



Agilent MicroLab ソフトウェア

操作マニュアル

注意

マニュアル番号

0020-410

第 11 版 2024 年 10 月

著作権

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2024

本マニュアルの内容は米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形態や方法（電子媒体への保存やデータの抽出または他国語への翻訳など）によっても禁止されています。

Agilent Technologies Australia [M] Pty Ltd

679 Springvale Road

Mulgrave, Victoria 3170, Australia

www.agilent.com

ソフトウェアリビジョン

このマニュアルは改訂版が発行されるまで Agilent MicroLab 5.7 以降のリビジョンに対応しています。

保証

このマニュアルの内容は「現状有姿」提供されるものであり、将来の改訂版で予告なく変更されることがあります。Agilent は、法律上許容される最大限の範囲で、このマニュアルおよびこのマニュアルに含まれるいかなる情報に関しても、明示黙示を問わず、商品性の保証や特定目的適合性の保証を含むいかなる保証も行いません。Agilent は、このマニュアルまたはこのマニュアルに記載されている情報の提供、使用または実行に関連して生じた過誤、付随的損害あるいは間接的損害に対する責任を一切負いません。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、このマニュアルの内容に対する保証条項がここに記載されている条件と矛盾する場合は、別に合意された契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

本書で扱っているハードウェアおよびソフトウェアは、ライセンスに基づき提供されており、それらのライセンス条項に従う場合のみ使用または複製することができます。

権利の制限

米国政府の制限付き権利について: 連邦政府に付与されるソフトウェアおよび技術データに係る権利は、エンドユーザーのお客様に通例提供されている権利に限定されています。Agilent は、ソフトウェアおよび技術データに係る通例の本商用ライセンスを、FAR 12.211 (Technical Data) および 12.212 (Computer Software)、並びに、国防総省に対しては、DFARS 252.227-7015 (Technical Data - Commercial Items) および DFARS 227.7202-3 (Rights in Commercial Computer Software or Computer Software Documentation) の規定に従い提供します。

安全にご使用いただくために

注意

注意は、取り扱い上、危険があることを示します。正しく実行しなかったり、指示を遵守しないと、製品の破損や重要なデータの損失に至るおそれのある操作手順や行為に対する**注意**を促すマークです。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、**注意**を無視して先に進んではなりません。

目次

1	はじめに	7
	サポート対象の測定器	8
2	MicroLab Mobile	9
	PDA と測定器を Bluetooth で接続する	9
	初めてログオンする場合	11
	4300 ハンドヘルド FTIR でのソフトウェア IQ	12
	ユーザーの管理	13
	ユーザーの追加	13
	役割の定義	14
	共通のアイコン	15
	ホーム画面	15
	ステータス	15
	開始	15
	メソッド	16
	リファレンス メソッド	16
	ログオフ	16
	ロック	16
	メニュー	16
	メソッド画面	17
	メソッド・リスト	18
	アクティブ化	18
	編集	18
3	MicroLab PC	19

目次

ホーム画面	19
ステータス	19
開始	20
メソッド	20
リファレンスメソッド	20
ログオフと終了	20
ロック	20
測定データ一覧	20
詳細設定	20
メソッド	21
メインページ	21
新しいメソッドの作成/既存メソッドの編集	22
詳細設定	33
システムチェック	33
診断	33
MAC アドレス	34
ライブラリ管理	34
ユーザー管理	36
多変量メソッドの GRAMS PLS/IQ から MicroLab PC への転送	36
PLS/IQ *.cal ファイルを ASCII 形式でエクスポート	36
メソッドファイルの作成	36
MicroLab Expert から MicroLab PC への MicroLab Quant モデルの転送	38
[サンプリング前のアライメント チェック] の使用	39
編集したメソッドの MicroLab Mobile への転送	40
MicroLab Lite 同期の使用	40
「マイ コンピュータ」によるコピー	41

目次

21 CFR Part 11 対応環境のファイル移動	41
システムチェック	42
4 MicroLab Quant	43
ホーム画面	43
ログオフ (Logoff)	44
ロック (Lock)	44
新規モデルの開始 (Start New Model)	44
モデルのインポート (Import Models)	48
21 CFR Part 11 の機能	49
21 CFR Part 11	49
電子署名	49
5 MicroLab OQ	51
運転時適格性評価 (OQ)	51
システムの診断ベリフィケーション	51
性能評価	52
OQ の実行	52
OQ レポート	53
6 21 CFR Part 11 対応の MicroLab	55
SCM	55
SDA	56
MicroLab の 21 CFR Part 11 ソフトウェアコンポーネント	57
ロック (Lock)	57
電子署名 (E-Sign)	57
変更の理由 (Reason for Change)	59
21 CFR Part 11	59

目次

7	サンプルの測定	61
	サンプリングインターフェースのクリーニング	61
	バックグラウンド測定	62
	サンプル測定	62
8	結果のレビュー	65
	MicroLab Mobile	65
	結果画面	65
	データの処理	65
	測定データ一覧	67
	MicroLab PC/MicroLab Lite	68
	結果画面	69
	スペクトルの GRAMS へのインポート	75
	MicroLab のレポート作成	76
	メソッドにレポートテンプレートを割り当て	76
	新しいレポートテンプレートの作成	77
9	アップデートおよびトラブルシューティング	79
	ファームウェアのアップデート	79
	トラブルシューティング	79
	初期化の失敗	79
	レポートテンプレートの作成の失敗	80
	ゲインの変更が保存されない	80
	データベースアクセスの問題	80
	付録 A: MicroLab のファイルタイプ	81

Agilent MicroLab ソフトウェア・スイートは、Agilent 4100 ExoScan、4200 FlexScan、4300 ハンドヘルド FTIR、4500 シリーズ、5500 シリーズ、Cary 630 FTIR 分光光度計のコントロール用に設計されています。ソフトウェアには、MicroLab FTIR ソフトウェアおよび MicroLab Mobile ソフトウェアの 2 種類のパッケージがあります。

MicroLab FTIR ソフトウェアパッケージには、以下の 4 つのモジュールがあります。

- MicroLab PC – 測定器の接続と制御
- MicroLab Quant – 定量メソッド開発用
- MicroLab OQ – 運転時適格性評価 (OQ) 用
- MicroLab Lite – データ・レビューとメソッド開発

MicroLab Mobile ソフトウェアパッケージには、以下が含まれます。

- MicroLab Mobile
- MicroLab FTIR ソフトウェアパッケージ

注記

MicroLab Mobile ソフトウェアパッケージは、4300 ハンドヘルド FTIR、およびハンドヘルド PC (PDA) 付きで出荷していた測定器にのみ適用します。対象となる測定器は、Agilent 4100 ExoScan、4200 FlexScan、4500 シリーズです。

アジレントは、これらの測定器と組み合わせる PDA の販売は既に終了しています。

オプションの MicroLab Pharma ソフトウェアパッケージ (部品番号 G4984-64000) および MicroLab Pharma Upgrade ソフトウェアパッケージ (部品番号 G4985-64000) は、US の FDA 21 CFR Part 11、EU の Annex 11、およびその他の国の電子記録に関する同様の規制に準拠する、データセキュリティ、およびアクセス制御の機能を提供します。

本文書における、「21 CFR Part 11 ソフトウェア/環境/機能/その他」の表現は、MicroLab Pharma ソフトウェアを使用したデータインテグリティ環境/コンポーネントを指します。

MicroLab ソフトウェアパッケージは、次の点を除いて、同様の機能と構造を備えています。

- MicroLab Mobile ソフトウェアではメソッドを編集できません。
- MicroLab Lite ソフトウェアではデータを測定できません。
- MicroLab PC および MicroLab Mobile ソフトウェアを実行するには、測定器を PC に接続する必要があります。

はじめに

ソフトウェアの画面はメニュー方式で、分析手順が詳細に示されるため、上級者にも初心者にも使いやすくなっています。

ソフトウェアにはユーザー・ログオン方式が採用されており、各ユーザーには管理者によって割り当てられた定義済みの「役割」があります。これらの役割により、管理者は、下位レベルのユーザーに許可するメソッドや操作を制限できます。

サポート対象の測定器

このソフトウェアバージョンは、Agilent Cary 630、4100 ExoScan、4200 FlexScan、4300 ハンドヘルド、4500 ポータブル、5500 コンパクト FTIR 測定器をサポートしています。

2 MicroLab Mobile

PDA と測定器を Bluetooth で接続する	9
初めてログオンする場合	11
4300 ハンドヘルド FTIR でのソフトウェア IQ	12
ユーザーの管理	13
共通のアイコン	15
ホーム画面	15
メソッド画面	17

ソフトウェアをインストールまたはアップグレードするには、ソフトウェアに付属の「MicroLab Installation Instructions」を参照してください。

注記

MicroLab Mobile ソフトウェアパッケージは、4300 ハンドヘルド FTIR、および PDA 付きで出荷していた測定器にのみ適用します。対象となる測定器は、Agilent 4100 ExoScan、4200 FlexScan、4500 シリーズです。

PDA と測定器を Bluetooth で接続する

注記

このセクションは、Agilent 4100 ExoScan、4200 FlexScan、4500 FTIR シリーズの測定器にのみ適用します。

- 1 測定器と PDA 間の Bluetooth 接続を設定するには [ホーム] ページの [Bluetooth] アイコンをクリックします。「機内モード」がオンになっている場合はオフにします。[Bluetooth] バーをクリックし、Bluetooth 通信がオフになっている場合はオンにします。
- 2 [メニュー] から、[Bluetooth の設定] を選択します。
- 3 [デバイス] タブでデバイスを削除するには、スタイラスでデバイスを選択し、長押ししてメニューが表示されるまで待ちます。[削除] をクリックします。

- 4 デバイスが削除されたら、**【新しいデバイスの追加】** をクリックします。Bluetooth 対応デバイスのリストが表示されたら、適切なデバイスを選択します。画面の下の **【次へ】** をクリックします。
- 5 ハンドヘルドデバイスとの接続にはユニバーサル・パスコードが必要です。必要なパスコードは **7890** です。この値を入力し **【次へ】** を選択します。システムにより Portable FTIR 測定器との接続テストが行われ、デバイスが追加されます。
- 6 デバイスが追加されたら **【詳細設定】** を選択し、**【シリアルポート】** のチェックボックスが選択されていることを確認します。デフォルトではチェックボックスがオフになっているため、デバイスが正常に動作するように、必ずオンにしてください。 **【保存】** をクリックします。
 - **【詳細設定】** が表示されるのは接続直後のみです。オプションが消えて **【デバイス】** タブに戻った場合は、直前に接続したデバイスをスタイルスでクリックして選択してください。この操作により、上記の **【詳細設定】** に移動でき、シリアルポート通信の設定を行えます。
- 7 シリアルポートの設定が完了したら、**【Bluetooth】** 設定画面の下の **【COMポート】** タブを選択します。
- 8 **【新規送信ポート】** を選択します。Bluetooth の通信構成に先ほど追加されたデバイスを選択して **【次へ】** をクリックします。
- 9 MicroLab Mobile バージョン4.0 以降のデフォルトの COM ポートは COM 1 です。COM ポートを COM 1 に設定し **【セキュア接続】** のチェックを外します。チェックを外したら、画面下部の **【完了】** を選択します。
 - 選択した COM ポートで通信の問題が発生すると、PDA にエラーメッセージが表示されます。通信用 COM ポートのデフォルト設定は、ポータブル/ハンドヘルドデバイス用の通信ファイルから変更できます。COM ポートの設定を変更するため追加のインストール手順が必要な場合は、アジレントのサポート担当者までお問い合わせください。
- 10 **【完了】** を選択すると、Bluetooth 設定構成の初期画面に戻ります。右上の **【OK】** をクリックし、開いているプログラムをすべて閉じてからメインのホーム画面に戻ってください。
- 11 **【スタートメニュー】** を選択すると、選択肢として MicroLab Mobile が表示されます。

初めてログオンする場合

MicroLab Mobile に初めてログオンするには：

- 1 Agilent 4100 ExoScan FTIR/Agilent 4500 シリーズ FTIR システムに付属のハンドヘルド PC/内蔵 PC には、[スタート] メニューにインストールされている MicroLab Mobile ソフトウェアへのショートカットがあります。ソフトウェアを起動するには、[スタート] をクリックし、[MicroLab Mobile] アイコンをクリックします。My Device\Program Files\MicroLab Mobile を検索し、MicroLabMobileEX.exe アイコンをクリックしてもソフトウェアを起動できます。また、スタートメニューからプログラムを選択し、該当するアイコンをクリックしても起動できます。

MicroLab Mobile は Agilent 4300 ハンドヘルド FTIR に付属しており、内蔵コンピュータに事前にインストールされています。MicroLab Mobile は、4300 ハンドヘルド FTIR がオンになると自動的に起動します。

- 2 ソフトウェアが起動すると、初期同期が必要であることを示すメッセージが表示されます。この同期によって、SCM (21 CFR Part 11 対応ソフトウェア) で作成されたプロファイルと Public Mobile Methods フォルダ内のすべてのメソッドが、PDA または内蔵コンピュータにアップロードされます。21 CFR Part 11 環境でファイルを移動する手順については、41 ページを参照してください。
- 3 PC で MicroLab Lite を開いてログインします。
 - PDA を接続する場合は、Windows Mobile Device Center が PC にインストールされていることを確認してください。このアプリケーションは MicroLab ソフトウェアのインストールディスクからインストールできます。
- 4 PDA または内蔵コンピュータを通信ケーブルで PC と接続します。
- 5 同期が自動的に開始されない場合は、[詳細設定] をクリックしてから [同期] をクリックします。
- 6 [新規] をクリックします。
- 7 [接続されたデバイス名の取得] をクリックします。デバイス名がフィールドに表示されます。
- 8 をクリックしてから、Public Mobile Results フォルダに移動します。測定データはすべて、このフォルダに保存されます。
- 9 [OK] をクリックします。
- 10 同期を開始するには、[同期] をクリックしてから表示されたメッセージで [はい] をクリックします。
- 11 同期が完了したら [OK] をクリックします。

12 PDA または内蔵コンピュータで、MicroLab Mobile を再起動し、[セキュリティ] 画面が表示されたらログインします。MicroLab Lite または PC を使用して作成したものと同一ログイン資格情報を使用します。システムに [ホーム] 画面が表示されます。

21 CFR Part 11 環境の場合は、MicroLab Mobile 権限を持つプロファイルでログインします。SCM で作成されたプロファイル用の適切なユーザー名を入力します。[グループ] フィールドと [プロジェクト] フィールドにデータが自動的に入力されます。パスワードを入力して **[ログイン]** をクリックします。

注記

ユーザー名とパスワードは、大文字と小文字を区別する必要があります。

MicroLab Mobile 21 CFR Part 11 を使用している場合、パスワードに使用できるのは英数字のみです。特殊文字 (\$、@ など) は使用できません。

ハンドヘルドデバイスが PC に接続されている場合は、MicroLab Mobile または MicroLab Lite のどちらか 1 つにログインし、同じプロファイルで同時に両方にログインしないことをお勧めします。

4300 ハンドヘルド FTIR でのソフトウェア IQ

注記

このセクションは、Agilent 4300 ハンドヘルド FTIR にのみ適用します。

MicroLab Mobile には、測定器のオンボードコンピュータに組み込まれた IQ/OQ 機能があります。ソフトウェアの据付時適格性評価 (IQ) テストを実行して、すべての関連ファイルがインストールされていることを確認します。

IQOQ を実行するには：

- 1 ログイン画面で、**[終了]** をクリックして MicroLab Mobile を閉じます。
- 2 **[終了確認]** ダイアログボックスが表示されたら **[OK]** をクリックします。
- 3 画面が「パススルー」モードになり、2 個のアイコンが表示されます。上のアイコンは MicroLab Mobile、下のアイコンは IQ/OQ ソフトウェアを表します。
- 4 下のアイコンを選択して **IQ/OQ** を実行します。
- 5 **[ログイン]** 画面が表示されます。ユーザー名とパスワードを入力してログインします。
- 6 画面右下の **[次へ]** の矢印ボタンをクリックして、IQ-ソフトウェアテストを実行します。
- 7 テスト結果が表示されます。据付時適格性評価が合格したことを確認します。

- 8 [次へ] の矢印ボタンをクリックして IQ レポートを作成します。
- 9 [終了] をクリックして「パススルー」モードに戻ります。

ユーザーの管理

[詳細設定] オプションを使用すれば、管理者は、ユーザーのアクセス許可を管理したり、MicroLab システムの機能を変更することができます。システムは次の複数のユーザー・レベルでインストールされています：管理者、開発者、作業
者、電子署名者、サービス。ユーザーはいつでも追加できます。複数のオペレータがシステムを使用する場合は、初回起動時に目的のユーザーおよびパスワードでシステムをセットアップすることをお勧めします。

注記

[ユーザー管理] にアクセスできるのは、管理者権限を持っているユーザーだけです。

この機能は、21 CFR Part 11 環境が有効になっている場合は使用できません。その場合、すべてのユーザー管理機能は、Spectroscopy Configuration Manager (SCM) で実行します。詳細については、ソフトウェア付属の SCM ユーザーガイドを参照してください。

ユーザーの追加

システムにユーザーを追加するには：

- 1 MicroLab Mobile の [ホーム] 画面の [詳細設定] ボタンを押します。
- 2 [ユーザー管理] をクリックします。
- 3 [新規ユーザーの追加] をクリックします。
- 4 カスタムユーザー ID をテキスト・ボックスに入力します。
- 5 ユーザーの名前をフルネームで入力します。
- 6 新しいパスワードを挿入します。
- 7 新規ユーザーの役割 (管理者、サービス、開発者、作業) を決定します。
- 8 [変更の適用] をクリックします。
- 9 システムからログオフされることを知らせるウィンドウが表示されます。変更が適用されると、強制的に再度ログインさせられます。

注記

システムはユーザーを自動的にログオフします。新規ユーザー ID が、[ログオン] 画面の [ユーザー名] ドロップダウンメニューに表示されます。

役割の定義

サービス：サービス役割では、メソッドに適用可能なサンプリング・テクノロジーなど、メソッド内のすべての測定器パラメータにアクセスできます。

管理者：管理者の役割は、メソッドの編集、新規メソッドの作成、公開メソッドの定義、測定器のベリフィケーション、ユーザー・アクセスの制御など、継続的な保守や MicroLab ソフトウェアへの変更の責任者用に確保されています。

開発者：開発者役割では、システム性能検証にアクセスしたり、メソッドを編集／実行することができます。ただし、この役割では、ユーザー管理機能やシステム診断にアクセスすることはできません。

作業員：作業員の役割は、システムの標準ユーザー用です。管理者が公開と定義したメソッドを実行するためのアクセス権を持っているのは、作業員だけです。作業員は、データのレビュー、システムのバリデーション、メソッドの編集はできません。

電子署名者：ユーザーが、データ測定/データ・レビューのさまざまなレベルでメソッドや結果に電子署名できるようにするためのものです。このレベルは、通常、MicroLab ソフトウェアを 21 CFR Part 11 環境で運用している場合に使用されます。

注記

[詳細設定] にアクセスできるのは、管理者役割と開発者役割だけです。

ユーザー管理画面

新規ユーザーの追加：システムにユーザーを追加します。ユーザー名、パスワード、アクセス・レベルを割り当てる必要があります。また、フルネームが必要です。

ユーザーの削除：ユーザーのプロファイルを MicroLab Mobile システムから完全に削除します。

パスワードのリセット：管理者が現在選択されているユーザーのパスワードを変更できるようにします。

セキュリティのリセット：カスタムユーザーをすべて削除し、定義済みの 3 ユーザー（サービス、管理者、ユーザー）をリセットします。このオプションはセキュリティもリセットします（[セキュリティを無効にする] オプションによって無効にされた場合）。

セキュリティを無効にする：すべてのセキュリティ機能を削除します。セキュリティを無効にした場合は、パスワードは不要で、すべてのユーザーが管理者権限を持ちます。セキュリティを復元するには、[セキュリティのリセット] ボタンを押してから初期の管理者アカウント情報を入力します。

共通のアイコン

これらのアイコンは、ソフトウェア全体を通して表示されます。

ホーム：ソフトウェアを最初の [ホーム] 画面に戻します。

メニュー：メニュー・オプションを表示します。

次へ：ソフトウェアをデータ測定プロセスの次のステップに進めます。

ホーム画面

[ホーム] 画面は、MicroLab のログオン後の最初の表示画面です。[ホーム] 画面からは、メソッドを起動したり、リファレンスサンプルを測定したり、[メソッドの選択] ダイアログボックス、[測定データ一覧] ダイアログボックスまたは [詳細設定] ダイアログボックスを開くことができます。サンプル・モジュールまたはサンプル・インタフェースの変更は、[ホーム] 画面で行います。すべての手順は、[ホーム] 画面から開始して終了します。

ステータス

画面の右上コーナーに、小さな円が表示されます。この円の色によって、MicroLab ソフトウェアに接続されている測定器の状態がわかります。システムが工場定義のパラメータの範囲内で動作している場合には、円は緑になります。赤または黄色のライトは仕様の範囲外のパラメータを示します。赤または黄色のライトが点灯したままの場合は、Agilent までお問い合わせください。[詳細設定] > [診断] には、システムのレディ状態の確認に使用されるパラメータがすべて表示されます。リミットの範囲外のパラメータは、[診断] 画面に赤で表示されます。

レディ・ライトの真上にバッテリーインジケータがあります。バッテリーインジケータは、測定器の電池の残量レベルを示します。MicroLab ソフトウェアでは、ハンドヘルド PC を動かしているバッテリーの充電レベルは表示されません。

開始

[スタート] ボタンは、現在選択されているメソッドを使ってサンプル測定を開始します。[ホーム] 画面の左上コーナーに、現在選択されているメソッドが表示されます。

メソッド

[メソッド] ボタンは、[メソッドの選択] ダイアログボックスを開きます。管理者権限を持っていないユーザーが選択できるのは、管理者が公開と指定したメソッドだけです。以下の「メソッドの選択」の説明を参照してください。

リファレンス メソッド

[リファレンス メソッド] ボタンでは、定量分析メソッドのリファレンスサンプルを測定できます。濃度を増減率 (%) で表す定量分析メソッドもあります。これらの計算では、スタート値を計算するのに、仕様範囲内のサンプルを参照する必要があります。[リファレンス メソッド] によって仕様範囲内の (新しい) 材料のスペクトルを保存して、後で視覚的に比較することもできます。

ログオフ

[ログオフ] ボタンは、現在のユーザーを終了し、MicroLab ソフトウェアを [ログオン] 画面に戻します。[ログオン] 画面から [終了] ボタンを押すことにより、ソフトウェアを閉じることができます。

ロック

このボタンは 21 CFR Part 11 環境でのみ使用できます。これを使用すると、無人のときのアクセスを制限するためにソフトウェアがロックされます。詳細については、55 ページの MicroLab 21 CFR Part 11 のセクションを参照してください。

メニュー

メニューの内容：

- 測定データ一覧
- 詳細設定

測定データ一覧

以前に測定したデータを表示することができます。[測定データ一覧] にアクセスできるのは、サービス役割、管理者役割、開発者役割だけです。

21 CFR Part 11

結果ファイルを開いている時、[21 CFR part 11] ボタンをクリックすると、モデルを作成/編集したときに実行された操作リスト付きの監査証跡を表示することができます。

MicroLab Mobile

この機能の詳細については、55 ページの MicroLab 21 CFR Part 11 のセクションを参照してください。

詳細設定

管理者役割、サービス役割、開発者役割のユーザーは、[詳細設定] 画面から、[診断]、[システムチェック]、[ユーザー管理]、[ライブラリ管理] にアクセスできます。

[システムチェック] には、測定器のテストとして、性能 (SN 比)、安定性テスト、レーザー周波数キャリブレーションチェック、スペクトル分解能チェックが含まれています。診断およびシステムのチェックの詳細については、該当する測定器の操作マニュアルを参照してください。

サンプリングインターフェース

[詳細設定] 画面から、ユーザーは 4100 ExoScan FTIR システム用のサンプリングインターフェースを選択できます。これは、サンプリングインターフェースに直接関係するメソッドだけでなく、サンプリングデバイスに性能仕様をリンクするためにも重要です。これらのいずれかが適切に動作するには、適切なサンプリングインターフェースを選択する必要があります。

メソッド画面

メソッドは、測定器のデータ測定パラメータおよび MicroLab ソフトウェア内のデータ解析を定義します。スペクトル測定のためのメソッド、スペクトルを測定し、測定データと定義済みライブラリを比較するメソッド、またはスペクトルを測定し、測定データの定量またはピーク解析を実行するメソッドを設定できます。事前定義された 3 つのメソッドタイプは、(1) データ測定、(2) 定性 (ライブラリ検索)、(3) Agilent 4500t/5500t および Cary 630 FTIR 分光光度計用の定量 (定量またはピーク解析) メソッドです。定義済みメソッドの仕様に関する質問および詳細については、Agilent までお問い合わせください。

MicroLab Mobile では、定義済みメソッドの選択しかできません。メソッドの編集は、MicroLab PC または MicroLab Lite ソフトウェアが動作している別のコンピュータで行う必要があります。メソッドを [メソッド] ダイアログボックス内に表示するには、PC/Lite ソフトウェアで開発したメソッドをハンドヘルド・コントローラまたは内蔵コントローラの以下のディレクトリに転送する必要があります。 \\Program Files\ MicroLab Mobile\Methods

21 CFR Part 11 環境では、メソッドの転送は同期中に行われます。

メソッド・リスト

MicroLab PC アプリケーションソフトウェア用に作成されたメソッドのリストを表示します。メソッド・リストを上下に移動するには、スタイラスをリストに押し当てて、画面全体にリストをドラッグするだけです。

注記

システム管理者はメソッドへのアクセスを制限します。システム管理者は画面左端沿いにあるチェックボックスを選択しなければなりません。これにより、すべての作業レベルのユーザーがメソッドを操作できます。作業員役割を持つユーザーの場合は、この画面には、システム管理者が以前に使用可能にしたメソッドだけが表示されます。

アクティブ化

[アクティブ化] ボタンは、強調表示されているメソッドを選択し、画面を閉じます。ソフトウェアは [ホーム] 画面に戻ります。正しいメソッドがアクティブであることを確認してください。間違ったメソッドが表示されている場合は、[メソッド] 画面に戻って別のメソッドを選択します。このためには、[メソッドの選択] ボタンを押して目的のメソッドを強調表示し、[アクティブ化] を押しします。

編集

メソッドの編集は、MicroLab Mobile ソフトウェアではできません。メソッドを編集するには、別のコンピュータにインストールされている MicroLab Lite ソフトウェアを使用する必要があります。確立したメソッドは、ハンドヘルド PC または内蔵 PC に転送して、MicroLab Mobile で使用することができます。

注記

PDA 付き測定器の場合、メソッドやデータを簡単に転送するには、Windows Mobile Device Center を搭載したコンピュータに、MicroLab Lite ソフトウェアをインストールしてください。Windows Mobile Device Center は、MicroLab ソフトウェアのインストールディスクからインストールできます。

3 MicroLab PC

ホーム画面	19
メソッド	21
MicroLab Expert から MicroLab PC への MicroLab Quant モデルの転送	38
[サンプリング前のアライメント チェック] の使用	39
編集したメソッドの MicroLab Mobile への転送	40
システムチェック	42

ホーム画面

[ホーム] 画面は、MicroLab PC のログオン後に最初に表示される画面です。すべての手順は、[ホーム] 画面で開始および終了します。

[ホーム] 画面では、次のオプションを選択できます。

- スタート
- メソッド
- リファレンステンプレート
- ログオフ
- 測定データ一覧
- 詳細設定

ステータス

画面左上の [ステータス] ボタンは緑色で、READY と表示されているはずですが、フィールドが黄色または赤の場合は、[詳細設定] オプションの下にある [診断] ボタンをクリックして、問題を特定します。赤または黄色のライトが点灯したままの場合は、Agilent までお問い合わせください。

注記

特定のインタフェース/測定器の組み合わせでは、データ測定中にステータスが黄色になるのは異常ではありません（これは特に外部反射インタフェースに当てはまります）。

MicroLab PC

開始

[スタート] ボタンをクリックすると、アクティブなメソッドを使ってサンプル測定を開始します。アクティブなメソッドは、[ホーム] 画面の左上に表示されています。

メソッド

[メソッド] ボタンは、[メソッドの選択] ダイアログボックスを開きます。管理者権限を持っていないユーザーがアクティブにできるのは、管理者が公開したメソッドだけです。

メソッドの詳細については、21 ページの「メソッド」を参照してください。

リファレンスメソッド

[リファレンステンプレート] ボタンを使用すると、新しいリファレンスメソッドテンプレートの作成および既存のリファレンスメソッドテンプレートの編集、選択したリファレンスメソッドテンプレートのアクティブ化が可能になります。

ログオフと終了

ログオフした画面から、別のユーザーがシステムにログオンしたり、終了したりできます。[終了] ボタンを押すと、MicroLab PC ソフトウェアが閉じます。

ロック

このボタンは 21 CFR Part 11 環境でのみ使用できます。これを使用すると、無人のときのアクセスを制限するためにソフトウェアがロックされます。詳細については、55 ページの MicroLab 21 CFR Part 11 のセクションを参照してください。

測定データ一覧

分析を実行したらすぐに、[ホーム] 画面から測定結果にアクセスできます。[測定データ一覧] をクリックすると、実行したサンプルのリスト画面が表示されます。サンプルには、選択した命名規則に従って名前が付けられます。

詳細設定

[詳細設定] 画面から、次のオプションを選択できます。

- システム チェック
- 診断

MicroLab PC

- MAC アドレス
- ライブラリ管理
- ユーザー管理
- パスワードの変更

[詳細設定] の詳細については、33 ページを参照してください。

メソッド

メインページ

メソッド・リスト：MicroLab PC アプリケーションソフトウェア用に作成されたメソッドのリストを表示します。ここに表示されるメソッドはすべて、MicroLab Lite にも表示されます。

削除：現在選択されているメソッドを削除します。アクセスできるのは管理者権限を持つユーザーだけです。このボタンは、21 CFR Part 11 環境では使用できません。

インポート：このボタンは 21 CFR Part 11 環境でのみ使用できます。CFR 対応メソッドおよび CFR 未対応メソッドをインポートします。CFR メソッドは古い監査証跡を維持しますが、署名はすべて削除されます。インポート後、これらのメソッドを CFR 環境で使用できます。インポートされた CFR 未対応のメソッドは読み取り専用です。

新規：新規メソッドを作成します。アクセスできるのは管理者権限を持つユーザーだけです。

印刷：このシステム機能を使用すると、選択したメソッドの詳細（測定器の条件やメソッド条件）を印刷できます。

編集：現在選択されているメソッドを編集のために開きます。アクセスできるのは管理者権限を持つユーザーだけです。

アクティブ化：現在強調表示されているメソッドを使用するメソッドとして選択します。特定のメソッドを使用してデータを測定するにはまず、メソッドをアクティブにする必要があります。

注記

管理者以外のレベルのユーザーが表示またはアクティブにできるのは、[公開] の列がチェックされているメソッドだけです。

新しいメソッドの作成/既存メソッドの編集

情報ページ

[情報] ページは、選択したメソッドに関する基本情報を設定するために使用します。このページのデフォルト設定は最低限の“ベースメソッド”です。

メソッド名：このフィールドにはメソッド名を指定します。メソッド名はメソッド・リストに表示されます。メソッド名は [情報] ページからは編集できません。これは、新しいメソッドを初めて**保存**した時、または編集した既存メソッドに**名前を付けて保存**したときに定義されます。

開発者：このフィールドにはメソッドを開発したユーザーを指定します。

コメント：ユーザーはこのフィールドを使用して、メソッドに関する特別情報を入力することができます。

注記

MicroLab ソフトウェアで提供されるデフォルトのメソッドは、ベースメソッドとしてのみ使用することを目的としています。アジレントは、このメソッドの使用を推奨していません。必ず適切に編集したメソッドを使用してください。

タイプ・ページ

[タイプ] ページはすべてのタイプのメソッドに共通であり、データ測定前のチェックパラメータを指定するために使用します。

メソッドタイプ：MicroLab PC ソフトウェアでは、次の3種類のメソッドを使用できます。

- **定量分析：**定量予測メソッドまたはスペクトル解析。赤外スペクトルが測定され、そのデータまたはピーク高さ/面積の解析結果から定義済みの定量予測が行われます。ひとつのメソッドに複数の成分を設定できます。成分ごとに独自の定量キャリブレーションが用いられます。ピーク高さ/面積/重心/ノイズを測定する機能もあります。
- **スペクトル測定：**赤外スペクトルを測定して表示するだけです。測定したデータの詳細な分析は行われません。
- **スペクトルサーチ：**赤外スペクトルを測定し、定義済みスペクトルライブラリまたは複数のライブラリに対してそのスペクトルのサーチを実行します。このメソッドの結果は、選択した検索アルゴリズムに基づいて得られた、スペクトルライブラリに最もよく一致したものです。

バックグラウンド測定前にエネルギーチェックを実行する：このオプションにより、システムによるバックグラウンドの測定前に ATR 結晶またはサンプルセルのエネルギーチェックをオン/オフすることができます。このオプションが推奨されるのは、ATR インタフェースのみです。

- **チェックスキャン数：**実行されるチェックスキャンの回数を設定します。

- **しきい値**：チェックスキンの吸光度の上限しきい値を設定します。

注記

チェックスキンのしきい値は、実験の要件に基づいて時間の経過とともに調整が必要な場合があります。

バックグラウンド：バックグラウンドの測定には次の2つのオプションがあります。

- **サンプル測定前に新規バックグラウンドを測定**：サンプルごとに新しいバックグラウンド・スペクトルを測定する必要があります。これは、データの質が極めて良い場合の推奨オプションで、水蒸気、二酸化炭素、その他の周囲環境の変動を補正するのに最適です。
- **バックグラウンドの有効期間を設定**：このオプションを選択した場合、バックグラウンドが一定の間隔で測定されるため、サンプル間にバックグラウンドスペクトルを測定しなくても、サンプルを順次測定できます。時間の間隔は、分、時間、日の単位で設定できます。

注記

有効期間は、アプリケーションの要件と実験条件の予想される変化に基づいて設定できます。データ品質を保つには、バックグラウンドスペクトルを頻繁かつタイムリーに測定することが不可欠です。

Y軸の単位：このオプションでは、Y軸のスケールを指定します：スケールは、吸光度、透過率、反射率から選択します。

最大クランプのY軸値：指定値を超える吸光度の値を、最大クランプのY軸値として表示します。測定してみると分析対象ではないバンドでスケール外の値が得られる可能性がある場合に有効なオプションです。この機能を選択した場合、スケール外バンドの形状は「フラットトップ」となり、表示スケールに悪影響を及ぼすことはありません。このオプションは、Y軸の単位として吸光度が選択された場合に使用できます。

Y軸最小しきい値：Y軸の最小しきい値を設定します。このオプションは、[Y軸の単位]として[吸光度]が選択されている場合にのみ利用可能で、シグナルが不十分であることを知らせるのに使用されます。有効にすると、データ測定の開始時に検出された信号が指定された値を下回った場合、スキンを続行する前にサンプルの再配置を促す注意が表示されます。この機能は、最初のスペクトルスキンでのみ実行されます。

注記

Y軸のクランプは通常、透過インターフェースで使用され、記録される最高の吸光度を制限して、スケール内のピークモデリングを向上させます。通常、値として2が使用されます。デフォルトの最大値は5 Absで、0.00001T (0.001 %T) に相当します。

サンプリング前にアライメントチェックを表示：このオプションは、サンプリング前のアライメントチェックを有効にします。[サンプリング前のアライメントチェック]の詳細については、39ページを参照してください。

サンプリングの連続性チェックの表示：このオプションは、サンプリングの連続性チェックを有効または無効にします。このチェックは、ハンドヘルドデバイスでは通常有効にします。測定中にサンプルがサンプリング・テクノロジーの焦点内に確実に保たれるようにします。

注記

[サンプリング前にアライメント チェックを表示] および **[サンプリングの連続性チェックを表示]** は、外部反射インタフェース/モジュールのみが対象です。これらのチェックは、ATR インタフェースには適用されません。

クラシック表示を使用する：このオプションは、グラフィックウィンドウのクラシック表示を有効または無効にします。これは、メソッドが [スペクトル測定] に設定されている場合にのみ利用可能です。

[スペクトル測定] のグラフィックウィンドウの詳細については、71 ページを参照してください。

装置ページ

[装置] ページはすべてのメソッドタイプに共通であり、測定されたデータの処理に使用する測定器の設定を指定します。

スペクトル範囲 (cm⁻¹)：波数でのスペクトル範囲の上限値と下限値を指定します。[フル] を選択すると、検出器のデフォルト範囲でのデータ取り込みが有効になります。範囲は測定器のシリーズによって異なり、広がる場合も狭まる場合もあります。

バックグラウンドスキャン回数：バックグラウンド測定でのスキャン回数を指定します。スキャン回数を増やすことによって S/N 比は高くなりますが、スキャン回数に比例して測定時間は長くなります。

サンプルスキャン回数：サンプル測定でのスキャン回数を指定します。バックグラウンド測定の場合と同様に、スキャン回数を増やすことによって S/N 比は高くなりますが、時間は長くなります。サンプルのスキャン回数は、バックグラウンドのスキャン回数と同じかそれ以下でなければなりません。通常は、バックグラウンドとサンプルは同じスキャン回数で測定されます。

分解能 (cm⁻¹)：スペクトル分解能を指定します。固体サンプルの場合は、ほとんどの測定を 4 cm⁻¹ の分解能で行うことができます。

注記

適切な分解能は、アプリケーションの要件によって異なります。分解能が高い（波数の値が低い、つまり 2 cm⁻¹ など）と、スキャン速度がわずかに遅くなると、データ容量とポイント数が多くなります。ゼロフィリングなしで 4cm⁻¹ で測定された標準的なスペクトルは、約 32 Kb のファイルになります。

ゼロフィルファクタ：インターフェログラムをフーリエ変換でエネルギースペクトルへ変換する際に使用されるゼロフィルの係数を指定します。

アポダイゼーション：インターフェログラムをフーリエ変換でエネルギースペクトルへ変換する際に使用されるアポダイゼーション関数を指定します。関数は、なし (Bpxcar)、三角形、または Happ-Genzel です。

位相補正：位相差を補正するために、標準 Mertz 法が適用されます。

サンプリング技術：サンプリング技術を選択します。透過セル、反射、ATR、ガスセル、その他。これはオプションのフィールドです。選択したメソッドのサンプリング技術が実際のインタフェースと一致しない場合、メソッドはアクティブ化に失敗する可能性があります。

メソッドゲインの設定：このオプションは、ルーチン分析のメソッドのゲイン値を保存するために使用します。これは通常、特定のアタッチメントと組み合わせた特定の測定器の設定に使用され、適切なバックグラウンドキャップが採用されています。

定量結果を光路長 (μm) に対して正規化：このオプションは、透過セルおよびガスセルサンプリング技術にのみ適用されます。

サンプリングのサブタイプ：選択したサンプリング技術に従ってサンプリングのサブタイプを選択します。

- **透過セル：**TumblIR、DialPath、または 630 透過アタッチメント
- **反射：**拡散、正反射、またはグレージングアングル
- **ATR：**1 回反射、3 回反射、5 回反射、9 回反射、ZnSe 5 回反射、Ge 1 回反射、ダイヤモンド 1 回反射、ZnSe 1 回反射

検出器タイプ：測定器の検出器タイプを選択します。

GPS データの保存：この機能は、Agilent 4300 ハンドヘルド FTIR にのみ適用します。このオプションにより、スペクトル測定時に GPS データ（グローバル・ポジショニング・システム）を保存できます。GPS データは、スペクトルが記録された場所の経度と緯度を表示します。

GPS データの要求：この機能は、Agilent 4300 ハンドヘルド FTIR にのみ適用します。このオプションは、スペクトル測定時に毎回 GPS データを必須情報とすることがを設定します。測定器が GPS データの提供をサポートしていない場合は、このオプションを無効にしてください。無効にしないと、データ採取が実行できません。屋内の場合または衛星のカバレッジが十分でない地域では、このオプションは使用しないでください。

ライブラリページ

[ライブラリ] ページは、[スペクトルサーチ] メソッドタイプが選択されている場合にのみ利用可能です。表示リストの最初の列はライブラリ名を示し、2 番目の列はライブラリに ATR スペクトルが含まれているかどうかを示します。ライブラリは、このページから追加または削除できます。

ライブラリの詳細については、33 ページの「ライブラリ管理」セクションを参照してください。

サーチページ

[サーチ] ページは、[スペクトルサーチ] メソッドタイプが選択されている場合にのみ利用可能です。このページは、メソッドが選択されたライブラリをどのように検索するかを構成するために使用されます。

サーチアルゴリズム：サーチアルゴリズムのドロップダウンメニューには、検索機能を実行するための次のオプションがあります。

- ユークリディアン
- 絶対値
- 微分絶対値
- 最小二乗法
- 微分最小二乗法
- コリレーション
- 微分コリレーション
- 類似度
- 微分類似度
- 拡張相関

微分アルゴリズムギャップ：このフィールドは、微分型の検索アルゴリズムが選択されている場合にのみ使用できます。このフィールドは、微分が適用されるギャップサイズ（計算に使用されるポイント間のギャップ）を選択するために使用されます。値が「1」のとき、標準の Norris Gap 微分を適用するのと同様です。値は1より大きくすることができ、最適な効果はインタフェースとスペクトルの特徴に依存します。

最小ヒット率：このフィールドは、表示されるライブラリヒットの品質（0～100%）の最小値のしきい値を指定するために使用されます。指定された値を下回る値の結果（インデックス x 100）は、検索結果から除外されます。

表示する最大ヒット数：このフィールドは、最小ヒット率のライブラリヒット結果のリストの数を指定された数に制限するために使用されます。例えば、12 を選択すると、最小ヒット率を上回る上位 12 個のインデックス結果が表示されます。

品質の警告リミット：このフィールドは、品質検索結果の色分け機能の上限値を設定します。[品質の注意リミット] オプションが選択されていない場合、品質の警告リミット値を下回る検索結果は赤で表示されます（値は0から1の間でなければならず、小数も許容されます）。このパラメータは、インデックス値にリ

MicroLab PC

ンクされています。品質の警告リミットが設定されていない場合、色分けは適用されません。

品質の注意リミット：このオプションのフィールドは、注意検索結果の下限値を設定します。品質の注意リミットと警告リミットの間にある結果はすべて黄色で表示されます（値は0から1の間でなければならず、小数も許容されます）。

注記

品質リミットの指標と色による評価は、選択したアルゴリズムに合わせて自動的に調整されます。

メタデータを表示する：選択したサンプルに対応するメタデータを表示するには、このチェックボックスを選択します。メタデータには、サンプルのランク、説明、危険性などの情報が含まれます。この機能は、21 CFR Part 11 環境では利用できません。

自動差スペクトルサーチ：このチェックボックスを有効にすると、測定されたスペクトルに残差検索機能が自動的に適用されます。

- [トップヒット] を選択すると、自動残差機能により、スペクトルから最初のトップライブラリヒットが差し引かれ、選択したライブラリが再検索され、結果のトップ残差ヒットが表示されます。

注記

[トップヒット] を選択すると、トップ残差ヒット結果のみが表示されます（実際のトップヒットは表示されません）。

- [定義済みスペクトル] を選択すると、自動残差機能により、測定されたスペクトルからユーザー定義のスペクトルが差し引かれ、選択されたライブラリが検索され、最上位の定義済み残差ヒットが表示されます。

注記

定義済みスペクトルファイルは、*.a2r 形式のアジレント結果ファイルであり、結果フォルダから選択する必要があります。

サーチ除外範囲 (cm⁻¹)：このオプションのフィールドは、スペクトルに検索除外範囲を追加するために使用されます。これにより、スペクトルから不要な波数範囲（結晶固有の吸収の範囲など）が削除され、よりクリーンな結果が得られます。さらに、吸収帯域のみに検索を集中させるための目的などに使用することもできます。

定量分析ページ（定量分析メソッド）

[定量分析] ページには、そのメソッドに対して定義されている成分が表示されます。成分とは、サンプルの構成成分を定量的に校正したものです。各メソッドに対して複数の成分を定義できます。

追加：このボタンは、新しいユーザー成分をメソッドに追加します。このボタンを選択すると、[成分の追加] ダイアログボックスが表示されます（以下を参照）。

削除：このボタンは選択した成分をメソッドから削除します。

編集：このボタンを選択すると、選択した成分キャリブレーションに使用するパラメータを編集できます。このボタンを選択すると、「成分の編集」ダイアログボックスが表示されます（以下を参照）。

〔成分の追加〕ダイアログボックス：〔成分の追加〕ダイアログボックスでは、成分を追加・編集できます。このダイアログボックスでは、成分キャリブレーション用の設定、表示設定、その成分に対する制限を指定します。成分制限により、成分結果を色分け表示できます。

成分名：成分リストと結果の両方に表示する成分名を指定します。明確にするために、名前には結果の単位を含めます。

計算タイプ：このフィールドには、使用する計算のタイプを指定します。計算タイプとしては、単変量ピーク高さ、ピーク高さ（シングルベースライン）、ピーク高さ（デュアルベースライン）、ピーク面積、ピーク面積（シングルベースライン）、ピーク面積（デュアルベースライン）、ノイズ計算（RMSノイズ）、ピーク位置（ピークの重心）、多変量（定量モデル）があります。定量モデルの計算タイプは、MicroLab Quant の単変量/多変量キャリブレーションでも使用されます。

注記

ピーク高さ、ピーク面積、ピーク比を用いて単変量キャリブレーションのリニアフィッティングを行う場合は、サードパーティ製ソフトウェア（Microsoft Excel など）から行う必要があります。MicroLab Quant ソフトウェアを使用すれば、サードパーティ製ソフトウェアを使用せずに、単変量キャリブレーションをすべて実行できます。

注記

多変量キャリブレーションは、Thermo Galactic PLS/IQ Plus ソフトウェアで行われ、MicroLab PC ソフトウェアが読み取れるテキスト形式、Eigenvector Solo Plus Model Exporter の XML 形式、または MicroLab Expert（Quant モジュールを利用）にエクスポートされます。キャリブレーションのエクスポートの詳細については、以下の説明を参照してください。

ピークの開始、ピークの終了：

- 多変量計算やピーク位置計算では、これらは使用するピークを定義します。
- ピーク高さ計算では、この範囲の最大値が選択されます。
- ピーク面積の場合は、これらが面積計算の範囲になります。
- 重心の場合は、重心計算の範囲になります。
- 多変量（定量）の場合は、これは表示範囲の境界になります。

ベースライン1の開始、ベースライン1の終了：これらのポイントは、ベースラインの最初のポイントの計算の開始エリアを定義します。単一ポイント・ベースラインの場合は、ベースライン1だけが使用されます。このベースラインがこの範囲内の最小値と見なされます。

ベースライン2の開始、ベースライン2の終了：これらのポイントは、ベースラインの第2ポイントの計算の開始エリアを定義します。このベースラインがこの範囲内の最小値と見なされます。

成分：この機能は、計算タイプとして「定量モデル」が選択されている場合にのみ、Agilent MicroLab Expert Quant モデル (*.a2q) にのみ適用されます。多変量モデルで使用される成分は、ドロップダウンメニューに表示されます。

注記

Agilent MicroLab Expert Quant モデル (*.a2q) ファイルを使用するには、同じデバイスに Quant 機能を備えた MicroLab Expert をインストールする必要があります。

スケーリング：このセクションは、データに適用する直線キャリブレーションを定義します。これは、任意のピーク定義（ピーク高さ、ピーク面積など）で使用することも、多変量（定量）メソッドによって得られた値の変更に使用することもできます。通常は、適切なスケールに値を変更するのに使用します。

- **スケール (x値)：**スケールは直線キャリブレーション方程式の傾きです。リニアフィッティングの方程式では、 $y=mx+b$ 、スケールは'm'です。
- **オフセット：**オフセットは直線キャリブレーションのY軸オフセットです。リニアフィッティングの方程式では、 $y=mx+b$ 、オフセットは'b'です。
- **レポート対象の10進値：**結果レポートの小数点以下の桁数を定義します。

しきい値 (T)：このセクションは、MicroLab PC ソフトウェアが表示結果やレポートの色分けに使用するリミット値を定義します。[限界 (高)] と [クリティカル (高)] のしきい値、または [限界 (低)] と [クリティカル (低)] のしきい値の間の値は、黄色で表示されます。[限界 (高)] しきい値より上の値または [限界 (低)] しきい値より下の値は、赤で表示されます。他の値はすべて緑で表示されます。

計算値：値は、次のオプションから計算できます：

- 実際の値
- パーセント低
- パーセント高

注記

[パーセント高] および [パーセント低] オプションには、[警告高] 基準値が必要です。基準値は事実上 100 % 基準値です。計算値は、基準値の % として報告されます。

成分レポートページ

成分レポートを使用することにより、メソッド開発者は、成分を [結果] 画面とレポートの両方に表示する場合を決定できます。「表示」列の選択した成分だけが画面とレポートに表示されます。

[成分レポート条件の編集] ダイアログボックス

さらに、メソッド開発者は、一定の条件でのみ成分をレポートすることを選択できます。例えば、成分の値がキャリブレーションが行われた範囲内にある場合にだけ成分がレポートされるように指定することができます。このため、1つのメソッドに複数の範囲（高、中、低）にわたるキャリブレーションを指定できます。指定した場合には、範囲内のキャリブレーションから得られた濃度だけがレポートされます。多変量メソッドの場合は、任意のメソッド統計測定（Mahalanobis 距離、F 検定など）を使用して、値をレポートする必要があるかを決定することができます。

レポート対象：開発者はこのセクションを使用して、成分を計算値としてレポートするか、値に基づいたテキスト文字列としてレポートするかを選択できます。条件設定で論理ロジックと一緒に用いれば、数値結果ではなく、「仕様範囲外」や「良好」などのテキスト・ベースの結果を表示することができます。

成分／診断：このドロップダウンリストには、表示ロジックの選択に使用できる診断情報がすべて表示されます。

テストの状態：診断の状態を指定できます。これは以下の「値」と一緒に使用します。

値：その成分を表示するかどうかを決定するためにテストの状態と一緒に使用する診断の値。

例1：簡単な単変量メソッドの場合は、1つの分析物に対して2つの成分を指定することもできます。1つの成分には低範囲にわたって有効なキャリブレーションを適用し、もう1つの成分には高範囲にわたって有効なキャリブレーションを適用します。適切な範囲だけがレポートされるように選択することもできます。この例では、成分は「面積」と呼ばれ、高レンジは1000～5000 ppmの範囲で有効になります。この例では、成分／診断に対して面積を選択します。まず、「 \geq 」のテストの状態として、1000の値を選択します。これが追加されたら、“AND”を選択します。次に、「 $<$ 」のテストの状態として、5000の値を選択します。この例では、値が1000～5000の範囲内にある場合にだけ、面積成分がレポートされます。

例2：多変量（PLS）メソッドの場合は、1つに複数の成分を指定することもできます。成分ごとに異なる多変量キャリブレーションを適用することもできます。未知のサンプルと最も密接な関係があるキャリブレーション・セットを持つ成分だけが必要な場合もあります。この場合、MDistance（マハラノビス距離）の成分／診断、 \leq のテストの状態、3の値を選択します。これにより、マハラノビス距離が3未満の値だけがレポートされます。これは、そのサンプルが統計的にはそのキャリブレーション・セットのグループの中に含まれることを示します。

カスタム フィールド ページ

カスタムフィールドは、管理者により定義され、選択したメソッドの開始時に表示されるフィールドです。次に、メソッドのユーザーがこのフィールドに入力します。フィールドは日付またはテキスト、数値が可能で、管理者のみが追加/削除できます。これらのフィールドは、[結果] 画面やレポートに表示できます。具体的なユーザー要件に応じて、さまざまなオプションフィールドをメソッドに追加できます。

推奨ページ

サンプル分析後、推奨事項が [結果] 画面に表示されます。メッセージは独自の機能で、ユーザーは固有のニーズやパラメータに合わせて結果をカスタマイズすることができます。

レポートページ

[レポート] ページはすべてのメソッドタイプに共通であり、利用可能なレポートテンプレートを現在のメソッドに割り当てたり、レポートテンプレートを現在のメソッドから削除したりするために使用します。利用可能な場合、複数のレポートテンプレートを同時に追加/削除できます。

利用可能なレポート テンプレート：レポートテンプレートは、特定のメソッドタイプに対して提供されています。

- [スペクトル測定] の場合、Spectrum レポートテンプレートを使用できます。
- [定量分析メソッド] の場合、Spectrum または ComponentReport テンプレートを使用できます。
- [スペクトルサーチ] の場合、OilReport、Spectrum、SpectrumOverlaid、SpecrumStacked、ZoomedSpectrumOverlaid、ZoomedSpectrumStackedテンプレートを使用できます。

独自のカスタム レポートテンプレートを作成することもできます。レポートテンプレートの詳細については、77 ページのセクション 8 を参照してください。

- **結果フォルダ：**以下のフォルダのうちの 1 つを、結果の保存場所として指定します。
- バージョン 5.3 以降のすべてのシステムでは、すべてのユーザー定義ファイルおよび対話式呼び出しファイルは、
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab または C:\Users\Public\Public Documents\Agilent\MicroLab に保存されます。

このフィールドを空白にしておいた場合、ファイルは結果フォルダ：
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results に直接保存されます。

21 CFR Part 11 環境でフィールドを空白にしておいた場合、デフォルトの結果フォルダは、VAIMDB_Public(000)|Public Results になります。

別のフォルダを入力して、Results ディレクトリ内にファイルを保存することができます。MicroLab Mobile を実行するシステムにメソッドを転送する場合、フォルダはモバイル機器の適切なフォルダに自動的にアップデートされます。自動レポート機能用のオプションもあります。このボックスをチェックすると、サンプルの測定に使用されたメソッドに関連するすべてのレポートが自動的に作成されます。

レポートテンプレートを現在のメソッドへ追加/削除

〔使用可能なレポートテンプレート〕列にリストされているレポートは、メソッドに追加されるまでアクティブになりません。現在のメソッドにレポートを追加するには：

- 1 〔使用可能なレポートテンプレート〕列で目的のレポートを強調表示します。
- 2 **〔追加 ->〕** をクリックします。

メソッドの完了後、〔使用可能なレポートテンプレート〕列に追加されたレポートはすべて、ユーザーが選択できるようになります。**〔選択されたレポートの自動作成〕** オプションを選択すると、〔使用可能なレポートテンプレート〕列にリストされているすべてのレポートが自動的に印刷されます。

現在のメソッドからレポートを削除するには：

- 1 **〔選択されたレポートテンプレート〕** 列から目的のレポートを強調表示します。
- 2 **〔<- 削除〕** をクリックします。

削除されたレポートは、〔使用可能なレポートテンプレート〕列に再び表示されます。

保存先フォルダ □ 指定したレポートの保存先のファイルパスを指定します。

結果の命名規則 □ MicroLab には自動保存機能があり、各分析に固有の識別番号が作成されます。すべてのファイルは、すべての許可されたユーザーが使用でき、〔測定データ一覧〕 ボタンを押すことによって再表示できます。管理者は、ユーザーのニーズに最適なフォーマットを選択することができます。

- **サンプル ID + 通し番号 (サンプル ID が必要)** □ 結果の名前は、サンプル ID と 4 桁の通し番号になります。例：Sample_0000
- **日付と時刻**：結果名は分析の日付／時刻スタンプと一致します。
- **サンプルID+日付と時刻**：結果名には、サンプル ID、分析の日付と時刻が含まれます。

自動エクスポート：MicroLab には自動エクスポート機能があり、データ測定時に結果ファイルを自動的にエクスポートすることができます。MicroLab は、さまざまなサードパーティ製ソフトウェアプログラムへのインポートに対応するため、*.csv、*.spc、*.asp ファイルタイプを生成できます。*.spc は、GRAMS または

Eigenvector でのデータ使用に必要なユニバーサル スペクトル データ ファイルです。*.asp ファイル形式は、ヘッダーが X 軸 で定義された Y 軸 データの単純な ASCII 出力です。

注記

サンプル ID は、ユーザーが分析中に入力します。ユーザーがサンプル ID を入力しないと、システムが自動的に日付/時刻スタンプを作成します。複数のサンプルを実行する場合、ユーザーは常にサンプル ID をアップデートする必要があります。MicroLab PC は、以前に入力されたサンプル ID を記録します。

詳細設定

システムチェック

[システムチェック] には、測定器のテストとして、

- パフォーマンス (S/N)
- 安定性試験
- レーザー周波数キャリブレーションチェック
- スペクトル分解能チェック

[システムチェック] の詳細については、該当する測定器の操作マニュアルを参照してください。

診断

[診断] ページには、以下を含む測定器に関する重要な診断と一般情報が表示されます。

- 測定器のステータス
 - エネルギー (カウント)
 - バッテリー (AC 電源またはバッテリー %)
 - 光源 (電流/電圧)
 - レーザー (カウント)
- コンポーネントの温度 (°C)
- バージョン情報

このページでは、以下の操作も可能です。

- クリーンおよびバックグラウンド有効性のリセット
- 日時フォーマットの構成

MAC アドレス

[MAC アドレス] ページには、システムの現在の MAC アドレスが表示され、エクスポート用にアドレスをクリップボードにコピーできます。

ライブラリ管理

[ライブラリ管理] ページには、保存されているライブラリ名や内容などのライブラリ情報が表示されます。このページでは、新規ライブラリの作成、既存ライブラリの削除、および現在のライブラリエントリの編集もできます。

注記

ライセンスされたライブラリのライブラリエントリは編集または削除できません。

新規ライブラリの作成

- 1 ライブラリリスト ウィンドウの右側にある **[新規ライブラリ]** ボタンを選択します。

[ライブラリの作成] ウィンドウが表示されます。

- 2 **ライブラリ名**を入力します。
- 3 必要に応じて、ライブラリに付加するオプションの**コメント**を入力します。
- 4 **ライブラリスpekトル**のタイプとして以下を選択します。
 - ベースライン補正
 - ATR spekトル
- 5 **Yタイプ**として以下から選択します：
 - 吸光度
 - 反射率
 - 透過率
- 6 **ライブラリのバイト数**を選択します：これは、各spekトルを保存するために使用されるバイト数を指定します。ユーザーが作成したライブラリには通常、値として2が適切です。
- 7 **ライブラリの最初のエントリから自動検出かどうか**を選択します。この機能が有効な場合、ライブラリ内の最初のspekトルを使用して、最初のX (cm⁻¹) および最後のX (cm⁻¹)、ポイント数を決定します。この機能を無効にすると、ユーザーはライブラリマッチの範囲とポイント数を手動で選択できます。
- 8 **[作成]** をクリックします。

注記

アジレントは、正反射データ、グレージングアングル データ、または拡散反射データに ATR 補正を適用することを推奨していません。

現在のライブラリの編集

既存のライブラリにエントリーを追加するには：

- 1 詳細設定 > ライブラリ管理に移動し、既存のライブラリファイル (.lib) を選択します。
- 2 [ライブラリに追加] をクリックします。
- 3 該当する *.a2r ライブラリ エントリ ファイルを選択します。
- 4 [開く] をクリックします。

[結果エントリーのインポート] ダイアログボックスが表示されます。このボックスでは、名前とオプションの CAS# をエントリーに適用できます。

- 5 [OK] をクリックします。

注記

あるライブラリにあるサンプルのカスタム情報を編集すると、同じライブラリおよび他のすべてのライブラリにあるその CAS# のすべてのエントリー情報が自動的に編集されます。

既存のライブラリからエントリーを削除するには：

- 1 リストから既存のライブラリファイル (.lib) を選択します。
- 2 [ライブラリから削除] をクリックします。
- 3 [OK] をクリックします。

注記

削除されたライブラリのエントリーはライブラリから完全に削除されます。対応するライブラリインデックス番号は利用できなくなります。

注記

アジレントは、1つのライブラリに追加するのは、同じサンプリングタイプ (ATR など) のスペクトルにすることを推奨します。

カスタム情報

[カスタム情報] ウィンドウには、選択したライブラリエントリーに関連する識別情報とデータ情報が表示されます (利用可能な場合)。このページではまた、そのライブラリエントリーに関連するクラス、注記、および取り扱い情報をユーザーが追加することもできます。

ユーザー管理

[ユーザー管理] ページを使用して、ユーザーの氏名、役割を編集し、ユーザーのセキュリティを変更できます。

ユーザー管理の詳細については、13 ページを参照してください。

多変量メソッドの GRAMS PLS/IQ から MicroLab PC への転送

PLS/IQ *.cal ファイルを ASCII 形式でエクスポート

PLS/IQ *.cal ファイルを ASCII にエクスポートするには：

- 1 PLS/IQ を使用して、PLS/IQ *.cal ファイルを作成します。PLS/IQ でキャリブレーションを保存するには、GRAMS ヘルプファイルの「Galactic GRAMS：測定ディレクトリからキャリブレーションを保存する」手順を使用します。GRAMS ヘルプファイルに関する質問および詳細については、Agilent までお問い合わせください。
- 2 GRAMS のメイン画面から、**[アドオン] → [PLS/IQ] → [キャリブレーション エクスポート]** をクリックします。**[開く]** ダイアログボックスが表示されます。
- 3 該当する *.cal ファイルを選択し、**[開く]** をクリックします。**[エクスポート]** ダイアログボックスが表示されます。
- 4 最初のセクションには、選択したキャリブレーションファイルが表示されます。2 番目のセクションには、エクスポートしたファイルの種類が表示されます。出力ファイルの種類は **ASCII テキスト (*.txt)** でなければなりません。
- 5 **[次へ]** をクリックします。**[名前を付けて保存]** ダイアログボックスが表示されます。
- 6 ファイルを保存する前に、
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\models を検索します。
- 7 適切な名前を入力し、**[開く]** をクリックします。キャリブレーションファイルがエクスポートされます。ソフトウェアは **[エクスポート]** ダイアログボックスに戻ります。
- 8 **[キャンセル]** をクリックして、GRAMS に戻ります。

メソッドファイルの作成

MicroLab PC でメソッドファイルを作成するには：

- 1 MicroLab PC または MicroLab Lite から、**[メソッド]** ボタンをクリックします。

- 2 [メソッド] ダイアログボックスで、**[新規]** ボタンをクリックします。
- 3 メソッドの **[タイプ]** ページで、メソッドタイプのドロップダウンリストから **[定量分析]** を選択します。
- 4 **[定量分析]** ページをクリックします。
- 5 [定量分析] ページで、**[追加]** ボタンをクリックします。
- 6 [成分の追加] ダイアログボックスに、成分の名前を指定します。
デフォルトでは、成分名はユーザーがメソッドを実行した時に値の隣に表示されるテキストです。予測成分のプロパティを説明する名前を入力します。
- 7 多変量 (PLS) メソッドの場合は、計算タイプとして **[定量モデル]** を選択します。[ファイルを開く] ダイアログボックスが表示されます。
- 8 該当するキャリブレーション テキスト ファイル (「PLS/IQ *.cal ファイルを ASCII 形式でエクスポート」のステップ 7 で Galactic GRAMS からエクスポートしたファイル) を選択し、**[開く]** をクリックします。
- 9 [成分の追加] ダイアログボックスで設定可能なその他のオプションを以下に示します。

[成分の追加] / [成分の編集] ダイアログボックスで設定可能なその他のオプションを以下に示します。

- a **定量の開始および定量の終了:** [結果] 画面から成分を選択した時に表示する周波数レンジを設定します。空白にした場合は、スペクトル全体が表示されます。
 - b **スケーリング:** スケーリング・セクションは、定量モデルから得られた結果にリニア・スケーリングを適用します。
 - c **しきい値 (T):** これらの値は成分結果の表示色を設定します。成分値がクリティカル値より大きいまたは小さい場合は、結果が赤で表示されます。成分値がクリティカル値と限界値の間の場合は、結果が黄色で表示されます。それ以外の場合は、結果が緑で表示されます。
 - d **計算値:** 実際の成分値、クリティカル (高) 値の%、クリティカル (低) 値の%の間で表示を変更します。
- 10 すべての値を適切に設定したら、**[OK]** をクリックします。
 - 11 **[名前を付けて保存]** をクリックします。メソッド名を入力し、適切な場所に保存します。デフォルトのファイルパスは以下のとおりです。

C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods

注記

21 CFR Part 11 環境では、メソッドを保存するデータベースの場所を選択します。

- 12 MicroLab PC でメソッドを使用できるようになります。メソッドを使用するには、メソッドがアクティブであることを確認します。

MicroLab Expert から MicroLab PC への MicroLab Quant モデルの転送

MicroLab PC で MicroLab Expert からの モデルファイルを活用するには：

注記

21 CFR Part 11 環境では、メソッドに含める前に、MicroLab Quant を使用して、モデルをデータベースにインポートすることが必要です。詳細については、48 ページの「モデルのインポート (Import Models)」を参照してください。

- 1 MicroLab PC または MicroLab Lite から、**[メソッド]** ボタンをクリックします。
- 2 **[メソッド]** ダイアログボックスで、**[新規]** ボタンをクリックします。
- 3 メソッドの **[タイプ]** ページで、メソッドタイプのドロップダウンリストから **[定量分析]** を選択します。
- 4 **[定量分析]** ページをクリックします。
- 5 **[定量分析]** ページで、**[追加]** ボタンをクリックします。
- 6 **[成分の追加]** ダイアログボックスで、成分の名前を指定します。
- 7 計算タイプとして **[定量モデル]** を選択します。**[ファイルを開く]** ダイアログボックスが表示されます。
- 8 モデルファイルが存在する場所に移動します。ファイルタイプフィールドを変更して、ファイルタイプにフィルタをかけます。次のファイルタイプが使用できます。
 - Agilent モデル (*.mqm)
 - Thermo モデル (*.txt)
 - Eigen Vector モデル (*.xml)
 - Agilent MicroLab Expert Quant モデル (*.a2q)

注記

Agilent MicroLab Expert Quant モデル (*.a2q) ファイルの使用には、「測定バンドル」(G8188AA) などのワークフロー製品バンドルの一部として提供される、別のライセンス登録コードが必要です。登録がない場合は、エラーが表示されます。

- 9 モデルファイルを選択し、**[開く]** をクリックします。これで、モデルがメソッドに設定されます。
- 10 **[成分の追加]** ダイアログボックスで使用可能な他のオプションを入力します。**[OK]** をクリックします。
- 11 **[名前を付けて保存]** をクリックします。適切なメソッド名を入力し、C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods に保存します。
 - 21 CFR Part 11 環境では、メソッドを保存するデータベースの場所を選択します。

- 12 MicroLab PC でメソッドを使用できるようになります。メソッドを使用するには、メソッドがアクティブであることを確認します。

[サンプリング前のアライメント チェック] の使用

[サンプリング前のアライメント チェック] は、プレビュー画面に測定サンプルの信号強度をビジュアル表示します。これにより、サンプルが FTIR 測定器のインタフェースの焦点面にあり、サンプルに対してフラットであるかどうか、あるいは最大シグナルが得られるように測定器がサンプルに位置合わせされているかどうかを判断できます。この手順では、サンプリング前のアライメント・チェックを使用するメソッドの作成について詳細に説明しています。メソッドには、サンプルから行う測定を指定します。通常は、目的のサンプルに対応するピーク高さまたはピーク面積です。

サンプルのアライメントをチェックするには：

- 1 MicroLab PC または MicroLab Lite で、**[メソッド]** ボタンをクリックします。
- 2 **[メソッド]** ダイアログボックスで、**[新規]** ボタンをクリックします。
- 3 メソッドの **[タイプ]** ページで、メソッドタイプのドロップダウンリストから **[定量分析]** を選択します。
- 4 **[定量分析]** ページをクリックします。
- 5 **[定量分析]** ページで、**[追加]** ボタンをクリックします。
- 6 **[成分の追加]** ダイアログボックスで、成分の名前を指定します。
- 7 成分の計算タイプを選択します。
通常は、ピーク面積（デュアル ベースライン）またはピーク高さ（デュアル ベースライン）がサンプルのアライメントの最もよい指標となります。
- 8 測定対象のピーク（面積）を定義します。
 - ピーク面積の場合、ピーク開始とピーク終了によってピークのエッジを定義します。
 - ベースライン 1 とベースライン 2 の場合は、始点と終点の間の最低点としてベースラインが確立されています。
- 9 測定ポイントが 1 より大きくなるように、**[スケール係数]** を設定します。ピーク高さの場合、スケール係数を 1000 に設定すると、ほとんどの測定がオンスケールで表示されます。
- 10 **[OK]** をクリックします。
- 11 メソッド **[タイプ]** ページで、**[サンプリング前のアライメント チェックを表示]** を選択します。ドロップダウンリストから、ステップ 6 で定義した成分を選択します。

MicroLab PC

- 12 **【サンプリングの連続性チェック】**を使用することにより、システムが測定全体を通してサンプルに合わせてアライメントされていることも確認できます。
- 13 **【名前を付けて保存】**をクリックし、メソッドを保存します。
- 14 ハンドヘルド PC で使用するには、メソッドをモバイル機器の MicroLab Mobile/Methods フォルダに転送する必要があります。
- 15 MicroLab Mobile では、サンプリング前のアライメントチェックが、[サンプル・アライメント] ページに赤/黄/緑の棒グラフで表示されます。棒グラフの最大値に達するためには、サンプルを回転またはアライメントさせる必要があります。

編集したメソッドの MicroLab Mobile への転送

MicroLab PC/MicroLab Lite でのメソッドに対する変更が完了したら、使用するためには、ファイルを内蔵 PC またはハンドヘルド PC に転送する必要があります。ファイルをコピーするには、2 通りの方法があります。[マイ コンピュータ] を使用するか、MicroLab Lite によって自動的に転送します。

MicroLab Lite 同期の使用

MicroLab Lite 同期を使用してメソッドを MicroLab Mobile に転送するには：

- 1 ハンドヘルド PC または内蔵 PC を MicroLab Lite を搭載しているコンピュータに接続します。
 - 4300 ハンドヘルド FTIR を使用している場合は、デバイス上の MicroLab Mobile ソフトウェアを終了して「パススルー」モードに入り、USB 接続を使用してコンピュータに接続します。MicroLab Mobile を終了するには、[ホーム] 画面で **【ログオフ】** を選択し、**【終了】** をクリックし、**【終了確認】** ダイアログボックスが表示されたら **【OK】** をクリックします。
- 2 コンピュータの MicroLab Lite を開きます。
- 3 **【詳細設定】** をクリックします。
- 4 **【同期】** をクリックします。
- 5 接続がリストされていない場合は、**【新規】** をクリックします。
- 6 ダイアログボックスで、**【接続されたデバイス名の取得】** を選択すると、接続されている PDA または 4300 ハンドヘルド FTIR 測定器のシリアル番号が自動的にダイアログボックスに入力されます。
- 7 標準構成の場合は、同期するオプションを選択します。レポート、結果、メソッドを同期させることができます。さらに、目的のプリンタを指定して、レポートを自動的に印刷することができます。

MicroLab PC

- 21 CFR Part 11 対応システムの場合は、[参照] をクリックしてから、Public Mobile Methods フォルダまたは Results フォルダに移動します。
 - メソッドファイルを 21 CFR Part 11 が有効な MicroLab Mobile にアップロードするには、それらのファイルが Public Mobile Methods フォルダにある必要があります。フォルダ内のすべてのメソッドファイルがアップロードされます。
- 8 同期させるデバイスを選択したら、[OK] をクリックします。
 - 9 ファイルを転送するには、リストから目的のハンドヘルドPCを強調表示し、[同期] をクリックしてから、[はい] をクリックします。

「マイ コンピュータ」によるコピー

注記

21 CFR Part 11 環境の場合、CFR 未対応メソッドは、「マイ コンピュータ」によってコピーするときは表示されますが、アクティブ化はできません。

「マイ コンピュータ」を使用してメソッドを MicroLab Mobile に転送するには：

- 1 ハンドヘルド PC または内蔵 PC を MicroLab PC を搭載しているコンピュータに接続します。

注記

この手順は、4300 ハンドヘルド FTIR では使用できません。40 ページで説明されている [同期] 機能を使用します。

- 2 PC で、[マイ コンピュータ] を開き、C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods フォルダに移動します。
- 3 目的のメソッドを選択し、[編集] > [コピー] を選択します。
- 4 [マイ コンピュータ] から、[モバイルデバイス] ドライブを選択します。
- 5 Program Files\MicroLab Mobile\Methods\ フォルダを検索します。
- 6 [編集] → [貼り付け] をクリックします。
- 7 コンピュータの C:\ドライブに戻り、C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Models フォルダに移動します。
- 8 Models フォルダの内容全体をコピーします。
- 9 [マイ コンピュータ] から、[モバイルデバイス] ドライブを選択します。
- 10 Program Files\MicroLab Mobile\Models フォルダを検索し、[編集] → [貼り付け] をクリックします。
- 11 上書き警告が表示されたら、[すべて上書き] をクリックします。

21 CFR Part 11 対応環境のファイル移動

この手順は、メソッドファイルおよび結果ファイルに使用できます。

特定のフォルダから別のフォルダにファイルを移動するには：

- 1 ログオンしたユーザーが、メソッド/結果の切り取り/貼り付けを行える権限を持っている必要があります。
- 2 MicroLab Lite または MicroLab PC で、目的のファイルを選択して右クリックしてから、[切り取り] を選択します。
- 3 適切なフォルダに移動してから、ファイルの [貼り付け] を行います。

注記

ファイルを別々のフォルダにコピーすることはできません。

システムチェック

システムのチェックを実行するには：

- 1 [ホーム] 画面の [詳細設定] をクリックします。
- 2 [システムチェック] を選択します。4つのテストを実行できます。各テストの詳細については、測定器の操作マニュアルを参照してください。
- 3 実行するテストを選択します。
 - 必要に応じて、テスト回数、時間（分）、または測定回数のパラメータを調整できます。
 - 複数のテストを選択して一緒に実行できます。
- 4 [次へ] をクリックしてテストを開始します。
- 5 画面の指示に従います。1つのステップが完了したら [次へ] をクリックします。
- 6 テストが完了するまで、上記のステップを繰り返します。

4 MicroLab Quant

ホーム画面	43
ログオフ (Logoff)	44
ロック (Lock)	44
新規モデルの開始 (Start New Model)	44
モデルのインポート (Import Models)	48
21 CFR Part 11 の機能	49

ホーム画面

バージョン5.1以降の MicroLab PC をインストールすると、MicroLab Quant モジュールもインストールされます。このモジュールは、MicroLab PC の MicroLab 定量分析メソッドモジュールで使用できるメソッドやモデルをユーザーが作成できるように設計されています。

MicroLab Quant は、MicroLab PC で使用しているものと同じセキュリティ設定とユーザー管理ツールを使用します。ログインするには、MicroLab PC と同じユーザー名とパスワードを入力します。21 CFR Part 11 環境の場合は、グループとプロジェクトも入力する必要があります。

以下のオプションを利用できます：

- 新規モデルの開始 (Start New Model)
- 以前のプロジェクト/モデル (Previous Project/Model)
- モデルの評価 (Evaluate Model)
- モデルのインポート (Import Models) (21 CFR Part 11 の場合のみ)

新規プロジェクト/モデル用のデータは、MicroLab Quant を使用する前に測定しておく必要があります。測定は MicroLab PC で実行します。すべてのデータは同じ測定パラメータを使用して測定する必要があります。

ログオフ (Logoff)

ログオフした画面から、別のユーザーがシステムにログオンしたり、終了したりできます。[終了] (Exit) ボタンを押すと、MicroLab PC ソフトウェアが閉じます。

ロック (Lock)

このボタンは 21 CFR Part 11 環境でのみ使用できます。これを使用すると、無人のときのアクセスを制限するためにソフトウェアがロックされます。詳細については、55 ページの MicroLab 21 CFR Part 11 のセクションを参照してください。

新規モデルの開始 (Start New Model)

新規モデルを作成するには

- 1 **[Start New Model]** を選択します。新しいプロジェクト名はソフトウェアによって自動作成されますが、ユーザーが名前を入力して作成することもできます。
- 2 データ選択メニューが表示され、データが保存されているフォルダをユーザーが選択することができます。データは、測定に使用されたメソッドごとにグループ分けされます。
 - a モデルの作成に使用するデータを選択します。目的のデータをクリックして選択します。Windows 環境でファイルを選択する場合と同様に、ユーザーは **[CTRL]** や、**[Shift]** キーを使用して複数のファイルを選択できます。
 - b ファイルを選択したら、画面の下にある **[Next >>]** ボタンをクリックして進みます。
- 3 各標準用の Concentration 欄に濃度を入力します。

- 4 [Quant Algorithm] ドロップダウンメニューからデータに適用するアルゴリズムの種類を選択し、[Next >>] をクリックします。アルゴリズムには、次のオプションがあります。
- a **Simple Beer's Law (ベールの法則)** : 1つの成分を1次式として特性を評価する一般的な方法です。一連の既知の濃度と特有のスペクトル特性(吸光度単位で表示)の変化によって成分を特定します。特性の変化には、ピーク高さ、ピーク面積、ピーク比があります。ベールの法則の概念である $A = \epsilon bc$ より、1次式は $y = mx + b$ の形に決まります。これを使用して、既知のキャリブレーションの式に対して未知の濃度を計算します。
 - b **Classical Least Squares (従来の最小二乗法)** : 混合物の中に複数の成分が存在する場合に使用します。この解析タイプもベールの法則に基づいており、複数の周波数を選択してすべての成分に生じる変化をすべてサンプリングします。各成分は、キャリブレーションモデルの予測濃度と実測濃度の相関が最大になる組み合わせが採用されます。
 - 1 複数の周波数を無制限に定義できます。各成分の既知の濃度を定義する必要があります。
 - 2 最小二乗法は、混合物が成分に対してマトリクス効果を引き起こし、成分に相互作用がある場合は有効ではありません。ベースライン効果の影響を受ける可能性もあります。
 - 3 最小二乗法が最も有効なのは、混合物の中の1つの成分を特定する場合です。
 - c **Inverse Least Squares (逆最小二乗法、逆ベールの法則、または重回帰法とも呼ばれる)** : マトリクス効果が存在する、複数成分の混合物で使用します。この解析タイプはベールの法則に基づいています。複数の周波数を使用して、ベールの法則の逆数である $C = P \cdot A + e_c$ のキャリブレーションを定義します。
 - 1 目的成分の情報だけが必要な、多変量モデルとして最も使用されません。複雑な分析タイプに最適です。
 - 2 キャリブレーションで使用する周波数の数は、キャリブレーションで使用されている既知の標準の数以下に設定する必要があります。これらの周波数は、目的成分の変化に対応している必要があります。
 - 3 十分な数のキャリブレーション・スペクトルを使用できる場合、逆最小二乗法は、一般的に、最も正確なキャリブレーションになります。
- 5 定量アルゴリズムを選択した後は、ピークを定義します。ソフトウェアでは、ピーク高さ、ピーク面積、ピーク比の選択が可能です。

- a ピーク高さの定義：** ピーク高さアイコン  をデータウィンドウに表示されているスペクトルにドラッグ・アンド・ドロップします。スペクトル上の矢印を使用して、ベースラインとピークの位置を対話形式で変更できます。
- 1 上向きの赤い矢印でベースラインの位置（開始ポイントと終了ポイント）を設定します。
 - 2 下向きの青い矢印はピーク位置を示します。
- b ピーク面積の定義：** ピーク面積アイコン  をデータウィンドウに表示されているスペクトルにドラッグ・アンド・ドロップします。スペクトル上の矢印を使用して、ベースラインとピークの位置を対話形式で変更できます。
- 1 上向きの赤い矢印でベースラインの位置（開始ポイントと終了ポイント）を設定します。
 - 2 下向きの青い矢印はピーク位置（開始ポイントと終了ポイント）を示します。
- c ピーク比の定義：** ソフトウェアでは、ピークまたは面積の比をキャリブレーションに使用するように定義できます。2つ以上のピークを、面積または高さで定義する必要があります。目的のピークを定義したら、データウィンドウの下の [ピーク比] アイコン  をクリックします。ダイアログが表示され、ピーク比の式の分子と分母を定義するように指示されます。
- d スケーリング：** ユーザーは、必要に応じて、スペクトルデータをクリックして拡大できます。拡大を解除するには、スペクトル表示ウィンドウを右クリックして [Full Scale] をクリックします。
- e データ・テーブル：** テーブルに表示されているデータは、ユーザーがスペクトル表示ウィンドウから対話形式で追加したピークの定義です。別の値にする必要がある場合は、ユーザーはこれらの値をテーブルから直接変更できます。
- 1 **Include in Model の設定：** ユーザーは、どの演算を開発中のモデルに含めるかを決定できます。これはフルデータセットに基づきます。
 - 2 **Delete ボタン：** モデルからピーク定義を完全に削除します。
- f Standards テーブル：** キャリブレーション・アルゴリズムに使用する特定の標準を対話形式で選択します。個々のスペクトルデータに対応するチェックボックスの選択をオフにすると、それらはプロットまたはモデルから削除されます。さらに、Standards テーブルでハイライトすると、表示ウィンドウで個々のスペクトルがハイライトされます。

- g モデルプロット ウィンドウ：**モデルプロット ウィンドウのデフォルトは、実測データ対予測データのプロット表示です。次の2つの方法のいずれかで、定義済みピーク対濃度のプロットに切り替えることができます。
- 1 モデルプロット・ウィンドウを右クリックして目的のプロットを選択します。
 - 2 解析画面の下部にある **[Select Model Plot]** ボタンをクリックします。
- h Model Evaluation (モデルの評価)：** [Model Evaluation] ボタンをクリックすると、ソフトウェアで2つの機能を使用できるようになります。これらの機能は、通常、キャリブレーション・セットの外れ値と信頼性を特定するために使用します。
- 1 **Cross Validation (クロス検証)：**ソフトウェアは、各標準をクリアするキャリブレーションを一通り実行してから、その標準を未知として解析したら結果の値がどうなるかを決定します。
 - 2 **Independent Set (個別セット)：** **[Add Files...]** から、キャリブレーションサンプルとは別に分析されたチェック標準を追加し、これらのサンプルの値を予測します。各サンプルの濃度をテーブルに入力し、 **[Predict] (予測)** ボタンをクリックします。
 - a 標準誤差の合計 (Total Standard Error) 、実測データ対予測データの決定係数 (r2, R-Squared) が画面の下部に表示されます。実測データ対予測データのグラフも画面に表示されます。
 - b 値は、 **[Export]** ボタンを使用して CSV ファイル形式で指定した場所に **エクスポート** できます。
 - c モデルを **保存** するオプション **[Save]** や前のデータ解析画面に戻るオプション **[Back]** が表示されます。
- i Finalize Model (モデルの完成)：**キャリブレーションモデルに問題がない場合は、 **[Finalize Model]** ボタンを選択します。これにより、標準およびモデルを含むプロジェクト (*.mpq) を保存できます。このとき、MicroLab メソッドにデータを保存することもできます。これには、関連したモデルで定義した成分とすべてのキャリブレーション・パラメータも含まれます。
- 1 **モデルファイル：**複数の成分を定義する必要がある場合、これを個々のモデルやプロジェクトで実行する必要があります。各成分は、個々のモデルまたは *.mqm ファイルにプロジェクトファイルが保存されるときに同時に定義されます。
 - 2 **メソッドの保存：**目的成分と一緒に、*.a2m の拡張子でファイルを保存します。メソッドには、モデルを作成したときに使用したキャリブレーションファイルと同じデータ測定パラメータが含まれています。メソッドファイルに複数の成分を定義する場合は、それらを MicroLab Lite/MicroLab PC を介して手動で追加する必要があります。

MicroLab PC の多変量メソッドの転送のセクションを参照してください。モデルの追加手順は GRAMS モデルと同じですが、前述したように、これらは *mqm ファイルとして定義されます。

- 3 Print (印刷)** : 標準/モデル情報を含む PDF を作成する場合に選択します。ファイルは、
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results フォルダに保存されます。
- 6 Previous Project/Model (以前のプロジェクト/モデル)** : ユーザーは、以前のプロジェクトおよび編集パラメータを選択できます。これは、前述の新規モデルの開始セクションと同様に行います。ただし、作業の中には既に完了しているものがあります。通常、標準は追加済みで、いくつかのピーク定義も追加されている場合があります。
ユーザーは同様の手順で、メソッドの定義、評価、完了を行います。
- 7 Evaluate Model (モデルの評価)** : 評価するメソッドを選択します。
[Independent Set Evaluation] 画面が表示され、ユーザーは、既知の標準をロードし、濃度を予測して、先に進むことができます。手順は、前述の新規モデルのセットアップの、モデルの評価セクションで実行したものと同じです。

モデルのインポート (Import Models)

MicroLab Quant を使用してモデルファイルをインポートするには :

注記

この機能は 21 CFR Part 11 環境でのみ使用できます。

MicroLab Quant は、MicroLab PC を使用したメソッド内のモデルを活用するために、データベースにモデルをインポートする機能を持つ唯一のアプリケーションです。21 CFR Part 11 非対応の環境でのモデルの転送については、38 ページを参照してください。

- 1 MicroLab Quant にログオンします。
- 2 [Import Models] を選択します。
- 3 モデルが保存されている場所に移動して目的のモデルを選択します。必要に応じて、モデルタイプにフィルタをかけます。次のファイルタイプが使用できます。
 - Agilent モデル (*.mqm)
 - Thermo モデル (*.txt)
 - Eigen Vector モデル (*.xml)
 - Agilent MicroLab Expert Quant モデル (*.a2q)

注記

Agilent MicroLab Expert Quant モデル (*.a2q) ファイルの使用には、「測定バンドル」(G8188AA) などのワークフロー製品バンドルの一部として提供される、別のライセンス登録コードが必要です。登録がない場合は、エラーが表示されます。

- 4 **【開く】** をクリックします。[Select database/folder] ウィンドウが表示されます。
- 5 モデルファイルをインポートするデータベースフォルダを選択して **【OK】** をクリックします。
- 6 モデルファイルがデータベースに適切にインポートされたら **【OK】** をクリックします。
- 7 38 ページに記載されている手順に従って、MicroLab PC を使用してメソッド内にモデルを取り込みます。

21 CFR Part 11 の機能

これらの機能の詳細については、55 ページの MicroLab 21 CFR Part 11 のセクションを参照してください。

21 CFR Part 11

モデルを作成・編集したときに実行された操作リストを表示します。

電子署名

[E-Sign] をクリックして、モデルに電子署名を適用してコメントを追加します。

(空白ページ)

5 MicroLab OQ

運転時適格性評価 (OQ)	51
OQ の実行	52
OQ レポート	53

MicroLab OQ ソフトウェアは、目的どおりにシステムが機能することを確認するための診断および性能評価テストを備えています。各測定器の診断および性能評価テストに関する詳細については、該当する測定器の操作マニュアルを参照してください。

運転時適格性評価 (OQ)

システムの診断ベリフィケーション

[Diagnostic] (診断) 画面には、以下の測定器の情報が表示されます。

- Instrument Status (測定器のステータス) : エネルギー、バッテリー、ソース、レーザー、現在のゲイン。
- Temperatures (温度) : 検出器、CPU、IR ボード、電源、ブロック
- Version Information (バージョン情報)

注記

診断は、MicroLab PC および MicroLab Mobile の **【詳細設定】** 画面からも確認できます。

結果は色分けされて表示されます。

- 緑：結果が最適な値の範囲内です。測定器は適切に機能しています。
- 黄色：結果がリミットの境界にあります。測定器は機能していますが、性能レベルが低い状態です。
- 赤：結果が許容範囲外です。測定器は正常に動作していません。

性能評価

以下のテストが可能です。

- Signal to Noise (Performance) (パフォーマンス (S/N) テスト)
- Stability (安定性テスト)
- Laser Frequency Calibration Check (Frequency accuracy and repeatability)
(レーザー周波数キャリブレーションチェック、周波数の真度と繰り返し再現性)
- Spectral Resolution Check (スペクトル分解能チェック)

注記

これらは、MicroLab PC および MicroLab Mobile の **【詳細設定】** 画面の **【システムチェック】** テストと同じものです。

OQ の実行

運転時適格性評価を開始するには：

- 1 **【次へ】** をクリックしてテストを始めます。
- 2 正しい測定器が選択されていることを確認します。
- 3 OQ テストで使用するアタッチメントをひとつ選択します。選択したアタッチメントを、**プライマリ (Primary)** アクセサリとして設定します。
以下に、プライマリに設定するアタッチメントの推奨順序を示します。
テストを実行するには、以下のいずれかのアタッチメントが必要です。
 - 透過アタッチメント
 - DialPath アタッチメント
 - Tumbler アタッチメント
 - 1回反射型ダイヤモンド ATR アタッチメント
 - 1回反射型ゲルマニウム ATR アタッチメント
 - 1回反射型 ZnSe ATR アタッチメント
- 4 **【Make Primary】** (プライマリにする) をクリックしてプライリアクセサリを指定します。これにより、選択したアタッチメントを用いて測定器のテストが実行できるようになります。プライリアクセサリは、すべての性能評価テストを実行できるアクセサリにする必要があります。これは、測定器が正しく機能していることを確認するためです。
- 5 **【OK】** をクリックして設定を適用します。

MicroLab OQ

- 6 [診断] ページが表示されます。診断結果が1つでも不合格になると、性能テストを続行させることができません。
 - 装置ステータスの下の [エネルギー] フィールドに「不合格」と表示された場合は、信号が最適な範囲（緑色）に入るように [ゲイン調整] ボタンをクリックしてゲイン値を調節してください。信号が最適な範囲に入っているときはステータスインジケータも緑色になります。
 - [装置の初期ゲインに設定] をクリックして測定器のデフォルト値としてゲイン値を保存します。
 - [戻る] をクリックして [診断] ページに戻ります。
- 7 [次へ] をクリックします。
- 8 性能テストを選択して実行します。 [次へ] をクリックします。
- 9 画面の指示に従います。準備ができれば [次へ] をクリックします。
- 10 追加のアタッチメントに対して上記のステップを繰り返し、OQ を完了させます。

OQ レポート

結果の概要

運転時適格性評価が完了すると、 [Results Summary] 画面が表示され、各テストの結果が表示されます。

OQ レポートも PDF 形式で生成され、次の内容が含まれます。

System Information : ワークステーション ID やソフトウェアバージョンなどのシステム情報

Reporting Information : ユーザー情報やレポートファイル名などのレポート情報

Accessories : 測定器に取り付けられたアクセサリ情報など

MicroLab OQ の結果は、次のファイルパスにあります：
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\IQOQ

(空白ページ)

6 21 CFR Part 11 対応の MicroLab

SCM	55
SDA	56
MicroLab の 21 CFR Part 11 ソフトウェアコンポーネント	57

21 CFR Part 11 のコンポーネントは 2 つのプログラムで構成されています。

- Spectroscopy Configuration Manager (SCM)
- Spectroscopy Database Administration (SDA)

測定の実行後は、結果を削除することはできません。

CFR のインストール後は、CFR 機能をオフにすることはできません。MicroLab ソフトウェアと SCM をアンインストールしてから MicroLab ソフトウェアのみを再インストールしても CFR の設定は維持されます。これにより、CFR 環境の整合性が保たれます。

インストール手順については、ソフトウェアに付属している「21 CFR Part 11 環境用の MicroLab ソフトウェアのインストール手順」を参照してください。

注記

オプションの MicroLab Expert ソフトウェアは、21CFR Part 11 環境では使用できません。詳細については、MicroLab Expert ソフトウェアのインストール手順および MicroLab Pharma のインストール手順、Agilent MicroLab Expert 1.1.0.1 ソフトウェアリリース ノートを参照してください。

SCM

Spectroscopy Configuration Manager (SCM) は、システム管理担当者と Agilent 分光光度計 ソフトウェア・アプリケーションの測定サーバーを結ぶソフトウェア・インタフェースです。SCM は、システムのセキュリティ、ユーザー管理、データパスに関わる、データの作成・設定・保守の手段を提供します。

21 CFR Part 11 の規制に準拠したコンプライアンスに必要なセキュリティを実現するために、Agilent はセキュリティおよびアクセス許可のコントロールに SCM を使用しています。これらのセキュリティ機能により、以下を実現します。

- ユーザー ID とパスワードの使用によるアクセスの制御と権限のチェック。
- データベースの使用による電子記録セキュリティ。
- 日付と時刻のタイムスタンプ付きの監査証跡。

21 CFR Part 11 対応の MicroLab

ユーザー ID とパスワードを使用して、システムにログオンできるメンバーと、Agilent アプリケーションソフトウェア内の特定の機能を実行できるメンバーをすべて管理できます。さらに、電子記録への電子署名を使用できる仕組みもあります。SCM と連携したデータベースを使用すれば、権限のないユーザーによるファイルの変更や削除を防ぐことができます。SCM のイベントログには、アプリケーションソフトウェアに常駐する監査証跡を強化します。SCM 管理者は、必要なユーザーを設定する必要があります。これを実行して 21 CFR Part 11 に準拠したコンプライアンスが遵守されていることを確認する場合、多くのシンプルな要件に従うことが重要です。

SCM の設定に関する詳細な情報は、SCM のヘルプを参照してください。SCM ヘルプにアクセスするには、SCM アプリケーションを開き、キーボードで F1 を押すか、C:\Program Files (x86)\Varian\21 CFR 11\Configuration manager\Server\Configuration Manager Database Help に移動してください。

SDA

Spectroscopy Database Administrator (SDA) は、Agilent のアプリケーションソフトウェアがデータを保存するために使用するデータベースのセットアップや保守を行う、システム管理者用に設計されています。

SDA と、Agilent Spectroscopy Configuration Manager (SCM)、アプリケーションソフトウェア、独自の Standard Operating Practices (SOP) を組み合わせて使用して、Agilent 測定器をコントロールするための 21 CFR Part 11 機能環境を構成できます。

SDA は、Agilent の測定器によって測定されたデータをローカル (Agilent アプリケーションソフトウェアが動作している PC) に保存したり、クライアント/サーバー環境でリモートに保存したりできます。

設定できるユーザーは、システム管理者、または SDA を実行するための管理者権限を持つユーザーのみです。

SDA の設定に関する詳細な情報は、SDA ヘルプを参照してください。SDA ヘルプにアクセスするには、SDA アプリケーションを開き、キーボードで F1 を押すか、[スタート] > [すべてのプログラム] > [Agilent] > [Database Utilities] > [SDA Help] をクリックしてください。

MicroLab の 21 CFR Part 11 ソフトウェア コンポーネント

21 CFR Part 11 ソフトウェアをインストールすると、追加ボタンが表示されま
す。

ロック (Lock)

このダイアログにより、ユーザーは、21 CFR Part 11 ソフトウェアパッケージを
使用するとき MicroLab ソフトウェアをロックできます。これは、ホーム画面
からアクセスします。

ロックされると、[Unlock MicroLab PC] ダイアログボックスが表示され、認証
ユーザーがログオンしてソフトウェアのロックを解除するまで、何の操作もでき
ません。MicroLab PC/Lite/Quant/OQ を最初に「ロック」したユーザー以外の
ユーザーは、[Home] ページからのみソフトウェアのロックを解除することが
できます。このソフトウェアに最初にログオンしたユーザーだけが、すべての
ページからソフトウェアを解除できます。これにより、権限が正しく適用され、
MicroLab および Configuration Manager の監査証跡情報が正しく取得され、結果
ファイルが適切に保存されます。

User Identification – ユーザー ID を入力します。

Group – ドロップダウンリストからグループを選択します。

Project – ドロップダウンリストからプロジェクトを選択します。

Password – パスワードを入力します。

注記

MicroLab Mobile 21 CFR Part 11 を使用している場合、パスワードに使用できるの
は英数字のみです。特殊文字 (\$、@など) は使用できません。

OK – [OK] をクリックするとログオンできます。ダイアログボックスは閉じま
す。ここでソフトウェアのロックが解除されます。

キャンセル – ログオンせずにダイアログボックスを終了します。ソフトウェアは
ロックされたままになります。

電子署名 (E-Sign)

[E-Sign] をクリックすると、電子署名が適用されます。すべてのユーザーが、
メソッドまたは結果に「署名」できます。[Approval – 1] および [Approval –
2] を実行するには、ユーザーは Spectroscopy Configuration Manager で適切な権
限を付与されている必要があります。承認のために MicroLab ソフトウェアにロ
グインする必要はありませんが、[Signature] ダイアログボックスが表示された

21 CFR Part 11 対応の MicroLab

場合は、ユーザーは、[Approval - 1] または [Approval - 2] を実行するために資格情報を入力する必要があります。承認の実行前にログインしていた元のユーザーは、ログインしたままになります。MicroLab ソフトウェアにログインしているユーザーのアカウントが無効化またはロックされた場合、[e-Signature] ダイアログボックスをキャンセルする際に [Lock] ダイアログボックスが表示されます。MicroLab ソフトウェアをロック解除するには、その前に、Configuration Manager 管理者が元のユーザーのアカウントのロックを解除する必要があります。

User Identification – このフィールドには現在のユーザー名が表示されます。オペレータ/承認者は、電子署名を適用する前に、自分のユーザー ID をこのフィールドに入力する必要があります。

Group – グループは、ユーザー名が入力されると、自動的に入力されます。ユーザーが複数のグループに属している場合は、適切なグループを選択します。

Project – プロジェクトは、ユーザー名が入力されると、自動的に入力されます。ユーザーが複数のプロジェクトに属している場合は、適切なプロジェクトを選択します。

Password – オペレータ/承認者が電子署名を適用する場合は、このフィールドにパスワードを入力する必要があります。

Comment – このフィールドに、終了する操作や署名の趣旨に関する情報を入力します。[Sign]、[Approval - 1]、[Approval - 2] ボタンをクリックしたときに、必須フィールドであることを示すメッセージが表示された場合は、必ずコメントを入力する必要があります。

Approval-1 – 承認-1 レベルの電子署名を適用します。メソッドを実行したユーザーはデータを承認することはできません。それを伝えるメッセージが表示されます。

Approval-2 – 承認-2 レベルの電子署名を適用します。アプリケーションを実行してデータを作成したユーザーはデータを承認することはできません。これを伝えるメッセージが表示されます。

Approval - 2 が実行されると、メソッドまたは結果がロックされます。メソッドまたは結果は開いて表示することはできませんが、変更を加えることはできません。ロックされたメソッドを元に新しいメソッドを作成することはできます。

MicroLab のメソッドファイルおよび結果ファイルは、[Approval-2] を実行しない限りロックできません。オペレータおよび承認者-1 によって文書が署名されたら、確実にファイルにさらなる変更が加えられないようにするため、会社の SOP が必要になる場合があります。電子署名の実行中に加えられた変更はすべて、電子署名イベントを含め、監査証跡に詳細に記録されます。

21 CFR Part 11 対応の MicroLab

変更の理由 (Reason for Change)

このダイアログボックスは、メソッドの変更を完了した直後に表示されます。メソッドは、変更の理由が入力されると、ただちに保存されます。

このダイアログボックスにより、ユーザーは、メソッドに対して行われた変更の理由を入力できます。

ここに入力された情報は、MicroLab のレポート、ダイアログ、SCM の監査ログに表示されます。

ダイアログボックスの下部に、行われたすべての変更を含むメソッドのログが表示されます。

21 CFR Part 11

クリックすると、監査証跡、測定パラメータ、解析パラメータのタブにアクセスできます。

監査証跡 (Audit Trail)

メソッドと結果の監査証跡が表示されます。表示には以下のすべての操作記録が含まれます。

- メソッド/結果の保存場所
- 再解析に使用したメソッド
- メソッドパラメータの変更内容
- 変更の理由
- 分析を開始したメソッド
- 分析を停止したメソッド
- 想定外の測定器の異常、メソッドの実行停止
- 署名されたメソッドまたは結果
- 適用された残差

上記の各エントリに対して、以下の情報の組み合わせも記録されます：

- SDA サーバー/データベース/ファイル名
- ローカルの日付と時刻
- GMT 日付と時刻
- ワークステーション名
- ユーザー: グループ/プロジェクト/ユーザー ID

21 CFR Part 11 対応の MicroLab

- ユーザー名
- ユーザーの説明
- 測定器のシリアル番号
- 認証コメント
- ソフトウェアのバージョン番号
- ファームウェアのバージョン番号

7

サンプルの測定

サンプリングインターフェースのクリーニング	61
バックグラウンド測定	62
サンプル測定	62

MicroLab PC と MicroLab Mobile ソフトウェアは、サンプル測定の手順をガイドするように設計されています。サンプル測定の操作画像および操作手順が表示されます。画面の指示に従えば、一貫した測定結果が得られます。サンプル測定では常に、以下のステップが実行されます。

- サンプル・インタフェースをクリーニングします。
- バックグラウンドを測定します。
- 測定対象のサンプルを配置します。
- サンプル測定を実行します。

サンプリングインターフェースのクリーニング

サンプル測定の最初のステップは、サンプル取付け用インタフェースに前のサンプルの残留物や通常の使用／保管による残留物がないようにすることです。具体的なクリーニング手順については、システムに付属する測定器の操作マニュアルを参照してください。

注意

分光光度計を分解して、内部の表面をクリーニングしないでください。分解すると、保証の対象外となります。

バックグラウンド測定

アジレントは、各サンプルの前にバックグラウンドを測定するようにシステムを設定することをお勧めします。

メソッドが推奨どおりに設定されている場合は、分析開始前に、ソフトウェアによってバックグラウンド・スペクトルが自動的に測定されます。バックグラウンド測定（サンプルなし）では、現在のシステム状態のベースライン・プロファイルが得られるため、バックグラウンドやサンプル・スペクトルに異常がある時に要因を除外できます。

注記

バックグラウンドの測定前に、サンプル・インタフェースがクリーンであることを確認してください。サンプル・インタフェースのクリーニングには、メタノール、アセトン、イソプロピル・アルコールなどの適切な溶剤を使用してください。詳細については、測定器の操作マニュアルを参照してください。

バックグラウンド測定を実行するには：

- 1 [ホーム] 画面で、適切なメソッドがアクティブであることを確認し、[スタート] をクリックしてバックグラウンド・サンプルの分析を初期化します。
- 2 [次へ] をクリックします。サンプルインタフェース（結晶）の簡単なチェックが行われます。テストに成功すると、システムは「バックグラウンド」を測定します。バックグラウンド測定の進捗度がステータス・バーによって示されます。

注記

分析を最初からやり直したい場合は、[ホーム] をクリックするとメイン・ホーム画面に戻ります。

サンプル測定

サンプルを測定するには：

- 1 サンプル測定を開始するには、[ホーム] 画面で [スタート] ボタンをクリックします。
- 2 ソフトウェアの指示に従って、ATR/透過測定用のアタッチメントをクリーニングします。
 - Agilent 4100 ExoScan FTIR での反射率測定では、反射標準をサンプル・インタフェースに配置してください。

サンプルの測定

注記

サンプルの表面は、柔らかいティッシュとメタノール、エタノール、アセトンなどの適切な溶剤を使ってクリーニングしてください。

- 3** **[次へ]** ボタンをクリックします。[ホーム] ボタンをクリックすると、測定が停止し、[ホーム] 画面に戻ります。
メソッドでエネルギーチェックが選択されている場合、これが実行されます。保存されているリファレンスの吸光度がチェックされます。吸光度が検出されると、サンプル・インタフェースをクリーニングしてから再度スタートするように、ソフトウェアによって指示されます。

注記

エネルギーチェックに連続して失敗した場合は、保存されているバックグラウンドスキャンが破損している可能性があります。その場合には、[詳細設定] > [診断] をクリックし、[診断] ダイアログボックスの [クリーン有効性のリセット] をクリックすることにより、バックグラウンドのクリーニングをリセットすることができます。これにより、保存されているバックグラウンドがクリーニングされます。

- 4** エネルギーチェック（指定した場合）に続いて、ソフトウェアはバックグラウンド・サンプルを測定します。バックグラウンド・サンプルの測定は、メソッドの指定に従って、スキャンごとに、または指定の間隔で実行されます。サンプルをサンプル・インタフェースに置くように、ソフトウェアによって指示されます。システムの設定と一致するピクチャが表示されます。サンプルを配置したら、**[次へ]** をクリックします。
- 5** サンプル測定の光度（吸光度）を示すグラフが表示されます。この画面を使用して、サンプルがサンプリングインタフェースに正しく配置されていることを確認します。
 - Agilent 4500t FTIR を使用するオイルアプリケーションでは、値を最大化する必要があります。
 - 反射率を使用する Agilent 4100 ExoScan FTIR アプリケーションでは、値は 0.1~2 AU の範囲内でなければなりません。また、ATR 測定は、0.05~1 AU の範囲内でなければなりません。
- 6** [サンプル ID] フィールドにファイル名を入力します。このファイル名でサンプル・データが保存されます。[コメント] フィールドに、サンプルの詳細情報を入力します。
- 7** **[次へ]** ボタンをクリックして、サンプル測定を開始します。ソフトウェアは、メソッドに指定された回数だけサンプルを積算します。
- 8** サンプル測定中は、サンプリング・テクノロジーの焦点がそのサンプルになければなりません。
 - Agilent 4500t FTIR の場合は、測定中にサンプルセルを調整する必要はありません。

サンプルの測定

- Agilent 4100 ExoScan FTIR の場合は、測定中にサンプルの表面から測定器を移動する必要はありません。

測定中は、ソフトウェアによってサンプル信号がモニタされます。信号が事前に設定したしきい値を下回ると、測定が停止します。サンプルの焦点が回復すると、ソフトウェアは即座にデータの測定を開始します。

注記

進捗度バーは、データ測定の進捗状況を示します。進捗度バーが終了すると、プロンプトがデータの転送に変わります。これが始まると測定は完了しているので、測定器からサンプルを取り除くことができます。

- 9 サンプル測定が完了すると、[結果] 画面にメソッドの結果が表示されます。サンプル・スペクトルと計算されたメソッドの結果が自動的に保存されます。データはいつでも、[測定データ一覧] 画面から表示することができます。

8 結果のレビュー

MicroLab Mobile	65
MicroLab PC/MicroLab Lite	68
MicroLab のレポート作成	76

MicroLab Mobile

結果画面

定量分析メソッドの場合、[結果] 画面には計算された成分値が表示されます。成分値の順番は成分の警告リミットに対応します。警告の範囲外の成分値がまずリストされ、その後に注意リミット範囲外の値がリストされます。許容範囲内の成分は緑色で表示されます。

- 緑色の結果は、サンプルが調整可能な範囲内であることを示します。
- 黄色の結果は、サンプルが注意リミットと警告リミットの間であることを示します。
- 赤色の結果は、サンプルが警告リミットを上回っている、または下回っていることを示します。

ホーム：ソフトウェアを [ホーム] 画面に戻します。

次へ：追加サンプルの測定のために、ソフトウェアを [サンプル測定] ページに戻します。

データの処理

[メニュー] ボタンでは、データ処理を選択できます。このボタンを使って、サンプル ID やコメントを入力できます（以前に入力していない場合）。システムの自動保存機能により、コメントフィールドが保存され、サンプル ID に基づいて（入力されている場合）新規ファイルが作成されます。

注記

自動保存機能は常に、サンプル ID とタイムスタンプを組み合わせた名前で現在のファイルを保存します。このため、以前のサンプル結果が上書きされることはありません。

ホーム：ソフトウェアを [ホーム] 画面に戻します。

結果のレビュー

次へ：次のサンプルを測定するために、ソフトウェアをスタート・サンプル画面に戻します。

再解析：現在表示されているデータに対して、別のメソッドの計算を実行できます。サンプル・データを再測定できない場合に有効です。再解析するたびに、新しいデータファイルが生成されます。

注記

再解析機能は、選択したメソッドと同じスペクトル分解能で測定したデータのみ使用してください。スペクトル分解能の違いが定量結果に影響を及ぼす可能性があります。

エクスポート：測定したデータを他の解析ソフトウェアパッケージにエクスポートすることができます。エクスポートしたファイルは、サンプルと同じファイル名で保存されます。ただし、拡張子は *.csv、*.asp、または *.spc になります。Results ディレクトリに保存されます。

ピークピック：レビュー対象のスペクトルのマークするピークを定義できます。定義するには、スペクトルを右クリックして、メニューから [ピークピック] を選択します。スペクトルのピークをマークするには、クリック・アンド・ドラッグし、もう一度クリックして、しきい値ラインを描きます。これを複数回繰り返すことにより、スペクトルに複数のピークを定義できます。定義したピークは、作成したレポートに印刷され、データファイルと一緒に保存されます。終わったら、もう一度右クリックして、メニューの [ピークピック] の選択を解除します。

レポートテンプレートには、ピークピックテーブルが組み込まれます。選択したピークのピーク値は、選択された順序で表に表示されます。

スペクトルの GRAMS へのインポート

データを SPC 形式にインポートするには：

- 1 コンピュータで GRAMS/AI を開いて、[ファイル] → [インポート/エクスポート] をクリックします。ASCII ファイル・コンバータを選択します。[インポート] ボタンをクリックします。
- 2 ドライブおよびディレクトリを検索して、インポートするファイルを見つけます。インポート時には、ほとんどのファイル・コンバータが特定の入力ファイル名の拡張子を期待します。例えば、ASCII コンバータは、*.ASP というファイル拡張子を持つファイルを探します。（必要に応じて、[ファイルの種類] を [すべてのファイル (*.*)] に変更します）。

各ファイル名をクリックしながらコントロールキーを押すことにより、複数のファイルを選択することもできます。

[開く] をクリックします。[ファイルのインポート] ダイアログボックスに、インポートするファイルの名前が表示されます。（複数のファイルをインポートする場合は、最初のファイルの名前が表示されます。）

結果のレビュー

- 必要に応じて、ファイルの名前を変更します。新たに作成したファイルを別のディレクトリに書き込むには、ファイル名の前にフル・ディレクトリ・パス名を付けます。そうしないと、ASP ファイルと同じフォルダに保存されます（出力ディレクトリへの読取り／書込みアクセス権が必要です）。
- 〔出力ファイルの種類〕 から測定ディレクトリの主要な拡張子を選択します。デフォルトの **Spectra (*.spc)** に設定したままにします。
- 〔出力名変更〕 オプションを選択します。**Manual** のままにします。
- 〔自動で開く〕 をクリックして、GRAMS/AI で変換したファイルを自動的に開きます（〔自動で開く〕 では、複数のファイルを開くことはできません。〔自動で開く〕 は、最後に変換されたファイルに適用されます）。
- 〔ファイルのインポート〕 ダイアログボックスから、〔OK〕 をクリックします。

ファイルが変換されると、GRAMS 変換アプリケーションは、インポートするファイルを読み込み、新しいファイルをディスクに書き込みます。変換プロセスが完了したら、〔ファイル〕 → 〔トレースを開く〕 コマンドを使って、ファイルを GRAMS/AI に読み込みます。

変換が進むにつれて、何らかのメッセージまたはエラーが表示されます。多くのファイルを変換している場合は、GRAMS/AI または他の Windows プログラムに戻ることができます。変換は続行されます。変換プログラムは、GRAMSC32.EXE という名前の個別のアプリケーションで、Windows の GRAMS/AI とは無関係に実行できます。〔ファイル〕 → 〔インポート／エクスポート〕 コマンドは、特殊なコマンドラインスイッチによってこのアプリケーションを起動します。このため、このアプリケーションは変換後に自動的に終了します。

レポート：〔データ処理〕 ボタンをクリックすれば、レポートを保存できます。レポートは *.PDF ファイルで、定量分析メソッドの成分結果またはスペクトルサーチメソッドのライブラリ検索結果が詳細に示されます。レポートは Results ディレクトリに保存されます。MicroLab Lite を使用すれば、レポートを同期させることができます。

測定データ一覧

MicroLab Mobile の〔測定データ一覧〕を使用すれば、測定の実行後にデータをレビューできます。測定データ一覧は、〔ホーム〕画面の〔メニュー〕アイコン下にあります。以前に測定したサンプルのリストが結果画面に表示されます。リスト内を移動するには、リストをクリックし、ドラッグしてスクロールします。

ホーム：ソフトウェアを〔ホーム〕画面に戻します。

表示：データファイルを開いて表示します。データは、65 ページの「結果のレビュー」のセクションで説明した〔結果〕画面と同じように表示されます。

結果のレビュー

レポート：メニューの [レポート] ボタンを選択すると、31 ページの「レポート ページ」のセクションに明記されている PDF レポートが作成されます。

MicroLab PC/MicroLab Lite

MicroLab PC/MicroLab Lite では、MicroLab Mobile より詳細なデータ解析が可能です。画面サイズが原因で、MicroLab Mobile ソフトウェアでは現在、スペクトルは表示されません。MicroLab PC/MicroLab Lite を使用すれば、スペクトルを表示できるだけでなく、成分計算に使用されたスペクトル範囲をレビューできます。コンピュータに転送したデータは、MicroLab PC または MicroLab Lite の測定結果機能を使用してレビューできます（40 ページの「編集したメソッドの MicroLab Mobile への転送」を参照。結果の転送はメソッドの転送と同様です）。MicroLab PC の [ホーム] 画面から **[測定データ一覧]** ボタンをクリックすると、すべてのサンプルのファイル名がリストされた画面が表示されます。

ホーム：ソフトウェアを [ホーム] 画面に戻します。

インポート： [結果] 画面に追加できます。

レポート： レポートテンプレートがメソッドの [レポート] ページに割り当てられている場合、サンプルのレポートを作成します。メソッドにレポートテンプレートを割り当て方法については、76 ページを参照してください。

表示：ソフトウェアを [サンプル結果] 画面に戻します。サンプル結果は、MicroLab ソフトウェアを使っていつでもレビューできます。

オーバーレイ： [オーバーレイ] ボタンは、複数のスペクトルファイルを選択した場合に表示されます。最大 5 個のスペクトルを重ね描き／スタック形式で表示して、比較することができます。ファイルを一緒に表示させるためには、ファイルの横座標のタイプが同じでなければなりません。

エクスポート：測定したデータを他の解析ソフトウェアパッケージにエクスポートすることができます。エクスポートしたファイルは、サンプルと同じファイル名で保存されます。ただし、拡張子は *.asp または *.spc になります。Results ディレクトリに保存されます。

診断情報：MicroLab に接続された分光光度計の診断情報を表示します。

注記

「測定結果」セクションのソフトウェアは、「結果」セクションと同じように動作します。画面は同じです。これらの機能を使用すれば、オペレータはデータをレビューできます。

結果のレビュー

結果画面

実行が完了すると表示される [結果] 画面は、選択したメソッドタイプによって異なります。

定量分析メソッドタイプ

Test2			
Name	Value	Low Threshold	High Threshold
Test	Outside Data Range	0	
Test2		0.15	0.32

図 1. 定量分析メソッドの結果画面

定量分析メソッドの検索結果は、見やすくするために色分けされます。指定範囲外の結果は赤で強調表示され、リストの一番上に移動されます。

- 緑色の結果は、サンプルが許容範囲内であることを示します。
- 黄色の結果は、サンプルが許容範囲のリミットに近いことを示します。
- 赤色の結果は、サンプルが許容範囲外であることを示します。

結果テーブルには、サンプルの名前、値、低しきい値、および高しきい値が表示されます。

スペクトル測定メソッドタイプ

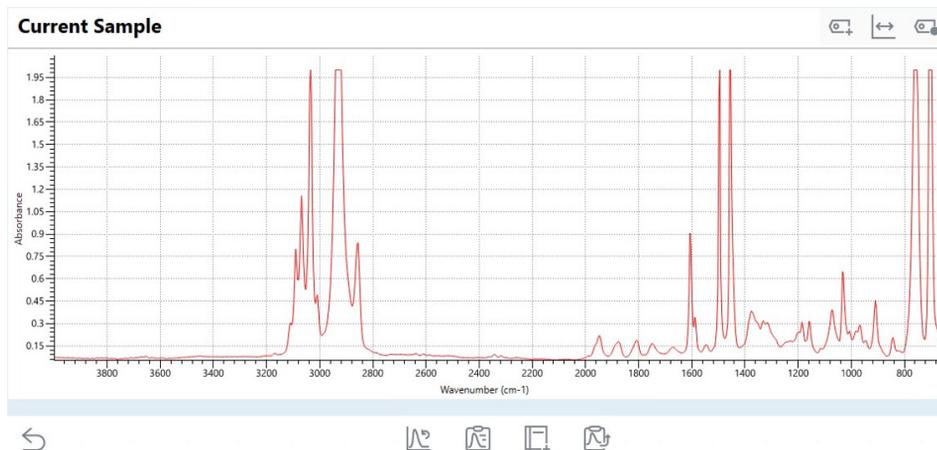


図 2. スペクトル測定メソッドタイプの [結果] 画面

結果のレビュー

デフォルトの [スペクトル測定] メソッドタイプウィンドウには、MicroLab 結果インターフェースが表示されます (図 2)。結果ウィンドウの上のツールバーには、データ表示の操作に用いるさまざまなアイコンがあります。

- ホーム画面に戻るには、 アイコンを選択します。
- 結果スペクトルにデータラベルを追加/削除するには、アイコン  を選択します。

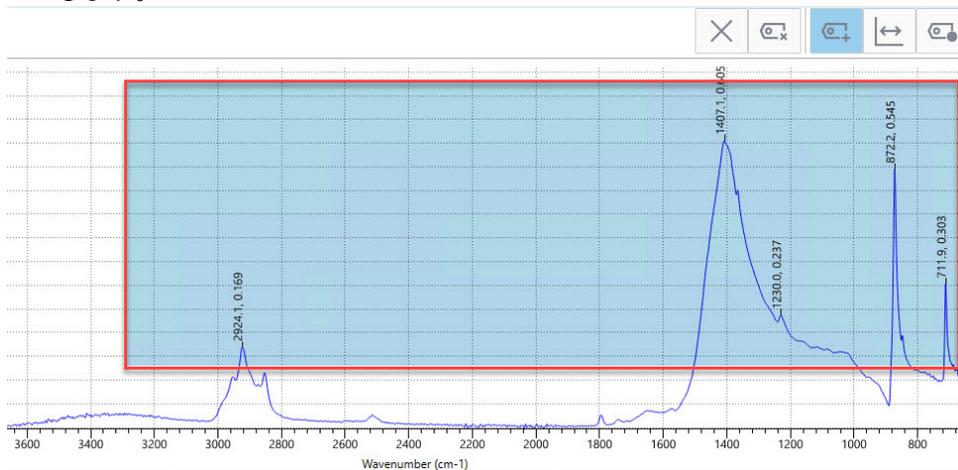


図 3. ピークピックと データラベル機能

- **ピークピック**：便利な機能として、ラベルは複数のピークに適用できます。**データラベル**アイコン  を選択し、範囲をドラッグして関連するピークを選択することにより、スペクトルの複数のピークにデータラベルを同時に追加できます。ラベルアイコンは、キーボードショートカットの **Ctrl+F** を使用してアクティブにすることもできます。
- スペクトル表示をデフォルト表示からコンパクト表示に切り替えるには、アイコン  を選択します。この機能は、表示されたスペクトルの特定の範囲をより明確にする必要がある場合に役立ちます。
コンパクト表示では：
 - **[位置]** の値は、コンパクト表示と通常表示の波数の境界位置を定義します (X 軸)。
 - **[係数]** の値は、選択した波数位置 (X 軸) の左側の範囲に適用される縮小係数を定義します。
- 適用したデータラベルの表示と形式を編集するには、アイコン  を選択します。

結果のレビュー

データ表示の下のツールバーには、データ解析とソフトウェアのナビゲートに利用できるさまざまなアイコンが配置されています。

- データの再解析には、アイコン  を選択します（測定結果に対してのみ使用可能）。
- レポートを作成するには、アイコン  を選択します。
- 現在の結果をライブラリに追加するには、アイコン  を選択します。
- 現在のレポートに電子署名を適用するには、アイコン  を選択します（21 CFR Part 11 モードのみ）。
- 結果ファイルをエクスポートするには、アイコン  を選択します。
- 次のサンプルのワークフローを開始するには、アイコン  を選択します（測定ワークフローの一部としてのみ使用可能）。
- サンプル ID と測定前に入力されたコメントを表示するには、アイコン  を選択します。

スペクトル測定「クラシック表示」グラフィックウィンドウ

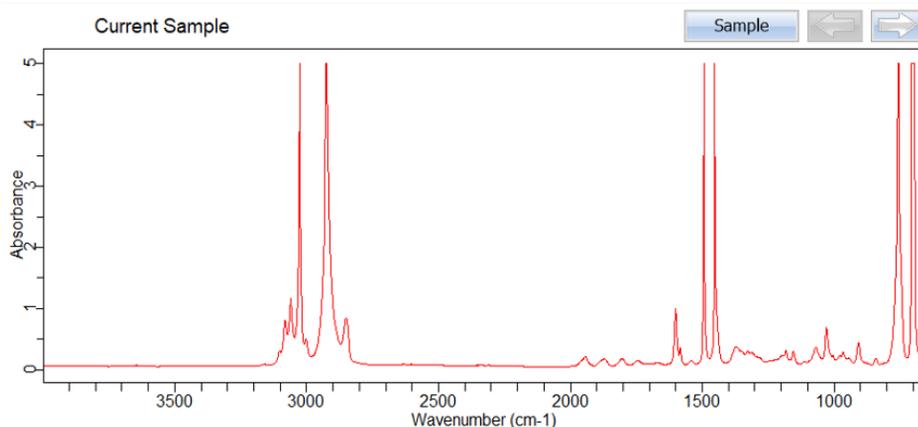


図 4. スペクトル測定メソッドタイプのクラシック表示の [結果] 画面

クラシック表示のデータ測定グラフィックウィンドウでは、「スペクトル測定」メソッドタイプが選択されている場合に結果を表示するもう一つの方法です。この機能は、メソッド編集ウィンドウの [クラシック表示を使用する] チェックボックスから有効/無効にできます。

結果のレビュー

スペクトルサーチメソッドタイプ

Results:					
Warning	Rank	Quality	Library	CAS#	Name
	1	0.18933	TIC TAC (523)		Table Salt
	2	0.26196	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (280)		Natural-Rubber - Blair Run#5
	3	0.30146	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (139)		Gasket-SBR 10053333 Run#4 edge
	4	0.36079	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (278)		Natural-Rubber - Blair Run#3
	5	0.38287	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (279)		Natural-Rubber - Blair Run#4
	6	0.38513	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (138)		Gasket-SBR 10053333 Run#3 edge
	7	0.42246	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (258)		Natural-PureGum-Rubber - US Flex Run#2
	8	0.44293	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (347)		Neoprene U S Flexible Run#3

Rank 10

図 5. スペクトルサーチメソッドの [結果] 画面

スペクトルサーチの結果は、わかりやすくするために色分けすることができます。

- 緑の結果は、ライブラリのヒットが品質の注意リミット内であることを示します。
- オレンジ色の結果は、ライブラリのヒットが品質の注意リミットと警告リミットの間にあることを示します。
- 赤の結果は、ライブラリのヒットが品質の警告リミットを上回ることを示します。

色分けのしきい値設定の詳細については、21 ページの「メソッド」セクションを参照してください。

スペクトル範囲の表示

MicroLab ソフトウェア独自の機能を使用することにより、特定の範囲のサンプルを比較できます。個々のパラメータをダブルクリックするだけです。サンプル・スペクトルと一緒に、リファレンス・スペクトルが表示されます。カテゴリ間を移動するには、右上コーナにある左右の矢印を使用します。サンプル・スペクトルおよびリファレンス・スペクトルを重ね描き表示して比較するか、スタック表示して比較するか決定することもできます。

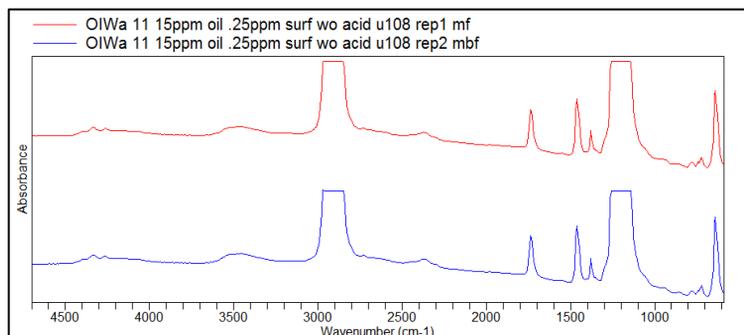


図 6. スタック表示の例

結果のレビュー

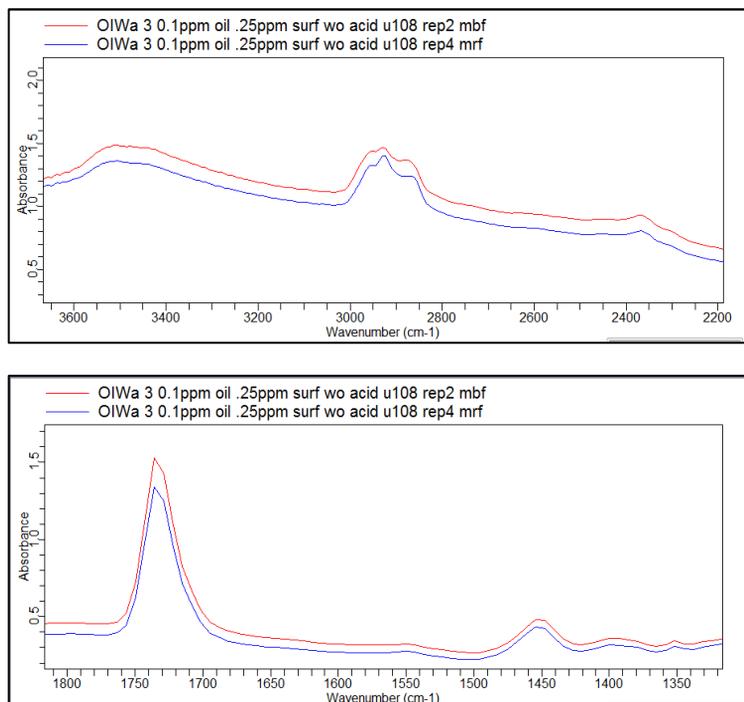


図 7. 重ね描きの例

注記

カテゴリを変更するには、右クリックして、いずれかのオプションにスクロールダウンします。画面には、指示どおりに表示されます。

詳細

[詳細] をクリックすると、サンプルのスペクトルを表示できます。MicroLab ソフトウェアでは、サンプル・スペクトルとリファレンス・スペクトルを比較表示できます。

スペクトルサーチを選択すると、スペクトルの下の表に、品質でランク付けされたライブラリヒットがリスト表示されます。

さらに、次のタブが表示されます：

- **テキスト検索**：名前または CAS 番号により、特定のライブラリエントリを検索できるようにします。これを選ぶと、選択したライブラリエントリのスペクトルが **[詳細]** タブのサンプル・スペクトルと比較されます。このエントリはさらに、ライブラリ品質のヒットリストのトップにランクされて表示されます。
- **残差**：現在解析中のサンプルを、選択したライブラリヒットに対する残差として表示します。

結果のレビュー

注記

スペクトルの任意の部分を拡大できます。マウスまたはタッチパッドを使って、グラフをクリックして、目的の部分を強調表示します。画面は自動的に拡大部分に切り替わります。

スペクトル全体に戻るには、グラフを右クリックして [拡大を元に戻す] を選択します。

パラメータ

[パラメータ] をクリックして次のタブを表示します。

- **パラメータの収集** メソッドパラメータのサマリを表示します。
- **分析パラメータ**：測定したデータの分析サマリを表示します。

データ処理

[データ処理] をクリックして、以下の機能にアクセスします。

レポート： レポートテンプレートがメソッドの [レポート] ページに割り当てられている場合、サンプルのレポートを作成します。レポートには、プリセットパラメータの概要に加えて、結果が適切な単位で、リファレンス・オイルまたは ASTM (American Society for Testing and Materials、米国材料試験協会) メソッドと比較して示されます。メソッドにレポートテンプレートを割り当てる方法については、76 ページを参照してください。

ライブラリに追加： サンプル・スペクトルを適切なライブラリに追加することができます。 [参照] をクリックしてライブラリにアクセスします。使用可能なライブラリのリストが表示されます。

[ライブラリに追加] を選択すると、プロセスが完了します。新しいスペクトルをユーザーライブラリに追加することにより、その後の分析でサンプルが類似しているかどうか判断できます。

エクスポート： 測定したデータを他の解析ソフトウェアパッケージにエクスポートすることができます。

再解析： 現在表示されているデータに対して、別のメソッドの計算を実行できます。サンプル・データを再測定できない場合に有効です。

注記

再解析機能は、選択したメソッドと同じスペクトル分解能で測定したデータのみ使用してください。スペクトル分解能の違いが定量結果に影響を及ぼす可能性があります。

電子署名

このボタンは 21 CFR Part 11 環境でのみ使用できます。 [電子署名] をクリックすると、電子署名が適用されます。詳細については 57 ページを参照してください。

結果のレビュー

21 CFR Part 11

メソッドや結果の実行/編集集中に行われた操作のリストが表示されます。詳細については 59 ページを参照してください。

スペクトルの GRAMS へのインポート

データを SPC 形式にインポートするには：

- 1 コンピュータで GRAMS/AI を開いて、[ファイル] → [インポート/エクスポート] をクリックします。ASCII ファイル・コンバータを選択します。[インポート] ボタンをクリックします。
- 2 ドライブおよびディレクトリを検索して、インポートするファイルを見つけます。インポート時には、ほとんどのファイル・コンバータが特定の入力ファイル名の拡張子を期待します。例えば、ASCII コンバータは、*.ASP という拡張子を持つファイルを探します（必要に応じて、[ファイルの種類] を [すべてのファイル (*.*)] に変更します）。

各ファイル名をクリックしながらコントロールキーを押すことにより、複数のファイルを選択することもできます。

[開く] をクリックします。[ファイルのインポート] ダイアログボックスに、インポートするファイルの名前が表示されます（複数のファイルをインポートする場合は、最初のファイルの名前が表示されます）。

- 3 必要に応じて、ファイルの名前を変更します。新たに作成したファイルを別のディレクトリに書き込むには、ファイル名の前にフル・ディレクトリ・パス名を付けます。そうしないと、ASP ファイルと同じフォルダに保存されます（出力ディレクトリへの読取り/書込みアクセス権が必要です）。
- 4 [出力ファイルの種類] から測定ディレクトリの主要な拡張子を選択します。デフォルトの **Spectra (*.spc)** に設定したままにします。
- 5 [出力名変更] オプションを選択します。Manual のままにします。
- 6 [自動で開く] をクリックして、GRAMS/AI で変換したファイルを自動的に開きます（[自動で開く] では、複数のファイルを開くことはできません。[自動で開く] は、最後に変換されたファイルに適用されます）。
- 7 [ファイルのインポート] ダイアログボックスから、[OK] をクリックします。

ファイルが変換されると、GRAMS 変換アプリケーションは、インポートするファイルを読み込み、新しいファイルをディスクに書き込みます。変換プロセスが完了したら、[ファイル] → [トレースを開く] コマンドを使って、ファイルを GRAMS/AI に読み込みます。

変換が進むにつれて、何らかのメッセージまたはエラーが表示されます。多くのファイルを変換している場合は、GRAMS/AI または他の Windows プログラムに戻ることができます。変換は続行されます。変換プログラムは、実際には

結果のレビュー

GRAMSC32.EXE という名前の個別のアプリケーションで、Windows の GRAMS/AI から独立して実行できます。[ファイル] → [インポート/エクスポート] コマンドは、特殊なコマンドラインスイッチによってこのアプリケーションを起動します。このため、このアプリケーションは変換後に自動的に終了します。

完了： サンプリング領域およびサンプリングデバイスをクリーニングするように求める画面に戻ります。これにより、分光光度計は次のサンプルの準備をします。[完了] を選択すれば、[ホーム] 画面に戻らなくても、複数のサンプルを実行できます。

注記

このオプションでは、ユニット情報を変更できません。さまざまなマシンからサンプルを実行している場合は、[ホーム] 画面に戻らなければなりません。

注記

分析を終了するには、[ホーム] ボタンをクリックします。

MicroLab のレポート作成

メソッドにレポートテンプレートを割り当て

MicroLab を使用して、ユーザーはリストからレポートテンプレートを選択し、それを特定のメソッドに割り当てることができます。各レポートテンプレートは、メソッドタイプまたはソフトウェアの特定の機能に対して作成するときに指定します。

メソッドにレポートテンプレートを割り当てるには：

- 1 [メソッド] を [ホーム] 画面で選択してから、レポートテンプレートが必要なメソッドを選択します。[編集] を選択します。
- 2 [メソッド] タブで、[レポート] を選択します。
- 3 [利用可能なレポートテンプレート] で、メソッドに関連付ける 1 つ以上のテンプレートを選択します。[追加] ボタンをクリックします。
- 4 レポートの自動作成が必要な場合は、[選択したすべてのレポートの自動作成] チェックボックスをオンにします。これにより、データ分析の終了時に、すべての関連レポートが自動的に作成されます。
- 5 不要なレポートを削除するには、不要なレポートを選択して [削除] ボタンをクリックします。
- 6 すべての変更が完了したら、[保存] ボタンをクリックしてメソッドを保存します。または、[名前を付けて保存] をクリックしてメソッドを別のメソッド名で保存します。

新しいレポートテンプレートの作成

MicroLab PC をインストールすると、Microsoft Office の Word プラットフォーム用のアドインもインストールされます。アドインにより、ユーザーは、MicroLab ソフトウェア・プラットフォームで使用するレポートテンプレートをカスタマイズ・作成できます。

注記

この機能は、Microsoft Word 2010 以降の 32 ビットインストールでのみサポートされています。

この機能を使用するには、このマニュアルに記載されていない Microsoft Word の知識が必要です。

新しいレポートテンプレートの作成：

- 1 Microsoft Word を開いて新規ドキュメントを作成します。
- 2 このドキュメントを作成したら、[表示] メニュー/タブに移動します。
- 3 [表示] メニューに新しい機能 (MicroLab レポート) が追加されています。これには 2 つのボタンがあります：[レポートデザイナー] と [マージの実行] です。
- 4 ドキュメントの作成を開始するには、[レポートデザイナー] 機能を選択します。画面の右側にメニューとして、MicroLab に関連するスキーマが表示されます。
- 5 必要なレポートタイプを決定し、[レポートタイプ] から選択します。レポートタイプには以下の種類があります。
 - a 成分レポート：これは、メソッドエディタでメソッドが定量分析メソッドに指定されている場合にのみ表示されます。
 - b スペクトルサーチ：このレポートテンプレートは、メソッドエディタでメソッドが「スペクトルサーチ」に指定されている場合にのみ表示されます。
 - c スペクトル測定：このレポートテンプレートは、メソッドエディタでメソッドが「スペクトル測定」に指定されている場合にのみ表示されます。
 - d メソッドレポート：メソッドパラメータを印刷するためのシステムレベルのレポートです。
 - e ログレポート：システムログファイルを印刷するためのシステムレベルのレポートです。
- 6 レポートテンプレートの名前は、MicroLab レポートパラメータで指定します。
- 7 レポート・フィールドには、MicroLab ソフトウェアと関連するパラメータフィールドがあります。フィールドは、結果からメソッドパラメータまで、ユーザー用のさまざまなカテゴリの中に配置できます。ユーザーが多様な力

結果のレビュー

カテゴリに慣れるには時間がかかります。メソッドタイプごとに、独自のメソッドカテゴリと結果カテゴリがあることに注意してください。例えば、スペクトルサーチメソッドには関連する2つのカテゴリとして、ヒットリストとメソッドライブラリがあります。このメソッドタイプに特有な情報と結果ファイルをここで確認できます。一方、より一般的な情報は、結果カテゴリまたはメソッドカテゴリで簡単に確認できます。

- 8 フィールドをクリックしてレポートテンプレートのページにドラッグするだけで、レポートにフィールドを追加できます。
 - a 追加されたフィールドは指定された情報の印刷だけを行います。これは Word なので、ユーザーはフィールドを識別するとき、またはラベルを付けるときは、どこにでもテキストを追加できます。
 - b レポートにエラーが生じる可能性があるため、定義済みの表以外の表を使用することはお勧めしません。
- 9 成分レポート用の定義済みの表とサーチ・ヒットリストは、ユーザーがクリックして簡単にレポートテンプレートにドラッグできるように設定されています。
- 10 いつでも、MicroLab レポートの下部にある [レポートのプレビュー] ボタンを選択して、レポートがどのように表示されるのかをプレビューで確認できます。
 - a マージの実行機能でもプレビューが可能です。
 - b 最も良い方法は、レポートを保存し、そのレポートをメソッドに割り当て、そのメソッドを使用して実測データを解析して作成されたレポートにすべての必要な値が表示されているかどうかを確認することです。
- 11 適切なレポートが作成できたら、ファイルを MicroLab のレポートテンプレートフォルダに保存します。このフォルダは、通常、`C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\rptTemplates` にあります。
 - a ファイルは docx ファイル形式で保存されます。
- 12 付属の複数のレポートテンプレートがソフトウェアと一緒にインストールされています。それらを編集できます。ただし、元のテンプレートがそのまま残るように、編集済みのレポートテンプレートは、Word の [名前を付けて保存] 機能を使用して別のファイル名で保存することを強く推奨します。

9

アップデートおよびトラブルシューティング

ファームウェアのアップデート	79
トラブルシューティング	79

ファームウェアのアップデート

アジレントは、システムの機能を修正/拡張するために、ファームウェア（FTIR 分光光度計に含まれるソフトウェア）のアップデートを不定期にリリースします。ファームウェアのアップデートは、Microsoft Windows の実行可能ファイルとして提供されます。これらのファイルは、ユーザーに直接提供される場合も、Agilent MicroLab PC アプリケーションのアップデートの一部として提供される場合もあります。

Agilent 4300 ハンドヘルド FTIR ファームウェアの場合、アップデートは MicroLab モバイルソフトウェア内の個別の実行可能ファイルとして提供/インストールされます。詳細情報については、システムに付属する各測定器の操作マニュアルを参照してください。または、アジレントにお問い合わせください。

トラブルシューティング

初期化の失敗

次のエラーメッセージが表示された場合：

測定器の初期化に失敗

測定器が返すエラー コード：-2

アプリケーションは終了します。測定器の電源を入れ直して、アプリケーションをもう一度起動してください。

ソフトウェアを起動したら、分光光度計の電源がオンになっていること、および USB ケーブルまたは Bluetooth（該当する場合）を介してコントロール用の PC に接続されていることを確認します。測定器の電源がオンになっていること（緑色の LED が点灯）を確認します。MicroLab PC を介して 4300 FTIR を制御する場合は、測定器が「パススルー」モードになっていることを確認してください。4300 FTIR を同期する場合は、測定器が USB 経由で PC に接続され、「パススルー」モードであり、MicroLab Lite ソフトウェアが使用されていることを確認してください。

アップデートおよびトラブルシューティング

レポートテンプレートの作成の失敗

レポートテンプレートの作成またはカスタマイズの詳細な要件および手順については、77 ページを参照してください。

ゲインの変更が保存されない

更新されたゲイン値が保存されず、メソッドのアクティブ化またはデータ測定の開始時に測定器のステータスが緑色から黄色に変わる場合は、以下を確認してください。

- MicroLab PC/MicroLab Mobile ソフトウェアの **[メソッド]** でメソッドを選択し、**[編集]** をクリックして、**[測定器]** ページに移動して、**[メソッドゲインの設定]** チェックボックスがオフになっていることを確認します。
- **[診断]** ページで (MicroLab OQ、または MicroLab PC/MicroLab Mobile の **[詳細設定]** から)、**[ゲイン調整]** をクリックし、ゲイン値を調節して、**[装置の初期ゲインに設定]** をクリックしてゲインを測定器のデフォルトとして保存します。
[メソッドゲインの設定] を選択した場合は、使用しているメソッドにのみゲインが保存されます。

データベースアクセスの問題

SDA のインストール後 (21 CFR Part 11 環境)、サーバーへ接続しようとした際に次のエラーメッセージが表示された場合、以下の方法で対処します。

エラー：サーバー接続エラー

シナリオ 1 でインストールした場合は、PC を再起動し、SDA を再度開いてサーバーに適切に接続します。

シナリオ 2 および シナリオ 3 でインストールした場合は、複数台の PC がネットワーク上にあることを確認し、すべてのファイアウォールを無効にして PC を再起動します。SDA サーバーへの接続を再度試みます。
詳細情報については、21 CFR Part 11 のインストール手順書を参照してください。

MicroLab PC または MicroLab OQ でシステムのチェックテストを実行する場合は、ユーザーがシステムチェックデータベースとパブリックデータベースの両方にアクセスできるグループおよびプロジェクトに、割り当てられていること確認してください。詳細情報については、SCM ユーザーガイドを参照してください。

付録 A: MicroLab のファイルタイプ

次の表は、MicroLab で使用され読み込まれるさまざまなファイルタイプとその説明です。

表 1 MicroLab のファイルの種類

ファイルタイプ	ファイルの拡張子	コメント
Agilent ライブラリファイル	*.a2l *.a2x *.lib	ライブラリが MicroLab PC/Lite に作成されると、3 種類のファイルすべてが作成され、一緒に保存されます。ライブラリをエクスポートする場合は、3 つのファイルと一緒にしておく必要があります。 <ul style="list-style-type: none">*.a2l ファイルには実際のライブラリコンテンツが含まれています。*.a2x ファイルは関連するブランク結果が保存されます。*.lib ファイルには同定のためのライブラリタイトルが含まれています。
Agilent メソッドファイル	*.a2m	メソッドファイルには次のいずれかのメソッドタイプが保存されます。 <ul style="list-style-type: none">スペクトル測定、スペクトル（ライブラリ）サーチ、定量分析タイプメソッド
Agilent 結果ファイル	*.a2r	これはスペクトルファイルの形式で、選択したメソッドタイプに従って、3 つの結果ファイルのサブタイプから 1 種類を作成します。 <ul style="list-style-type: none">スペクトル結果正規化したスペクトル付きのライブラリ検索結果成分結果およびスペクトル
Agilent セキュリティ設定ファイル	*.a2s	このファイルは、ユーザーのログイン設定およびパスワードを保存します。これは内部ファイルで、移動および削除することはできません。
MicroLab 互換ファイルタイプ		
スペクトルファイル	*.asp	MicroLab PC/Lite はこのスペクトルファイルタイプを表示およびインポートすることができます。またこのファイルタイプを自動エクスポートできます。
Thermo Galactic / GRAMS	*.spc	MicroLab PC/Lite はこのスペクトルファイルタイプを表示およびインポートすることができます。またこのファイルタイプを自動エクスポートできます。
GRAMS PLS1 テキストモデル	*.txt	GRAMS モデルの手順のテキスト形式は、定量分析メソッドに組み込まれます。このファイルは、適切なモデルの構築後に、GRAMS IQ ソフトウェアで作成されます。
Eigen Vector モデル	*.xml	MicroLab PC/Lite は、XML ファイル形式を使用して、定量結果を定量分析メソッド内で作成します。PLS1 多変量モデルタイプのみ適用できます。
Agilent MicroLab Quant モデル	*.mqm	MicroLab Quant で作成され、MicroLab Quant/PC/Lite の定量分析メソッド内で使用でき、数値結果を作成します。
MicroLab Quant プロジェクト	*.mqp	MicroLab Quant ワークフローを保存するために使用され、MicroLab Quant でのみ使用されます。
Agilent MicroLab Expert Quant モデルファイル	*.a2q	このファイルは MicroLab PC で使用されます。MicroLab Expert ソフトウェア、パッケージ v1.1 以降でのみ作成されます。

付録

(空白ページ)

本書の内容

本書には以下の情報が記載されています。

- はじめに
- MicroLab Mobile
- MicroLab PC
- MicroLab Quant
- MicroLab OQ
- 21 CFR Part 11 対応の MicroLab
- サンプルの測定
- 結果のレビュー
- アップデートおよびトラブルシューティング

www.agilent.com

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2024

第11版 2024年10月



0020-410

