

OpenLAB ChemStation 積分イベントの紹介

2016/08

Agilent Technologies

この紹介資料では

積分イベントとマニュアル積分

初期設定

～クラシカルとアドバンスド～

自動積分

～最適値の提示～

初期設定のイベント

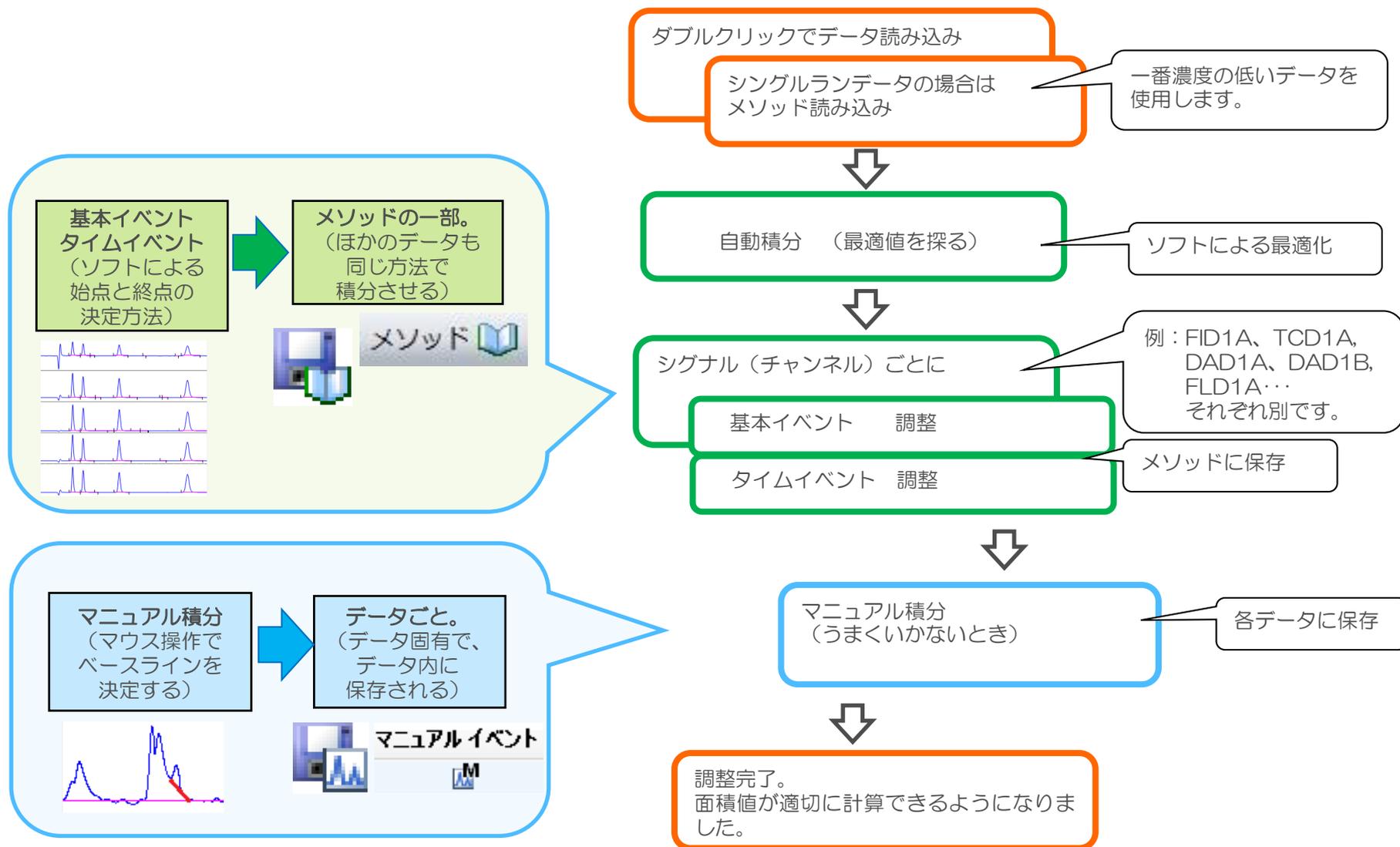
～始点と終点の決定パラメータ～

実践的なアドバイス

タイムイベントの使用方法

マニュアル積分の使用方法

積分イベントとマニュアル積分



積分イベントの表示



積分イベントの表示

1200Infinity (オフライン): データ解析

ファイル(F) メソッド(M) シーケンス(S) 再計算(L) グラフィックス(G) 積分(I) キャリブレーション(C) レポート(R) スペクトル(S) バッチ(B) 表示(V) 中断(A) ヘルプ(H)

シグナル DEF_LC.M

データ解析

シングルラン: DEMO

再計算モード

重ね...	タイプ	日時	オペレータ	バイアル	データファイル	サンプル名	マニ...
		1994/04/19 8:08:...	a.g.h.	バイアル 5	005-0104.D	Isocratic Std. 1	-

積分

キャリブレーション シグナル 純度 スペクトル

レポート: 簡易

ロードした全てのシグナル

DAD1 A, Sig=254.4 Ref=550.100 (DEMO#005-0104.D)

DAD1 B, Sig=230.4 Ref=550.100 (DEMO#005-0104.D)

積分終了。

システム (localhost) 1200Infinity 0 レディ

積分

レポート: 簡易

1) DAD1 A, Sig...#005-0104.D

メソッド マニュアル イベント

全てのシグナルの初期イベント:

積分イベント	値
タンジェント スキム モード	スタンダード
テールピーク スキム高さ	0.00
フロントピーク スキム高さ	0.00
スキム谷比	20.00
ベースライン補正	アドバンスド
ピーク谷比	500.00

シグナルの特定のイベント:

DAD デフォルト

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	5
初期	ピーク幅	0.02
初期	面積リジェクト	5
初期	高さリジェクト	1
初期	ショルダー	オフ

表示されているクロマトグラムを
データ解析のメソッドを使って積分します。

初期設定 ～クラシカルとアドバンスド～

全てのシグナルの初期イベント:

積分イベント	値
タンジェント スキム モード	スタンダード
テールピークスキム高さ	3.00
フロントピークスキム高さ	6.00
スキム谷比	20.00
ベースライン補正	アドバンスド
ピーク谷比	500.00

シグナル特定イベント:

DAD1 A 指定

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	2
初期	ピーク幅	0.1
初期	面積リジェクト	0
初期	高さリジェクト	0
初期	ショルダー	オフ

ベースラインモードを選択できます。

- ・アドバンスド
- ・貫通なし
- ・クラシカル

クラシカルモードでは、

- ・スロープ感度の値の変化に対して敏感なので、ベースラインの始点終点を決めやすい。

- ・スロープ感度の設定が不適切だと、始点終点部分が不適切になる。

アドバンスドモードでは、

- ・タンジェントスキムが自動でできる
- ・ベースライン上昇に追従する。

- ・ベースライン範囲は広めになる。
- ・スロープ感度の値の変化に対して反応しにくい。
(スロープ感度を細かく決められない／細かく決めなくてもある程度の積分ができる)



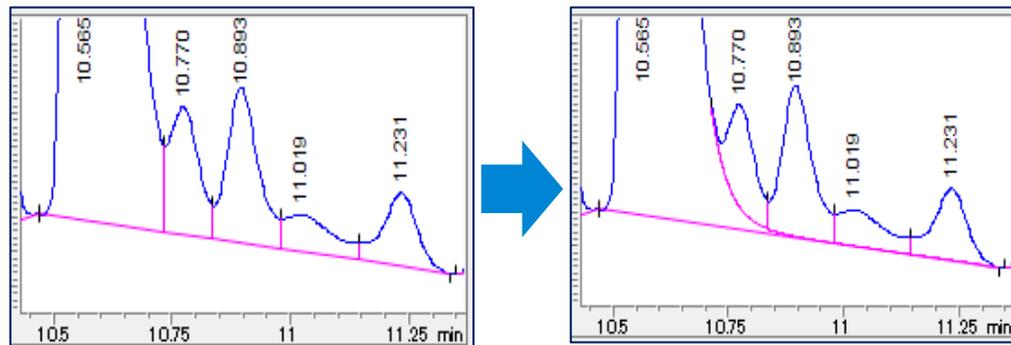
初期設定 ～アドバンスドの特徴～

アドバンスドモードの特徴①

タンジェントスキムが自動でできる

設定例

積分イベント	値
タンジェントスキムモード	スタンダード
テールピークスキム高さ	3.00
フロントピークスキム高さ	6.00
スキム谷比	20.00
ベースライン補正	アドバンスド
ピーク谷比	500.00

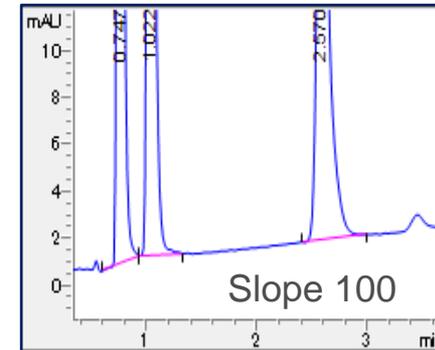
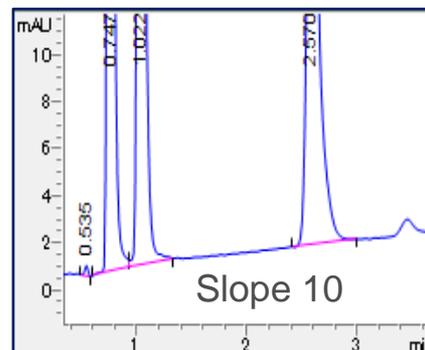
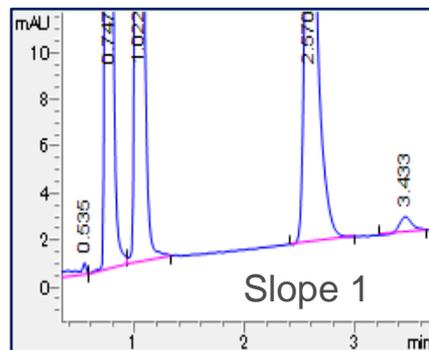
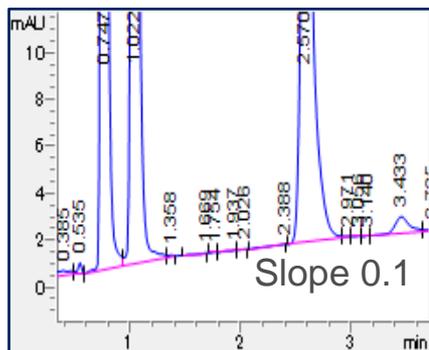
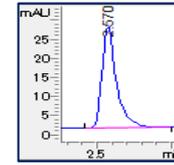
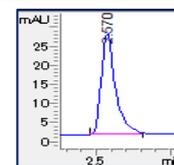


アドバンスドモードの特徴②

- ベースライン範囲は広めになる。
- スロープ感度の値の変化に対して反応しにくい。
(スロープ感度を細かく決められない
細かく決めなくてもある程度の積分ができる)

クラシカル

アドバンスド

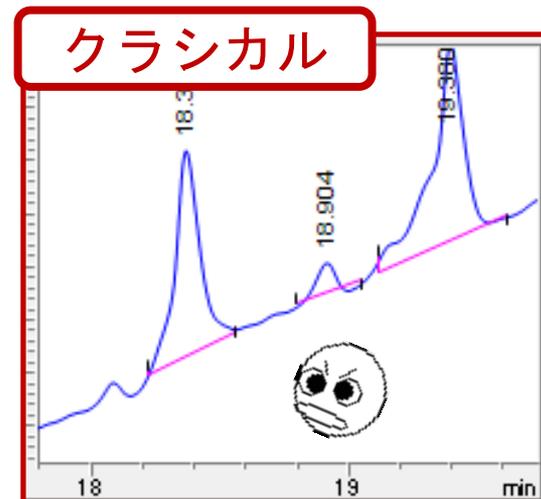
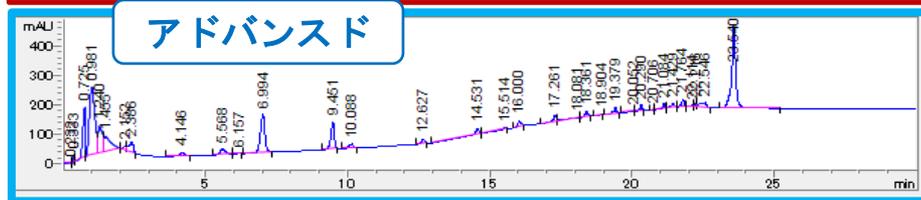
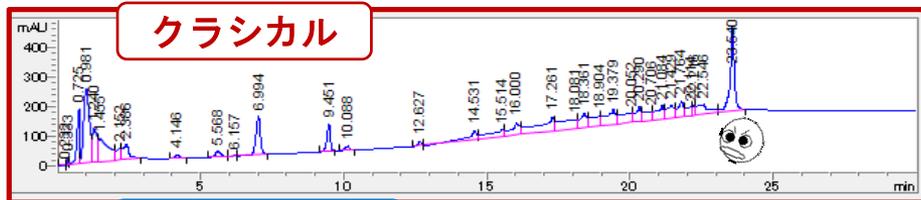


初期設定 ～アドバンスドの特徴～

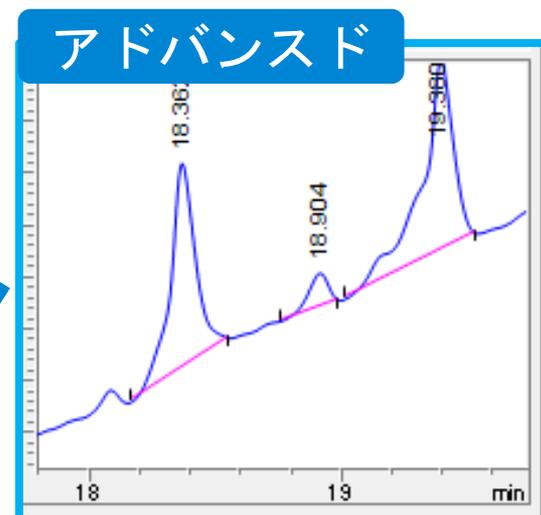
アドバンスドモードの特徴③

ベースライン上昇に追従する。

Slope 20



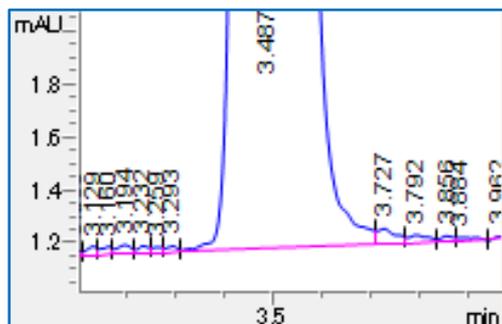
Slopeをあげてみる 20 → 40



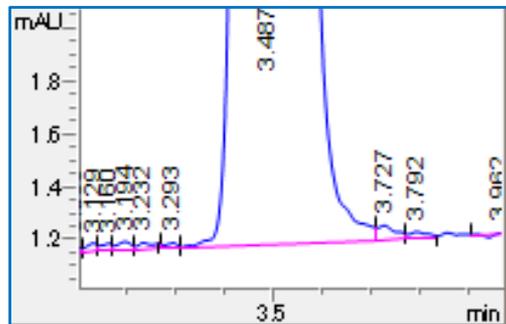
初期設定 ～クラシカルの特徴～

クラシカルモードの特徴

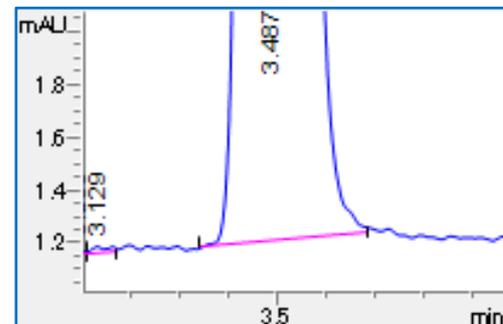
- スロープ感度の値の変化に対して敏感なので、ベースラインの始点終点を決めやすい。



Slope 0.1

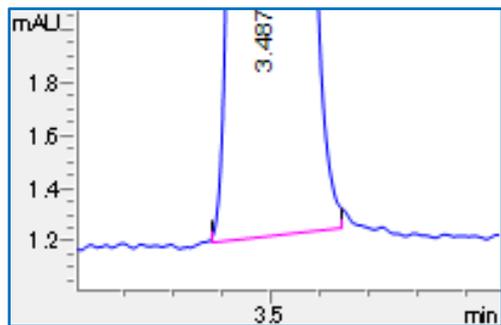


Slope 0.5

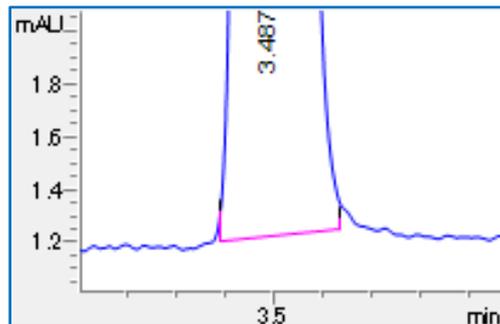


Slope 1

- スロープ感度の設定が不適切だと、始点終点部分が不適切になる。



Slope 5



Slope 10

初期設定のイベント

始点と終点の 決定パラメータ

クラシカルモードでは、
始点と終点は
数値の変化で
敏感に変化します。

全てのシグナルから:

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

イベント テーブル

DAD デフォルト

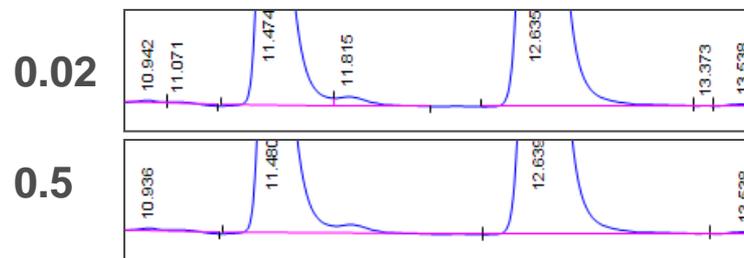
時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	5
初期	ピーク幅	0.05
初期	面積リジェクト	5
初期	高さリジェクト	1
初期	ショルダー	オフ

面積リジェクト- 面積がこの値より小さいピークはすべてレポートされません。

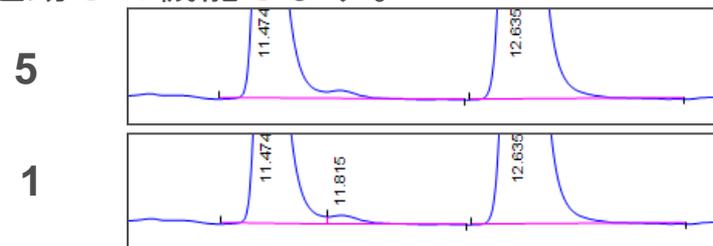
高さリジェクト- 高さがこの値より小さいピークはすべてレポートされません。

ショルダー検出モード- ピークの二次微分係数を使用してショルダーを検出します。

ピーク幅 - 一番狭いピークの幅を入力します。スロープ感度と連動して、ベースラインからピークを識別する能力を決定します。一般には、ピーク幅の値を増加させるとブロードなものとして検出されます。



スロープ感度 - スロープ感度を低くすると、より小さいピークが検出されます。ピーク幅と連動して機能します。



実践的なアドバイス

1. もし、タンジェントスキムをする場合は
テールピークスキム高さを3
フロントピークスキム高さを6
スキム谷比を20に設定する
2. ベースライン補正をアドバンスド
タンジェントスキムモードを新しい指数
に設定する
3. 自動積分で積分を実施する。
しない場合は以下のパラメータを設定して
積分してみる
 - スロープ感度を50（検出器による）
 - ピーク幅は、実際のクロマトグラムの、
一番狭いピークの幅を入力する。
（スパイクノイズではなくピーク）
 - 初期の高さリジェクトを0
 - 初期の面積リジェクトを0
に設定する
4. もし自動積分を使用したら、
 - 初期の高さリジェクトを0
 - 初期の面積リジェクトを0
に設定する
5. もし解析対象のピークが積分されて
いない場合、スロープ感度を調整する。
スロープ感度を低く設定すると
小さなピークまで積分するようになる
6. もしまだうまく積分できないピークが
ある場合はピーク幅を小さくしてみる
7. 必要に応じてタイムイベントを使用する
8. 不要なピークは、高さリジェクトか
面積リジェクトで排除する



タイムイベントの挿入

1行挿入

リアルイベント
シグナルの初期イベント:

1行削除

選択して
クリック

積分イベント	値
ターゲット スキム モード	スタンダード
テールピークスキム高さ	0.00
フロントピークスキム高さ	0.00
スキム谷幅	20.00

シグナルの特定のイベント:
DAD デフォルト

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	5
初期	ピーク幅	0.02
初期	面積リジェクト	5
初期	高さリジェクト	1
初期	ショルダー	オフ

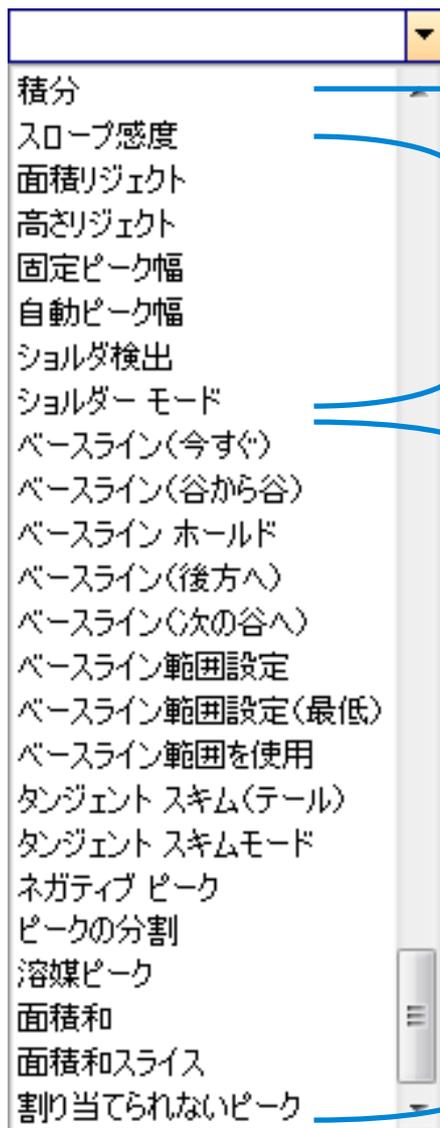
#	時間	面積	高さ	幅	対称	面積%
1	0.747	296.6	104.8	0.045	0.72	30.656
2	1.022	264.3	75.5	0.0528	0.71	27.315
3	2.57	176.7	26.6	0.1014	0.636	18.269
4	5.852	229.9	16.3	0.2127	0.755	23.760

行削除は
ここをクリックして
1行削除ボタンを
クリック

0.022	積分	オフ
0.380	積分	オン
0.786	積分	オフ

- ドロップボックスから、必要なイベントを選択してから、クロマトグラムをクリックします。
- または、タイムイベントの挿入ツールを使用します。
- タイムイベントの削除ツールを使用して、イベントを削除できます。

タイムイベントの種類



積分のオン/オフ

基本設定の変更

時間範囲でのイベント

タイムイベントの紹介①

スロープ感度
面積リジェクト
高さリジェクト

初期の面積リジェクト値：0

初期の高さリジェクト値：0

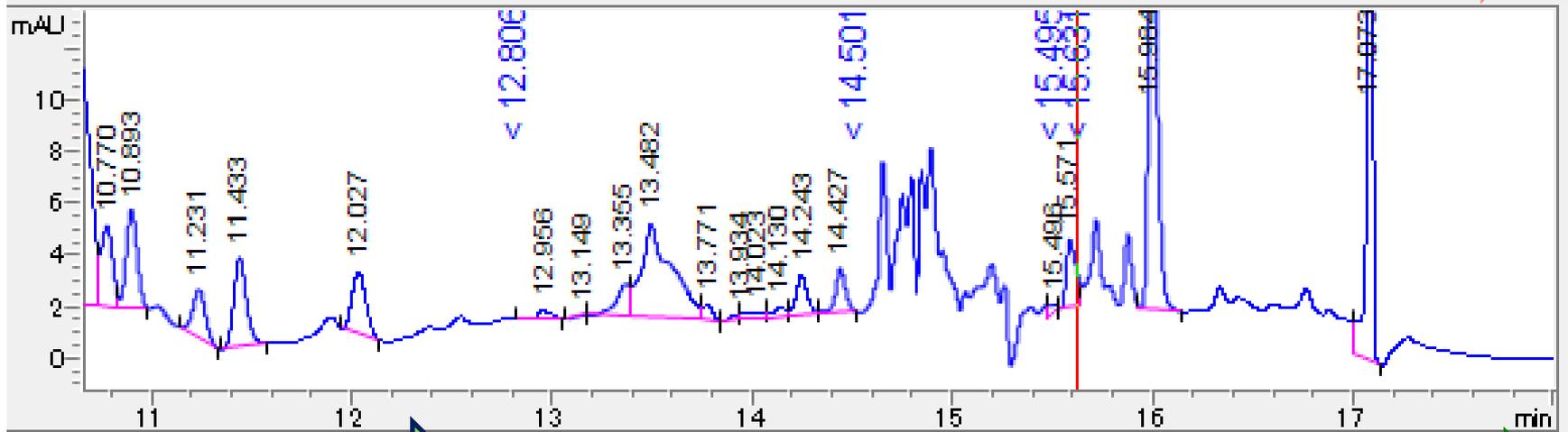
面積リジェクト
値：0

面積リジェクト
値：15

高さリジェクト
値：7

15

高さリジェクト 7



スロープ感度 20

スロープ感度 0.01

初期の
スロープ感度
値：20

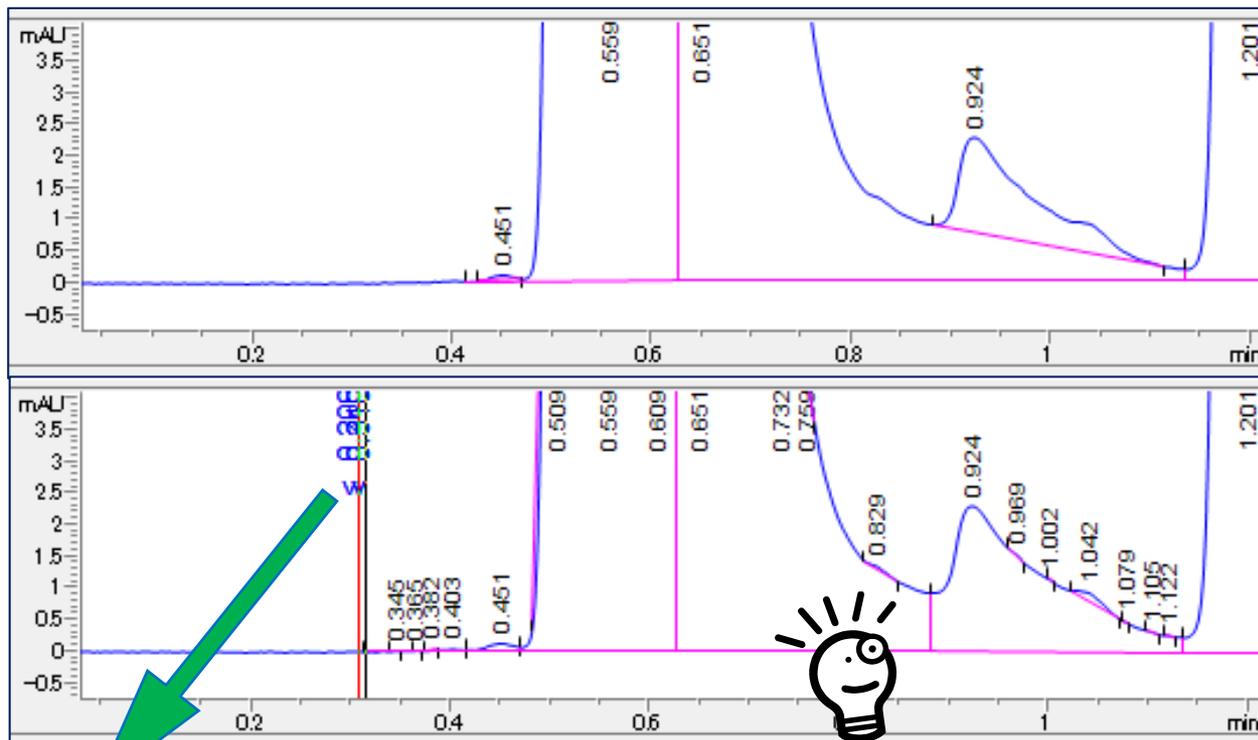
スロープ感度
値：0.01



Agilent Technologies

タイムイベントの紹介②

ショルダ検出
ショルダーモード



時間	積分イベント	値
0.298	ショルダ検出	オン
0.300	ショルダーモード	TAN
0.310	高さリジェクト	0
0.310	面積リジェクト	0
0.310	スロープ感度	0.01

ショルダーを ON にする

ショルダーを TAN (接線) にする

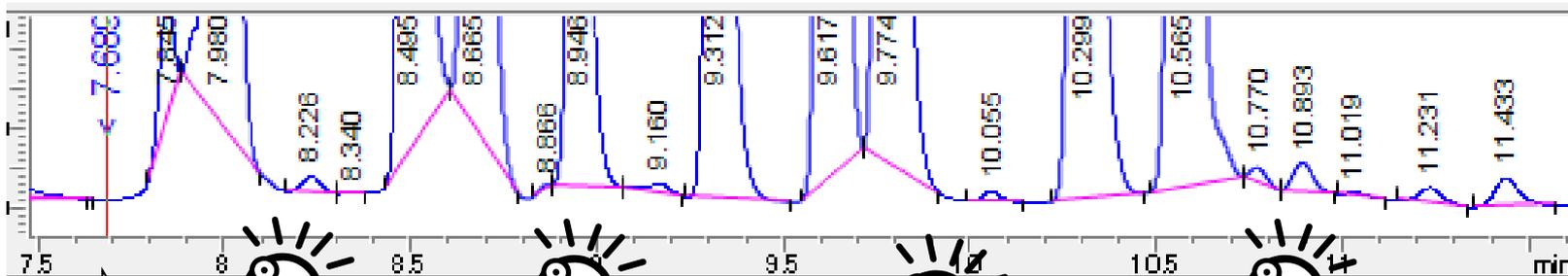
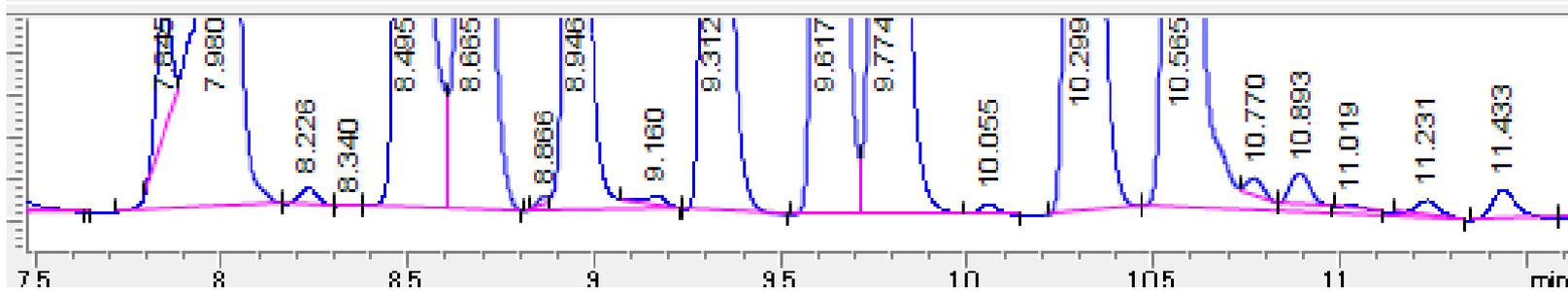
0にする

0にする

小さくする

タイムイベントの紹介③

ベースライン(谷から谷)

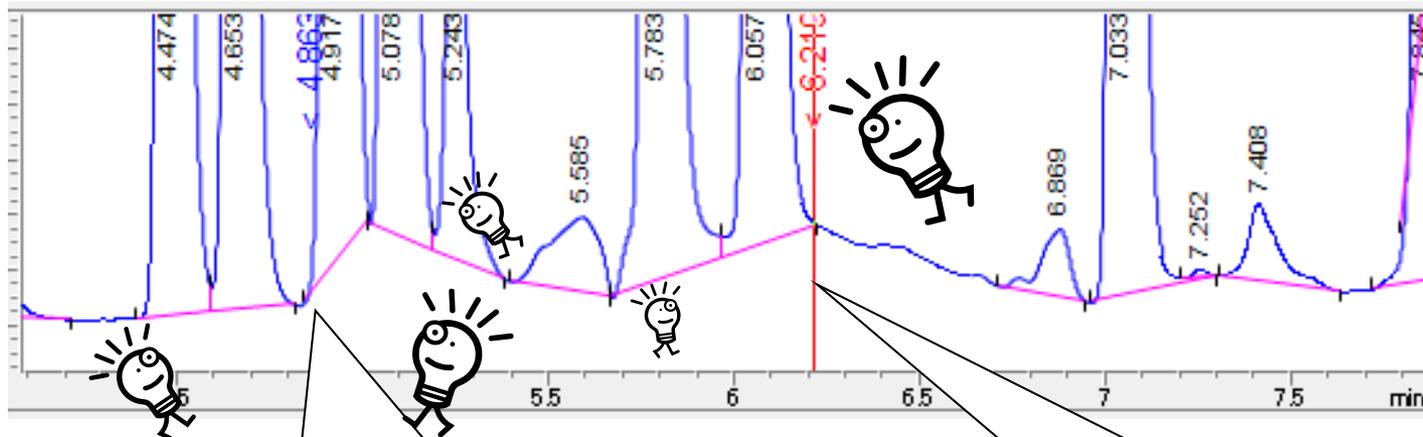
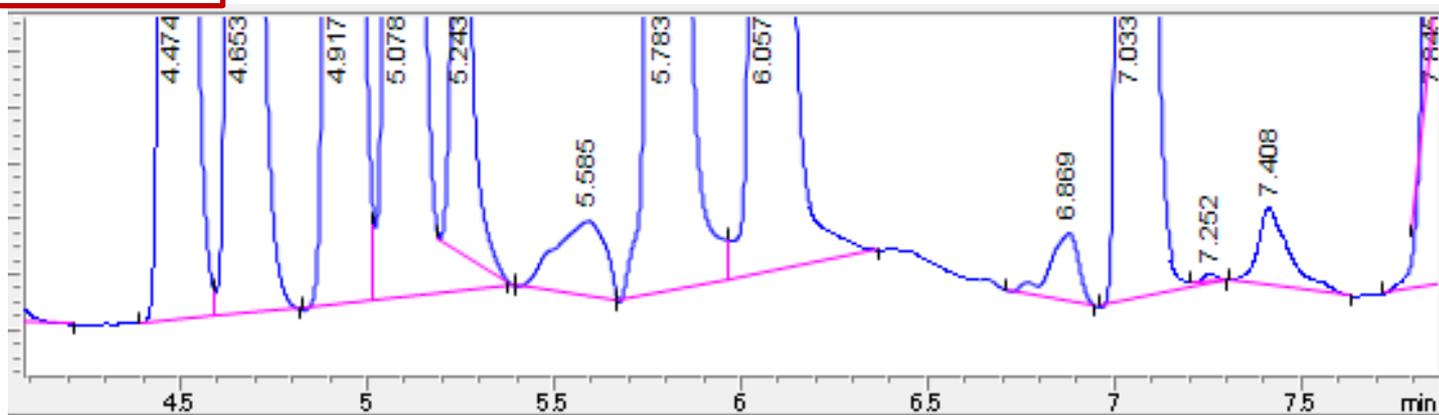


ベースライン (谷から谷)
値：オン

タイムイベントの紹介④

ベースライン(次の谷へ)

ベースライン(今すぐ)

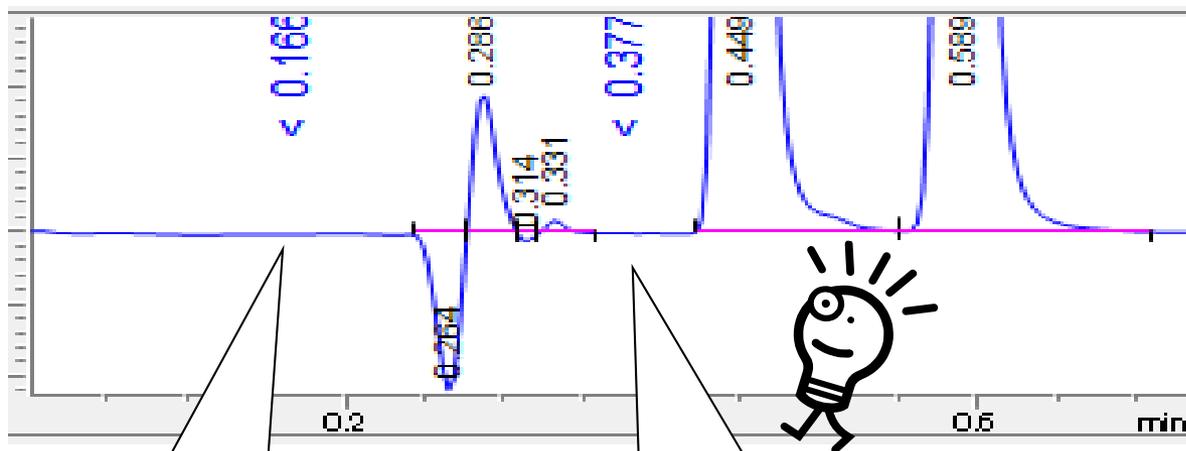
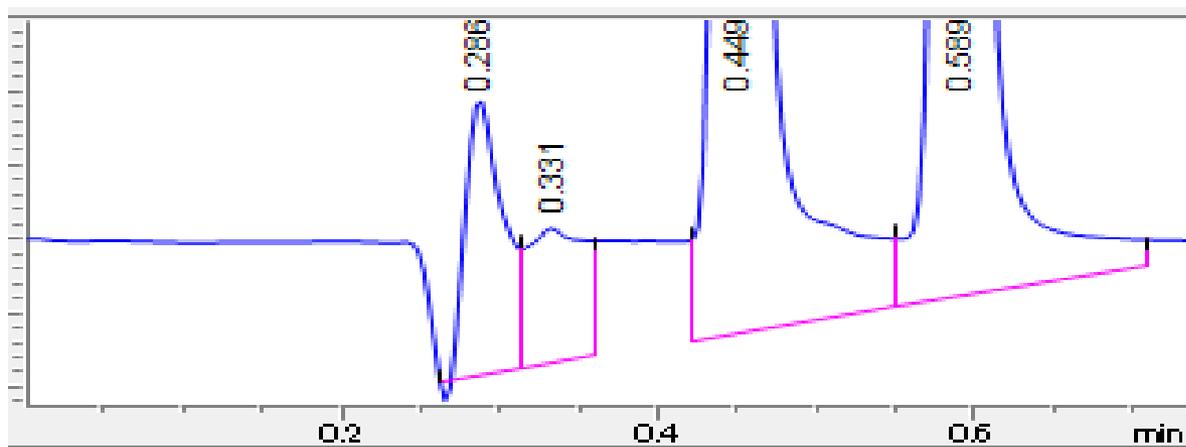


ベースライン (次の谷へ)

ベースライン (今すぐ)

タイムイベントの紹介⑤

ネガティブピーク

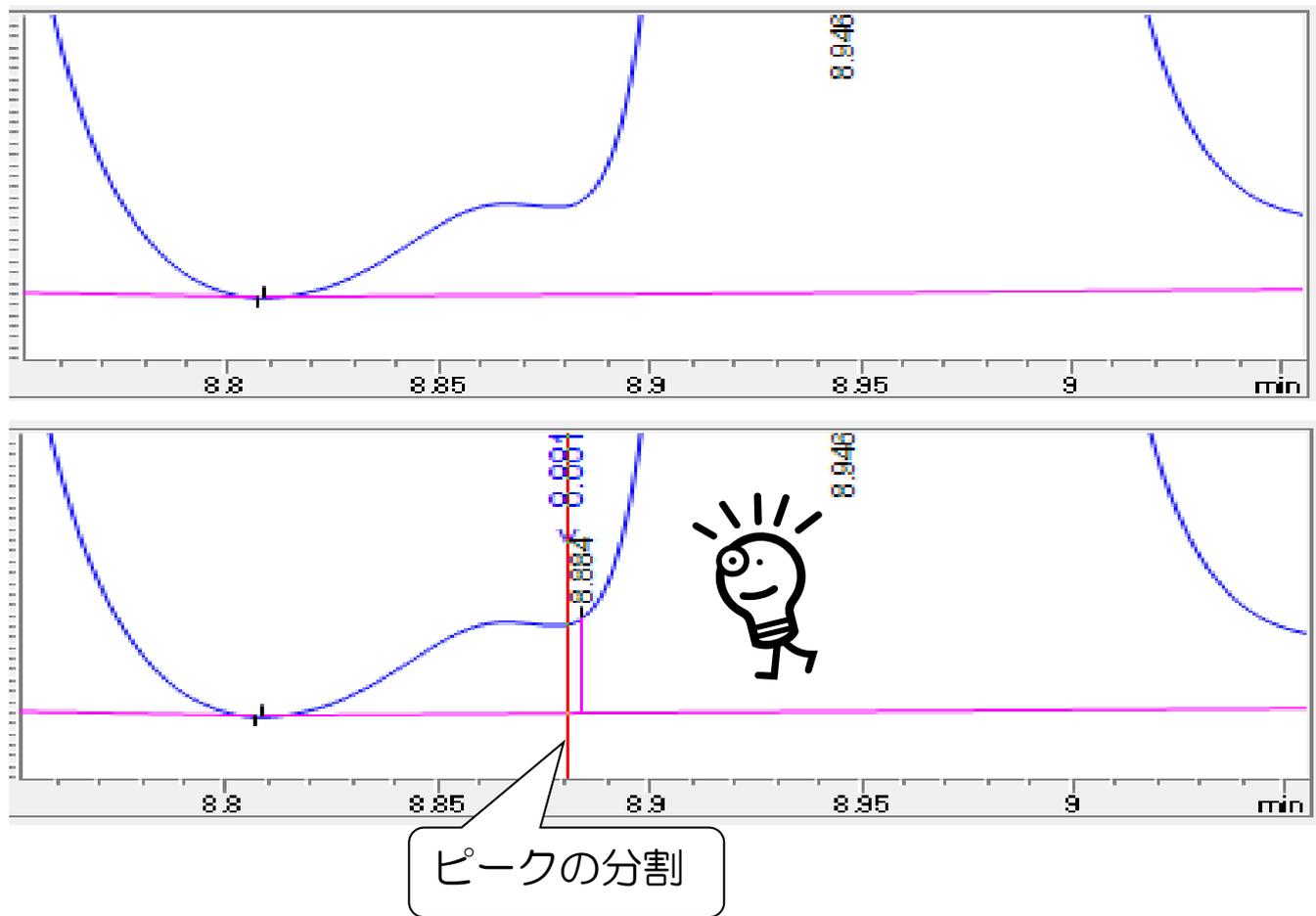


ネガティブピーク
値：オン

ネガティブピーク
値：オフ

タイムイベントの紹介⑥

ピークの分割

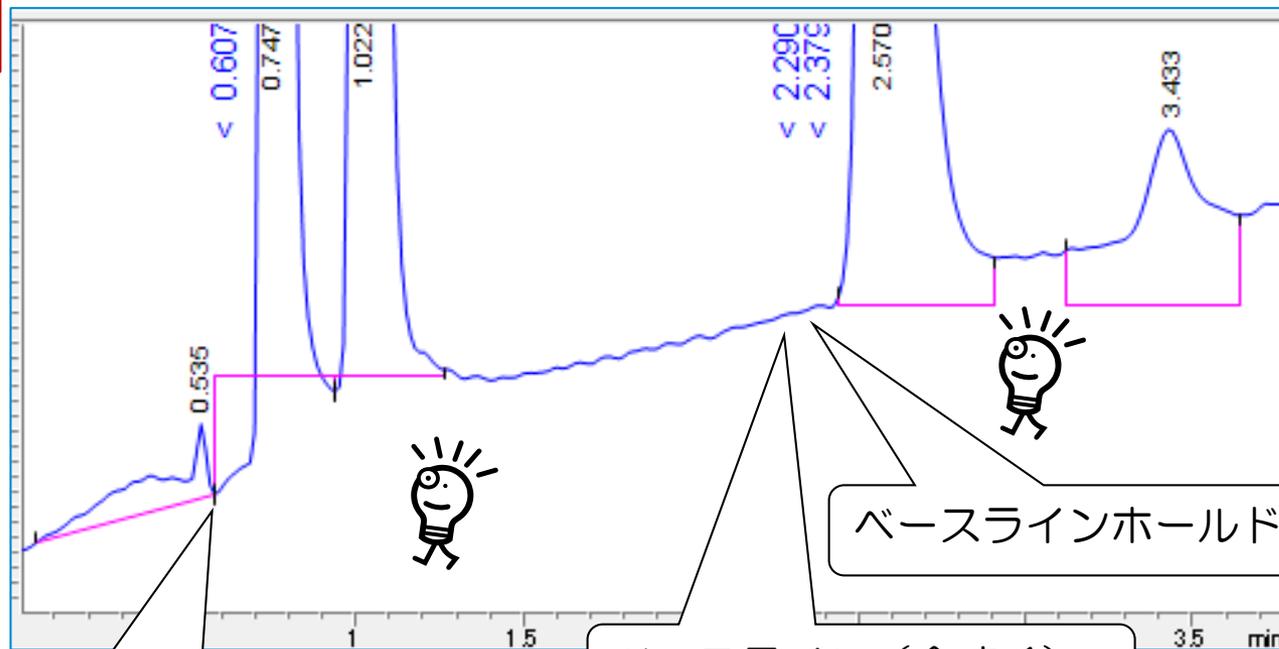


タイムイベントの紹介⑦

ベースライン(後方へ)

ベースライン(今すぐ)

ベースライン ホールド



ベースライン (後方へ)
※クラシックモードのみ対応

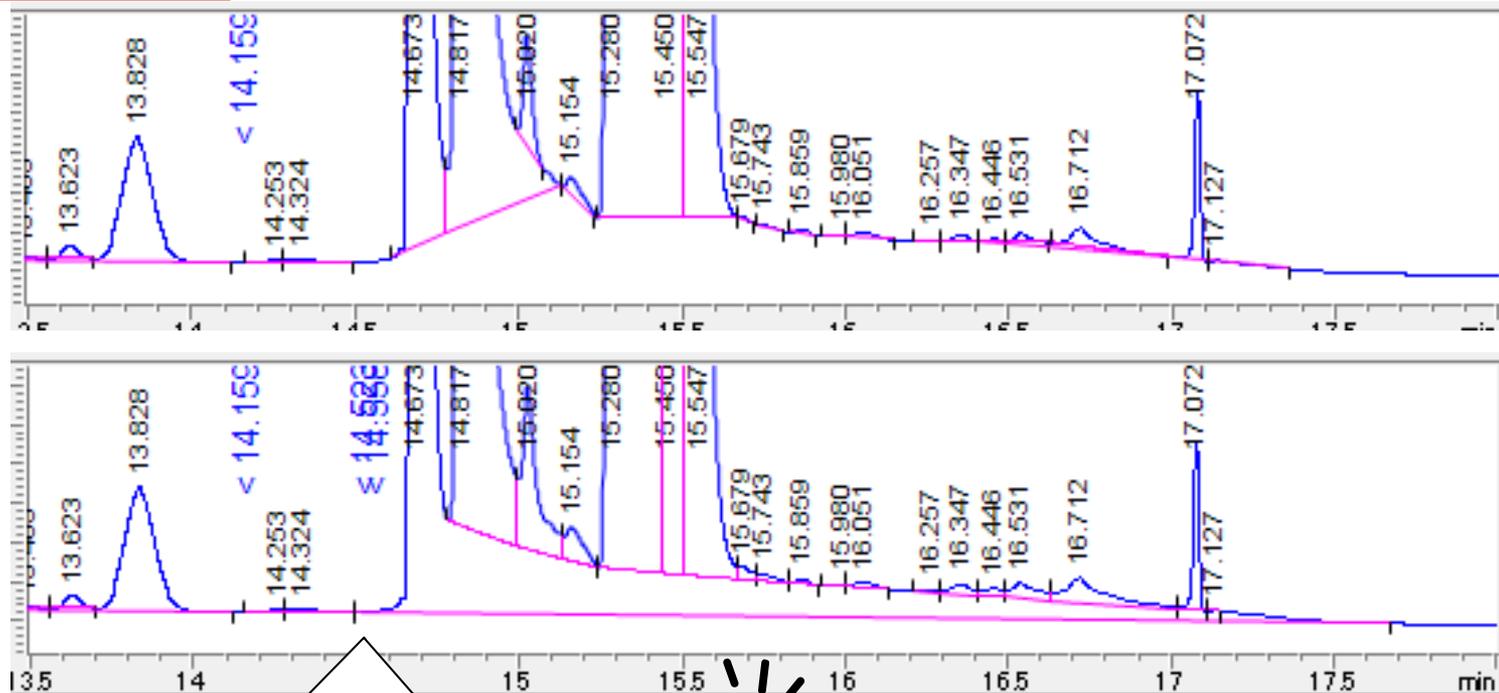
ベースライン (今すぐ)

ベースラインホールド



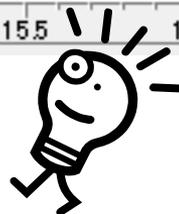
タイムイベントの紹介⑧

タンジェント スキム(テール)
タンジェント スキムモード



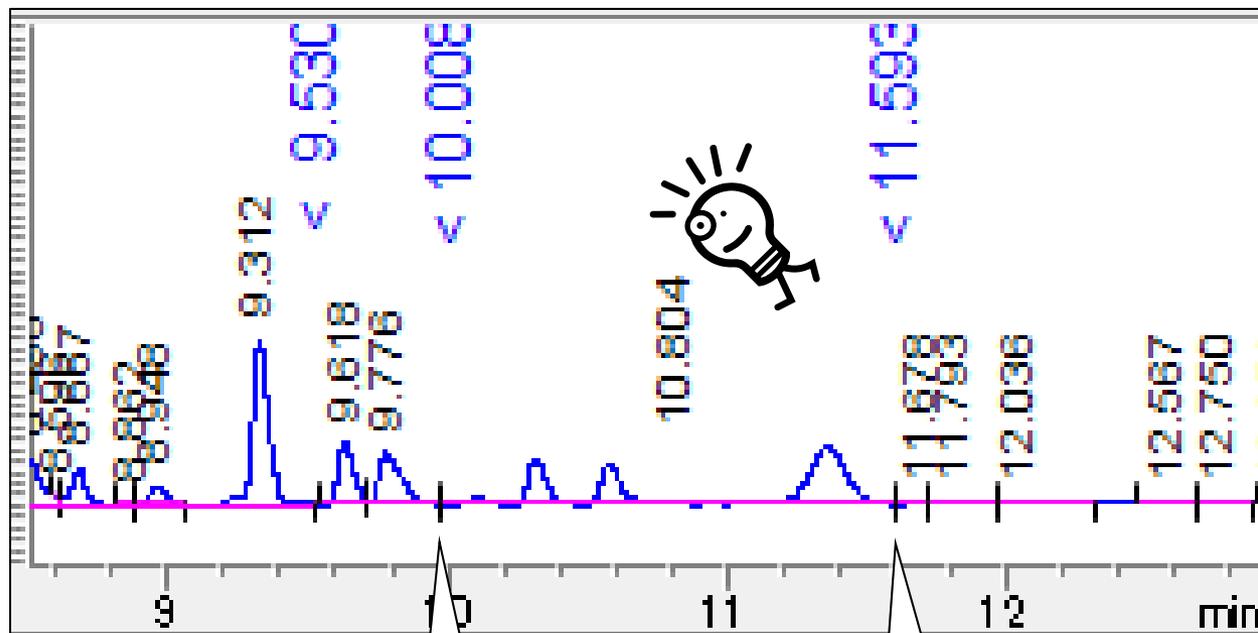
タンジェントスキム (テール)
値：オン

タンジェントスキムモード
値：STD



タイムイベントの紹介⑨

面積和



面積和
値：オン

面積和
値：オフ

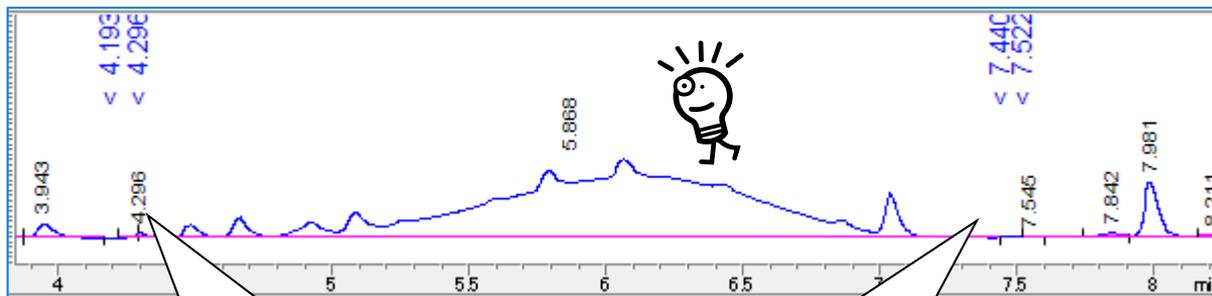
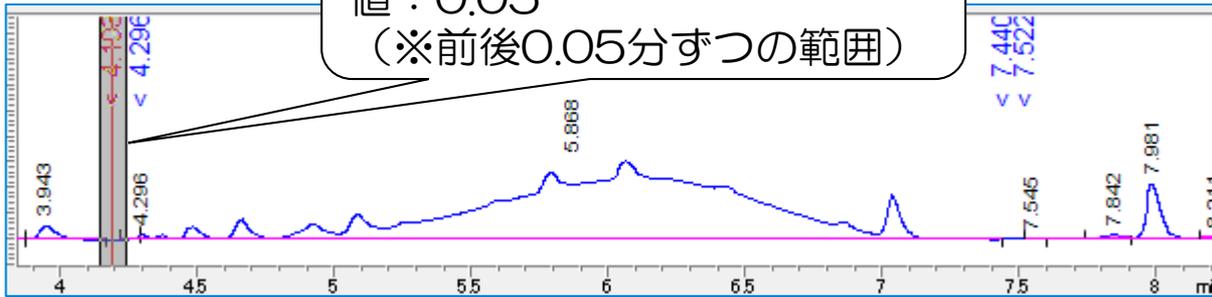
タイムイベントの紹介⑩

ベースライン範囲設定
ベースライン範囲設定(最低)
ベースライン範囲を使用

面積和スライス

ベースライン範囲と、
面積和スライスは
組み合わせて使用します。

ベースライン範囲設定
値：0.05
(※前後0.05分ずつの範囲)



面積和スライス
値：オン

面積和スライス
値：オフ

ベースラインの高さを決
める範囲を指定するには

ベースライン範囲設定

指定したい区間に乱れが
多い場合は、

ベースライン範囲設定(最低)

ベースライン範囲を使用

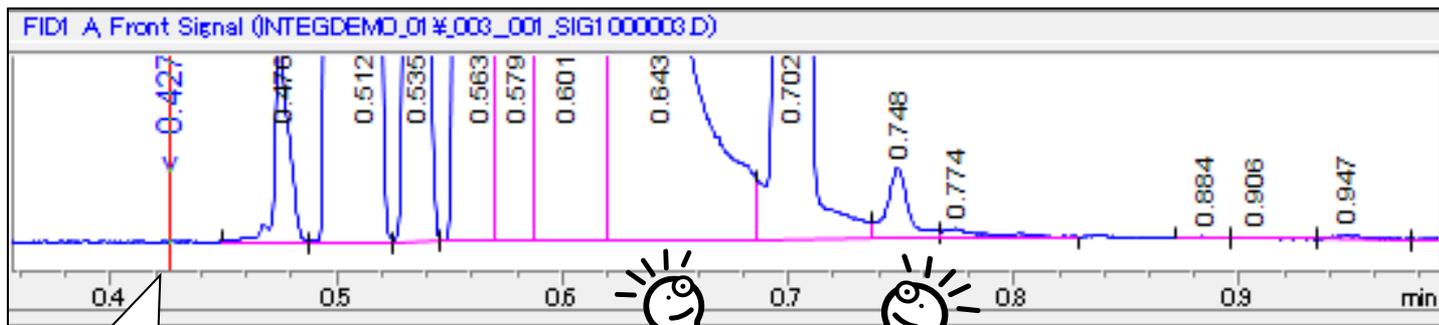
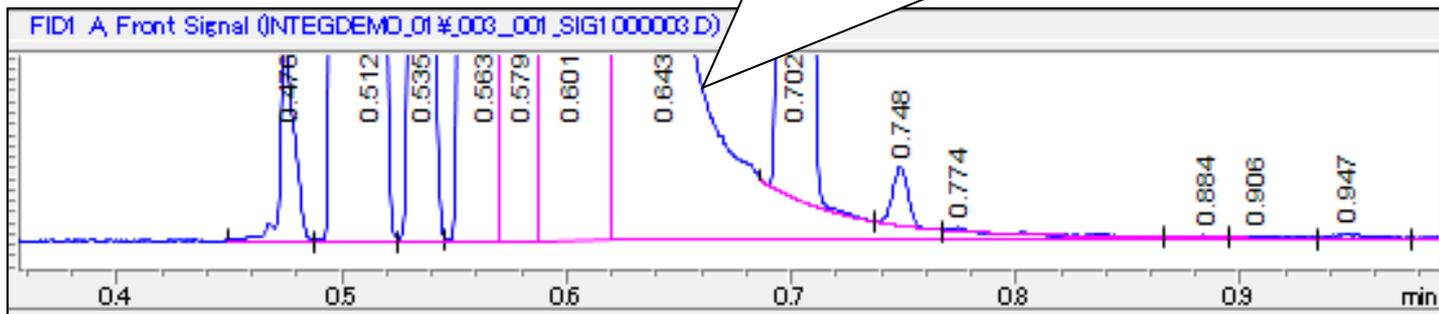


範囲を複数指定した場合の割
り当て、または、この機能の
終了を指定できます。

タイムイベントの紹介⑪

溶媒ピーク

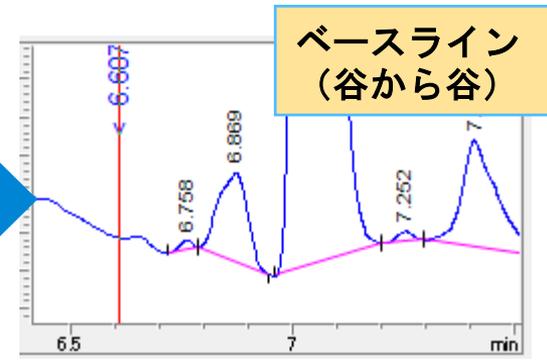
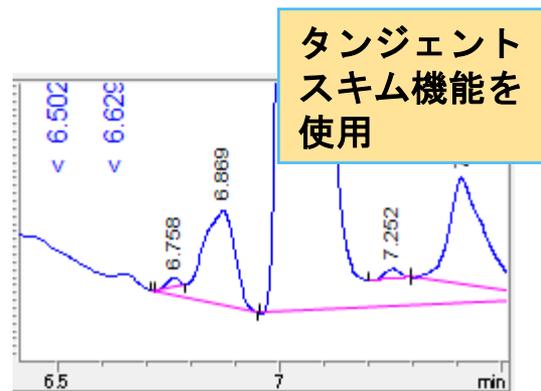
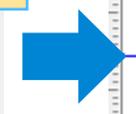
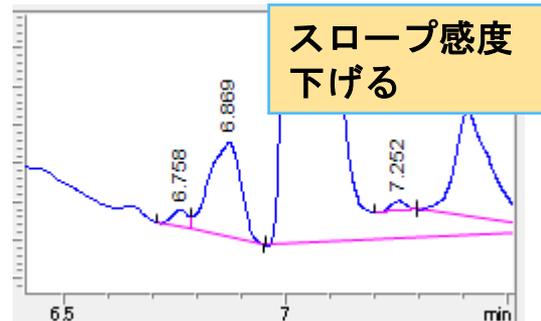
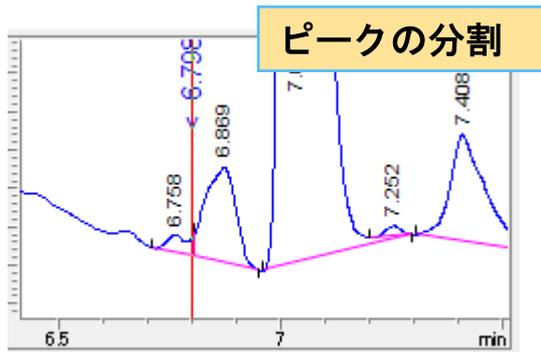
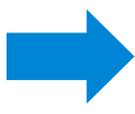
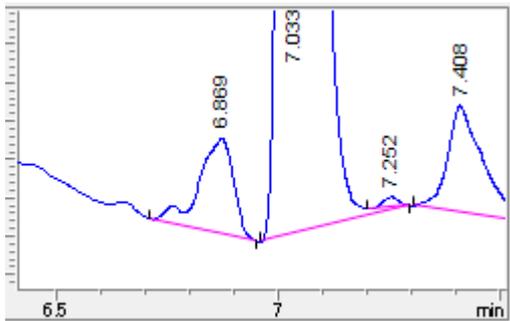
※GCデータの場合、大きなピークを“溶媒ピーク”として自動で認識し、溶媒ピークのテール部分では、自動でタンジエントスキムが実行される。



溶媒ピーク
値：オフ

GCデータの溶媒ピークを、
手動で指定したり、
手動で指定を取り消したりできます。

タイムイベントの活用例



全てのシグナルの初期イベント:

積分イベント	値
タンジェント スキム モード	スタンダード
テールピークスキム高さ	3.00
フロントピークスキム高さ	1.00
スキム谷比	20.00
ベースライン補正	アドバンスド
ピーク谷比	500.00



保存と終了



保存して
終了



キャンセル
して終了

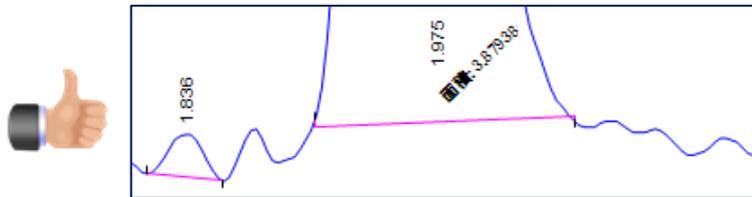
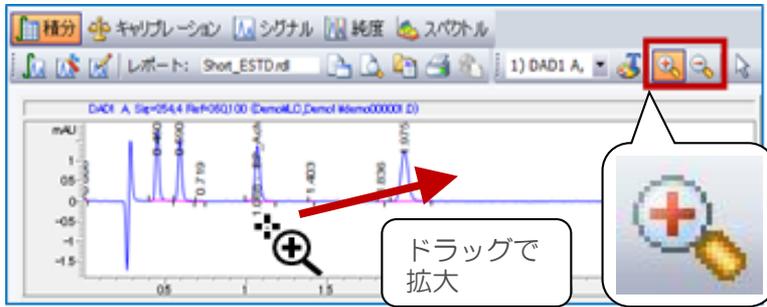
The screenshot displays the Agilent ChemStation software interface. The top menu bar includes options like '積分' (Integration), 'キャリブレーション' (Calibration), 'シグナル' (Signal), '純度' (Purity), and 'スペクトル' (Spectrum). The main window shows a chromatogram with four peaks labeled at retention times 0.747, 1.022, 2.570, and 5.852 minutes. Below the chromatogram is a table of integration results.

#	時間	面積	高さ	幅	対称	面積%
1	0.747	296.6	104.8	0.045	0.72	30.656
2	1.022	264.3	75.5	0.0528	0.71	27.315
3	2.57	176.7	26.6	0.1014	0.636	18.269
4	5.852	229.9	16.3	0.2127	0.755	23.760

※ここでの“保存”は、メソッドに反映させることを意味します。
解析用メソッドは、上書き保存する必要があります。

マニュアル積分

マニュアル積分はデータファイルに保存され、メソッドとは関係がありません



ベースラインを引く



ネガティブピーク



タンジェントスキム



ピーク分割



ピーク削除



やり直し：最後のマニュアル積分を取り消します



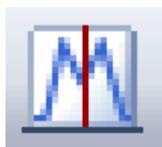
全てのイベントを削除します



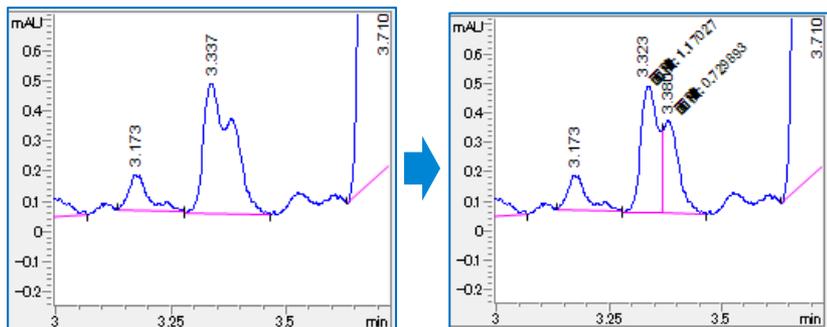
マニュアルイベントをデータファイルに保存します



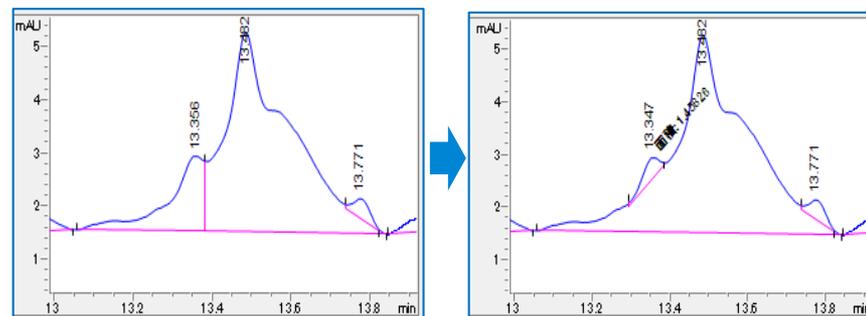
マニュアル積分の例



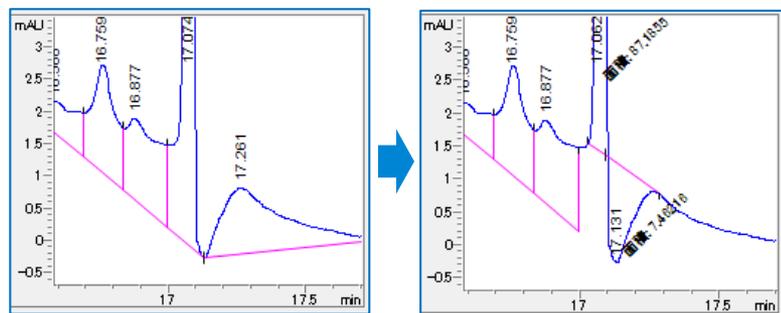
ピーク分割



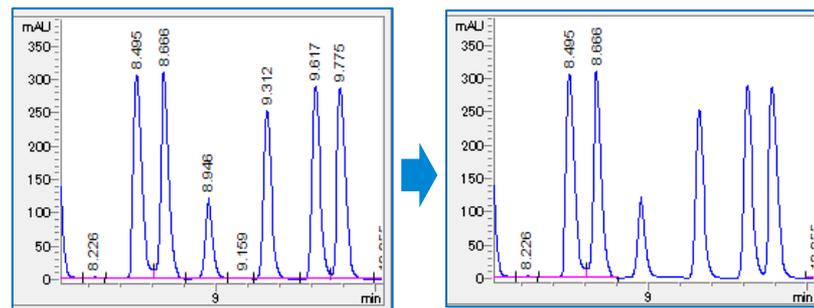
タンジェントスキム



ネガティブピーク



ピーク削除



マニュアル積分をデータに保存する

シングルラン: DEMO

再計算モード

重ね... タイプ 日時 オペレータ バイアル データファイル サンプル名

1994/04/19 8:08:... a.q.h. バイアル 5 005-0104.D Isocratic Std. 1

積分 キャリブレーション シグナ

レポート: 簡易

DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100 (DEMO#005-0104.D)

mAU

100

80

60

40

20

0

0.747

1.022

高さ: 248.937

データ ファイルに現在のマニュアルイベントをコピー...

データ ファイルからマニュアルイベントを削除...

ナビゲーションテーブルのクリア

選択したデータファイルの削除

レポートレイアウトに選択を送信

ヘルプ

高さ

LC-ファイル	005-0104.D
ファイルパス	C:\CHEM32\1\DATA\DEMO\

保存ボタンも
利用できます。

マニュアル積分イベント

次のシグナルのマニュアル積分イベントをコピーします:
DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100 (DEMO#005-0104.D)
選択されたファイルに。

OK キャンセル

シングルラン: DEMO

再計算モード

バイアル	データファイル	サンプル名	マニュアル イベント	サンプル情報	サンプルアマ...
バイアル 5	005-0104.D	Isocratic Std. 1			0
バイアル 5	005-0105.D	Isocratic Std. 1	-		0