevel calibration2.met 「アイル名(以): Test	<u>キャノセル</u> ヘルプ(<u>H</u>)
画 multilevel calibration.met 画 multilevel calibration1.met 画 multilevel calibration2.met	
画 multilevel calibration1.met 画 multilevel calibration2.met アイル名(N): Test	
マイル名(N): Test	
アイリレ(J)#単実見\1.2 x'/ット'ファイル(* met) ▼1	
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	
\$E	

ファイルをどのフォルダに保存するか選択します。[**ファイル** 名]フィールドに、「Test.met」という名前のメソッドを保存し ます。

予備試料を測定する

ここでは、前のステップで保存した機器条件を使用して、初め てデータ収集を行います。また、チュートリアルの後半のステ ップを考慮して、標準試料の測定を行ってください。

> 測定を開始するために、[コントロール/シングルラン]を選択するか、または[シングルラン]ボタンを クリックします。下図のようなダイアログが表示 されます。

・25 4/F1資半限 サンフッル TD:			- •	+eUTD-va2&170	スタート(S)
パット	C:¥EZChrom Elite¥Metho	ds¥multilevel calibration.	mer 🗃	■ 検量線をすべて削除(OCA)	キャンセル(©)
データハペス:	C:¥EZChrom Elite¥Data		- 📰	■ このレベルの検量線を削り除(OCL)	^ルフ°(<u>H</u>)
データファイル:				■ 検量線を印刷(OPT)	
繰り返し回数:	1	□ カスタムレホペートモロ刷	_	 	
定量結果の補正 サンプル量:			1		
内部標準物質量:			1	□ ^`-スラインチェック	
補正係数:	1	1	1	- ラン開始	
希釈係数:	1	1	1	即時	

- 2. [サンプル ID]フィールドに[テスト]と入力します。
- [メソッド]フィールドにメソッド名とそのパスを 入力するか、または[メソッド]フィールド横の[フ ァイルを開く]ボタンをクリックしてディスクのフ ァイルリストから Test.met ファイルを選択します。
- [データパス]フィールドにデータファイルを保存 するパスを入力するか、またはこのフィールド横 の[ファイルを開く]ボタンをクリックすると表示さ れるリストからパスを選択します。
- 「データファイル]フィールドにデータファイルを 保存する名前として[Test.dat]と入力します。この フィールドには、他と重複しないファイル名を入 力する必要があります。したがって、以前にこの チュートリアルを行ったことがある場合は、まず このファイルをディスクから削除するか、または 別のディレクトリに移動しておいてください。
- この時点ではキャリブレーションを行わないため、 ただ[スタート]をクリックして、標準試料を注入す るだけです。データが収集される様子がクロマト グラムウィンドウにて確認できます。

クロマトグラムを見ながらインテグレーションパラ メータを設定する

EZChrom Elite では、単純なクロマトグラフィー測定に適した デフォルトインテグレーションパラメータを使用します。しか し、特殊なインテグレーション処理が必要な場合があります。 そのような特殊なインテグレーション処理は、ご使用のメソッ ドに[インテグレーションタイムイベント]として入力されます。 このイベントは測定の始めにおいてすべてのピークに適用する ことも、あるいは、クロマトグラムのある中間点に挿入して特 定のピークに適用することもできます。下記の手順に従って、 解析オフにするイベントをメソッドに追加してみます。

注 ソフトウェアに介属しているmulticalibration level.datファイルの一つを使って行えます。

- この時点では、最後に取り込まれたクロマトグラムが、クロマトグラムウィンドウに表示されています。もし表示されていない場合は、[開く]ボタンをクリックし、[データを開く]を選択し、表示されたリストからデータファイルを選択します。あるいは、Elite付属のファイルから選んでも構いません。
- [解析]ボタンをクリックしてクロマトグラムをイ ンテグレーションし、ベースラインを表示させま す。

注

ボタンの機能やからない場合は、カーソルをそのボタン 上に種類クリックしないこと)させてください。ボタンの名前または 機能を示すツールチップボックスが表示されます。

 [解析オフ]イベントを追加するには、ツールバーの[解析オフ]ボタンをクリックします。ウィンドウ 最下部のステータスバーの指示に従って、クロマ トグラム上で解析したくない範囲の開始点でマウ スをクリックします。(ピークのある部分を選択し てください。)次に、インテグレーションを再開し たい点でもう一度クリックします。下図のような ダイアログが表示されます。

術力			2
開始時間:	3.015	min	〒~7兆へ追加(<u>T</u>)
終了時間:	6.516	min	キャンセル
値:	0	-	^#J*
XY9FA44	◇)を追加 (すべ)	てのテ~タ)	
C このテ~タフ	71ዚወ ው 1ላ እኮ§	追加	解析実行(A)

クリックした点が、[開始時間]、[終了時間]として示されま す。クロマトグラムのこの2点間では、解析が行われま せん。このイベントに数値は不要のため、[値]は0に設定 されます。イベントをメソッドに追加して、クロマトグラ ムの再解析を行うには、[解析実行]をクリックします。[テ ーブルへ追加]を選択すると、イベントをインテグレーショ ンイベントテーブルに追加するだけで、再解析は行いませ ん。

[インテグレーションテーブルへ追加]のボタンを選択する と、イベントはメソッドの[インテグレーションテーブル] にイベントが追加され、このメソッドで分析された全クロ マトグラムに使用されます。[マニュアルインテグレーシ ョンテーブルへ追加]のボタンを選択すると、イベントは 現在のクロマトグラムの[マニュアルインテグレーション] テーブルに追加され、このクロマトグラムにのみ適用され ます。

クロマトグラムは、新しいインテグレーションイベントを 使用して描き直されます。なお、操作3で選択した部分 は、インテグレーションがオフになるため、これらの選択 領域についてはベースラインが引かれないことに注意して ください。

 インテグレーションイベントは、インテグレーション テーブルに入力されます。このテーブルを表示するに は、コマンドリボンの[インテグレーションテーブル] ボタンをクリックします。インテグレーションテーブ ルが表示されます。解析オフィベントがテーブルに 追加されたことを確認してください。

- 5. [解析オフ]イベントを削除するには、メソッドから[解 析オフ]イベント名または行番号(#)をクリックし、次 にキーボードのキーを押します。[編集/切り取り]コマ ンドを使ってイベントを削除することもできます。 こ の場合、必要に応じて[編集/貼り付け]コマンドでこの イベントを再度挿入することができます。イベントを 実際にテーブルから削除せずに、削除した結果を一時 的に表示する場合は、そのイベント横のチェックボッ クスをクリックしてその選択を解除します。チェック ボックスを再度クリックすると、イベントが再度設定 できます。
- インテグレーションテーブルの作業が終了したら、テ ーブル右上の[X]ボタンをクリックしてテーブルを閉じ、 クロマトグラムに戻ります。

キャリブレーションの設定

定量分析(標準試料の測定結果から算出する)を行いたい場合は、 キャリブレーションを行うメソッドを設定する必要があります。 マルチキャリブレーションの設定方法の詳細は、このリファレ ンスガイドの[メソッド開発]に記載されていますが、このチュ ートリアルでは、シングルキャリブレーションを設定します。

どのタイプのキャリブレーションをセットアップする場合にも、 次のステップが含まれます。

- キャリブレーションしたいピークを同定し、標準試料の量(濃度)をメソッドに入力する
- 標準試料(1つ以上)を測定する
- 検量線を確認する

キャリブレーションピークのデータを入力する最も簡単な方法 は、まず実際に標準試料を測定し、次に保存されているデータ ファイルを使ってキャリブレーションピークをグラフィック的 に定義することです。チュートリアルの通り行ってきた場合、 すでに標準試料がディスクに保存されているはずです。保存さ れていない場合は、このチュートリアルの[予備試料を測定す る]の項に示された手順に従って、標準試料を測定するか、ま たはデータシステムのデータファイル1つを選択してください。

- [開く]ボタンをクリックし、保存したデータファイル を開いて、[データを開く]を選択します。次に、リストから標準試料データファイルを選択するか、または Eliteのファイルからどれか1つを選択します。ファイルが現在のデータクロマトグラムウィンドウに表示されたら、[解析]ボタンをクリックしてクロマトグラム をインテグレーションし、ベースラインを表示させます。
- ツールバーの[シングルピーク設定]ボタンをクリック します。最初に検出されたピークのダイアログボック スが表示されます。

保持時間				0.37 min	終了	(<u>D</u>)
ピーク名:	アセト	×			NH7'	°(Ħ)
濃度レベル:	1	100				
単位			mg/L			
ISTD ID #			1			
Ref. ID #			1		ドーり番号:	1
保持時間の許容	李幅				」 と り留 り ビーク数:	11
• 湘村		+/-	5	%		
C 絶対:		*/-	0.009	. min		
			戻る(日))次へ(<u>N</u>)>>>		

最初に検出されたピークに対する保持時間が表示され ます。このピークをピークテーブルに追加する場合は、 このピークに対する設定作業を行います。このピーク をピークテーブルに追加しない場合は、[次へ]ボタン をクリックします。クロマトグラム中の特定のピーク に移動したい場合は、そのピークをマウスでクリック します。ダイアログに表示された保持時間は、選択し たピークの保持時間に変わります。

ピーク名

このフィールドに化合物名を入力します。

濃度レベル

濃度レベル1が表示されます。この濃度レベルに対す るこの化合物の量(濃度)を入力します。(注:この化合物 について複数のレベルを設定する場合は、濃度レベル 2とそのレベルに対する量を入力します。必要なキャ リブレーションレベルについて、設定を完了するまで、 各レベルの濃度を入力します。)

単位

結果の表示に使用される単位を入力します。

ISTD ID

内部標準法でキャリブレーションを実行する場合は、 この化合物の内部標準物質ピークの ID #を入力します。 これはピークテーブルからのピーク ID 番号です。この 番号がわからない場合は、あとでピークテーブルに追 加しても構いません。

Ref ID

相対保持時間法を実行する場合は、このピークに対し て使用する保持時間リファレンスピーク ID #を入力し ます。これはピークテーブルのピーク ID 番号です。こ の番号がわからない場合は、あとでピークテーブルに 追加しても構いません。リファレンスピークは、保持 時間がずれのようなクロマトグラフィー条件の変化が 生じた場合に、キャリブレーションされたピークを探 し出すために使用されます。

保持時間の許容幅

このピークに対する保持時間の許容幅の設定方法を選 択します。許容幅は、予想保持時間からわずかにずれ ている場合に、ピークを同定するために使用されます。 相対

ピークの予想保持時間に対する割合(%値)に基づいて 保持時間の許容幅を計算する場合にクリックします。 許容幅の計算に使用したい%値を入力してください。

絶対

ピークの絶対許容幅を入力する場合にクリックします。 保持時間の許容幅に使用したい値を分単位で入力しま す。

- 次の検出ピークに移るには、[次へ]ボタンをクリックします。前の検出ピークに戻るには、[戻る]ボタンをクリックします。現在のピーク番号および全ピーク数がダイアログボックスの右側に表示されます。ピークテーブルへのピークの追加が完了したら、[終了]ボタンをクリックします。定義したピークはそれぞれ、ピークテーブルの行として表示されます。なお、ピークテーブルにすでにピークが含まれていた場合、上記で定義したピークは存在するピークに追加されます。ピークテーブルを表示するには、ツールバーから[ピーク/グループテーブル]ボタンをクリックします。
- ピークを定義したら、[ピークテーブル]ボタンをクリ ックするとキャリブレーションピークテーブルが表示 されます。[同定ピーク]タブが選択されていることを 確認します。定義した各ピークが、保持時間やそのほ かの入力パラメータとともにピークテーブルスプレッ ドシート中に行として表示されます。

E	= ピーウ / グループ テーブル ×								
Γ	同定ビーク グループ								
L	#		名前	ID	保持時間	許容幅	Ref. ID #	ISTD. ID #	
L	1	V	Peak1	1	5.72931	0.114	0	0	
L	2	V	Peak2	2	6.5675	0.131	0	0	
L	3	V	Peak3	3	8.27347	0.165	0	0	
L	4	V	Peak4	4	8.53972	0.171	0	0	
L	5	V							

スプレッドシートの情報は、行や列をスクロールして 編集または変更することができます。ピークテーブル の詳細内容については、本マニュアルの[キャリブレー ション]の項に記載されています。 この時点では、ほかの列に情報を入力しないでください。スプレッドシートウィンドウ右上隅のXボックスをクリックして、ピークテーブルを閉じます。

以上の操作により、キャリブレーションを行う準備が整いました。キャリブレーションを行う前に、メソッドをディスクに保存してください。この場合、[保存]ボタンをクリックし、次に [メソッドを上書き保存]をクリックします。または、メニューから[ファイル/メソッド/上書き保存]を選択します。(メソッドを別の名前で保存する場合は、[ファイル/メソッド/名前を付けて保存]コマンドを使います。)

保存されたデータファイルを使ったキャリブレーション

ソフトウェアが未知試料について量(濃度)を計算するには、標準試料の各成分の面積がメソッドに含まれていなければなりません。メソッドにこの面積を入れるには、標準試料を再度キャリブレーション測定として行うか、または、[解析/シングルレベルキャリブレーション]コマンドを使って、保存されたデータファイルによるキャリブレーションを行います。保存データファイルを使用してキャリブレーションを行う場合は、次の手順に従ってください。

 メニューバーから[解析/シングルキャリブレーション] コマンドを選択します。キャリブレーションのための ファイル情報を入力するためのダイアログボックスが 表示されます。

解析/シンクル レベル キャリブレーション		×
報析情報 サンフル ID: Test メウトド: OVEZChron EliteVEnterpriseVProjectsVDefaultWheth: データンパン: OVEZChron EliteVEnterpriseVProjectsVDefaultWData データンパム: Testdat アンワンク4. Testdat デンシンパン: アンリンム・トを印刷する 定量結果の補正 1 内部標準物質量: 1 1 1 希疑係統: 1	・ ・	23-15) ++>24%

 最初のフィールドにサンプル ID を入力します。チュ ートリアルの通り操作を行っている場合は、[Test]が 入力されています。

- キャリブレーションを行うメソッドの名前を、パス名 を含めて入力します。メソッド名が不確かな場合は、 [メソッド]フィールド横の「ファイルを開く」ボタンを クリックして、リストから選択してください。チュー トリアルでのメソッドは、[Test.met]です。
- データパス名を入力するか、または「ファイルを開く」 ボタンを使ってリストから選択します。
- [データファイル]フィールドにキャリブレーションデ ータファイル名を入力します。[ファイルを開く]ボタ ンを使ってディスクからファイル名を選択することも できます。チュートリアルで使われる名前は [Test.dat]です。
- [定量結果の補正]については、"1"のままとします。これらの値の使用法については、[メソッド開発]を参照してください。
- [キャリブレーション]チェックボックスをクリックし、
 [キャリブレーションレベル]に"1"を入力します。この メソッドは現在、キャリブレーションを行っていない ため、キャリブレーションまたは繰返しに関するボッ クスを選択する必要はありません。ただし、メソッド の内容が不確かな場合は、開始する前に[検量線をすべ て削除]ボックスをクリックしてください。
- ダイアログボックスでの設定終了後、[スタート]ボタンをクリックします。分析が終了すると、クロマトグラムのインテグレーションが行われ、キャリブレーション化合物として同定されたピークの面積がメソッドに入力されます。この面積を使って検量線が作成されます。この時点で、メソッドに対して1つのレベルについてキャリブレーションが行われるため、このメソッドを使って未知試料のキャリブレーション化合物を含む試料の測定と解析に使用できます。

サンプルシーケンスの作成と実行

オートサンプラを使用して試料を注入している場合には、注入 する試料およびそれらを取り込んで分析する方法を定義する必 要があります。この場合には、サンプルシーケンスを使用しま す。サンプルシーケンスを使って、キャリブレーション試料と 未知試料の両方を取り込むことができます。また、保存データ ファイルを自動的に再解析することもできます。シーケンスの 作成および使用については、[シーケンス]の項を参照してくだ さい。ここでは、キャリブレーション試料と、未知試料2、3 点を取り込むための単純なシーケンスを作成し、使用してみま す。

新しいシーケンスを作成するには、[ファイル/シーケンス/シーケンスウィザード]コマンドをクリックします。
 下図のような[シーケンスウィザード]ダイアログボックスが表示されます。

パッド: Elite¥Enterprise¥Projects¥Default¥Method¥Test.met データファイルの種類 ・ ・ 新規(分析用) ・ 既存(解析用) ・ 既存(解析用) 定量結果の補正 1 ウパッル量: 1 内部標準物質量: 1 補正係数: 1 1 1
2 キャンセル 〈 戻る(B) 次へ(W) 入 完了

- データ収集に使用するメソッドを入力するか、または [ファイルを開く]ボタンをクリックして、リストから メソッド名を選択します。
- [メソッド]フィールドでは、このチュートリアルで使用しているメソッドの名前(パスを含む)を入力します。 パス名が全部わからない場合は、このフィールド横のファイルボタンをクリックし、表示されたリストからメソッド名を選択することもできます。チュートリアルの通り操作を行っている場合は、メソッド名として [Test.met]を入力してください。[定量結果の補正]ついては、それぞれデフォルト値のままとしておきます。

 [新規(分析用)]ボタンをクリックします。データ収集 に必要な情報の入力が求められます。[次へ]ボタンを クリックします。

シーケンス ウィザート・ 一未知試料					×
	サンフ [®] ル ID: データ ハ*ス: データ ファイル: 未知試料の数: 未知試料ごとの線 □ 各繰り返し分析	<###> <m> C¥EZChrom Elite¥Enterprise¥P <id> い返し回数: fを1行ずつに分けて作成</id></m>	rojects¥Default¥Dat 3 1		
	0	キャンセル く 戻る(B)	[次へ№>]	完了	

- [サンプル ID]フィールドでは、試料の識別名を入力します。青色の右矢印をクリックし、[行番号]および[メソッド名]を選択します。これは、各試料がシーケンスの行番号と現在のメソッド名で識別されることを意味します。
- [データパス]フィールドにデータを保存するパス名を 入力するか、または[ファイルを開く]ボタンをクリッ クして既存のパス名を選択します。
- 7. [データファイル]で、青色の右矢印をクリックし、サンプルIDを選択します。これにより、操作5で選択したサンプルIDによって、データファイルに名前が付けられます。数字による識別番号を使うと、各測定のデータファイルは各々固有の名前が付けられます。これにより、もし、既存のデータファイル名でデータ収集を行おうとした場合に発生するエラーを防止することができます。
- 8. [未知試料の数]には"3"を入力します。そのほかのフィ ールドは、デフォルト値のままとします。

ユーザーガイド

9. [次へ]ボタンをクリックして続行します。

シーケンス ウィザート・ キャリプレーション				×
	キャリフ・レーション ID: キャリフ・レーション パクス: キャリフ・レーション ファイル: キャリフ・レーション ファイル: キャリフ・レーション レベルのう レベル毎の繰り返し回聴 シークンスのスタート時 各繰り返し分析を 合 線数のキャリフ・レーション セット間の未知時料料 (● キャリフ・レーション バ ● 最初のキャリフ・レー		Projects¥Default¥Dat [1 1 1 する	
	Q	キャンセル < 戻る(B)	次へ(№)> 完	7

10. このダイアログでは、キャリブレーション ID とキャリ ブレーションファイル名が、自動的に前のダイアログ と同じ設定となります。[キャリブレーションレベルの 数]を"1"に設定し、[レベル毎の繰り返し回数]も"1"のま まとします。そのほかのボックスはすべてチェックマ ークを外したままにして、[次へ]ボタンをクリックし ます。

ユーザーガイド

ን ን የንገር በረጉ የስት		×
	サマリー ▼ <u>サマリー しホートに未知試料分析を含める</u> ▼ サマリー しホートに未知試料分析を含める > システム適合性試験 「 システム適合性試験 「 システム適合性試験を行う @ 最初のキャリアルーションセットのみ、 ○ すべてのキャリアルーションセット QO チェック 「 次の間隔でQOチェックを行う 10 未知試料ごと ■ メソット 内容レホートを含む	
	2 キャンセル < 戻る(B) 次へ(11) > 完了	

- 11. 試料をサマリーレポートおよびキャリブレーションサ マリーレポートに含めるためのチェックボックスを選 択します。そのほかのボックスは選択しないでおきま す。
- 12. [**完了**]ボタンをクリックします。先に指定したファイ ル名とメソッド名が示されシーケンススプレッドシー トが表示されます。

🔲 ୬-ታን:								
#	ステータス	分析タイプ	レベル	濃度オーハンーライトン	回数	サンプル ID	メソット	デ*ータフ
1		CAL SMB 💽 🕨	1		1	001 Test.met	Test.met 💿	001 Test.m
2		サマリー(SMR)	0	N/A	1	002Test.met	Test.met	002Test
3		サマリー(SMR)	0	N/A	1	003Test.met	Test.met	003Test
4		サマリー終了(SME)	0	N/A	1	004Test.met	Test.met	004Test
5								
_ ∢								Þ
- 13. この時点で、キャリブレーション試料1点、未知試料 3点を測定するためのシーケンスが設定されます。な お、サンプル ID およびデータファイル名は、重複しな いように自動的に番号が付けられています。 最初にキャリブレーション標準試料を測定するには、 それをキャリブレーション測定に指定する必要があり ます。これは、シーケンスウィザードによって自動的 に行われます。未知試料のレベルは常に"0"です。「分 析タイプ]フィールドの情報は、複数の指定がある場合、 省略した形で表示されます。選択できる分析タイプを 表示させるためには、このフィールド横の矢印をクリ ックします。分析タイプの詳細内容は、[シーケンス] の項を参照してください。 このチュートリアルで作成したメソッドはシングルキ ャリブレーションのため、キャリブレーションに必要 な標準試料は1点です。
- シーケンスファイルを保存するには、シーケンスファ イルの保存ダイアログボックスで保存/シーケンスファ イルを保存ボタンを選択するか、メニューバーからフ ァイル/シーケンス/名前を付けて保存を選択します。
 C:\datasystem\Sequence フォルダ(ここで datasystem はデータシステムをインストールしたフ ォルダ)を選択し、名前に Test あるいは Test.seq と 入力します。
- 注 デフォルトでは、シーケンスファイルにはseq 拡長が行ちれて保存れます。

シーケンスファイルを実行する

作成したシーケンスファイルを使用してデータ収集を行うには、 ツールバーにある[シーケンスラン]ボタンをクリックするか、 またはシーケンススプレッドシートでマウスを右クリックして、 [シーケンスラン]を選択します。下図のようなダイアログボッ クスが表示されます。

シーケンスラン		×
 >-ケンス情報 >-ケンス名: Enterprise¥Projects 実行範囲 すべて(4) ご 遅沢(£) ご 範囲(B) 	¥Default¥Sequence¥multilevel calibration.seq サート・ ダワー: N/A 処理モート: /-マル フラグタットキリフルーション: なし ▼	スタート(<u>S</u>) キャンセル(<u>C</u>) ヘルフ°(<u>H</u>)
- 日日刷 □ カスタムレホート日日刷 □ >ケンスレホート日日刷 - ラン開始- □ 四時う □ 0	 ● 確認 ● 1回ごとに一時(停止 ● キャリフレーションセットごとに一時(停止 ● 電子・ノール受信者 ■ スタート時 ■ 終了また(はこうー時 宛先 	

[シーケンス名]フィールドにシーケンスファイル名とパスを入 力します。このフィールド横のボタンをクリックしてディスク のシーケンスファイルリストから選択することもできます。そ のほかのパラメータはデフォルト設定のままにしておきます。

標準試料1点、続いて未知試料3点を注入するためにオートサンプラの準備をします。最初の試料を注入する準備ができたら、 [スタート]ボタンをクリックします。シーケンス終了時には、 標準試料1点、未知試料3点のデータファイルが取り込んで保存され、各未知試料の分析結果レポートとシーケンスのサマリ ーレポートが作成されます。

シーケンスサマリーレポートはまだ定義していないため、[シ ーケンスレポート印刷]ボックスにチェックマークを付けない でください。

20 チュートリアルファイルを使用した操作

ここでは、データシステムの付属機能について、理解を深める ために、チュートリアルファイルを使用します。

多点検量線を表示させる

メソッドのキャリブレーションが完了したら、検量線および関 連データを[検量線]機能を使って検量線およびそのデータを確 認することができます。ここでは、データシステムの 「multilevel calibration.met」ファイルを使用して、キャリブレ ーションされた多点検量線を見てみます。

- [ファイル]/[メソッド]/[開く]コマンドをクリックして multilevel calibration.met メソッドファイルを開きま す。ファイルは、\datasystem\Methods フォルダ内に あります ("datasystem"は、ソフトウェアをインストー ルしたフォルダ となります)。
- [multilevel calibration.met]ファイルを開いたら、[検 量線]ボタンをクリックするか、または[メソッド/検量 線]コマンドを選択します。下図のようなウィンドウが 表示されます。



ユーザーガイド

キャリブレーションされたピークは、ウィンドウ右上 のピークリストに表示されます。表示された検量線は、 ハイライトされたピークの検量線です。別のピーク名 をハイライトすると、そのピークの検量線を表示する ことができます。画面上部には、現在の検量線を作成 するために使用された面積を含むすべてのキャリブレ ーション情報を表示するスプレッドシートが表示され ます。

 検量線の近似方法のデフォルト設定は、[折れ線]です。 別の近似方法の検量線を重ねて表示するには、検量線 ボックスでマウスを右クリックします。[検量線の表 示]を選択し、次に[直線]を選択します。新しい直線の 検量線が、折れ線近似曲線に重ね書き表示されます。 右側のボックスには、表示されたそれぞれの検量線の 式と寄与率(r²)の計算結果が示されます。ただし、折 れ線近似曲線の場合は、定義上、データに完全に適合 するため、寄与率は計算されません。

[検量線]のさらに詳しい説明は、[メソッド開発]の項を参照してください。ウィンドウを閉じるには、[検量線]ウィンドウ右上隅の[X]ボックスをクリックします。

ピークテーブルを調べる

ピークテーブルは、メソッドキャリブレーション情報が納められるところです。ここでは、ソフトウェアで提供されるメソッドを使用してピークテーブルを調べ、ピークテーブルについての理解を深めます。

- C:\datasystem\Methods フォルダ("datasystem"は、ソ フトウェアをインストールしたフォルダ となります) 内の multilevel calibration.met メソッドファイルを 開きます。
- 「multilevel calibration.met」メソッドを開いたら、ツ ールバーにある[ピーク/グループテーブル]ボタンをク リックしてピークテーブルを表示します。下図のよう なピークテーブルが表示されます。

🗖 Ľ [°] ーク / クブループ [®] テーブブル								
同定ビーク グルーフ°								
	#		名前	ID	保持時間	許容幅	Ref. ID #	ISTD. ID #
	1	V	Peak1	1	5.72931	0.114	0	0
	2	V	Peak2	2	6.5675	0.131	0	0
	3	V	Peak3	3	8.27347	0.165	0	0
	4	V	Peak4	4	8.53972	0.171	0	0
	5	V						
·		-						

 [同定ピーク]タブには、このメソッド内のキャリブレ ーションされたピークに関するすべてのキャリブレー ション情報を含むテーブルがあります。右にスクロー ルすると、次々に別の列が現れ、各列ともキャリブレ ーションパラメータを示しています。キャリブレーシ ョンの各レベルにおけるそれぞれの各化合物のキャリ ブレーション量を示す[レベル]という列もあります。 なお、指定のキャリブレーションに必要なパラメータ しか表示されないようピークテーブルをカスタマイズ することができます。ピークテーブルのカスタマイズ の方法および各列の詳細については、このマニュアル の[メソッドの開発]の項を参照してください。

カスタムレポートを調べる

レポートを作成するために使用できるレポートテンプレートが 付属されています。レポートの一例を表示するには、 [レポート/表示/External Standard]コマンドを使います。(現在 のクロマトグラムがすでに解析されていることを確認してくだ さい。)標準的なレポートが画面のウィンドウに表示されます。

外部標準法レポト

データファイル名: ¥¥Ezchrom-j1¥Enterprise¥Projects¥Default¥Data¥multi calibration level 5.dat メソットファイル名: ¥¥Ezchrom-j1¥Enterprise¥Projects¥Default¥Methods¥multilevel calibration.met ユーザー名: 田中 分析日時 2001/12/07 13:15:33 日刷日時 2001/12/07 13:46:05

Channel A結果

Pk #	名前	保持時間	面積	ESTD 濃度
1	Peak1	5.729	778821	95.753
2	Peak2	6.568	666961	36.552
5	Peak3	8.273	633704	116.345
6	Peak4	8.540	993963	97.842
1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.				
·····	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	3073449	346.492

メソッドにカスタムレポートが定義されていない場合、システムは標準レポートフォーマットを使ってレポートを印刷します。

必要があれば、標準レポートテンプレートを修正し、またはカ スタムレポート機能を使って全く新しいレポートを作成するこ とができます。カスタムメソッドレポート、またはカスタムシ ーケンスレポートを作成することできます。詳細は、「カスタ ムレポート」の項で説明します。

「multilevel calibration.met」ファイルのカスタムレポートテン プレートを表示するには、まずファイルを開きます。([開く] ボタンに続いて[メソッド]をクリックし、次にファイルリスト から選択します。) コマンドツールバーの[**カスタムレポート**] ボタンをクリックして、メソッドカスタムレポートエディタを 呼び出します。現在のメソッドのカスタムレポートテンプレー トが表示されます。



ウィンドウの下部および横に表示されているスクロールバーで カスタムレポートテンプレートをスクロールしてみてください。 カスタムレポートを編集または作成する前に、「カスタムレポ ート」の項をよく読んでください。メソッドに戻るには、カス タムレポートウィンドウ右上隅のXボックスをクリックしま す。

条件により、インテグレーションパラメー タを変更する

コンピュータ化されたデータシステムを使用することのもう1 つの重要な点は、インテグレーションイベントを使ってインテ グレーションをカスタマイズできるということです。ここでは、 「multi calibration level3.dat」データファイルを使用して、メ ソッドにインテグレーションタイムイベントを設定し、これら のイベントの影響を調べることにより、理解を深めます。各イ ンテグレーションイベントの詳細については、「インテグレー ション」の項に示します。

- multi calibration level 3.dat データファイルを開きます。ファイルは、\Data フォルダ内にあります。 multilevel calibration.met を開くため結果から開くの オプションを選択します。
- [解析]ボタンをクリックしてクロマトグラムを解析し、 ベースラインを表示させます。



注

0

カーソルの垂直線はマウスに従って種加ます。カーソル 位置の保守背は、クロマトグラムウィンドウの上部に表示されます

[谷渡り処理]イベントを追加して、4つの大きなピークを解析します。この場合は、インテグレーションツールバー[谷渡り処理]ボタンをクリックします。次に、最初の大きなピークの前でマウスをクリックし、最後のピークの直後でもう1度クリックします。

谷渡り処理		×
開始時間:	5.240 min	テーフルへ追加(工)
終了時間:	9.155 min	キャンセル
値:	0	^//7°
💿 র্যস্র্যাম্বর্ন		
C 207°-91	解析実行(A)	

イベントの始点(開始時間)および終点(終了時間)を表示するダ イアログボックスが現れたら、[**解析**]ボタンをクリックし、ク ロマトグラムを表示させます。イベント領域内のピークが[谷 渡り処理]イベントでインテグレーションされ、それに応じて ベースラインが調整されていることを確認してください。



 ツールバーから[インテグレーションテーブル]ボタン をクリックします。テーブルに谷渡り処理イベントが 追加されていることを確認してください。

🔲 ՈՆՇԵՆ–ՆգՆ Շ–ԾՆ							
#	1 ፈላኒንኑ		開始時間	終了時間	値		
1	▶ 検出感度	-	0.000	0.000	50		
2	☑肩ヒ⁰ーク処理		0.000	0.000	50		
3	■ L°ーク幅		0.000	0.000	0.2		
4	☑ 谷渡り処理		5.240	9.155	0		
5							

- 谷渡り処理イベントの番号をマウスでクリックし、次 にメニューバーから[編集/削除]を選択してこのイベン トを削除します。この場合は、イベント右のチェック ボックスの選択を解除し、クロマトグラムを再解析す ると、このイベントをテーブルに残したまま、谷渡り 処理イベント無しと同じ状態でインテグレーションを 試すことができます。
- [インテグレーションテーブル]テーブル右上隅のXボ ックスをクリックしてテーブルを閉じます。インテグ レーションイベントの追加と削除に慣れるまで「multi calibration level3.dat」データファイルを使用してイン テグレーションイベントの追加と削除の練習を繰返し 行ってください。

以上で、チュートリアルは終了です。マルチキャリブレーショ ンの作成法、カスタムレポートの作成法およびサンプルシーケ ンスの作成および使用法については、リファレンスガイドで詳 しく説明します。本ソフトウェア使用時は、広範囲にわたるオ ンラインヘルプを有効に活用してください。



G4650-90008