Agilent

OpenLab ChemStation

コンセプトとワークフロー

注意

文書情報

文書番号 : D0013748ja Rev. B
エディション : 2025 年 4 月

著作権

© Agilent Technologies, Inc. 2010-2025

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
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn, Germany

ソフトウェアリビジョン

本ガイドは Agilent OpenLab ChemStation のリビジョン LTS 01.11 Update 07 以降を対象にしています。

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。

警告

警告は、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、人身への傷害または死亡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、警告を無視して先に進んではなりません。

本書の内容

Agilent OpenLab ChemStation は、アドオンソフトウェアと高度なメソッド開発で Agilent GC、LC および CE 機器の高度な機能とワークフローをサポートすることにより、研究およびメソッド開発を行うラボに大きな柔軟性を提供しています。本書では、OpenLab ChemStation のすべての概念について詳しく説明します。

このマニュアルでは、ラボの生産性を高めるための ChemStation のデータ取込、解析、およびレポート機能の効率的な使用法も説明します。

表 1　このドキュメントで使用される用語と略語

用語	説明
AIC	Agilent 機器コントローラ
ChemStation	OpenLab ChemStation
コントロールパネル	OpenLab Control Panel
Microsoft コントロールパネル	Microsoft Windows オペレーティングシステムの一部
LTS	Long-term Support（長期サポート）
シングルラン	ランメソッドやキューメソッドから追加して開始されるシングルサンプルの個々の分析。シーケンステーブルで定義されている各ラインを個別のランとしてキューに追加することでシングルランを実行することもできます。

1　ChemStation の基本概念

この章では、リモートコントロール、グラフィカルインターフェイス、および ChemStation 表示など、ChemStation での操作に使用する原則について説明します。

2 メソッドの使用

メソッドは、OpenLab ChemStation の機能の重要な部分です。OpenLab ChemStation は、メソッド開発を柔軟に行うことができるクロマトデータシステムです。本章では、メソッドの概念について詳しく説明します。

3 データ取込

OpenLab ChemStation から、Agilent の LC、GC、CE、CE/MS、および LC/MS システムをシームレスに制御でき、アドオンソフトウェアによって Agilent GC および LC 機器の高度な機能とワークフローをサポートし、研究およびメソッド開発を行うラボに大きな柔軟性をもたらしています。この章では、分析データ取り込みプロセスの概要について説明します。

4 自動化/シーケンス

本章では、自動化の概念について説明します。具体的には、ChemStation でシーケンスを使用する方法、シーケンスの実行時に起こること、およびシーケンスのカスタマイズ方法を説明します。

5 ランコントロール

この章では、ランキューとキュープランの概念について説明します。シングルサンプル、シーケンス、一時停止、またはコマンドをランキューに追加する方法について説明します。毎日のラボの作業をスケジュールできるコマンドスケジューラについても説明します。

6 データ解析とレビューの概念

ChemStation でデータの解析およびレビューができます。この章では、ChemStation のデータ解析およびデータレビューのオプションについて説明します。

7 キャリブレーション

本章では、キャリブレーションの概念について説明します。

8 レポート

この章では、インテリジェントレポートとクラシックレポートの概念について説明します。

9　CE 特有のコンセプトと機能

この章は、ChemStation を使用して CE 機器をコントロールする場合にのみ関連する内容です。

目次

1 ChemStation の基本概念 9

はじめに 10
ChemStation ソフトウェアについて 11
ChemStation データ構造 43
リモート機器コントロール 46

2 メソッドの使用 49

メソッドの詳細 50
メソッドの各部分 52
メソッドの作成 54
メソッドの編集 55
メソッド管理 60
メソッドの実行時に起こる事柄 68

3 データ取込 75

データ取り込みとは 76
オンラインモニタ 78
ログブック 78
ステータス情報 79
ルールとアラート 81

4 自動化/シーケンス 82

自動化とは 84
シーケンスおよびシーケンステンプレートとは 84
シーケンスパラメータ 85
グラフィカルなサンプルエントリ 87
シーケンステーブル 90
イージーシーケンス 96
シーケンスを用いた作業 (シーケンスとシーケンステンプレート) 101
シーケンスログファイル 113

シーケンスの実行時に起こる事柄　113
シーケンスデータファイルの構造　115
ポストシーケンス処理　126
自動リキャリブレーション　128
リキャリブレーションの指定　129
シーケンスのタイプ　132

5　ランコントロール　147

ランキューについて　148
ランキューの使用　150
キュープランの使用　154
コマンドのスケジュール　155

6　データ解析とレビューの概念　157

データ解析　158
レビュー　177

7　キャリブレーション　180

用語の定義　181
キャリブレーションの種類　182
キャリブレーションテーブル　189
ピーク和(S)　190
化合物グループ　190
未知サンプル　191
リキャリブレーション　192

8　レポート　195

レポートとは　196
クラシックおよびインテリジェントレポート　202

インテリジェントレポート　203
クラシックレポート　210

9　CE 特有のコンセプトと機能　218

メソッド & ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能　219
ピークトップタイプ　222
キャリブレーションタイプ　223
CE-MS　226
CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ　227

1 ChemStation の基本概念

はじめに 10

ChemStation ソフトウェアについて 11

データの完全性 11
中央データ記憶領域 11
メソッドおよびシーケンス 12
システムコンフィグレーション 12
取込メソッドビューアー 12
メソッドのダウンロードオプション 13
データモデル 13
ファイルの命名規則 14
データファイル 18
ソフトウェアユーザーインターフェイス 19
データ取込 22
リテンションタイム ロッキング 23
データ解析 23
レポート作成 27
データのエクスポートとインポート 28
カスタマイズ 28
自動化 31
ランキューとキュープラン 33
サンプルロケーション 33
GLP 36
分取液体クロマトグラフィ 39

ChemStation データ構造 43

リモート機器コントロール 46

この章では、リモートコントロール、グラフィカルインターフェイス、および ChemStation 表示など、ChemStation での操作に使用する原則について説明します。

はじめに

ChemStation には、Agilent の LC、GC、CE、CE-MS、および LC-MS 機器のすべての機器コントロールが用意されています。マルチテクニック、マルチベンダーの機器コントロールを利用してデータの取り込み、分析、解釈を行うことができます。このクロマトグラフィソフトウェアは OpenLab Control Panel から起動します。コントロールパネルでは、OpenLab Shared Services のすべての機能を利用できます。

ChemStation ソフトウェアについて

データの完全性

データ、メソッド、シーケンスなどの ChemStation ファイルは、さまざまなローカルフォルダーに保存されます。データの完全性を確保するために、ChemStation ではセキュアファイル I/O 機能を提供しています。この機能を有効にした場合、すべてのフォルダーが ChemStation 外部からの変更や ［**開く**］または［**名前を付けて保存**］ ダイアログでの変更から保護されます。

詳細については、『OpenLab ChemStation コンフィグレーションガイド』（CDS_CS_Configure.pdf）の「セキュアファイル I/O を用いたフォルダー保護」を参照してください。

中央データ記憶領域

中央データ記憶領域システムは、さまざまな独自仕様のデータ形式からも独立したあらゆる電子データを保存できます。ChemStation の生データ（およびワークブックなど人間が読み取れるその他の文書）は**メタデータ**と一緒に保存されます。これにより、非常に簡単にデータを検索することができます。ChemStation メソッド、シーケンステンプレート、レポートテンプレート、およびデータファイル（シーケンスとシングルラン）は、中央リポジトリにアップロードし、必要に応じて後で元の ChemStation にダウンロードすることができます。

Agilent では、中央データ記憶領域として 2 種類のシステムを提供しています。

- **OpenLab Server** は、最大 30 台の機器を使用する小中規模ラボでデータ管理の一元化を実現するシングルサーバー ソリューションです。法規制に対応したセキュリティ機能を備えています。詳しくは、OpenLab Server の文書を参照してください。
- **OpenLab ECM** は、数台から数百台の機器を備えたラボ用の総合的なデータ管理ニーズに対応するシングル サーバー またはマルチ サーバーの分散ソリューションとして利用可能です。法規制に対応したセキュリティ機能も備えています。詳しくは、OpenLab ECM の文書を参照してください。

中央データ記憶領域のコンセプトの詳細については、『Content Management システム付き OpenLab ChemStation - 管理者ガイド』を参照してください。

メソッドおよびシーケンス

分析メソッドは、分析を実行する方法を記述したものです。これには、積分、定量およびレポートを含む、機器コントロール、データ取り込みおよび解析に関するすべてのパラメータが含まれています。システムは、多数のサンプルから異なるメソッドでデータを取り込むように設定できます。この種の操作のためのコントロールファイルはシーケンスと呼ばれます。個々のサンプル情報、適切なメソッドの参照、自動リキャリブレーションの条件、およびシーケンス内のすべてのランのサマリーレポート指定が含まれます。メソッドおよびシーケンスについての詳細は、「自動化/シーケンス」 82 ページ およびオンラインヘルプシステムを参照してください。

システムコンフィグレーション

機器システムのコンフィグレーションは、コンフィグレーションエディタプログラムを起動する OpenLab Control Panel から行います。これを使えば、機器の LAN アドレス、データ、シーケンスおよびメソッドのディレクトリ、ChemStation ソフトウェアの初期画面サイズを定義することができます。さらに、インテリジェントレポートおよび 3D スペクトル解析を有効または無効にし、メソッドのダウンロードオプションを定義することができます。

取込メソッドビューアー

取込メソッド表示を使用することで、現在の機器コンフィグレーションからは独立して、メソッドの中に保存された取込パラメータを確認することができます。 元のバージョンのこのメソッドを機器に適用するか、このメソッドを現在の機器コンフィグレーションに変換させることができます。

メソッドのダウンロードオプション

メソッドのダウンロードオプションは、以前の機器セッションからの最後に選択したメソッドが現在の機器設定と異なる場合に、ChemStation の動作を定義します。以下のオプションから選択できます。

- **機器にメソッドをダウンロード**

  最後に選択したメソッドを機器に書き込みます。機器設定は上書きされます。この動作は、ChemStation リビジョン C.01.03 またはそれ以前の動作に相当します。

- **機器からメソッドをアップロード**

  最後に選択したメソッドに機器から設定を読み込みます。メソッドに変更されたことが記録されます。

- **機器から新規メソッド作成**

  機器の設定が、新しく作成される ChemStation のメソッドに読み込まれます。

- **選択するオプションをユーザーに確認する**

  ChemStation の起動時に、上記のオプションの一つを選択できるダイアログが表示されます。このダイアログでは、各モジュールの機器設定を、最後に選択したメソッドの設定と比較できます。

  相違点を比較するとき、すべての設定のリストを表示するか、または相違点のみを表示することができます。

データモデル

ChemStation ソフトウェアは、レジスタと呼ばれるメモリ構造体に基づくデータモデルに従って設計されています。レジスタは、多目的の構造体で、分析データと、2 次元の情報（時間/強度など）および 3 次元の情報（時間/強度/波長など）の両方の情報を格納できます。

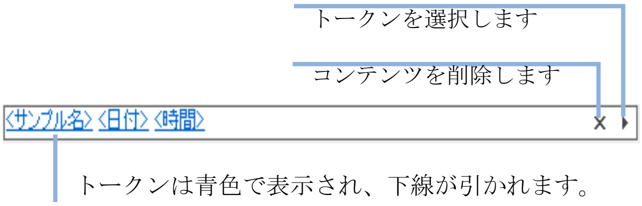
ChemStation は、レジスタの構築、拡張、抽出、および主要なデータを変更しない場合に編集を行うためのコマンドと機能を提供します。 詳細は、 **［ヘルプ］** > **［コマンド］**から、ChemStation のオンラインリファレンスを参照してください。

ファイルの命名規則

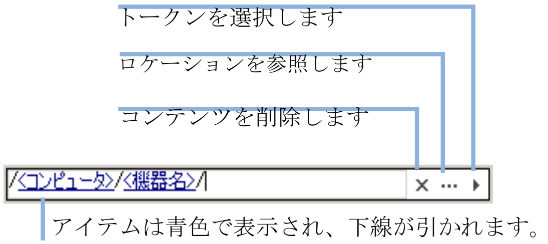
ファイル名およびトークンの指定

パス名またはファイル名を入力できる ChemStation のほとんどのダイアログでは、トークンを使用して動的に適切な名前を生成することができます。 ダイアログで設定したファイル名またはパス名によって、異なったトークンを使用できます。 次の画面では、トークンの例を挙げています。

ファイル名のコントロールは、次のようなものになります。



パス名のコントロールは、次のようなものになります。



相当する各ダイアログでは、その結果のファイル名またはパス名が追加表示されます。

このタイプのフィールドでは、次のオプションを使用できます。

- 固定テキストを追加します。
- 矢印ボタン (▸) をクリックし、リストからトークンを選択します。

  下矢印キーを押し、リストからトークンを選択します。
- 既に使用されているトークンを右クリックして、リストから別のトークンに置換できます。
- X ボタンをクリックして、フィールド内の現在のコンテンツを削除します。
- 3 つのドットのボタン (…) をクリックして、必要なパスを参照します。

命名規則

ChemStation のファイル名やディレクトリ名、シーケンステンプレート名やメソッド名は以下のようにしてください。

A-Z、a-z、0-9、_（アンダーバー）、-（ハイフン）

名前の先頭または末尾にスペースを入力できませんが、容易に監視できます。

注記 トークンを使用すると、機器名、オペレータ名、またはサンプル名などの情報を基にファイル名やディレクトリ名を自動的に生成できます。これらの名前は、同じ命名規則に従っているものとします。

注記 自動的に生成されたファイル名には、フロントおよびバックインジェクタに関する固有の文字を含めることができます。これらの文字をローカライズすることができます。これらは、上にある文字でなくても有効です。

次の予約済みデバイス名は、ファイル名としては使用できません。また、この名前を拡張子の前に付けないでください（Nul.txt など）。

- CON、PRN、AUX、NUL
- COMx（ここで x は 1～9 の数字）
- LPT1x（ここで x は 1～9 の数字）

注記 英語、日本語、中国語のオペレーティングシステムで、命名規則をテストしています。Agilent は英語以外のオペレーティングシステムでのサポートステートメントおよび特殊文字を提供できません。

ChemStation ファイル名とサブディレクトリーの最大の長さ

ファイル名およびサブディレクトリーの Agilent ChemStation の仕様は、以下に記載されています。

表 2　ChemStation ファイル名とサブディレクトリーの最大の長さ

データファイル/ サブディレクトリー/パス	最大文字数	自動付加	例
シングルサンプルのデータファイル名	60	.D	Demodad.d
プレフィックス/カウンターを使用する、シーケンス内のデータファイル名	60	.D	longname000001.d
名前のパターンを使用する、シーケンス内のデータファイル名	60	.D	05-1-sampleA.d
メソッド シーケンス ライブラリ カスタマイズされたレポートテンプレート	60	.M .S .UVL .FRP	def_lc.m def_lc.s demodad.uvl areapct.frp
データファイルサブディレクトリー	40		demo（サンプル情報で入力）

表 2　ChemStation ファイル名とサブディレクトリーの最大の長さ

データファイル/サブディレクトリー/パス	最大文字数	自動付加	例
データシーケンスサブディレクトリー	40		demo（シーケンスパラメータで入力）
データパス メソッドパス シーケンスパス ライブラリパス カスタマイズされたレポートテンプレートパス	149		C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥1¥Data C:ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥1¥Methods C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥1¥Sequence C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥SpecLibs C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥RepStyle

ChemStation のすべてのログブックでは、システムメッセージが拡張形式でレポートされます。情報は複数行にわたって印刷されます。シーケンスレポートなどの特定のレポートは、すべての情報がレポートテンプレートに収まるように、ファイル名を切り詰めることがあります。

すべてのパスは Windows オペレーティングシステムによって 260 文字に制限されています。文字の一部はオペレーティングシステムによって非表示になっています。このため、上記の仕様をすべて満たしていても、ファイル名を短くすることが必要な場合があります。

データファイル

データファイルは一群のファイルからなっており、デフォルトではデータファイル名と拡張子 .D を持つサブディレクトリとして、データディレクトリまたはそのサブディレクトリに保存されます。データファイル名は、拡張子を含めて最大 42 文字までで、マニュアルで定義できます。ディレクトリの各ファイルは命名規則に従います（「ファイルの命名規則」14ページを参照）。データディレクトリの追加は、［**プレファレンス**］設定からできます。

表 3　データファイル

名前	説明
*.CH	クロマトグラフ/電気泳動シグナルデータファイルです。ファイル名は、モジュールまたは検出器のタイプ、モジュール番号およびシグナルまたはチャンネルの識別子から構成されます。たとえば、ADC1A.CH の場合、ADC はモジュールタイプ、1 はモジュール番号、A はシグナル識別子、.CH はクロマトグラフを表す拡張子です。
*.UV	UV スペクトルデータファイルです。ファイル名は、検出器タイプとデバイス番号から構成されます（ダイオードアレイおよび蛍光検出器の場合のみ）。
*.ms	LCMS スペクトルデータファイルです。
REPORT.TXT, REPORT.PDF	シグナルデータファイルと同等のレポートデータファイルです。 注：PDF で一意のファイル名を使用する場合、PDF ファイル名は異なる可能性があります。
Acq.MACAML	このファイルには、データ取り込み中に使用したメソッドの情報が含まれます。情報は ACAML フォーマットで保存されます。ACAML ファイルは、インテリジェントレポートで使用されます。
Sequence.ACAM_	このファイルには、シングル注入結果が含まれます。情報は ACAML フォーマットで保存されます。ACAML ファイルは、インテリジェントレポートで使用されます。
SAMPLE.MAC または SAMPLE.XML	サンプル値が保存されるファイルです。

表 3　　データファイル

名前	説明
SAMPLE.MAC.BAK または SAMPLE.XML.BAK	オリジナルの sample.mac のバックアップです。サンプルパラメータ（倍率など）が最初に更新された際、再解析中に .bak ファイルが作成されます。このファイルには、取り込みに使用されたオリジナルのサンプル値が保存されています。
RUN.LOG	分析中に作成されたログブックエントリです。ログブックは、分析の記録を保持します。すべてのエラーメッセージと、ChemStation の重要なステータス変更は、ログブックに記録されます。
LCDIAG.REG	LCの場合のみです。機器カーブ（グラジェント、温度、圧力など）、注入量および溶媒の説明が含まれます。
ACQRES.REG	カラム情報が含まれます。GC の場合には、注入量も保存されます。
GLPSAVE.REG	［GLP データの保存］を指定した場合のデータファイルの一部です。
M_INTEV.REG	マニュアル積分イベントが含まれます。

ソフトウェアユーザーインターフェイス

ChemStation のユーザーインターフェイスは、代表的な分析タスクに応じて機能をグループ化した「ビュー」としてデザインされています。すべてのソフトウェアコンフィグレーションに、以下の標準的なビューが存在します。

- ［メソッド & ランコントロール］: 機器コントロールおよびデータ取込
- ［データ解析］: 取り込んだデータの再解析
- ［レビュー］: 指定したレポートテンプレートを使用したデータのレビュー
- ［レポートレイアウト］: レポートレイアウトの設計

データ評価モジュール、または機器の診断とベリフィケーションをサポートする特定の機器コンフィグレーションを追加した場合には、ビューが追加されます。

ナビゲーションペインにはナビゲーションボタンがあり、ChemStation のビュー、およびツリー表示の ChemStation エクスプローラを素早く切り替え

ることができます。ChemStation エクスプローラの内容はビューに応じて変わり、さまざまな ChemStation のエレメントにアクセスできます。

それぞれのビューは、メニューとツールバーを含む、標準的なユーザーエレメントのセットから構成されています。標準ツールバーからは、メソッドやシーケンスなど、共通のシステム仕様情報にすばやくアクセスできます。**［メソッド & ランコントロール］**ビューには、システムステータスバー、シングルランまたはシーケンスを構成できるサンプル情報エリア、および GC、CE、LC コンフィグレーションの視覚的な機器インターフェイスダイアグラムが組み込まれています。機器インターフェイスのシステムダイアグラムはリアルタイムな情報が表示されます。機器のパラメータにすばやくアクセスでき、各分析の進行状況のステータスをアニメーションのグラフィカルな概要で確認できます。機器インターフェイスダイアグラムは、不要なときにはオフにすることができます。これによりメモリや Windows の他のリソースを節約できます。**［ランキュー］**タブには、機器でスケジュールされたすべてのシーケンス、サンプルおよびコマンドが表示され、ランの順番変更や削除などの操作をすることができます（「ランキューの使用」 150 ページを参照）。

［データ解析］ビューでは、データ解析モードに応じて標準ツールバーが拡張されます。これらのデータ解析モードには、再計算、再解析、積分、キャリブレーション、レポート、注釈、シグナル比較が含まれます。モジュールがインストールされている場合には、その他の特別なモードも含まれます。それぞれのデータ解析モードは、モードごとのツールセットによってサポートされます。

［レビュー］ビューは、インテリジェントレポートを有効にしている機器で利用できます。このビューでは、柔軟にデータをレビューすることができます。レビューのベースとして、任意のデータファイルを組み合わせて使用することができます。また、選択したデータに既存のレポートテンプレートを適用できます。作成するレポートへのデータの表示方法と情報タイプは、選択したレポートテンプレートによって決まります。作成したレポートは、ツールバーから印刷およびエクスポートすることができます。

［レポートレイアウト］ビューでは、レポートテンプレートまたはレポートスタイルのレイアウトを定義することができます。また、このタスクに固有のツールバーのセットも使います。このビューで表示されるレポートテンプレートエディタは、機器に設定されているレポートのタイプにより異なります。クラシックレポートまたはインテリジェントレポートのいずれかを使用できます（「レポート」 195 ページを参照）。

ナビゲーションペイン

ChemStation ビューの左側にあるナビゲーションパネルは、主要な ChemStation 要素の多くへのアクセスを高速化するためや、ビューを素速く切り替えられるように設計されています。ナビゲーションパネルには、ツリー

ベースの ChemStation エクスプローラと、構成可能なボタンエリアがあります。これにはまた、ChemStation ワークスペースが妨げられないようにするための自動非表示機能があり、ナビゲーションボタンエリアのサイズ変更、および再配列などの標準的な機能も提供しています。

ナビゲーションボタン

特定のナビゲーションボタンをクリックすれば、ChemStation のビューを切り替えることができます。ナビゲーションボタンのセクションは最小化、拡張、再配置が行えます。

ChemStation エクスプローラ

ナビゲーションパネルの内容は、ビューに応じて変わります。[メソッド & ランコントロール]、[データ解析]、[レビュー] および [レポート レイアウト] では、ChemStation エクスプローラによって ChemStation のそれぞれの要素にナビゲートされます。デフォルトでは、データ、メソッドおよびシーケンスのこれらの要素は、コンフィグレーションエディタの設定に基づいています。[ビュー] メニューの [プレファレンス] オプションを利用して、メソッド、シーケンス、データロケーションのノードを指定することができます。

表 4　　ナビゲーションペイン項目

ナビゲーションボタン	ChemStation エクスプローラ要素
メソッド & ランコントロール	シーケンステンプレート / マスターメソッド、結果セットメソッド
データ解析	データ/マスターメソッド、 結果セットメソッド
プレビュー	データ/レポートテンプレート
レポートレイアウト	クラシックレポート:マスターメソッド インテリジェントレポート:レポートテンプレート
ベリフィケーション （LC および LC/MS）	ベリフィケーションビュー固有のショートカット
診断（LC/MS）	診断ビュー固有のショートカット
チューン（LC/MS）	チューンビュー固有のショートカット

データ取込

機器のステータスは、ソフトウェアがウィンドウとして表示されているときでも、アイコン化されたときでも継続してモニタされ、分析の経過時間とともにディスプレイ上で更新されます。エラー、分析の開始および終了時の機器の状態を含む、分析中に生じたトランザクションは、システムのログブックに記録されます。それは、データファイル毎に保存されます。

液体クロマトグラフの流量、温度、圧力および溶媒の組成などの機器コンディションは、各データファイルに記録、保存されます。これらの機器パラメータを表示、プロットして、各分析の品質を確認することができます。実際にどのようなパラメータが記録されるかは、システムと構成機器の性能の両方に応じて決まります。

すべての通常のデータ取込、すなわちシングルサンプルおよびシーケンスランは、まずランキューに追加され、その後にそこから開始されます。詳細については、「ランキューについて」 148 ページを参照してください。

機器が取り込んでいるデータをリアルタイムにモニタするために、いくつかの表示ウィンドウを使用することができます。データは、mAU、ボルト、℃または bar など、実際の測定単位で表示されます。ウィンドウはそれぞれ、複数のクロマトグラフ、電気泳動シグナル、圧力などの機器パラメータを重ね書きで表示することができます。表示のデフォルト設定を、調整し、システムに記憶させることができます。これによりユーザーは、自分の設定を機器のデフォルトとして設定することができます。ウィンドウにはズーム機能があり、カーソルで任意の時点の特定のシグナルのレスポンスを表示することができます。

分析の間も、オフライン解析で ChemStation のすべての機能を使用することができます。取り込みを行っている間、オンラインセッションのデータ解析部分にアクセスできないので、データの確認はオフラインセッションを実行する必要があります。

分析の完了前にデータの処理を開始したい場合は、スナップショット機能を利用してください。スナップショットは、機器のオフラインセッションで取る必要があります。これは確認用としてすぐに表示されます。

視覚的な機器インタフェースダイアグラムを含む、シグナルおよびステータス情報ウィンドウのレイアウトは、自動的に保存されます。

データ取込についての詳細は、「データ取込」75ページおよびオンラインヘルプシステムを参照してください。

リテンションタイム ロッキング

クロマトグラフィにおいて、リテンションタイムは最も重要な定性情報です。通常、ピークの同定は、未知ピークのリテンションタイムを標準サンプルのものと比較することで行われます。そのため、分析する化合物のリテンションタイムが一定であると、ピークの同定とメソッドのバリデーションがはるかに容易になります。しかしながら、現実にはリテンションタイムのシフトは頻繁に起こります。カラムのカットなどの日常的なメンテナンスによってもリテンションタイムがシフトするためです。ラボ内の複数の機器で同じメソッドを使用して分析している場合、同一の条件で分析していても、機器ごとにリテンションタイムが異なることがあります。機器間でリテンションタイムが異なると、リキャリブレーションを行ってリテンションタイムを更新する必要がでてきます。つまり、機器ごとに個別のキャリブレーションテーブルや積分イベントテーブルが必要となり、システム間でメソッドを移行するのに時間がかかってしまいます。さらに、時間の経過とともに機器間のデータを比較するときに追加作業が必要になります。

リテンションタイムロッキング（RTL）を利用すると、同じカラムタイプ（同じ固定相、カラム内径、長さ、および相比（膜厚））であれば、異なる GC システム間でリテンションタイムをほぼ一致させることが可能となります。RTL では、初期のリテンションタイムロッキング設定の RT / 圧力キャリブレーションを使用して、ターゲット化合物のピークがシフトしたときに希望のリテンションタイムに戻す（再ロック）ように GC メソッドの新しい注入口圧力を計算します。このロックされたメソッドを別の GC に読み込み、注入口圧力の設定を更新することで、リテンションタイムを一致させることもできます。

データ解析

データ解析-オプション

「クラシック」データ解析は、ChemStation の機能です。概要を以降のページで説明します。詳細は、「データ解析」 158 ページを参照してください。

データ解析-表示

［ChemStation データ解析］ビューでは、再計算、再解析、積分、キャリブレーション、レポート、注釈、およびシグナル比較ツールセットを含むタスクがグループ化され、データ解析機能の標準的なツールバーを拡張します。以下の主要なグラフィカル操作が可能になります。

- クロマトグラム/エレクトロフェログラム読み込み時に、単一または複数シグナルを表示
- 異なるサンプルのクロマトグラム/エレクトロフェログラムの重ね描き
- あるクロマトグラム/エレクトロフェログラムから他のものを減算
- 視覚的に比較しやすくするため、シグナルを縦または横に並べて表示
- 視覚的に比較しやすくするため、シグナルの上下または左右反転
- 特定の積分されたピークに対する、拡張ピークパフォーマンス特性の表示
- グラフィカルなズームおよびスクロール機能
- チックマーク、ベースライン、軸、リテンション/マイグレーションタイムおよび化合物名を含む、表示属性の調整（リテンションタイム (RT) および化合物ラベルのフォント選択、表示のサイズと向きの調整、重ね描き表示または分割表示の選択および倍率の選択）
- 構成機器の性能に応じた、クロマトグラム/エレクトロフェログラム表示への機器パラメータのグラフィカルな重ね書き
- ユーザー定義の注記を、フォント、サイズ、テキストの回転および色を選択して、表示へ対話的に追加（一度定義した注記は、グラフィカルに移動、編集または削除が可能）
- ディスプレイを Windows のクリップボードに、メタファイルとビットマップの両方の形式でコピー
- **ピックモード**機能を使って、個別のデータポイントの値を検出器の単位で表示
- デジタル化された時間/強度のポイントを Microsoft Windows のクリップボードにエクスポート

データ解析—積分

ChemStation のインテグレータアルゴリズムは、耐久性、信頼性および使いやすさに焦点を当てた、新しい世代の 2 番目のバージョンです。

データ解析-定量

ChemStation のデータ解析ビューのキャリブレーションモードを使うと、以下を同時に表示することができます。

- キャリブレーション中のシグナルと、現在の化合物のリテンション/マイグレーションタイムウィンドウの表示

- キャリブレーションパラメータの包括的な選択によって表示を構成できるキャリブレーションテーブル
- キャリブレーションされた化合物のキャリブレーションカーブ

すべてのキャリブレーションモードウィンドウはリンクしているので、いずれかを変更すると自動的に他のウィンドウに反映されます。 このモードを使えば、キャリブレーションデータをグラフィカルに選択して、修正できます。

定量は、ピーク面積または高さから計算された%、Norm%、ESTD、ESTD%、ISTD、および ISTD% に基づいて行われます。 キャリブレーションはマルチレベルで行うことができ、複数の内部標準定義を設定することができます。 キャリブレーション履歴は自動的に保存され、リキャリブレーション計算の重み付けに使用できます。

キャリブレーションと定量についての詳細は、「キャリブレーション」 180 ページを参照してください。

データ解析-バッチレビュー

バッチレビューレポートを使用して、サンプルごとに各化合物の結果をレビューできます。バッチレビューでは、次の主要なグラフィカル操作を提供しています。

- （キャリブレーションされた）データファイルの自動またはマニュアルのレビューと再解析の定義
- キャリブレーションテーブルのリキャリブレーション
- キャリブレーションされたメソッドの化合物テーブルのレビュー
- 固有バッチレポートの作成

ナビゲーションテーブルでは、次の主要なグラフィカル操作を提供しています。

- ソート、ドラッグアンドドロップ オプション、カラムの選択、希望するナビゲーションテーブルのコンフィグレーションを指定するための項目のグループ化などの標準のテーブルコンフィグレーション機能
- シグナルの読み込み、重ね描き、データのエクスポート、レポートのプリントを行うためのマウス右クリック機能
- ナビゲーションテーブルの行を展開することによる、シグナルの詳細のレビュー
- 指定したメソッドを使用し、シグナルのレビューと ChemStation レポートの作成

バッチレビューでは、分析ごとにマニュアル積分イベントを保存できます。バッチレビュー外部のデータファイルと一緒にマニュアルイベントを保存することも可能です。2 つのマニュアル積分設定の矛盾を避けるため、データファイルと一緒に保存されたマニュアルイベントはバッチレビューでは適用されません。

注意すべき点がいくつかあります。

- バッチレビューでのリキャリブレーション方法は、オリジナルのシーケンスでリキャリブレーションされたものとは異なります。バッチレビューツールバーの［キャリブレーション更新］ボタンを押すと、すべてのキャリブレーションランがバッチにある状態でシステムがリキャリブレーションし、リキャリブレーションされたキャリブレーションテーブルが作成されます。次にバッチレビューツールバーの［スタート］ボタンを押すと、キャリブレーションされた各化合物のアマウントが再計算されます。すべてのサンプルのアマウントが、リキャリブレーションされたキャリブレーションテーブルから計算されます。
- バッチレビューサンプルテーブルの行をクリックすると、関連付けられたデータファイルが読み込まれます。大きなデータファイルを読み込む場合、時間がかかることがあります。シグナル読み込みを使用して同じデータファイルを読み込む場合も同様です。
- バッチレビューレポートには、サンプルごとに各化合物の結果が得られます。キャリブレーションテーブルによっては多数の化合物があるため、非常に大きなバッチレビューレポートになる場合があります。
- バッチレビューでは、分析ごとにマニュアル積分イベントを保存できます。バッチレビュー外部のデータファイルと一緒にマニュアルイベントを保存することも可能です。2 つのマニュアル積分設定の矛盾を避けるため、データファイルと一緒に保存されたマニュアルイベントはバッチレビューでは適用されません。

ChemStation と中央データ記憶領域を併用する場合、バッチビューはデフォルトでは無効になっています。ChemStation.ini ファイルの［PCS］セクションに入力すると有効にできます。[PCS]_BatchReview=1。ChemStation.ini ファイルは、C:¥ProgramData¥Agilent Technologies¥ChemStation ディレクトリにあります。

データ解析-再計算

再計算モードの機能を利用して、ナビゲーションテーブルに表示されるデータサブセットの結果またはレポートを素早く生成することが可能です。 サンプルを取り込んだ時のオリジナルシーケンスに依存することなく、自分で組み合わせたデータセットを簡単に作成できます。再計算にはあらゆるメソッドが利用

可能です。 使用メソッドは、シングルデータファイル（DA.M）へコピーされます。 再計算中にキャリブレーションは行われません。

データ解析-再解析

再解析モードの機能により、シーケンス全体の再解析ができます。シーケンステーブルで定義されているメソッドおよびキャリブレーションサンプルの結果を利用して、サンプル結果を計算します。

データ解析-前回の結果

このモードでは、各分析のデータファイルメソッド（DA.M）が読み込まれます。 DA.M は、前回のデータ解析（取り込み、再解析、再計算）に使用したメソッドのコピーです。 前回の結果モードを使用することで、シーケンスメソッドがその間に変更されていても、前回のデータ解析の結果を再現することができます。

レポート作成

ChemStation では、使用するレポートのタイプを機器ごとに選ぶことができます。具体的には、

- ChemStation B バージョンと同様の**クラシック ChemStation レポート**。詳細については、「クラシックレポート」 210 ページを参照してください。
- **インテリジェントレポート**：インテリジェントレポートでは、次のことが行えます。
  - ドラッグアンドドロップでのレポートテンプレートの作成
  - データとレポートテンプレートを選択するだけで、 ［**レビュー**］ビューに新しいレポートの作成
  - 対話型レポートを使用したデータの確認。検索条件を定義して、注目している情報だけを選択できます。
  - シーケンスをまたがるレポートの生成

詳細は、「インテリジェントレポート」 203 ページを参照してください。

データのエクスポートとインポート

ANDI

ChemStation は、データファイルを Analytical Instrument Association（AIA）、リビジョン 1.0、copyright 1992 の andi（Analytical Data Interchange）クロマトグラフフォーマットでインポートおよびエクスポートできます。データのインポートは、コンプライアンスレベル 1（サンプル情報およびシグナルデータ）で、データのエクスポートはコンプライアンスレベル 2（サンプル情報、シグナルデータ、および積分結果）でサポートされています。

DDE

ChemStation には、Microsoft Windows プラットフォームのダイナミックデータ交換（DDE）規格をサポートするコマンドと機能が、DDE クライアントおよび DDE サーバーの両方が含まれています。コマンドセットには、接続の確立と解除、双方向の転送情報、およびリモート関数の実行のためのコマンドが含まれています。

ADF

OpenLab の ADFExport ツールから、ChemStation データを Allotrope Data Format（ADF）にエクスポートできます。このツールは、対応するアドオンがインストールされている場合のみ使用可能です。

OpenLab の ADFExport ツールの詳細は、ChemStation ADF Export のオンラインヘルプに記載されています。

カスタマイズ

ChemStation は、効果的なコマンドセットを使用してカスタマイズすることができます。これらのコマンドはグループ化して、特定の機能を自動的に実行できます。このようなグループはマクロと呼ばれます。

マクロを記述するユーザーは、独自の変数の定義、条件およびループ構造の作成、ファイル処理およびユーザー対話を含む物理 I/O の実行、マクロのネスト、スケジュール設定、および他の Microsoft Windows アプリケーションとのデータ交換を行えます。

ChemStation のカスタムコマンドまたはマクロの使用

ChemStation では、以下のロケーションでカスタムコマンドを使用できます。

- ランキュー

  「ランキューの使用」 150 ページ を参照してください。
- キュープラン

  「キュープランの使用」 154 ページ を参照してください。
- ラン タイム チェックリスト

  「ラン タイム チェックリスト」 53 ページ を参照してください。
- シーケンスパラメータ

  「シーケンスパラメータ」 85 ページ を参照してください。
- コマンドスケジューラ

  「コマンドのスケジュール」 155 ページ を参照してください。

各ロケーションから、コマンドやマクロを作成または変更するダイアログにアクセスできます。

カスタムコマンドの作成

ChemStation には、ビルトインコマンドがいくつか用意されています。必要な権限がある場合、独自のカスタムコマンドおよびマクロを作成できます。

必須要件 ［ChemStation:セキュリティ］ > ［コマンドライン］権限が必要です。権限は、コントロールパネルで設定します。

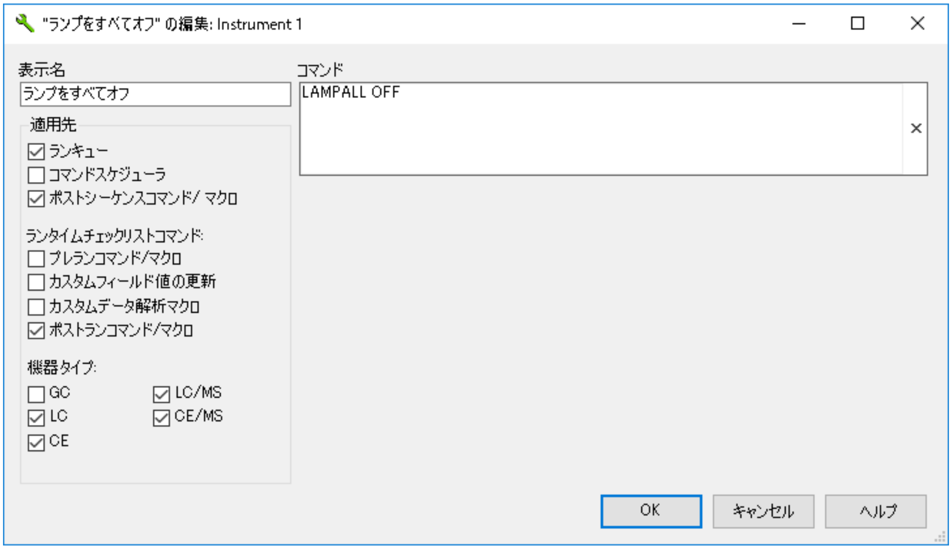
1 コマンドを使用できるロケーションから、［**カスタムコマンドの設定...**］を選択します。

［**カスタムコマンドテンプレート**］ダイアログに、現在の機器タイプで使用可能なすべてのビルトインコマンドおよびカスタムコマンドが表示されます。

2 必要なコマンドを選択し、［**編集...**］をクリックします。

コマンドプロパティを設定できるダイアログが開きます。

- すべてのユーザーに共通の ChemStation での表示名
- コマンドが使用可能なロケーション（［**ランキュー**］、［**コマンドスケジューラ**］、［**ポスト シーケンス コマンド/ マクロ**］、メソッドの［**ラン タイム チェックリスト**］）。
- コマンドが適用される［**機器タイプ**］。



3 変更を確認します。

注記

コマンドの定義は、メソッドのラン タイム チェックリスト、シーケンステンプレート、またはキュープランとは別に保存されます。つまり、定義を変更または削除した場合、［**カスタムコマンドテンプレート**］ダイアログを呼び出した範囲内でのみ変更が有効になります。別の範囲のダイアログに変更を適用するには、関連するメソッドチェックリスト、シーケンステンプレート、またはキュープランを明示的に更新する必要があります。

カスタマイズについての詳細は、コマンドまたはマクロに関する ChemStation オンラインヘルプを参照してください。

自動化

ChemStation では、シングルサンプルおよびマルチメソッドのシーケンスの両方を計画し、実行することができます。

シーケンスパラメータは、自動作成されたファイル、または 15 字までのユーザー定義のプレフィックスを持つ連番ファイルを使用するように定義されます。ユーザーは、分析のすべてを実行するか、またはシーケンスのデータ再解析だけを実行するかを選択できます。エラーまたはすべての分析が完了したシーケンスの終了時に、システム固有のシャットダウンコマンド（ビルトインコマンドの例については、「ポストシーケンス処理」 126 ページを参照）またはユーザー定義のシャットダウンマクロを選択することができます。

シーケンステーブル、つまり実行する分析のリストは、表計算に似たユーザーインターフェイスで構築することができ、ユーザーは、バイアル番号およびサンプル名、サンプルタイプ、メソッド、またサンプルアマウント、倍率や希釈率、キャリブレーション条件、LIMSID パラメータおよび繰り返し注入の回数を含むサンプル定量パラメータを指定できます。コンフィグレーションされた機器およびモジュールに応じて、より多くのフィールドにアクセスできます。例えば、Agilent 1100/1200 LC システムのフラクションコレクタが含まれている場合には、**[フラクション開始ポジション]** 列がシーケンステーブルに表示されます。シーケンステーブルの表示項目は、ユーザーが設定できます。ユーザーは、テーブル内の個々のセル間を移動できます。また、個々のセル、行全体、または一連の行をコピー、カットまたはペーストして、シーケンスを効率的または素早く構築することができます。

サンプルタイプは、シーケンステーブル内でサンプル、キャリブレーション、ブランク、またはコントロールで識別されます。サンプルタイプでは、次のようにサンプルの特別な解析処理を決めます。

- 未知のサンプルは、メソッドの指定に従って解析され、レポートされます。
- キャリブレーションサンプルは、後で説明しますが、メソッドの定量化合物をリキャブレートするために使用されます。
- ブランクのサンプルは、ヨーロッパ薬局方の定義に準じて、特定ピークに対してリファレンスシグナルを評価するために使用されます。カスタマイズしたレポートでシグナル/ノイズ比を印刷することができます。計算および必要なデータフィールドの詳細については、リファレンスガイドを参照してください。
- コントロールサンプルは、メソッドで定義された各成分のリミットに基づいて解析されます。結果が、指定されたパラメータの範囲外になった場合には、シーケンスの実行を停止します。

キャリブレーションサンプルは、シンプル、周期的またはブラケットとして定義されます。シンプルリキャブレーションは、シーケンスでキャリブレーションサンプルが定義されるたびにリキャブレーションが行われることを意味します。周期的リキャリブレーションは、一連の未知物質の分析中に、定義された間隔で行われることを意味します。一連の未知サンプルをブラケットにすると、2 つのキャリブレーションセットで分析されます。そして、未知サンプルの定量レポートは、2 つのキャリブレーションセットを平均したキャリブレーションテーブルを使用して計算されます。

シーケンスプレビュー機能により、シーケンスの実行順序を確認できます。シーケンスがキューに入れられると同時に、シーケンステーブルにもすべてのサンプルが分析ごとに表示されます。個々のサンプルエントリを選択して、再実行したり、再評価したりできます。すでに取り込んだデータの再解析を行う

場合、ユーザーは、再解析で元のサンプル定量データを使用するか、それともシーケンスのサンプルテーブルに入力された新しいデータを使用するかを指定できます。

他のメソッドでシングル注入の優先度の高いサンプルを分析するため、シーケンスを一時停止し、その後、自動化を中断せずに再開することができます。サンプルは、シーケンスの実行中にシーケンステーブルに追加することができます。

シーケンスとシーケンスの選択分析テーブルは、両方とも印刷できます。

シーケンスについての詳細は、「自動化/シーケンス」 82 ページおよびオンラインヘルプシステムを参照してください。

ランキューとキュープラン

ランキューにより、複数のシングルサンプルシーケンスを順番に自動実行させることが可能です。キューが一時停止にされない限り、データシステムがレディになると、最初にキューに追加されたアイテムが開始します。シングルサンプル、イージーシーケンステンプレートに基づいたシーケンス、従来の ChemStation シーケンス、またはキューの一時停止をキューに追加できます。各［**ランメソッド**］または［**ランシーケンス**］コマンドは、アイテムを自動的にランキューに追加し、キューでこのアイテムを自動的に開始します。

キュープランを使用して、複数のシングルサンプルまたはシーケンスをセットとして準備し、その計画をファイルシステムに保存することができます。計画したサンプルおよびシーケンスプランを開始するには、プランを開き、それをランキューに追加します。この機能によって、夜間または週末の分析などの長期にわたるタスクを開始できます。

詳細については、「ランキューについて」 148 ページを参照してください。

サンプルロケーション

グラフィカルコントロールによって、注入およびフラクションコレクションのバイアルロケーションを選択できます。

適切なサンプルロケーションを手動で入力する代わりに、ドロワーロケーション、トレイタイプ、およびバイアルロケーションを、マウスをクリックするだけで選択します。

以下のダイアログおよびツールバーに、サンプルロケーションを選択するときのグラフィカルコントロールがあります。

- **サンプル情報**
- **シーケンステーブル**
- **下へコピーオプション**
- **フラクションコレクタ（開始ロケーション）**
- **データ解析** ビューの［**純度**］タスクバー

コントロールには、以下の要素が含まれます。

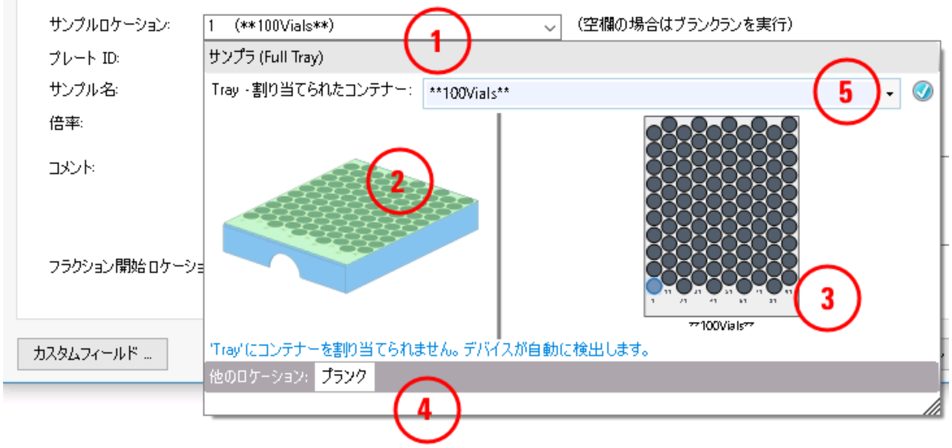


図 1　［サンプル情報］ダイアログのサンプルロケーションピッカー

1	サンプルロケーションの初期入力フィールド。矢印をクリックするか **F4** を押してグラフィカルコントロールを開くか、ロケーション文字列を手動で入力します。
2	サンプルコンテナデバイス（インジェクタまたはフラクションコレクタ）のレイアウトを視覚化したグラフィック。複数のコンテナロケーションが利用可能な場合、どれか 1 つをクリックして選択します。
3	選択されたサンプルコンテナのビジュアル表示。サンプルロケーションをクリックして選択し、グラフィカルコントロールを閉じます。

4	ドライバーによって定義された、追加のロケーション。サンプルの場合は［**ブランク**］、フラクションコレクションの場合は［**次のロケーション**］、［**次のプレート**］、［**プーリング**］など。ロケーションをクリックして選択し、グラフィカルコントロールを閉じます。
5	選択されたデバイスロケーションに対応するコンテナのリスト。［**現在のコンフィグレーションを使用**］によって、注入時にデバイス/ドライバーコンフィグレーションによって決定されたコンテナを選択します。 実行中にコンテナがコレクション順序で考慮されないようにするには、フラクションコレクタレイアウト用の **<empty>** などを使用します。

主に以下のワークフローがあります。

- 現在のコンフィグレーションを使用

  デフォルトはこちらです。サンプルまたはシーケンスが実行されると、システムは自動的にデバイスを検出します。

- 取り込み時に適用するコンテナを割り当てる

  このワークフローは、プレートなど、システムによって検出できない、定義可能なコンテナ用です。シーケンスまたはサンプルの実行時にどのコンテナを使用するかを指定します。

- 有効にするコンテナを割り当てる

  このワークフローは、トレイなど、デバイスによって自動的に検出される、定義不可能なコンテナ用です。シーケンスまたはサンプルが実行されると、システムは指定されたコンテナを検証します。物理的なコンテナが指定されたものと一致しない場合、ランは中断されます。これにより、適切なコンテナタイプが使用されるようになります。

- 割り当てられていないコンテナの準備

  このワークフローは、あらかじめ充填されていて、まだサンプラに挿入されていないコンテナ用です。これらはドロワーに割り当てられ、後で配置されます。

グラフィカルなサンプルロケーションコントロールは、**Agilent LC** RC.Net ドライバーなどでサポートされています。

GLP

ChemStation は、国際的に認識されるデザインおよび開発標準で開発され、特に、標準化された環境でユーザーが操作する上で助けとなる多くの機能があります。 これらの機能は、メソッドが意図した仕様に適しているかどうかについて、完全なメソッド指定とバリデーションの分野に関するもので、そのシステムの操作をチェックし、データの追跡可能性、オリジナリティ、品質を確保することができます。

開発プロセス

各ソフトウェアパッケージに付属するバリデーション証明書には、ソフトウェア開発および開発サイクルの一部として実行されたテストステップについて記述されています。開発プロセスは、ISO 9001 品質規格に登録されています。

メソッドの仕様と使用

- グローバルなメソッド - すべての機器およびデータ解析は 1 箇所に保存されます。メソッドには、キャリブレーション範囲外で適用されていない定量結果をチェックするための個々の化合物範囲の指定が含まれています。
- メソッドの変更履歴ログ機能を使えば、検証されたメソッドのユーザーは、メソッドがいつどのように変更されたかを自動的に記録することができます。ユーザーは、オプションとして、変更履歴ログにコメント理由を追加できます。変更履歴ログは、メソッドの一部としてバイナリ形式で自動的に保存されます。不正な方法でアクセスされるのを防ぐため、ログは後述のユーザーアクセススキーマによって保護されています。変更履歴ログは表示し、印刷することができます。
- データ解析定量のセクションで説明しているように、クロマトグラフ/エレクトロフェログラムの数およびシステムパフォーマンスパラメータについて、各メソッドの化合物ごとに制限を割り当てることができます。これらのパラメータ範囲を超える結果は、自動化のセクションで説明しているように、自動化シーケンスの実行をコントロールするために使用されます。これらは、適切な分析レポートに示されます。
- システムパフォーマンスまたはシステムスータビリティレポート（前述のレポートのセクションを参照）では、分離の品質についての詳細な分析が提供されています。

異なるロールおよび権限を OpenLab Shared Services に設定可能です。事前に設定されている［**ChemStation管理者**］、［**ChemStationラボマネージャ**］、［**ChemStation分析者**］、［**ChemStationオペレータ**］は、ご利用環境の基本のロールになります。

メソッドの堅牢性

シーケンスサマリレポート（「クラシックおよびインテリジェントレポート」202 ページを参照）には、メソッドの堅牢性をテストする手段が用意されています。 クラシックレポートでは、ユーザーが選択した基準に対する拡張フォーマットレポートがチャートとしてレポートされ、実際的な操作の限界を決定するために使用することができます。インテリジェントレポートでは、上限、下限ライン付きのチャートを含む、自分自身のシーケンスサマリレポート用テンプレートを作成することができます。その後、これらの限界をメソッドに組み込んで、コントロールサンプルの分析中、メソッドが指定した範囲内で運転するようにすることができます。

システム操作

ChemStation ベリフィケーションキットは、標準ソフトウェアの一部で、テストを実行したときに生成された結果と前もって記録された既知の値とを比較することにより、ソフトウェアのデータ解析部が正しくインストールされて、動作しているかどうかを、自動的にチェックします。ベリフィケーションキットを使えば、ユーザーは、自分独自のデータファイルとメソッドを定義して、テストの基礎とすることができます。

データのトラッキング、オリジナリティおよび品質

ランタイムログブックには、システム全体のトランザクションログが記録されています。これにはまた、異常なイベント（エラーや分析中のパラメータ変更など）や、分析前後の機器の状態が記録されます。関連するログブックの摘要のコピーは、それぞれのデータファイルに保存されます。

圧力、流量、および温度など、それぞれの分析中に生じた実際の機器の状態は、構成された機器がこの機能をサポートしている場合には記録されます。データはそれからクロマトグラム/エレクトロフェログラムとともに表示して、特定の分析中の機器の実際の状態を示すことができます。またこれは、レポートにも含められます。

データファイルとともに保存されたメソッドは、分析時の実際のメソッドを記録するので、後ほど、レポートされたデータを完全に再構成することができます。メソッドは、すべての分析ステップが完了すると、保存されます。

デフォルトでは、すべてのレポートにタイムスタンプと追跡可能なページ番号（**ページ x / y** の番号付けスタイル）が付けられます。ユーザーは、サマリーレポートからシステム詳細レポートまで選択できます。

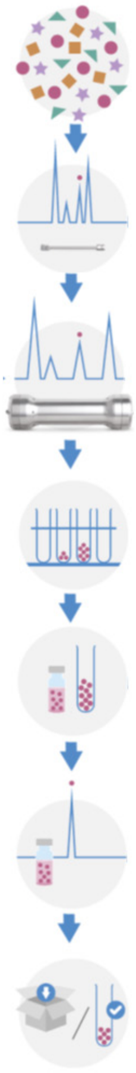
メソッドコンフィグレーションの一部として指定された GLP Save レジスタファイルは、サンプル情報、データ解析メソッド、クロマトグラフ/エレクトロフェログラムシグナル、機器の状態、積分と定量の結果、レポートデータお

よび分析ログブックを含む、オリジナルのすべてのデータを、1 つのチェックサムで保護されたバイナリファイルに保存します。これは編集不可能なバイナリフォーマットで、結果のオリジナリティを確保します。ファイルには、データが再解析されたかどうかを示すリビジョニングスキームが含まれます。

コントロールサンプルタイプは、シーケンステーブルで定義することができ、機器を無人で動作させるときに、機器のパフォーマンスを、品質コントロールサンプルの結果を基にして自動的にチェックするために使用できます。結果が、ユーザーが指定した受け入れ可能な範囲内に入らなかった場合には、機器の自動実行は停止されます。

分取液体クロマトグラフィ

ChemStation では、精製および分取ワークフローの自動化をサポートしています。一般的なワークフローには、フラクションプーリングを用いたフラクションコレクタの使用が含まれます。



粗製品およびサンプル情報

ターゲット確認および分析スカウト

ピュリフィケーション

収集されたフラクションの純度決定

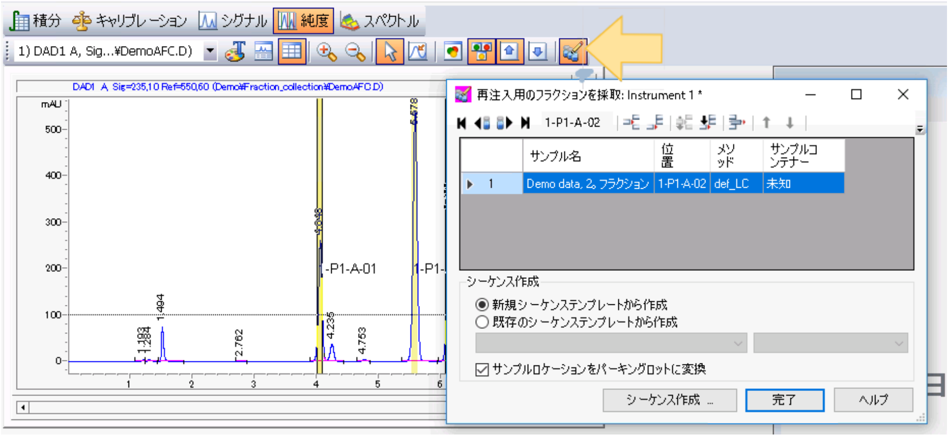
フラクションプーリングおよび再フォーマット

プールしたフラクションの純度決定

アーカイブまたはスクリーニング

採取されたフラクションの純度決定

採取されたフラクションの純度をチェックするために、フラクションをサンプルとして、再注入用にシーケンスに追加できます。データ解析の［**純度**］ツールバーから［**再注入用のフラクションを採取**］ダイアログを開き、再解析用のフラクションリストを作成します。



ダイアログテーブルで、シーケンスを作成するためのフラクションのリストを設定し、メソッドとサンプルロケーションを指定できます。

フラクションリスト	フラクションは、クロマトグラム、フラクションテーブル、またはサンプルコンテナグラフィックから選択して追加できます。
メソッド	ドロップダウンリストに、コンピューターに保存されたすべてのメソッドが表示されます。メソッドが再注入に使用する機器とは別の機器にある場合、メソッド名をフィールドに直接入力するか、ブランクにして後で入力できます。

シーケンス	［**新規シーケンステンプレートから作成**］オプションを使用すると、新しいシーケンスを作成できます。［**既存のシーケンステンプレートから作成**］オプションを使用すると、既存のシーケンスにフラクションを追加することもできます。
ロケーション	サンプルコンテナをフラクションの再注入用の別の機器へ転送する場合、［**サンプルロケーションをパーキングロットに変換**］チェックボックスをオンにします。 これによりテーブル内のロケーションが、別のサンプラで使用できるニュートラルなパーキングロットロケーションに変換されます。

設定に応じて、［**サンプルエントリ**］タブの［**サンプルリスト**］でシーケンスをすぐに実行または編集できます。詳細については、「グラフィカルなサンプルエントリ」87 ページを参照してください。

フラクションプーリング

プーリングとは、複数のフラクションを同じコレクションベッセルに収集することです。ChemStation ではさまざまなプーリングオプションをサポートしています。

- 同じサンプル位置から複数回注入し、同じベッセルに収集する。

  ［**サンプル情報**］ダイアログで、シングルサンプルに対して必要なランの数を選択し、最初のランに対する固定フラクション開始ロケーションを選択します。

- 異なるサンプル位置から注入し、同じベッセルに収集する。

プーリングをコンフィグレーションするには、最初のランおよび、必要に応じて以降のランに対してフラクションコレクタ開始ロケーションを設定します。

フラクションコレクタ ディレイキャリブレーション

化合物が検出器の検出位置とフラクションコレクタのコレクション位置間を移動するのに要する時間をディレイタイムと呼びます。ディレイタイムは、ディレイタイムキャリブレーションを実行することで決定できます。

ディレイキャリブレーションウィザードがこのフラクションコレクタ ディレイキャリブレーションの実行および評価プロセスをガイドします。ウィザード

には［**メソッド & ランコントロール**］ビューの［**機器**］メニューからアクセスできます。

最初に、［**ディレイキャリブレーションランの実行**］で、ディレイキャリブレーションを設定および実行します。次に［**ディレイキャリブレーションデータの評価**］で、ディレイキャリブレーションの結果を評価します。ディレイキャリブレーションは［**ディレイキャリブレーションサマリー**］レポートに要約されます。

データを評価することで、ピーク検出器とフラクションコレクタモジュール間のディレイを算定するのに役立ちます。ディレイタイムは、キャリブレーションランデータファイルの検出器のシグナルとフラクションコレクタのディレイセンサーシグナルに基づいて決定されます。ディレイボリュームは、フロー情報に基づいて計算されます。

詳細については、ChemStation オンラインヘルプを参照してください。

ChemStation データ構造

データファイルとメソッドの関連性を強化するために、ChemStation B.02.01 で結果セットを導入しました（結果セットを以前はシーケンスコンテナと呼んでいました）。

- データ解析に必要なすべての情報と共にデータが保存されます。それらの情報とは、すべてのメソッドのコピー、シーケンスファイルのコピー、インテリジェントレポートの場合はシーケンスに使用したレポートテンプレートのコピーです。これらのシーケンスメソッドはシーケンスごとに変更でき、元のマスターメソッドには影響を及ぼしません。このような理由から、結果セットのコンセプトは、結果作成のために一連のデータファイルとメソッドが 1 つのシーケンスとして構成されることを強化しています。
- シーケンスデータは上書きされません。シーケンスの取り込み毎に、結果のデータファイルを一意の名前で独自の結果セットに保存します。
- データ再計算と再解析は、［**データ解析**］ビューのナビゲーションテーブルから使用できます。
- 中央データ記憶領域システム（**OpenLab ECM 3.x**、**OpenLab ECM XT** または **OpenLab Server**）を使用する場合、完全な結果セット（シーケンス/メソッド/データファイル/レポートテンプレート）が中央リポジトリに 1 つのエンティティとして転送されます。

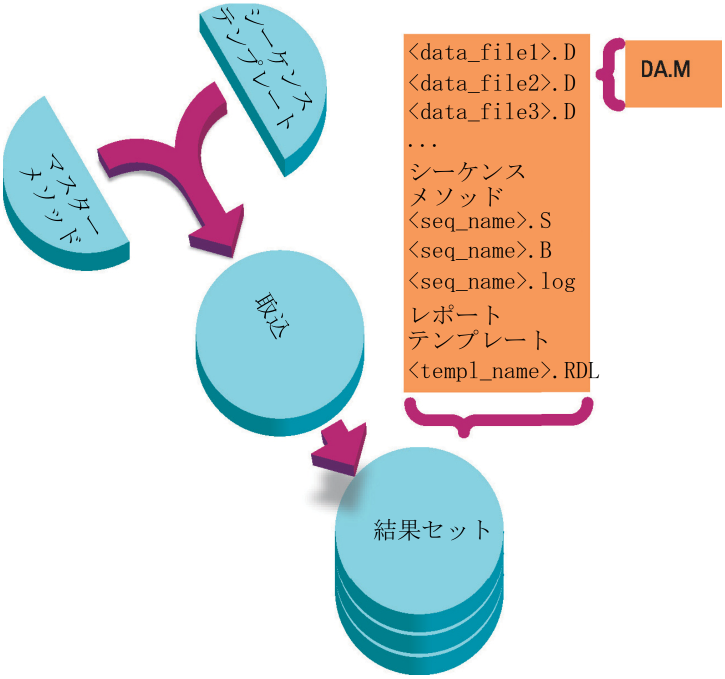


図 2　　シーケンス測定

ChemStation ¥x¥Methods フォルダーのメソッドは、[1]マスターメソッドとなります。これらのメソッドは取り込みとデータ解析中は変更されません。

同様に、パブリックのドキュメントフォルダー（ChemStation¥1¥Sequence）にあるシーケンスは、複数回シーケンスを再実行（再解析ではない）するのに使用できるシーケンステンプレートの役割を果たします。

パブリックのドキュメントフォルダー（ChemStation¥RepStyle）にあるレポートテンプレートは、独自のレポートテンプレートを作成する時の雛形となります。

データ保存パターンは、シングルランデータが取り込まれるか、シーケンスデータが取り込まれるかによって変化します。

1 シーケンスが実行される際、一意の名前を持つ新しいフォルダー（**結果セット**）が指定されたサブディレクトリに自動的に作成されます。シングル

[1] x は、機器番号です。デフォルトでは、フォルダーはパブリックのドキュメントの下になりますが、インストール中に設定することができます。

サンプルを実行すると、データファイル（*.d）は指定されたサブディレクトリに書き込まれます。

2 シーケンスデータでは、実行したシーケンステンプレート（*.s）と関連するすべてのメソッド（*.m）が結果セットにコピーされます。メソッドのコピーは、元のマスターメソッドと区別するために**シーケンスメソッド**と呼ばれます。インテリジェントレポートを使用している場合は、関連するすべてのレポートテンプレート（*.rdl）も結果セットにコピーされます。

すべてのシーケンス関連タスク（取り込みとデータ解析など）は、シーケンスとメソッドのコピーに対して実行されます。そのため、シーケンステンプレートとマスターメソッドを次のシーケンスで実行する場合は、元のままであり、これらが変更されることはありません。

シーケンステーブルへの行の追加など、シーケンス実行中のすべての変更は、結果セット内のコピーされたシーケンスファイルに対して行われます。元のシーケンステンプレートは変更されません。

同様に、メソッドの変更がある場合（たとえば、キャリブレーション分析でキャリブレーションテーブルが更新される場合）は、シーケンス中のメソッドには反映されますが、マスターメソッドは変更されません。

シーケンス実行中、作成されるデータファイル（*.d）は、それに対応するバッチファイル（*.b）とシーケンスログファイル（*.log）とともに、すべてシーケンスデータフォルダーに保存されます。

3 各データファイルには、分析で使用されるメソッドのコピーが 1 つ含まれます。以下のメソッド情報が保存されます。

- 各データファイルについて元のメソッドのパラメータを表示させるには、ナビゲーションテーブルで該当する行を右クリックして、［**ACQ メソッド表示**］を選択します。
- ChemStation は、各分析後に完全なメソッド（RUN.M）のコピーを保存するように提案いたします（「データファイルにメソッドのコピーを保存」 74 ページ を参照）。
- データ解析パラメータ（DA.M）のコピーは常に保存されます（「データファイルと一緒にメソッドのコピーを DA.M という名前で保存（ChemStation デフォルト）」 74 ページ を参照）。

リモート機器コントロール

分散システムコンフィグレーションでは、OpenLab Shared Services サーバーに接続されている任意の OpenLab Control Panel から ChemStation 機器を設定、起動することができます。

機器の起動

機器のコンフィグレーションや起動をするには、OpenLab Control Panel で［**機器コンフィグレーション**］、［**起動**］、および［**オフライン起動**］ボタンを使用します。ワークステーションまたはネットワークワークステーションのコンフィグレーションと同様に、［機器コンフィグレーション］ダイアログがローカル PC で実行します。ただし、分散システムのコンフィグレーションでは、ChemStation アプリケーション自体は機器コントローラ（AIC）マシンで実行されます。アプリケーションには、AIC マシンへのリモートデスクトップ接続を経由してアクセスします。

リモート ChemStation ウィンドウは、OpenLab Control Panel から独立して表示されます。機器を起動し、コントロールパネルを閉じても、機器を続けて操作することができます。また、異なるログオン認証を使用すると、同じクライアントで OpenLab Control Panel の複数のインスタンスを実行できます。この異なる認証は、OpenLab Control Panel から起動するそれぞれの機器に反映されます。

機器名と AIC 名の両方を含む、ウィンドウのタイトルによってリモート AIC マシンで実行中の機器を識別できます。

セッション切断

AIC で実行中の機器は、リモートデスクトップ接続で開いたクライアントとは無関係に動作します。たとえばネットワークの不具合のためにクライアントが切断されても、機器で実行中のシーケンスはその影響を受けることなく続行されます。ネットワークが回復した後、［**起動**］または［**オフライン起動**］ボタンをクリックすれば、機器セッションを再び制御できるようになります。

意図的に切断するには、［**閉じる**］ボタンをクリックするか、［**ファイル**］>［**終了**］を選択します。［**閉じる**］ダイアログに［**切断**］ボタンが表示されます。切断することで、機器を実行したままリモートデスクトップ接続を無効にできます。

注記 シーケンス実行中でもリモートデスクトップ接続を切断できます。

機器セッションに再接続するには、OpenLab Control Panel で［**起動**］または［**オフライン起動**］ボタンをクリックします。再接続は、OpenLab Shared Services サーバーに接続される任意の OpenLab Control Panel から行うことができます。

［**起動**］/［**オンライン起動**］をクリックしてオンライン機器/オフライン機器に再接続すると、オンライン機器用とオフライン機器用の 2 つの機器ウィンドウが表示されます。

セッションの引き継ぎ

別の PC の **OpenLab Control Panel**で［**起動**］（オンラインでの起動）または［**オフライン起動**］ボタンをクリックすると、既存のセッションを引き継ぐことができます。

- PC 1 の OpenLab Control Panel から機器を起動し、同じユーザー認証で PC 2 の OpenLab Control Panel にログオンしてその機器を起動した場合、既存のセッションを引き継ぎ、PC 1 で開始した内容を PC 2 で継続することができます。

注記 新ユーザーと前のユーザーが同じユーザー認証の場合、警告は表示されません。

- 他の PC の OpenLab Control Panel から他のユーザーが機器を起動していた場合、必要な権限を新たなユーザーが持っていれば、新しいユーザーは元のユーザーのセッションを引き継ぐことができます。新しいユーザーは、［**ChemStation リモートセッションの引き継ぎ**］権限を持っている必要があります。また、元のユーザーが ChemStation をロックしていた場合、新しいユーザーは［**セッションロックを解除**］権限も持っていなければなりません。ユーザー管理、権限、またはセッションロック設定の詳細につい

では、『OpenLab ChemStation コンフィグレーションガイド』（CDS_CS_Configure.pdf）を参照してください。

機器/セッションの現在のロックステータスが、［**機器**］パネルの［**使用者**］ユーザー名の左、および［**機器**］テーブルの［**使用者**］列にアイコン表示されます。

	機器/セッションは他のユーザーによって使用中です。引き継がないでください。
	機器/セッションはプライベートロックされています。引き継がないでください。
	機器/セッションは非プライベートロックされているか切断されています。他のユーザーが引き継ぎできます。

新しいユーザーがセッションを引き継ぐ場合、元のユーザーには、新しいユーザーがセッションを引き継いだことを示すメッセージが通知されます。

レポートには、ログオンしたユーザーが**取込オペレータ**に、シングルサンプルまたはシーケンスをランキューに追加したユーザーが**サンプルオペレータ**に表示されます。

オンライン機器とオフライン機器は同じセッションに含まれるため、常に一緒に転送されます。オンライン機器とオフライン機器の両方がすでにセッションで起動している場合、［**起動**］と［**オフライン起動**］のどちらのボタンをクリックしても、両方の機器コントロール権が移行されます。セッションにオンライン機器のみ起動している状態で［**オフライン起動**］をクリックした場合（またはその逆の場合）、オンライン機器とオフライン機器の 2 つの機器ウィンドウが表示されます。

強制終了

応答せず使用できない機器をシャットダウンするには、OpenLab Control Panel でその機器を右クリックし、ChemStation クライアントのコントロールパネルで［**強制終了**］を選択します。

この機能を使用するには、**機器管理者**権限を持っている必要があります。

強制終了しても機器ステータスはすぐには更新されません。ステータスが自動的にリセットされるまで、一時的に矛盾したステータスが表示されます。新しい ChemStation セッションを開始する前に 2 分以上待つことをお勧めします。

2 メソッドの使用

メソッドの詳細　50
マスターメソッド　50
シーケンスメソッド　50
データファイルメソッド　51
メソッドの各部分　52
メソッドの作成　54
メソッドの編集　55
メソッドの編集可能な部分　56
メソッドディレクトリ構造　57
オンラインモードでのメソッドの編集　59
オフラインモードでのメソッドの編集　59
メソッド管理　60
ChemStation エクスプローラのメソッドツリー　60
取込メソッドの表示　61
マスターメソッド内の DA パラメータの更新　64
メソッドの更新　65
メソッドを新しいマスターメソッドとして保存　66
メソッドの実行時に起こる事柄　68
メソッド操作のまとめ　69
プレランコマンドまたはマクロ(ランタイムチェックリスト)　70
データ取込（ランタイムチェックリスト）　71
データ解析（ランタイムチェックリスト）　71
カスタムフィールドの値の更新　72
カスタムデータ解析マクロ　73
GLP データ保存　73
ポストランコマンドまたはマクロ　74
データファイルにメソッドのコピーを保存　74
データファイルと一緒にメソッドのコピーを DA.M という名前で保存（ChemStation デフォルト）　74

メソッドは、OpenLab ChemStation の機能の重要な部分です。OpenLab ChemStation は、メソッド開発を柔軟に行うことができるクロマトデータシステムです。本章では、メソッドの概念について詳しく説明します。

メソッドの詳細

メソッドには、取り込みやデータ解析のためのすべてのパラメータと、特定のサンプルのプレランおよびポストランタスクからなります (必要な場合)。

利用可能なメソッド (*.m) ファイルは、ChemStation エクスプローラに表示されます。素早く簡単にナビゲーションできるように、**[プレファレンス]**ダイアログボックスの**[パス]**タブを用いて、追加のメソッドの場所を ChemStation エクスプローラの選択ツリーに追加できます。

メソッドにはいくつかタイプがあります。保存ロケーションによりメソッドは、マスターメソッドとして、シーケンスの結果セットのリファレンスとしてまたはデータ取り込みで使用した実際の設定記録として、のいずれかです。

マスターメソッド

コンピュータのディスクに保存されたメソッドがあります。 メソッドは、最大 40 文字の英数字の名前で拡張子 .M が付いています。マスターメソッド ディレクトリは［プレファレンス］で設定します（「パスの選択」 76 ページを参照）。

マスターメソッドはメソッドのサブディレクトリに保存され、ChemStation エクスプローラのメソッドのノードで使用できますが、結果セットとは直接関連はありません。

シーケンスメソッド

シーケンスを実行する場合は、シーケンスで使用されるマスターメソッドのすべてのコピーは、シーケンスデータファイルとともに、結果セットに保存されます。これらのメソッドはシーケンスに直接リンクされ、シーケンスが再解析される場合にも使用されます。デフォルトではこれらのメソッドへの変更は、マスターメソッドに影響しません。変更が有効となるのは、シーケンス実行の開始または一時停止後の次の分析からです。また変更は、シーケンスを再解析する際に、あらゆるレポートの作成において、データファイルメソッド（DA.M）にも反映されます。

データファイルメソッド

データ解析パラメータのコピーは、データファイルと共にデータファイルメソッド DA.M として保存されます。 データファイルメソッド DA.M は、各結果生成（データ取り込み、再計算、レポート作成）が行われると自動的に更新されます。 最後に行った結果モードの結果を再計算する時に、ChemStation によっても読み込まれます（「前回の結果モード」 163 ページを参照）。

ランタイムチェックリストの **[データ付きメソッドの保存]** オプションを使用すると、メソッドがデータファイルに run.m として保存されます。

ChemStation エクスプローラでは、メソッド項目をダブルクリックしてマスターメソッドまたはシーケンスメソッドを簡単に読み込むことができます。

メソッドの各部分

メソッドは、40 字までの英数字によって識別されます。 ファイル名には,メソッドであることを示す .M という拡張子が付けられます。 メソッドは、メソッドのコンポーネントに関連したそれぞれのファイルを含むディレクトリとして保存されます。

メソッドは、次の 4 つのコンポーネントから構成されます。

- メソッド情報
- 機器コントロール
- データ解析
- ランタイムチェックリスト

メソッド情報

このセクションでは、メソッドについての説明となる情報を定義します。

機器コントロール

機器またはそのコンポーネントをコントロールするパラメータを定義します。LC 機器の場合には、移動相組成、流量、注入量、検出器の波長などのパラメータが、ポンプ、インジェクタ、検出器をコントロールします。GC 機器の場合には、注入口温度、注入口圧力、パックドカラムの流量設定などのパラメータが、機器をコントロールします。

データ解析

データ処理をコントロールするパラメータを定義します。

- **シグナル詳細**

  データ解析で使用するシグナルとそのプロパティを定義します。

- **積分イベント**

  クロマトグラム/エレクトロフェログラムの特定のリテンション/マイグレーションタイムで生じるタイムイベントを定義します。 このタイムイベントは、シグナルを積分方法の変更に使用します。

- **ピーク認識**

  クロマトグラム/エレクトロフェログラムでのピークの識別に関連したデータ処理パラメータを定義します。

- **ピーク定量**

  各ピークに対応するサンプル成分のアマウントまたは濃度を決める定量計算に影響する、データ処理パラメータを定義します。

- **キャリブレーションおよびリキャリブレーション**

  キャリブレーションとその頻度に影響するデータ処理パラメータを定義します。

- **カスタムフィールド**

  メソッドに使用できるカスタムフィールドに関連するサンプルまたは化合物のプロパティを定義します。 カスタムフィールドにより、サンプル中のサンプルまたは化合物にカスタム情報を追加できます。

- **レポート**

  クラシックレポート: 分析後に印刷されるレポートの形式を定義します。

  インテリジェントレポート: 分析後のレポート生成で使用するレポートテンプレートを指定します。

ラン タイム チェックリスト

メソッドの実行時に、メソッドの実行する部分を定義します。

ランタイムチェックリストは、次の目的で使用できます。

- データ取込、保存、データ解析、レポートを生成する
- メソッドの一部だけを実行する
- データ取込、保存をするが解析は行わない
- 既存のデータファイルを再解析する
- データ解析、プレランおよびポストラン処理のために自身で作成したコマンドを使用する
- 解析の結果を、GLP の目的でレジスタに保存する
- データと共に使用するメソッドを保存する

カスタムコマンドとその設定方法の詳細については、「ChemStation のカスタムコマンドまたはマクロの使用」 29 ページを参照してください。

メソッドの作成

新しいメソッドの作成とは、マスターメソッドまたはシーケンスメソッドの変更、もしくはその変更の保存を意味します。既存メソッドを上書き、またはメソッドを新しいマスターメソッドとして保存することができます。メソッドを変更しても変更を保存しない限り、ディスク上のバージョンは変化しないことに注意してください。

メソッドの作成方法についてはいくつかの選択肢があります。分析の一部またはすべてを実行するメソッドを作成できます。たとえば、データ取り込みのみ実行するメソッドを作成できます。データの分析とレポートの作成の準備ができている場合は、メソッドを修正してデータ処理タスクを実行できます。

注記

デフォルトのメソッド（DEF_LC.M、DEF_CE.M または DEF_GC.M）は削除しないでください。これらのメソッドは、メソッドを新規作成するためのテンプレートとして使用されます。

メソッドの編集

既存のメソッドは、[メソッド] メニューの [メソッド全体の編集] 項目を使用して編集できます。 すべてのメソッドダイアログボックスを設定するようにガイドされ、最後にメソッドを保存できます。 このプロセスは次のとおりです。

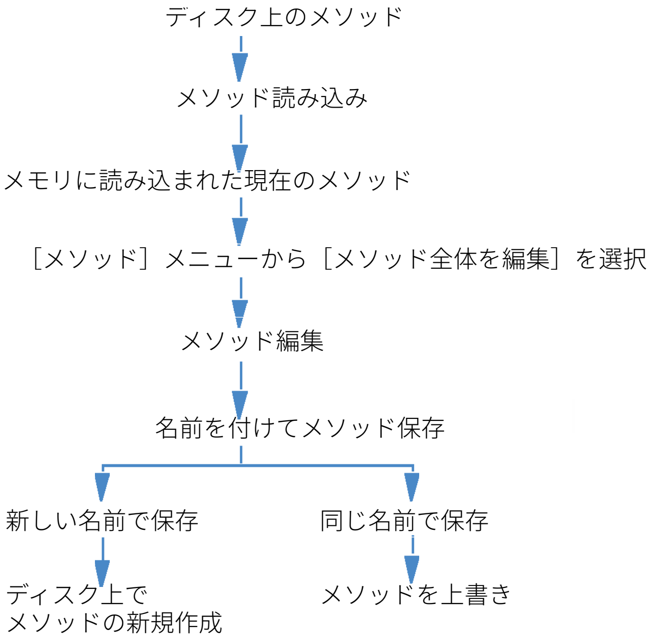


図 3　　メソッドの編集

メソッドの編集可能な部分

各メソッドは、個別に編集できる 4 つのコンポーネントからなっています。

以下のサブセクションの一部は特定のダイアログボックスに言及しており、他のものは一般的な説明です。

- **メソッド情報** は次のものから構成されています:
  - メソッドについてのテキストによる説明
- **機器コントロール**はコンフィグレーションに依存しており、次のものから構成されています:
  - オーブンパラメータ
  - インジェクタパラメータ
  - 検出器パラメータ
- **データ分析**は、以下の項目で構成されます:
  - シグナル詳細
  - 積分パラメータ
  - 定量パラメータ
  - キャリブレーションパラメータ
  - カスタムフィールド セットアップパラメータ
  - レポートパラメータ
- **ランタイムチェックリスト**は次のものから構成されています:
  - メソッドのうち、実行される部分

メソッドディレクトリ構造

フォルダ

メソッドは、メソッドディレクトリ（*.M）に保存されたファイルのグループからなります。デフォルトでは、マスターメソッドは機器のメソッドディレクトリに保存されます。このディレクトリは、パブリックのドキュメントフォルダー（C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥x¥METHODS）などです。このとき、x は機器番号です。

機器のパスは、インストール時に定義できます。マスターメソッドのパスの追加は、プレファレンス設定から追加できます。

ChemStation のメニュー［**ファイル**］>［**Windows エクスプローラーを開く ...**］を使用して、機器のデータディレクトリ（C:¥ユーザー¥パブリック¥Documents¥ChemStation¥1 など）を開きます。または、［スタート］メニューの［**機器データ**］へのショートカットを使用します。

シーケンスメソッドは結果セットに保存され、データファイルメソッドはデータファイルのサブディレクトリ (DA.M) に保存されます。

ファイル

.MTH という拡張子を持つメソッドファイルは、パラメータセットを含んでおり、UNICODE 形式です。ファイル INFO.MTH は、メソッドコントロールパラメータを含んでいます。

機器パラメータを含むメソッドファイルには、関連する分析モジュールの名前が付いています。たとえば、次のようになっています。

表 5　メソッドファイルの例

HPCE1.MTH	キャピラリ電気泳動用の取り込みメソッド。
ADC1.MTH	Agilent 35900 の取り込みメソッド。同一の機器が 2 台構成されている場合には、メソッドファイルは ADC1.MTH、ADC2.MTH となる。
DAMETHOD.REG	データ解析用ファイル。
LALS1.REG	クラシックモジュール LC システムが設定される場合の、Agilent 1100/1200 シリーズ オートサンプラのパラメータ。他の Agilent 1100/1200 シリーズモジュール用のメソッドファイルは、Lxxx1.reg という命名規則に従う。ここで xxx はモジュールの略号。
AgilentSamplerDriver1.RapidControl.xxx.xml	モジュール LC システムが設定される場合、Agilent 1100/1200 シリーズ オートサンプラのパラメータ。Several .xml ファイルはパラメータのさまざまな部分に存在（ファイル名の xxx で示されます）。他のモジュールで同様の .xml ファイルが利用可能。

オンラインモードでのメソッドの編集

オンライン ChemStation がアイドルであるときに、シーケンスメソッドの部分をすべて編集できます。 シーケンスが現時点で実行中の場合は、すべての取込パラメータ、およびレポート条件下の設定など、データ解析パラメータの一部を編集できます。

変更が保存され、現在の分析および同一メソッドを使用するその後のシーケンスラインに直ちに反映されます。 これは、シーケンスの一時停止またはシーケンスの選択分析の間にもメソッドを変更することが可能であることを意味しています。

オフラインモードでのメソッドの編集

同一メソッドがオンライン ChemStation の分析に使用されている間に、オフライン ChemStation のシーケンスメソッドを編集することができます。このシナリオでは、オフラインセッションでデータ解析部分を編集可能です。オフラインセッションでの変更を保存すると、変更された DA 設定がオンラインセッションの現在のシーケンス分析の次のデータ解析に使用されます。

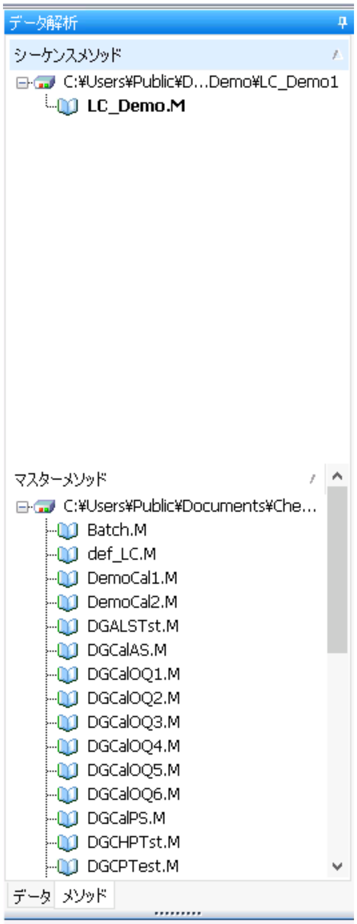
キャリブレーションに関するメソッド更新は考慮されません。また、履歴エントリはマージされません。すなわち、メソッドがオンラインセッションで実行されている場合にはオンライン、オフラインの両方のセッションで変更でき、メソッドの監査証跡にはオフライン ChemStation 内で行った変更のみが含まれます。

注記 同じマスターメソッドを同じ機器のオンライン ChemStation とオフライン ChemStation に読み込んだ場合、オンライン ChemStation 上のメソッドのみを編集できます。

メソッド管理

ChemStation エクスプローラのメソッドツリー

ChemStation エクスプローラのメソッドツリーは、2 つの部分に分かれています。上部には、現在読み込み中の結果セットに含まれているメソッドが表示されます。下部には、［プレファレンス］ダイアログで設定したマスターメソッドディレクトリのメソッドが表示されます。



読み込み中のメソッドの名前は常に太字で表示されます。

マスターメソッドをシーケンスメソッドへとドラッグ&ドロップすると、簡単にコピーができます。メソッド全体（DA パラメータおよび ACQ パラメータ）が、結果セットへとコピーされます。

取込メソッドの表示

[メソッド＆ランコントロール]ビューにある**[機器]** > **[取込メソッド表示]**から、取込メソッド表示にアクセスすることができます。取込メソッド表示は、オンラインとオフラインの ChemStation セッションの両方に使用できます。

取込メソッド表示を使用することで、現在の機器コンフィグレーションからは独立して、メソッドの中に保存された取込パラメータを確認することができます。ダイアログには、メソッドが ChemStation に保存されたときの機器コンフィグレーションが示されます。このビューアーにデータ解析パラメータは表示されません。取込メソッド表示では、読み込まれた ChemStation メソッドに変更を加えることはできません。

取込メソッド表示には、メソッド設定を読み取り専用モードで表示することができます。このビューアーには、メソッドを編集および保存するための機能はありません。

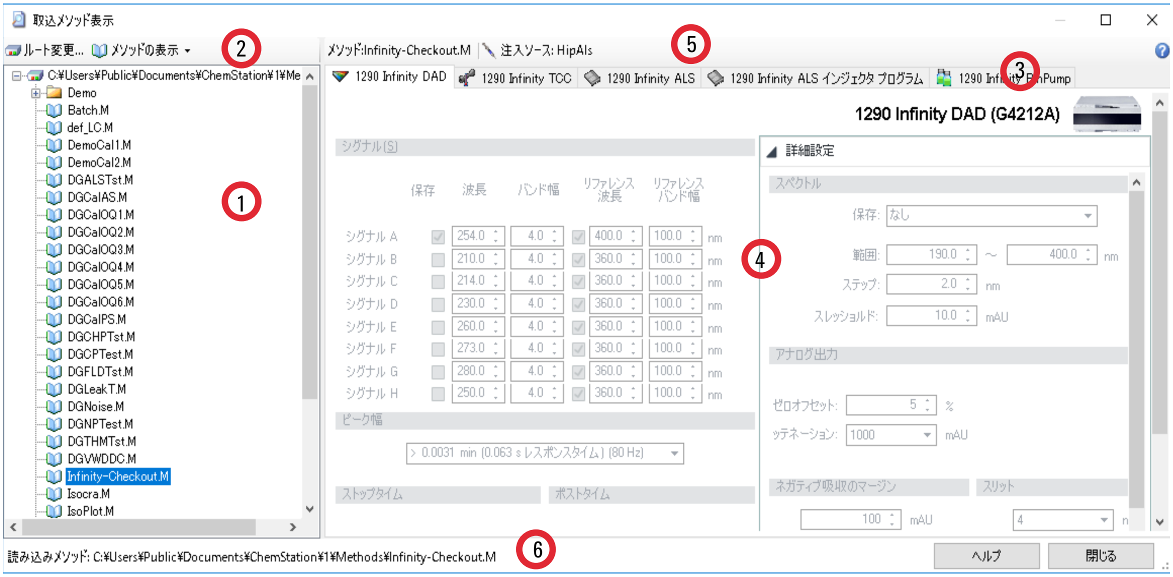


図 4 [取込メソッドビューアー] ダイアログ

1	メソッドブラウザ
2	ツールバー
3	モジュールタブ（使用される機器コンフィグレーションの中で見つかるすべてのモジュール用のタブコントロールでのメソッド設定、前処理設定を示します。）
4	メソッドビューアーエリア
5	メソッド名、注入ソース情報
6	ステータスバー

メソッドブラウザ（1）には、優先するメソッドパスがデフォルト表示されます。ツールバーで**[ルート変更...]**をクリックして、異なるディレクトリを選択します。

ツールバー（2）では、以下の **[メソッドの表示]**オプションが提供されます。

- **オリジナルコンフィグレーションで表示...**：メソッドに保存するように、設定を機器に読み込みます。
- **機器コンフィグレーションで表示...**：保存されたメソッドを現在の機器コンフィグレーションに適用します。このオプションはオンライン機器でのみ使用することができます。保存されたメソッドは、現在の機器設定と合致していない可能性があります。可能な場合は、設定が自動的に適応されます。または、**[メソッド変換情報]**ダイアログの中で詳細を確認することができます。このダイアログには、変換されていないメソッドと変換されたメソッドの間に存在する不一致と差異の一覧が示されます。

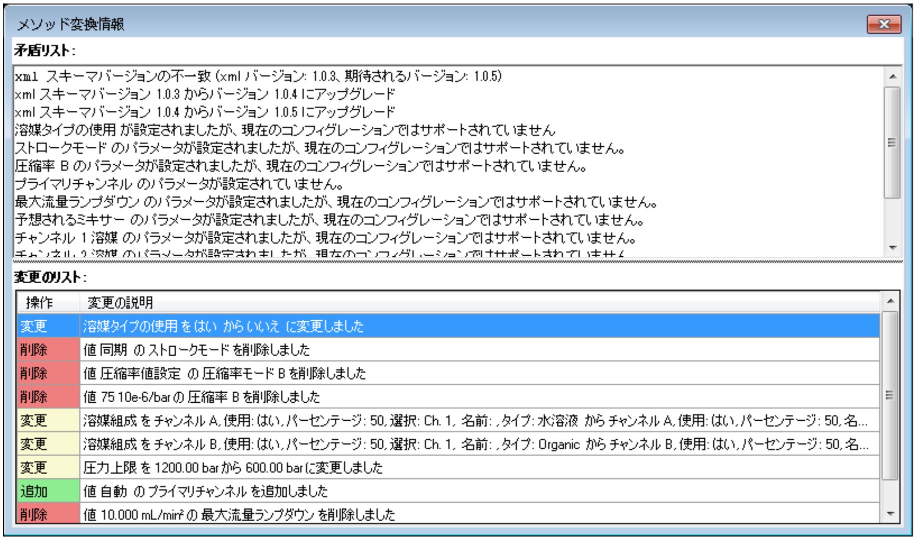


図 5　　［メソッド変換情報］ダイアログ

マスターメソッド内の DA パラメータの更新

［**マスターメソッドを更新**］オプションは、［**メソッド**］メニューから、および ChemStation エクスプローラのシーケンスメソッドのコンテキストメニューから利用可能です。この機能が使用できるかどうか、およびこの機能の正確な動作は、現在のモードによって決まります。あらゆる場合において、この機能はターゲットメソッドのデータ解析パラメータを更新します。

注記 この機能によって、ターゲットメソッドのデータ解析パラメータ**のみ**が**すべて**上書きされることに注意してください。

再解析または再計算モードにおけるマスターメソッドの更新

このモードでは、結果セットのシーケンスメソッド用にのみ**[マスターメソッドの更新]** コマンドが有効になります。 シーケンス作成時に参照したマスターメソッドを更新することができます。 マスターメソッドが、そのままマスターメソッドディレクトリ内に存在していることが前提条件となります（マスターメソッドの名前がシーケンスメソッドのものと同一でなくてはなりません）。

またシーケンスパラメータを設定して、各シーケンスの取り込み、再解析中にこの機能を自動的に実行することが可能です。 詳細については、「メソッド管理」 60 ページ を参照してください。

前回の結果モードにおける任意のマスターメソッドの更新

このモードでは、シーケンスとシングルサンプルの両方に **[任意のマスターメソッドを更新]** コマンドが有効になります。 現在のデータ解析パラメータを、データ解析用に前回使用されたマスターモードに転送することができます。 このメソッドは、ナビゲーションテーブルの **[解析メソッド]** 列に表示されます。

コマンドは、以下の条件下で使用することができます。

- メソッドファイルが、与えられた位置に存在しています（すなわち、名前と全体のパスが合致しなければなりません）。
- シーケンスについて： シーケンスの実行が、（シーケンスメソッドではなく）マスターメソッドを用いて手作業にて解析されています。

前回の結果モードにおける任意のマスターメソッドの更新

前回の結果モードでは、現在のシーケンスまたはシングルランに関連するマスターモードに依存せずに、データ解析パラメータをマスターメソッドに転送す

ることができます。 マスターメソッドを更新するには、**メニュー** > **任意のマスターメソッドを更新** を選択し、**[更新用のマスターメソッドの選択]** ダイアログでメソッドを選択します。 すると、データ解析パラメータが選択されたマスターメソッドにコピーされます。

メソッドの更新

[メソッドの更新] ダイアログ（下図を参照）では、マスターメソッドディレクトリから結果セットへとメソッドをコピーすること、またはその逆ができます。 いずれの場合においても、メソッド全体がコピーされます（DA パラメータおよび ACQ パラメータ）。

このダイアログは、**[メソッド]** > **[メソッドの更新]** メニューから、または ChemStation エクスプローラ内のシーケンスメソッドのコンテキストメニューから開くことが可能です。 この機能は、再計算と再解析モードで結果セットに使用することができます。

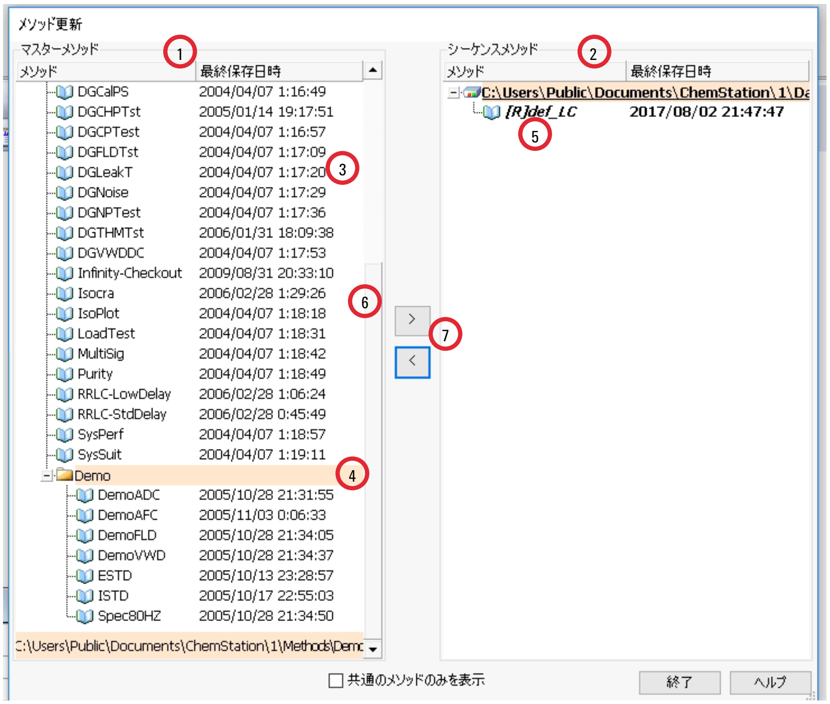


図 6　　[メソッドの更新]ダイアログ

1 左側には、すべてのマスターメソッドディレクトリ（プレファレンスで設定）のメソッドが表示されます。

2 右側には、現在読み込まれている結果セットのメソッドが表示されます。

3 それぞれのメソッドには、前回保存された日付が表示されます。 日付のツール チップにはメソッドの最終履歴が表示されます。

4 メソッドはマスターメソッドディレクトリのサブフォルダにも保存できます。

5 読み取り専用のメソッドには、[R] のプレフィックスが付きます。 現在ロードされているシーケンスメソッドはイタリック体で表示されます。

6 シーケンス結果セットとマスターメソッドに共通なメソッドは太字で表示されます。 メソッドは名前だけでマッチングされます。メソッド名が 1 つ以上のプールに存在している場合、各インスタンスは共通とみなされます。

7 ドラッグアンドドロップを使用するか、**[<]** および **[>]** ボタンを使用して、マスターメソッドとシーケンス結果の間でメソッドをコピーすることができます。 読み取り専用のマークが付いているメソッドを上書きすることはできません。

メソッドを新しいマスターメソッドとして保存

DA.M からデータ解析パラメータを新しいマスターメソッドとして保存することができます。 しかし、DA.M には取込パラメータが含まれていません。 新しいマスターメソッドのために有効な取込パラメータのセットを提供するには、もう一つのメソッドを取込パラメータのためのテンプレートとして選択しなければなりません（以下の図を参照）。 新しいマスターメソッドには、DA.M からの現在のデータ解析パラメータ、および選択されたテンプレートメソッドからの取込パラメータが含まれています テンプレートメソッドが存在するフォルダの中に新規メソッドが作成されます。

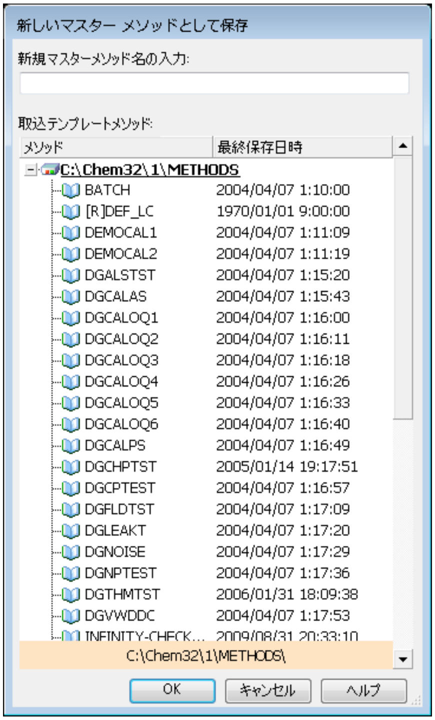


図 7　［新しいマスターメソッドとして保存］ダイアログ

メソッドの実行時に起こる事柄

［ラン タイム チェックリスト］ダイアログボックスでは、分析の開始時にメソッドの実行する部分を指定します。

ランタイムチェックリストには、次のような項目があります。

- プレラン コマンド/マクロ
- データ取込
- 標準データ解析
- セカンド シグナルの分析メソッド（GCのみ）
- カスタムフィールドの値の更新
- カスタムデータ解析マクロ
- GPL データの保存
- ポストラン コマンド/マクロ
- データ付きメソッドの保存s（RUN.M）

メソッドを実行すると、［ラン タイム チェックリスト］ダイアロググボックスで定義されたメソッドの、指定された部分が実行されます。メニューの**［メソッド］** > **［ラン タイム チェックリスト...］**から、ラン タイム チェックリストの指定部分を表示または編集します。

コマンドとその設定方法の詳細については、「ChemStation のカスタムコマンドまたはマクロの使用」 29 ページを参照してください。

メソッド操作のまとめ

次のリストは、ランタイムチェックリストのすべての部分を選択した場合の、メソッド操作の流れを示しています。

1 **プレランコマンドマクロ**

分析開始前のタスクを実行します。

2 **データ取込**

インジェクタプログラムを実行します。

サンプルを注入します。

生データを取り込みます。

データを保存します。

取込パラメータを ACQ.TXT ファイルに保存します。

3 必要に応じて、ランタイムチェックリストによる指示に従って以下を行います。**メソッドのコピーをデータと一緒に** RUN.M として保存します。

4 **データ解析（データ処理）**

データファイルを読み込みます。

データファイルを積分します。

ピークを同定し、定量します。

利用可能であれば、スペクトルライブラリを検索します。

利用可能であれば、ピーク純度をチェックします。

メソッド（DA.M）のコピーを保存します。

レポートを印刷します（選択されている場合は、カスタムフィールドの値の更新後）。

5 **カスタムフィールドの値の更新**

レポートを印刷する前に、マクロを実行してカスタムフィールドの値を更新します。

6 **カスタムデータ解析**

レポートが印刷された後にマクロを実行します。

7 **GLP データ保存**

バイナリレジスタ GLPSave.Reg を保存します。

8 **ポストランコマンドマクロ**

分析完了後のタスクを実行します。たとえば、カスタムレポートを生成します。

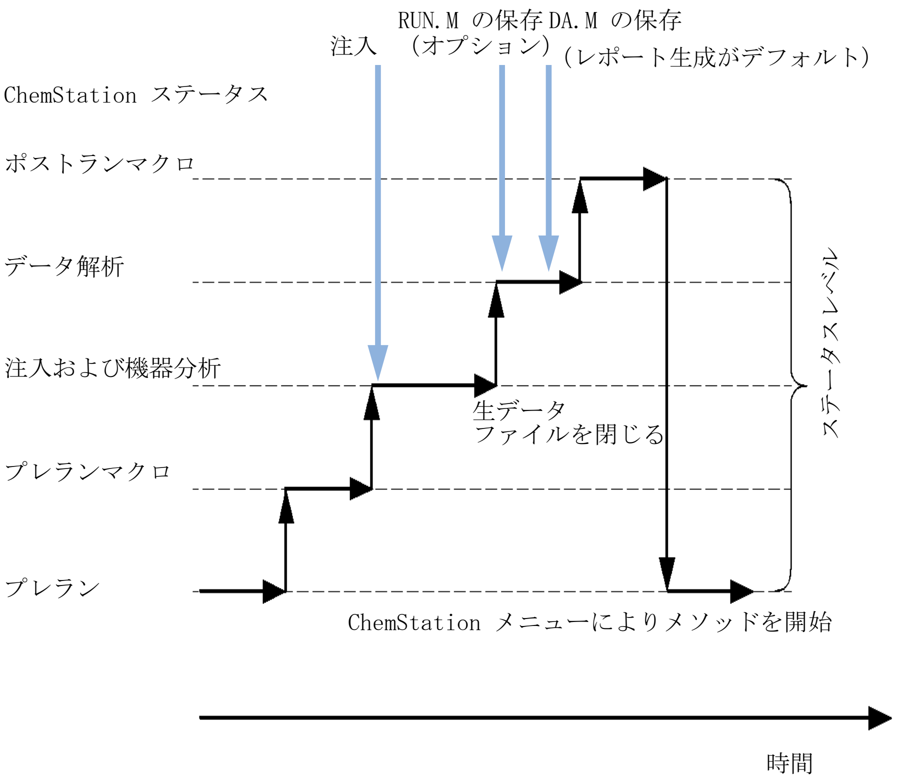


図 8 メソッド操作

以下の図は、メソッド操作中の ChemStation のステータスの概要を示しています。ここでは、ランタイムチェックリストのすべての部分を選択しています。

プレランコマンドまたはマクロ(ランタイムチェックリスト)

プレランコマンドまたはマクロを指定した場合には、それは分析が始まる前に実行されます。この部分は通常、他のソフトウェアパッケージと組み合わせる、システムカスタマイズのために使用されます。

データ取込（ランタイムチェックリスト）

- すべてのパラメータは、現在のメソッドで指定された初期状態に設定されます。
- 指定された場合には、注入プログラムが実行されます。注入には定義されているバイアルを使用します。
- モニタ表示には、クロマトグラム/エレクトロフェログラムの情報、および利用できる場合にはスペクトルデータを含む分析の進行状況が表示されます。
- データは取り込まれて、データファイルに保存されます。
- データの取り込みが完了すると、現在実行されているメソッドの取り込みパラメータがデータファイルの ACQ.txt としてデフォルトで保存されます。

データ解析（ランタイムチェックリスト）

ストップタイムを経過すると、分析は完了して、すべての生データはコンピュータのハードディスクに保存されます。すべての生データが保存されると、ソフトウェアがデータ解析を開始します。

積分

- シグナルのクロマトグラム/エレクトロフェログラム オブジェクトは、[積分イベント] ダイアログボックスで指定された条件で積分されます。
- ピークの開始、ピーク頂点、リテンション/マイグレーションタイムおよびピークの終了が決定されます。
- 各ピークのベースラインが定義され、最終的なピーク高さと面積が決定されます。
- 積分の結果は、積分結果リストとして表示されます。

ピーク同定と定量

- リテンション/マイグレーションタイムとオプションのピーククォリファイアを使い、それらをキャリブレーションテーブルで定義された既知の化合物と参照することによって、ソフトウェアはピークを同定します。
- ピーク高さとピーク面積を使用して、キャリブレーションテーブルで指定されたキャリブレーションパラメータを使用して、検出された各化合物のアマウントを計算します。

スペクトルライブラリサーチ（LC 3D、CE、CE/MS および LC/MS システムのみ、クラシックレポートで利用可能）

利用可能な UV 可視スペクトルを持つすべてのピークの場合、UV 可視スペクトルに基づいてサンプル内の化合物を同定するために、定義済みのスペクトルライブラリの自動検索を行うことができます。 詳細は、**スペクトルモジュールを理解する**を参照してください。

ピーク純度のチェック（LC 3D、CE、CE/MS および LC/MS システムのみ）

UV 可視スペクトルを持つピークの場合、そのピークの純度ファクタを計算して、レジスタに保存することができます。 自動ライブラリサーチを指定したとき、または適切なレポートスタイルを選択したときに、[純度チェック] ボックスをチェックした場合には、メソッドの一部として、各分析の最後にピーク純度を自動的に決定することができます。 詳細は、**スペクトルモジュールの概要**を参照してください。

レポート印刷(T)

分析で検出された化合物の同定結果とアマウントを示すレポートが生成されます。

注記

カスタムフィールドの更新マクロを実行した場合、このマクロが実行された**後に**レポートが作成されます。

カスタムフィールドの値の更新

ChemStation では、サンプルおよび特定の化合物用のカスタムフィールドを定義できます。これらのカスタムフィールドの値をレポートに含めることができます。デフォルトでは、これらの値は固定値です。［**カスタムフィールドの値の更新**］によって、レポートが作成される前にカスタムフィールドの値を変更できます。更新されたフィールドは、クラシックとインテリジェントのどちらのレポートでも利用できます。

マクロの例は **Disk2** > **UCL** フォルダーにあります。

カスタムフィールドの更新マクロは、以下のように実行されます。

1 レポートが作成される直前に、標準データ解析の一環として

2 ［**データ解析**］ビューでレポート/レポートプレビューを作成するごと（ランタイムチェックリストで標準データ解析が選択されていない場合でも）

注記 再解析中、カスタムフィールドの値は常に、シーケンス/サンプルで定義された固定値で上書きされます。カスタムフィールドは、レポートが作成される直前にのみ変更されます。このため、カスタムフィールドの更新マクロが含まれない、異なるメソッドでシーケンスを再解析した場合、値は定義された固定値にリセットされます。

カスタムデータ解析マクロ

解析データを評価するために、独自にカスタマイズしたマクロを実行することができます。

標準データ解析が有効になっていると、これらのマクロはレポートが作成された**後に**実行されます。このため、結果はレポートには利用できません（クラシック、インテリジェントレポートとも）。標準データ解析が無効になっていると、データ取込後にマクロが実行されます。

GLP データ保存

バイナリレジスタ GLPSave.Reg を、データディレクトリに、データ解析メソッドとともに保存します。.この機能は、データのオリジナリティおよび個々の分析の質を保証するためにデザインされました。

GLPSave.Reg バイナリファイルは、編集不可のチェックサムで保護されたレジスタファイルとして、次のような情報を含んでいます。

- 主要な機器の設定値（グラフィカルにレビュー可能）
- クロマトグラフまたは電気泳動のシグナル
- 積分結果
- 定量結果
- データ解析メソッド
- ログブック

これらのデータは、ランタイムチェックリストのチェックボックスで [GLP データ保存] 機能を有効にした場合にのみ、保存されます。ChemStation のデータ解析メニューで、GLP データのレビューを行えますが、編集はすることができません。

ポストランコマンドまたはマクロ

ポストランコマンドまたはマクロを指定すると、データの解析後に実行されます。たとえば、データをバックアップのためにディスクにコピーするなどです。

データファイルにメソッドのコピーを保存

これは、ランタイムチェックリストで**[データ付きメソッドの保存]**が有効になっている場合に限り、データ取り込み後に行われます。 取り込みに使用するメソッドをデータディレクトリに、RUN.M という名前でコピーします。 RUN.M には DA と ACQ パラメータが含まれます。 RUN.M は読み取り専用であるため、一時的にメソッドが変更された場合でも、分析を再構築することができます。 メソッドや選択したパラメータの変更が分析に与える影響を確認することができるため、最適化することが可能です。

データファイルと一緒にメソッドのコピーを DA.M という名前で保存（ChemStation デフォルト）

ランタイムチェックリストでチェックした項目とは独立して、現在実行されているメソッドのデータ解析パラメータのコピーがデータファイルのレポートと一緒に DA.M という名前で保存されます。 これは、**標準データ解析**部分の最後に、また [データ解析] 画面でレポートを作成する際に、実行されます。

3 データ取込

データ取り込みとは 76
オンラインモニタ 78
オンラインシグナルモニタ 78
オンラインスペクトルモニタ 78
ログブック 78
ステータス情報 79
ChemStation ステータス 79
ステータスバー 79
システムダイアグラム 80
ルールとアラート 81

OpenLab ChemStation から、Agilent の LC、GC、CE、CE/MS、および LC/MS システムをシームレスに制御でき、アドオンソフトウェアによって Agilent GC および LC 機器の高度な機能とワークフローをサポートし、研究およびメソッド開発を行うラボに大きな柔軟性をもたらしています。この章では、分析データ取り込みプロセスの概要について説明します。

データ取り込みとは

データ取り込み中、分析機器によって取り込まれたすべてのシグナルは、検出器内でアナログシグナルからデジタルシグナルに変換されます。 デジタルシグナルは ChemStation に電子的に転送され、シグナルデータファイルに保存されます。

パスの選択

シングルランやシーケンスのデータ保存は、再コンフィグレーションせずにさまざまな保存場所を指定できるようになりました。［**表示**］メニューの［**プレファレンス**］ダイアログボックスにある［**パス**］タブで、デフォルトパス[1]に加えて複数のパスを追加することができます。C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥x¥Data（ここで、x は機器番号です。）［**追加**］や［**消去**］ボタンを使用して、既存のパスを消去したり、選択したロケーションに移動してそのパスを［**プレファレンス**］に追加したりすることが可能です。

デフォルトパスはリストから削除できませんが、コントロールパネルの［**機器コンフィグレーション**］で変更できます。デフォルトパスの変更の詳細については、『OpenLab ChemStation 管理者用ガイド』を参照してください。

ChemStation メニュー［**ファイル**］ > ［**Windows エクスプローラーを開く...**］から、実際の機器のデータディレクトリ（C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥1 など）に簡単にアクセスできます。または、［スタート］メニューの［**機器データ**］へのショートカットを使用します。

1 インストール中にパスを定義することができます

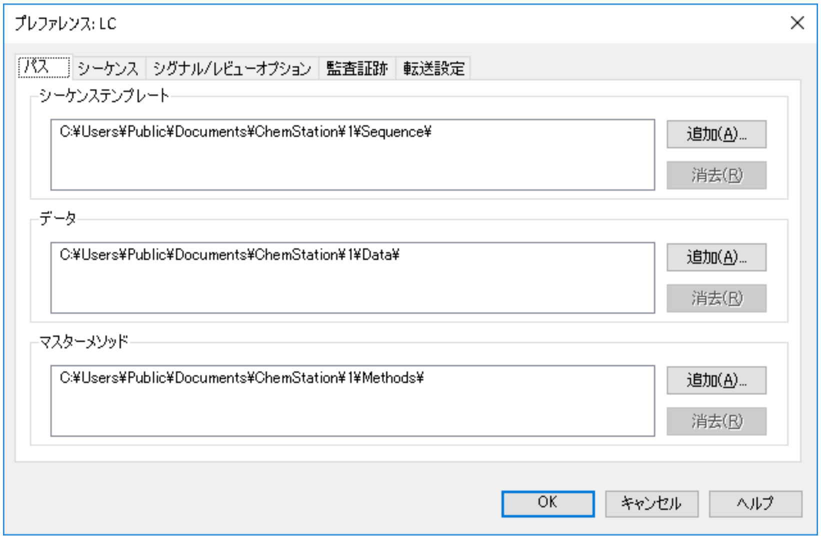


図 9　　［プレファレンス］ダイアログ内の［パス］タブ

これにより、分析を実行する際に新たに指定したすべてのデータパスを **［サンプル情報］** および **［シーケンスパラメータ］** ダイアログボックスで選択可能になります。

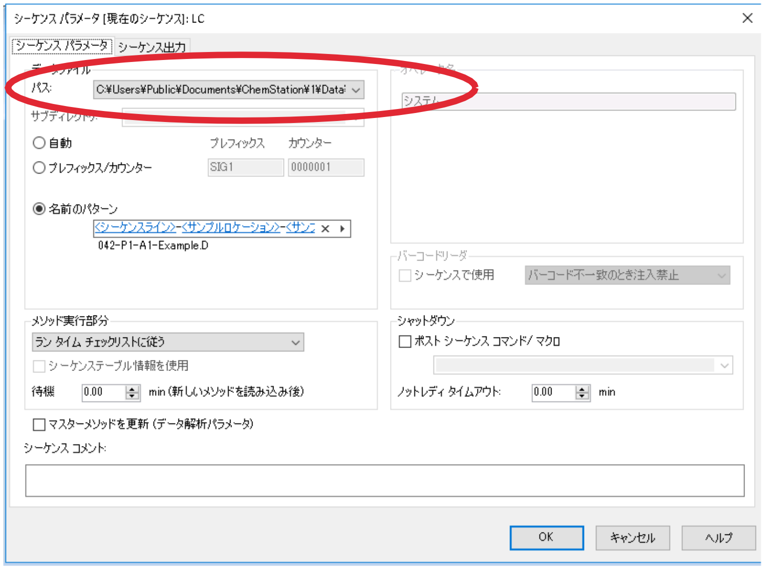


図 10　　[シーケンスパラメータ]ダイアログ内のデータパス選択

オンラインモニタ

オンラインシグナルモニタ

オンラインシグナルモニタでは、複数のシグナルおよび関連付けられた機器によってサポートされている場合は、同じウィンドウで機器パフォーマンスプロットをモニタできます。表示するシグナルを選択したり、時間軸とレスポンス軸の調整もできます。この機能をサポートする検出器では、バランスボタンが使用できます。

表示内で十字カーソルを移動することで、メッセージ行に絶対シグナルレスポンスを表示できます。

オンラインスペクトルモニタ

オンラインスペクトルモニタは、吸光度を波長の関数またはマススペクトルの m/z として表示します。表示される波長範囲と吸光度のスケールは、両方とも調整できます。

ログブック

ログブックには、分析システムによって作成されたメッセージが表示されます。これらのメッセージは、モジュールからのエラーメッセージ、システムメッセージまたはイベントメッセージです。メッセージが表示されたかどうかに関わらず、これらのイベントはログブックに記録されます。

ステータス情報

ChemStation ステータス

[ChemStation ステータス] ウィンドウには、ChemStation ソフトウェアの全体的なステータスが表示されます。

シングル分析の実行中には、次のようになります。

- [ChemStationステータス] ウィンドウの最初の行には、実行中の分析が表示されます。
- ステータスウィンドウの 2 行目には、現在のメソッドのステータスが表示されます。
- 3 行目には、分析時間（分単位）と生データのファイル名が表示されます (GC 機器の場合、フロントおよびバックインジェクタのファイルも表示されます)。

[機器ステータス] ウィンドウには、機器モジュールと検出器についてのステータス情報が表示されます。このウィンドウには、各コンポーネントのステータスと、必要に応じて圧力、グラジエント、流量データなどの現在の状態が表示されます。

ステータスバー

ChemStation のグラフィカルユーザーインターフェイスは、ChemStation の［メソッド＆ランコントロール］ビューのツールバーとステータスバーから構成されています。ステータスバーは、システムステータスフィールドと、現在読み込まれているメソッドおよびシーケンスに関する情報からなっています。メソッドやシーケンスを読み込んだ後で修正すると、機器に応じて、黄色のアスタリスクまたは歯車のマークが付きます。黄色の EMF 記号は、LC 消耗品（ランプなど）の使用期限が設定値を超えたことを示しています。ステータスバーにはランキューのステータスも表示されます。ステータスは **［再開］**、**［一時停止］**、または **［ブロック］** となります。

システムダイアグラム

設定した分析機器でサポートされている場合（Agilent 1200 Infinity LC シリーズモジュール、または Intuvo 9000 GC システムなど）、ChemStation システムでグラフィカルなシステムダイアグラムを表示できます。これにより、システムのステータスを一目でチェックできます。ダイアグラムを有効にするには、**［メソッド & ランコントロール］**ビューの**［表示］**メニューから**［システムダイアグラム］**を選択します。これは、ChemStation システムをグラフィカルに表現したものです。以下に示すカラーコードによって、現在のステータスが表示されます。

図 11　　システムダイアグラム、GC の例

表 6　　モジュールまたは機器のステータスを示す色

色	ステータス
灰色	オフライン
緑色	待機
オレンジ	ノットレディ
赤色	エラー
シアン	スタンバイ（ランプ消灯など）
紫色	プレラン、ポストラン

表 6 モジュールまたは機器のステータスを示す色

色	ステータス
マゼンダ	注入中
青色	分析中またはポストラン

また、実際のパラメータ設定のリストを表示することもできます。ステータスの概要のほかに、ダイアグラムからシステムコンポーネントごとのパラメータ設定のダイアログボックスに素早くアクセスできます。

システムダイアグラムの詳細は、オンラインヘルプの機器パートを参照してください。

ルールとアラート

この機能をサポートしている機器ドライバ（たとえば、8890 GC）では、**［機器］** > **［ルールとアラートの管理...］** を選択すると、ChemStation が取り込み中に特定のイベントに対してどのように反応するかを設定することができます。

例えば、バイアルや容器が見つからないことは、クロマトグラフィでよくあるエラーです。ChemStation では、例えば、シーケンスを継続する、一時停止する、停止する、中断'するなどを選択できます。

注記 対象となるイベントと選択できる動作は、機器ドライバごとに異なります。

4 自動化/シーケンス

自動化とは　84
シーケンスおよびシーケンステンプレートとは　84
シーケンスパラメータ　85
グラフィカルなサンプルエントリ　87
シーケンステーブル　90
シーケンスの作成（シーケンスおよびシーケンステンプレート）　91
イージーシーケンス　96
概要　96
［イージーシーケンス］ タブの使用（シーケンス）　97
[**イージーシーケンス セットアップ**] タブ (テンプレート) の使用法　99
シーケンスを用いた作業 (シーケンスとシーケンステンプレート)　101
シングルランのデータ取り込み　101
シーケンスでデータ取り込み　101
マスターメソッドの自動更新　103
優先サンプル　104
コントロールサンプルを使用したシーケンス　105
ブランクサンプルを使用したシーケンス　105
シーケンスの実行　106
ハイスループットオプションの使用　107
シーケンスの一時停止　108
シーケンスの停止　108
シーケンスの中断　108
シーケンスの選択分析　108
新規結果セットの作成　112
シーケンスログファイル　113
シーケンスの実行時に起こる事柄　113
シーケンスデータファイルの構造　115
データファイルの構造　115
プレファレンス - シーケンスタブ　116
データファイル名　120
結果セットのマイグレーション　123
ポストシーケンス処理　126
ノットレディータイムアウト (LC および CEのみ)　127
待機時間 (LC および CE のみ)　127
自動リキャリブレーション　128

リキャリブレーションの指定　129
シーケンステーブルおよび［サンプル情報］ダイアログのリキャリブレーションパラメータ　129
シーケンスのタイプ　132
明示的キャリブレーションシーケンス　132
周期的シングルレベルキャリブレーションシーケンス　132
周期的マルチレベルキャリブレーション シーケンス　133
明示的および周期的キャリブレーション両方　137
ブラケットを使用した周期的キャリブレーションシーケンス　139
標準の同じ希釈率を含むマルチバイアルを使用した周期的リキャリブレーションシーケンス　143

本章では、自動化の概念について説明します。具体的には、ChemStation でシーケンスを使用する方法、シーケンスの実行時に起こること、およびシーケンスのカスタマイズ方法を説明します。

自動化とは

自動化とは、複数のサンプルを無人で分析するものです。

ChemStation ソフトウェアのシーケンス機能により、取り込み、データ解析、レポート作成を自動化することができます。

シーケンスおよびシーケンステンプレートとは

シーケンスとはサンプルの分析を自動化する一連の命令のことです。シーケンスは、自動的に各サンプルを注入し、そのサンプル用に指定されたメソッドにしたがってデータを取り込み、解析するのに使用されます。シーケンス内の各サンプルバイアルは、異なる分析メソッドを使用することで、異なるクロマトグラフ/エレクトロフェログラフ条件および解析パラメータのセットで分析することもできます。

シーケンス ファイル （*.s）は、取込を繰り返し実行できる「シーケンステンプレート」です。ただし、これらのテンプレートは **［データ解析］** での再解析には使用しません。シーケンステンプレートを実行すると、すべての関連ファイルを含む結果セットを作成します。シーケンステンプレートを再度使用する場合、その都度 ChemStation は新しい結果セットを作成します。下位互換性の理由から、個別のシングルランとしてシーケンスを実行することもできます。詳細については、「シーケンス実行モード」 118 ページを参照してください。

使用可能なシーケンステンプレートは、ChemStation エクスプローラに表示されます。また **［プレファレンス］** ダイアログボックスの **［パス］** タブで、ChemStation エクスプローラの選択ツリーに追加するシーケンステンプレート保存場所を設定できます。

1 台の機器に対して複数のシーケンスを設定し、適切な順序でスケジュールすることができます。 **［ランキュー］** タブに、その機器の全体の作業（シーケンスやシングルサンプル、一時停止など）が表示されます。［ランキュー］タブでアイテムの順序を変更できます。ランキューについての詳細は、「ランキューについて」 148 ページ を参照してください。

シーケンスパラメータ

［シーケンスパラメータ］ ダイアログには、シーケンス内のすべてのサンプルバイアルに共通する情報が含まれています。ダイアログを開くには、 **［メソッド&ランコントロール］** ビューで **［シーケンス］** メニューから選択します。

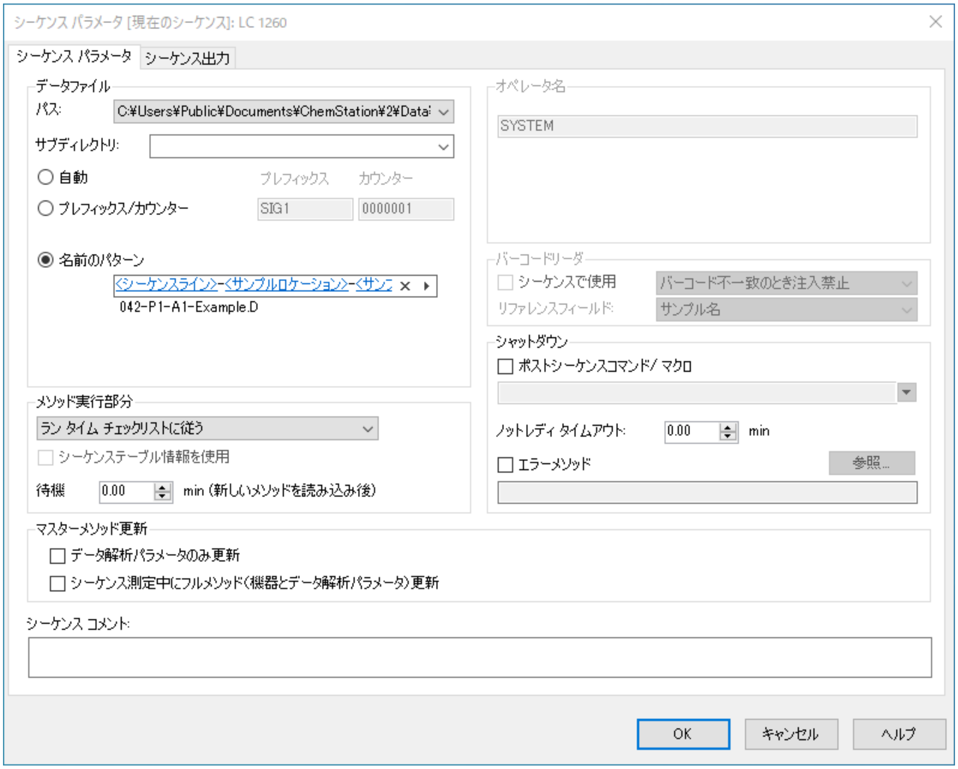


図 12　［シーケンスパラメータ］ダイアログ

このダイアログボックスを使用して、以下のタスクを行います。

- **［パス］**コンボボックスからデータディレクトリを選択
- ［メソッド実行部分］パラメータで、シーケンス解析をどのように行うのかを選択
- **［シャットダウン］**コマンドマクロを使用して、シーケンスが終了時の動作を指定。カスタムコマンドとその設定方法の詳細については、「ChemStation のカスタムコマンドまたはマクロの使用」29 ページを参照してください。

たとえば、次のいずれかを選択できます。

- ランタイムチェックリストに従う
- データ取り込みのみ
- 再解析のみ実行（ChemStation リビジョン B.01.03 以前で取り込んだデータ、または**［ユニークなフォルダ作成オフ］**レガシーオプションで取り込まれたデータ用）

注記

リビジョン B.01.03 までの ChemStation で取り込んだか、**［ユニークなフォルダ作成オフ］**のレガシーオプションを使用して取り込んだシーケンスデータは、**［メソッド & ランコントロール］**ビュー内の**再解析**オプションを使用して再解析する必要があります。

ChemStation リビジョン B.02.01 以降で取り込んだシーケンスデータは、**［データ解析ナビゲーションテーブル］**の**［再解析］**オプションを使用して再解析する必要があります。

［再解析］オプションが選択されている場合は、もともとサンプル分析する際に定義したサンプルデータを使用するか、**［シーケンステーブル情報を使用］**チェックボックスを有効にして、シーケンステーブルに以下の新しいデータを入力して、更新されたサンプルデータの使用を選択できます。

- システムにバーコードリーダーがインストールされている場合、シーケンスでバーコードの使用、およびバーコードの不一致をどのように処理するかを指定

グラフィカルなサンプルエントリ

グラフィカルなサンプルエントリでは、サンプルコンテナと読み込まれたサンプルの直感的なビジュアル表示が可能です。新しいサンプルをマニュアルで作成するか、既存のシーケンスを読み込みメソッドやコンテナロケーション（採取されたフラクションから作成された再注入シーケンス用など）、未設定のパラメータを割り当てることもできます。

サンプルコンテナとは、サンプル/バイアルを保持する機器トレイまたはプレートです。サンプルコンテナには、機器に応じてさまざまなサイズがあり、バイアルの容量もそれぞれ異なります。サンプルコンテナのタイプは、特定のトレイまたはプレートの物理的な性質を XML 形式で表します。カスタムサンプルコンテナタイプは、一元的に保管でき、サンプルコンテナのタイプ定義が入っている XML ファイルをインポートすることによって、ラボ全体で使用できます。OpenLab Control Panel にある［**サンプルコンテナータイプのインポート**］ボタンを使用して、カスタムサンプルコンテナータイプをインポートします。

サンプルコンテナは、［**サンプルエントリ**］タブで選択できます。コンテナのビジュアル表示をクリックするだけで、グラフィカルユーザーインターフェイスに新しいサンプルエントリを簡単に作成できます。サンプルロケーションは、サンプルタイプに対応したカラーコードで示されます。

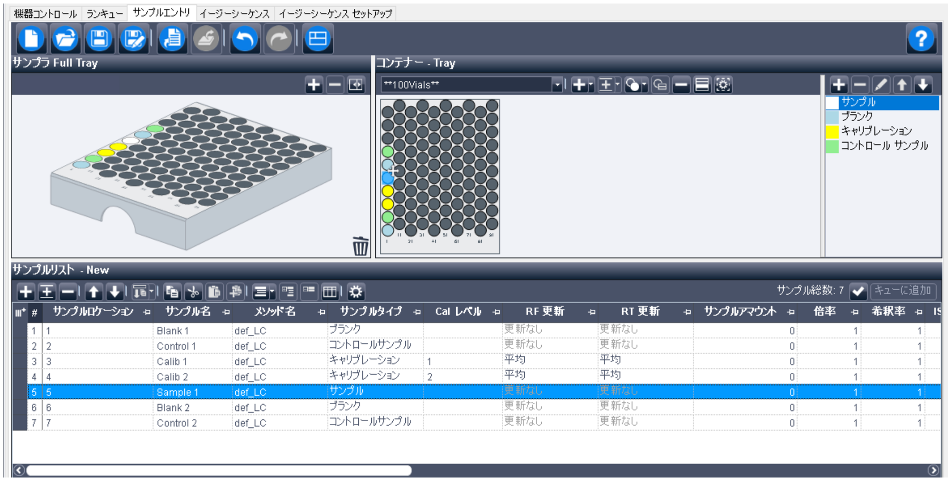


図 13　［**サンプルエントリ**］**タブ**

［選択プロパティ］ () により、複数のサンプルのパターンを定義できます。これらのオプションを使用して、順番を矢印で表示できます。複数の位置でマウスをドラッグするだけです。

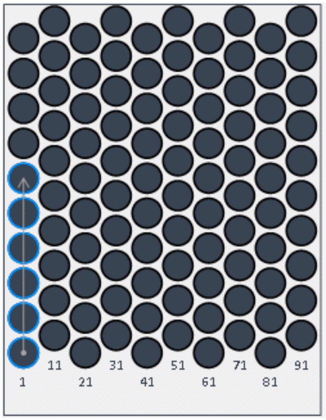


図 14　　順番の矢印

プレートの物理的な配置変更が可能なオートサンプラの場合は、どのオートサンプラでも、プレート全体を他の位置またはドロワーまでドラッグするだけです。バイアルの位置は、サンプルリスト内で自動的に調整されます。コンテナーのコンフィグレーションは、シーケンステンプレートと一緒に保存したり、PDF にエクスポートしたりできます。

特定の位置やドロワーに関連付けられていないプレートを準備することもできます。これらのパーキングロットは、ベンチで準備するプレートに対応しています。これらは他の設定と一緒にシーケンステンプレートに保存されます。該当する機器に対して後でこのシーケンステンプレートを読み込んでから、準備したプレートを適切な位置およびドロワーに割り当てることができます。

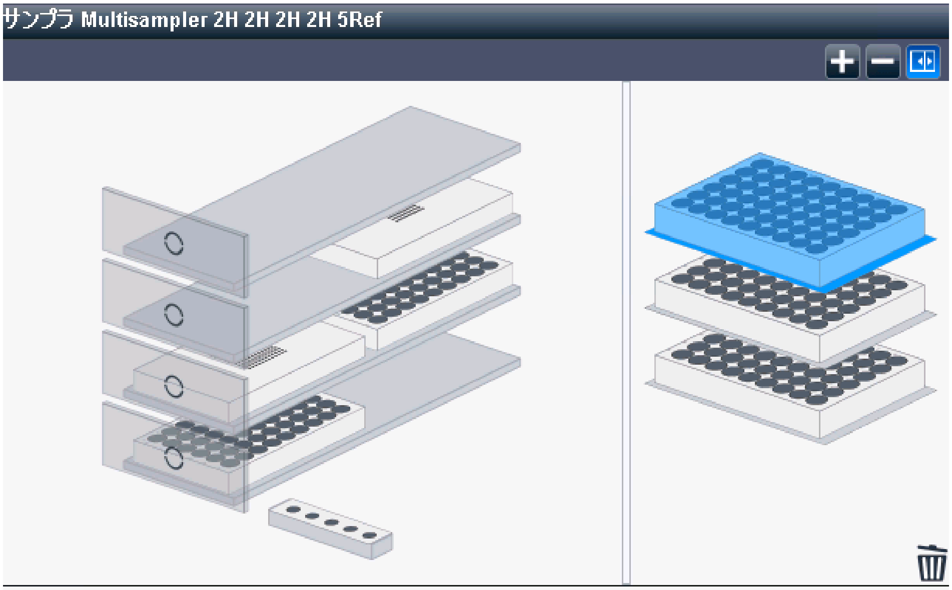


図 15　［サンプルエントリ］タブのマルチサンプラ

［サンプルリスト］テーブルには、以下のようにテーブルを編集するためのさまざまな機能が用意されています。

- セル範囲のコピー
- コピーしたセルまたはラインの追加
- 特定の情報によるサンプルのグループ化
- インテリジェントな自動インクリメントによる下へのコピー
- 選択した単一または複数の行の順序変更
- 個々のセルの内容または選択したテーブル領域のクリップボードへのコピー

サンプルリストには、シーケンステーブルの場合と同じ情報を用意します（「シーケンステーブル」90 ページ を参照）。完了したら、リストをランキューにシーケンスとして追加します。

注記 いったんシーケンスを実行すると、サンプルリストを編集することはできなくなります。オンライン編集はシーケンステーブルでのみ可能です。

注記 ChemStation でこのシーケンステンプレートの編集をするには、最初に **［サンプルエントリ］** タブの **［保存］** ボタンでそれを保存します。次に、 **［ファイル］** または **［シーケンス］** メニューからシーケンステンプレートを再び読み込みます。

注記 コンテナコンフィグレーションは、機器ダッシュボードのグラフィカルな表示では更新されません。

シーケンステーブル

シーケンステーブルは、サンプルバイアルの処理に使用するメソッド、およびバイアルのデータを取り込んで分析する順序を決定します。このテーブルでは、プレート上のサンプルロケーション[1]、サンプル名、定量パラメータ、リキャリブレーションパラメータなどの各サンプルに関する情報も格納されます。

デュアルサンプリングをサポートする機器（GC）では、テーブルに ［インジェクタロケーション］ 列が追加され（値は ［フロント］ または ［バック］）、下部に ［デュアル注入］ チェックボックスが表示されます。

- **［デュアル注入］** チェックボックスをオンにすると、複数のランが結合され、各ランで同時に 2 つのサンプルが処理されます。ライン番号は、それに応じて調整されます。このモードでは、シーケンステーブルを **［フロント］** または **［バック］** のインジェクタ位置で並べ替えることができます。
- このチェックボックスをオフにすると、各ランで 1 つのサンプルが処理されます。ランの順序は、テーブルに表示されるとおりです。フロントインジェクタとバックインジェクタを使用して切り替えることができます。

このテーブルの列の説明、およびこの列がメソッドに格納されている情報とどのように作用し合うかに関する説明については、オンラインヘルプを参照してください。

[1] 新しいサンプルコンテナタイプを、機器コンフィグレーションで定義するか、コントロールパネルにインポートできます。

シーケンスの作成（シーケンスおよびシーケンステンプレート）

シーケンステーブルを使用して、シーケンス内で実行するサンプル、メソッド、およびバイアルを指定します。シーケンステーブルには、シーケンス内の各サンプルをそれらが実行される順にリストします。このテーブルには、各サンプルについて、必須のバイアル番号またはサンプル位置、メソッド、キャリブレーション情報、サンプル量、ISTD倍率、その他のデータが格納されます。

表示する列の選択

シーケンステーブルによって表示されるこの情報は、以下のようにカスタマイズ可能です。

- 列を左右に移動して、作業に最も重要な列を前に持ってくることができます。
- 作業に必要ない列を表示させないこともできます。

シーケンステーブルの表示と内容を変更するには、［シーケンステーブル］ツールバーの （**列選択**）をクリックします。シーケンステーブルに表示する列を選択します。インストールされているソフトウェアパッケージに応じて、使用可能な列が増えます。たとえば、LC/MS または CE/MS をインストールすると、**［ターゲットマス］**列が追加されます。

選択モード

Microsoft Excel などのアプリケーションと同じように、以下のように複数のセルを選択したり、セル範囲を選択したりできます。

- **Ctrl** + クリックで、複数のセルを 1 つずつ選択できます。
- **Shift** + クリックで、セルの範囲を選択できます。

コピー、切り取り、貼り付け

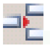
- コピー：選択したセルをコピーし、それを他の任意のアプリケーション（例えば、Microsoft Excel）に貼り付けることができます。コピーした情報には、列ヘッダータグが含まれます。タグは、情報を、例えば Microsoft Excel などに貼り付けることにより表示できます。この列ヘッダータグにより、列が異なる順番になっていた場合にでも、値を貼り付けて ChemStation シーケンステーブルに戻すことが可能になります。
- 切り取り：行全体を切り取ると、その行が削除され、クリップボードに入ります。一部の列またはセルだけを切り取った場合、行は維持され、そのセルの値だけがクリアされます。
- 貼り付け：行全体を選択した場合、貼り付けを行うと、クリップボード内の値が新しい行として挿入されます。コピーした内容に列ヘッダータグがある場合は、その列ヘッダータグを使用して値が適切な列にマッピングされます。単一の列のみを選択した場合は、クリップボードの値が上の行から下へと（ラインごとに）貼り付けられ、クリップボードバッファ内にあった数だけの列が右側に入力されます。単一のセルだけを選択した場合は、選択したセルの下側および右側にクリップボード内の値が入力されます。

取消、やり直し

シーケンステーブルでは、最後の操作の取消と、取消した操作のやり直しを行えます。

行の挿入、追加、削除

新しい空の行を挿入または末尾に追加したり、既存の行を削除したりするには、ツールバーの対応するボタンを使用します。

 **（ラインを挿入）**

(ラインを追加)

（ラインを削除）

下へコピー機能の使用

同じメソッドを使用するサンプルが多数ある場合は、［**下へコピー**］アイコン を使用すれば、シーケンステーブルにサンプルを効率よく入力できます。この機能は、情報を 1 つのセルから選択した複数のセルまたは列にコピーします。サンプルロケーション、サンプル名、およびデータファイル名の［**下へコピーオプション**］ダイアログで定義されたインクリメントルールが使用されます。その他の列については、この機能は、各フィールド（例えば、メソッド名、バイアルごとの注入数、そして指定されていればサンプル量、ISTD アマウント、倍率、および希釈率）をコピーします。

繰り返しから除外されるのは、LIMS ID などの固有の値を持つ列だけです。また、キャリブレーションの設定は、キャリブレーション標準ではないサンプルにはコピーされません。

［**下へコピーオプション**］ダイアログで、細かく調整したさまざまな下へコピー機能動作を指定できます。このダイアログでは、サンプルの位置やサンプルの命名方法に関するルールを設定できます。ウェルプレートに対して、インクリメントパターンの方向を指定でき、さらにこれがプレート上の一部分の四角形領域のみに対するものなのかどうかも指定できます。

データファイルを下へコピーする操作は特殊です。この機能では、完全なデータファイル名を基に、"--001"形式のカウンタが追加されます。GC については、下へのコピーを行った時点でのランに選択されていたインジェクタに応じて、"F" または "B" も追加されます。

新しいラインウィザード

このウィザードでは、大規模なシーケンステーブルを効率よく作成することができます。これを行うには、以下の複数の方法があります。

- シンプルモード：1 つのラインに複製する必要のあるすべての値を入力します。ラインを選択し、［**新規ラインウィザード**］を使用して、ラインを n 回繰り返します。指定した数のサンプルの後にキャリブレーションまたはブランクランを挿入するルールを定義することもできます。
- 拡張モード：複数のサンプルラインに入力して、パターンを作成します。次に、これらのラインをすべて選択し、［**新規ラインウィザード**］を呼び出します。交互に使用するキャリブレーション、コントロール、ブランクランと任意の回数のサンプルラン、キャリブレーションレベル、およびリキャリブレーション設定を持つことができます。

  また、例えばすべてのキャリブレーションを同じバイアルから実行されるようにし、サンプルバイアルのみインクリメントするようにすることもで

きます。サンプル位置は、開始位置からのインテリジェントインクリメント（コピーされた各ブロックのオフセット）で繰り返され、すべてのサンプル位置の距離が維持されます。ダイアログでルールを設定できない場合は、値がそのまま下向きに複製されます。

繰り返しから除外されるのは、LIMS ID などの固有の値を持つ列だけです。

シーケンステーブルのフィルター

［フィルターオプション］ で、シーケンステーブルの一部の行だけを表示させる条件を設定できます。

フィルタリングにより、圧縮形式でシーケンステーブルを表示させます。例えば、特定のサンプルタイプ、メソッド、キャリブレーションレベル、サンプルロケーション、またはサンプル名を表示させることができます。

これは、下へコピーの機能をフィルタリングしたリストに適用することで、一貫性を確認したり、特定のグループのシーケンスラインのみを編集したりする際に役立ちます。例：

- 特定のサンプルロケーションにあるすべてのサンプルに関するサンプルアマウントを更新します。
- 特定のキャリブレーションレベルに対して、バイアルまたはサンプルのロケーションを変更します。

バーコードの読み込み

機器にバーコードリーダーが装着されている場合は、**［バーコードの読込］** をクリックするとサンプル名を取得できます。バーコードを読み取るシーケンステーブルの行またはサンプル位置のセルを選択します。1 つまたは複数のラインを選択できます。バーコードは、指定した各サンプル位置のサンプル名のセルに置かれます。

カスタムフィールドボタンの使用

シーケンステーブルで使用するメソッドのカスタムフィールドが設定されている場合、**［カスタムフィールド］**ボタン を選択して、各サンプル（サンプル関連カスタムフィールド）またはサンプルのメソッド中の各化合物（化合物関連カスタムフィールド）のカスタムフィールド値を編集することができます。

シーケンスのプレビュー

[シーケンスプレビュー] を選択すると、シーケンスにあるキャリブレーション、QC サンプル、ブランクのすべての繰り返しを含め、シーケンスが実際に実行されるとおりにダイアログに表示されます。

イージーシーケンス

概要

［**イージーシーケンス**］ は、テンプレートを使ってシーケンスを短時間で簡単に設定するためのユーザーインターフェイスです。 テンプレートには、ユーザーが表示または編集するパラメータがあらかじめ指定されています。 キャリブレーションセットアップでは、使いやすいドラッグアンドドロップインターフェイスでキャリブレーションタイプとサンプルポジションを指定し、シーケンスの概要を表示することができます。 ［**イージーシーケンス**］ では、サンプル数は異なるもののそれ以外の点では似通った、特定のパターンに従うシーケンスを簡単に作成できます。

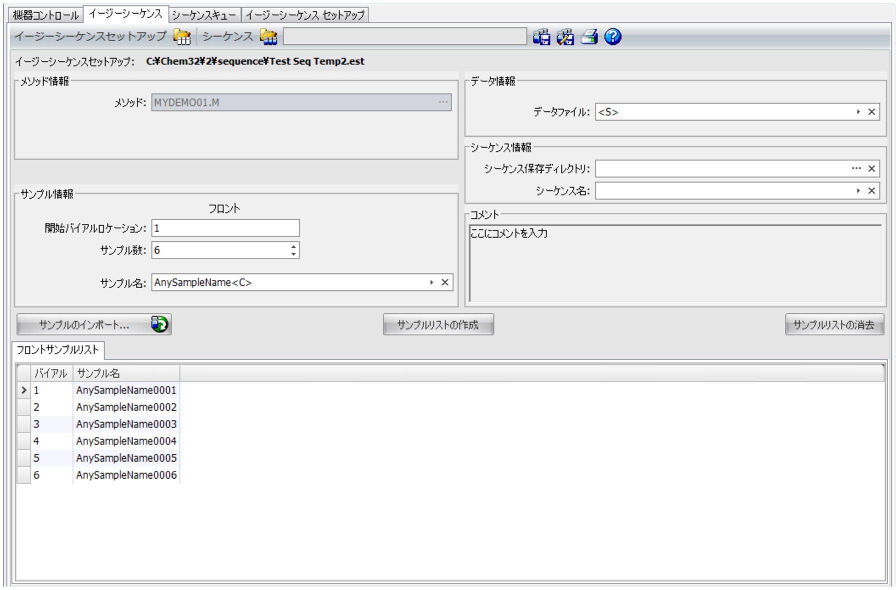


図 16　　［イージーシーケンス］ タブ

［イージーシーケンス］ タブの使用（シーケンス）

［**イージーシーケンス**］ タブでは、［**イージーシーケンスセットアップ**］ タブで作成したテンプレートからシーケンスを作成できます。 CSV 形式で保存されているサンプルをインポートすることもできます。

シーケンスの定義方法

1 [**イージーシーケンス**] タブで、[**イージーシーケンスセットアップ**] アイコンをクリックしてテンプレートを開きます。

2 必要に応じて、更新します。ここには、サンプルバイアルロケーション、キャリブレーション化合物バイアルロケーション、データ、シーケンスロケーションが含まれています。編集可能なパラメータは、テンプレートのコンフィグレーションに依存します。

3 記入済みのサンプルが新しいサンプルロケーションに適合しない場合は、[**サンプルリストの作成**] をクリックしてテーブルを修正します。

4 [**シーケンスのプレビュー/印刷...**] をクリックしてシーケンスをプレビューします。

5 シーケンスを保存します。

チップ　シーケンスは、キュー内でのステータスが **保留中** であれば、編集可能です。

6 [**保存してキューに追加**] をクリックし、シーケンスをシーケンスキューに登録します。

サンプルデータのインポート方法

[**イージーシーケンス**] には、サンプルデータセットをインポートできます。サンプルをインポートする前に、CSV ファイルを準備して正しくフォーマットしておく必要があります。CSV サンプルデータファイルの作成方法については、オンラインヘルプを参照してください。

1 ［**イージーシーケンス**］ タブで、［**イージーシーケンス設定の読み込み**］ アイコンをクリックしてテンプレートを開きます。

2 [**サンプルのインポート...**] をクリックします。

3 インポートする CSV ファイルを選択します。

有効なフィールドがすべてインポートされます。

注記

サンプルデータを [**バックサンプルリスト**] にインポートする場合は、[**サンプルのインポート**] ボタンを押す前に、[**バックサンプルリスト**] を選択して表示させていることを確認してください。

4 [サンプルリスト] をレビューし、各フィールドを確認します。

[イージーシーケンス セットアップ] タブ (テンプレート) の使用法

[**イージーシーケンス セットアップ**] は、シーケンス作成の出発点となるテンプレートを作成するために使います。ここには、2 つのパネルがあります。[サンプル] と [キャリブレーション] です。[**サンプル**] パネルでは、メソッド、サンプル、データ、シーケンスについての情報を指定します。テンプレートは、非表示または読み取り専用とするパラメータを指定するためにも使います。[**キャリブレーション**] パネルは、キャリブレーション分析の設定と表示を行うためのグラフィカルインタフェースを備えています。[キャリブレーション] は、キャリブレーションタイプ、周期的シーケンスとブラケットシーケンス、サンプルポジションを指定するための使いやすいドラッグアンドドロップインタフェースを備えています。

イージーシーケンステンプレートの作成方法

1 [**イージーシーケンス セットアップ**] タブから [**サンプル**] パネルを選択します。既存のテンプレートを開くか、新しいテンプレートを作成します。

2 [**メソッド**] を選択します。メソッドの注入ソースが [デュアル] の場合は、[デュアル インジェクション] オプションが表示されます。バックシグナルに対しては、バック用の解析メソッドを指定できます。メソッドはテンプレートで唯一必須のパラメータです。

3 必要に応じて、サンプル分析の推定継続時間（分単位）を入力します。 継続時間とは、サンプル開始から次のサンプル開始の範囲で測定された時間です。 このパラメータを使用して、シーケンスの合計推定継続時間を予測します。 推定サイクルタイムの機能を使用しない場合には、これらのフィールドを空白にしておいてください。

4 [**開始バイアルロケーション**]、[**サンプル数**]、[**サンプル名**] を指定します。

5 [**データロケーション**] を選択します。

6 [**シーケンスロケーション**] を選択し、[**シーケンス名**] を指定します。

7 テンプレートにコメントを記入します。

8 非表示または読み取り専用とするパラメータを指定します。[**注入回数/バイアル**]、[**サンプルアマウント**]、[**ISTD アマウント**]、[**注入量**] などに、デフォルト値を入力します。[**イージーシーケンス**] タブでシーケンスを作成するときに、間違える可能性を最小限にできます。

9 テンプレートを保存します。

キャリブレーションを定義するには、以下の手順を実行します。

必須要件 テンプレート内で使用するメソッドは、必要なレベルにキャリブレーションされている必要があります。

1 [**イージーシーケンス セットアップ**] タブから [**キャリブレーション**] パネルを選択します。
2 ［**キャリブレーションモード**］ドロップダウンリストから、［**周期的**］または［**ブラケット**］、または［**シンプルなキャリブレーション**］を選択します。
3 ［**シーケンスダイアグラム**］には、以下のセクションがあります。
   - **シーケンス開始**
   - **ブラケット/周期的**
   - **サンプル/注入**
   - **シーケンス終了**
4 シーケンスの［**サンプル**］エリアで、サンプルの数または注入回数に基づいて［**Cal インターバル**］を設定します。
5 **サンプルタイプ** エリアから、 **シーケンスダイアグラム** セクションまでアイコンをドラッグすることにより、**ブランク**、**キャリブラント**、または **QC サンプル** を設定します。
6 各サンプルタイプのパラメータを設定し、**非表示**または**読み込み専用**を指定します。
7 ［**イージーシーケンスの概要**］、キャリブレーションモードを確認します。
8 テンプレートを保存します。

シーケンスを用いた作業 (シーケンスとシーケンステンプレート)

シーケンス (シーケンスとシーケンステンプレート) は、[シーケンス] メニューからアクセスし、作成されます。シーケンスは、メソッドと同じ方法で作成および保存できます。シーケンスを保存する際には、.S の拡張子を持ったファイルが作成されます。シーケンスを編集したり、再利用したい場合は、たとえば、[シーケンス] メニューの [シーケンスの読み込み] アイテムを使用してそのシーケンスにアクセスします。

シングルランのデータ取り込み

シングルランでは、データファイルはそれぞれのサブディレクトリに直接保存されます。シングルランでは、メソッドが 1 つだけ使用されるので、このメソッドをサブディレクトリにコピーする必要はなく、すべてのアクションはマスターメソッドを使用して直接行われます。一部メソッドの取り込みが完了すると、取り込みパラメータのコピーがファイル ACQ.txt. に保存されます。マスターメソッドのデータ解析部分が実行されると、データ解析パラメータのコピーがデータファイルディレクトリ（DA.M）に保存されます。

シーケンスでデータ取り込み

シーケンスを実行するために、適切な定義済みメソッドを使用する必要があります。上記のようなマスターメソッドをそれらの目的で使用できます。通常、マスターメソッドとシーケンステンプレートは、ChemStation の［**メソッド & ランコントロール**］ビューで動作します。そのため、ChemStation エクスプローラでは、［**メソッド & ランコントロール**］ビューからマスターメソッドとシーケンステンプレートにアクセスできます。

シーケンステンプレートは、シーケンステーブルにあるメソッドを参照します。

デフォルトの実行モードでシーケンステンプレート <シーケンス名>.S を用いてシーケンスを実行し、マスターメソッド <メソッド名>.M を使用する場合、シーケンスランで作成されるすべてのファイルを格納する新しいフォルダー（「結果セット」）が作成されます。この結果セットフォルダーの保存場所は、［**シーケンスパラメータ**］ダイアログボックスで設定します（85ページ 図12

を参照）。結果セットフォルダーの名前のパターンとシーケンス実行モードは、**［プレファレンス］**で設定します（「プレファレンス - シーケンスタブ」116 ページを参照）。

シーケンス取り込み開始時に、シーケンステーブルで指定されたメソッドがマスターメソッドフォルダーから結果セットにコピーされます。さらに、シーケンスのコピーが、シーケンスログとバッチ（*.b）ファイルとともに結果セットに作成され保管されます。メソッドのすべての更新（キャリブレーションテーブルの更新など）は、結果セットのシーケンスメソッドに書き込まれます。インテリジェントレポートを利用している場合、シーケンスパラメータまたはメソッドプロパティで選択したレポートテンプレートが、結果セットへとコピーされます。こうして、マスターメソッドまたは他のシーケンスラン用のシーケンステンプレートに適用された変更の影響を受けることなく、必要なファイルのすべてを、データレビューおよび再解析に使用できます。

取り込み中、データファイルは結果セットに保存されます。各データファイル（*.D）に、シーケンスメソッドのコピーが特定の分析のために保存されます。ファイル ACQ.txt にはシーケンスメソッドの取り込みパラメータが含まれており、そのデータファイル取り込み時の状態のメソッドを維持します。フォルダー DA.M には、シーケンスメソッドで使用したデータ分析パラメータのコピーが含まれています。

マスターメソッドまたはシーケンステンプレートを変更せずに、シーケンスフォルダーに保存されたこれらのファイルを使用してすべてのデータレビューおよび再解析作業を実行できます。必要に応じて、メソッドの変更はマスターメソッドに再び保存することもできます。

注記 結果セットには、完全なすべてのデータファイル（*.D）セットが常に含まれている必要があります。データファイルの一部を削除すると、中央データ記憶領域に結果セットをアップロードする際に問題が発生します。シーケンスを短くする必要がある場合は、シーケンスラインから一部抜粋した新規結果セットを作成します（「新規結果セットの作成」112 ページを参照してください）。

マスターメソッドの自動更新

これらの機能によって、シーケンスで使用するマスターメソッドを更新するか否かと更新のタイミングを選択できます。これにより、例えばキャリブレーションテーブルが最新の状態に維持されるようになります。

これらの機能は、**[シーケンスパラメータ]**ダイアログで有効にすることができます（下図を参照）。

- **データ解析パラメータのみ更新**：

  シーケンスの終了時に、結果セットにあるメソッドのデータ解析パラメータからマスターメソッドフォルダーにあるすべてのメソッドのデータ解析パラメータを更新する場合は、このチェックボックスをオンにします。

- **シーケンス測定中にフルメソッド（機器とデータ解析パラメータ）更新:**：

  各ランの終了時に、機器パラメータが変更されたマスターメソッドを更新する場合は、このチェックボックスをオンにします。データ解析パラメータも同時に更新されます。機器パラメータに変更がない場合は、シーケンスの終了時にデータ解析パラメータが更新されます。

対応するマスターメソッド（マスターメソッドの名前がシーケンスメソッドのものと同一）が、結果セットにコピーされたときと同じマスターメソッドディレクトリ内にまだ存在していることがマスターメソッド更新の前提条件となります。

チェックボックスの設定を変更しマスターメソッドを更新するには、**メソッド変更の保存**および**シーケンスサマリの編集**権限が必要です。ユーザー管理と権限の詳細については、『OpenLab ChemStation コンフィグレーションガイド：ユーザー管理』（CDS_CS_Configure.pdf）を参照してください。

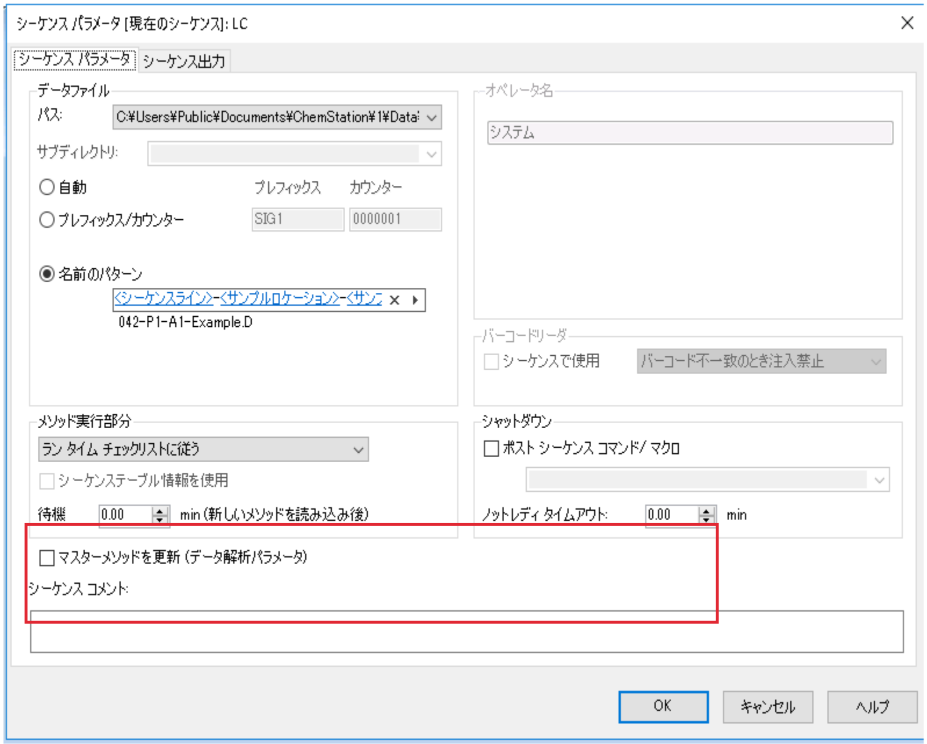


図 17　［シーケンスパラメータ］ダイアログの［マスターメソッド更新］オプション

注記　この機能はパフォーマンスに負担がかかるため、数百のメソッドを持つシーケンスの場合には、使用をお奨めしていません。

優先サンプル

現在分析中のシーケンスは、処理中のメソッドが完了したら一時停止することができます。シーケンスは、同じまたは別のメソッドで優先サンプルの分析をするために一時停止することができます。シーケンスは、その後再開し、一時停止した時のサンプルから続行できます。

コントロールサンプルを使用したシーケンス

コントロールサンプルは、シーケンステーブルの [サンプルタイプ] フィールドで指定することができます。コントロールサンプルの分析に使用するメソッドには、化合物の 1 つにコントロールサンプルリミットが指定されているキャリブレーションテーブルが必要です。指定したコントロールサンプルリミットを超えた場合、シーケンスは停止し、ログブックにメッセージが書き込まれます。ChemStation のレポートスタイルのいずれかを使用している場合は、これらの分析で生成されるレポートにはコントロールサンプルリミットも出力されます。コントロールサンプルを持つシーケンスの定義方法については、オンラインヘルプの「操作方法」を参照してください。

ブランクサンプルを使用したシーケンス

リファレンスシグナルは、ヨーロッパ薬局方の定義に準じてノイズ/シグナル比を評価するために必要です。 対応するサンプルに対して **[ブランク]** サンプルタイプを選択することにより、シーケンステーブルでリファレンスデータファイルを指定できます。

複数のリファレンスファイルを使用する場合は、ファイルの順序が重要です。ChemStation では、シーケンステーブルで新しいリファレンスファイルが指定されるまで、すべての連続したランで一つのリファレンスファイルを使用します。 ブランクサンプルのリファレンスファイルは、それ自体に対するリファレンスとしての役割を果たします。 次の表では、2 つのブランクサンプルを含むシーケンスの例を挙げています。

表 7　ブランクサンプルのシーケンスの例

	サンプル	データファイル	リファレンスファイル
1	Sample1	DF01.D	
2	**Blank1**	**DF02.D**	**DF02.D**
3	Sample2	DF03.D	**DF02.D**
4	Sample3	DF04.D	**DF02.D**
5	**Blank2**	**DF05.D**	**DF05.D**
6	Sample4	DF06.D	**DF05.D**
7	Sample5	DF07.D	**DF05.D**

シグナル/ノイズ比の計算については、リファレンスガイドを参照してください。

シーケンスの実行

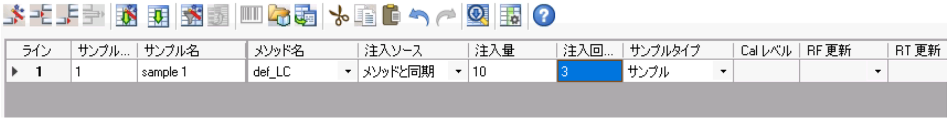
シーケンスをキューに追加すると、シーケンステーブルはすぐにランごとにリスト表示されます。ここには、実行されるとおりにシーケンスが表示されます。シーケンスに含まれるキャリブレーション、QC サンプル、およびブランクが、すべての繰り返しと正しい順序で表示されます。作成されたシーケンスファイルは、結果セットに保存されます。

取り込み済みまたは現在取り込み中のシーケンスラインはロックされます。編集はできなくなります。ヘッドスペース機器を使用している場合や、オーバーラップ注入をコンフィグレーションした場合など、特定のワークフローでは、いくつかの待機中のランもロックされます。

注記

シーケンスの測定中にシーケンスラインを追加した場合、対応するデータファイル名は、シーケンスパラメータで選択した命名規則によって異なります。命名規則として**名前のパターン**を使用すると、分析の開始時に、指定のトークンを使用してデータファイル名が設定されます。

例: 複数の注入でのシーケンス



ライン	サンプル...	サンプル名	メソッド名	注入ソース	注入量	注入回...	サンプルタイプ	Cal レベル	RF 更新	RT 更新
1	1	sample 1	def_LC	メソッドと同期	10	3	サンプル			

図 18　　キューに送信する前のシーケンステンプレート、注入が 3 回のサンプル

ライン	サンプル...	サンプル名	メソッド名	注入ソース	注入量	注入回...	サンプルタイプ	Cal レベル	RF 更新	RT 更新
1	1	sample 1	def_LC	メソッドと同期	10	1	サンプル			
2	1	sample 1	def_LC	メソッドと同期	10	1	サンプル			
3	1	sample 1	def_LC	メソッドと同期	10	1	サンプル			
4										

図 19　　キューに送信した後のシーケンスファイル、独立した 3 つの行

例:周期的キャリブレーションでのシーケンス

ライン	サンプルロケーション	サンプル名	メソッド名	注入回...	サンプルタイプ	Cal レベル	RF 更新	RT 更新	Cal インターバル	サンプルアマウ
1	1	Calibration 1	BRACK	2	キャリブレー...	1	ブラケット	置き換え	3	
2	2	Calibration 2	BRACK	2	キャリブレー...	2	ブラケット	置き換え	3	
3	10	Sample A	BRACK	1	サンプル					
4	11	Sample B	BRACK	1	サンプル					
5	12	Sample C	BRACK	1	サンプル					

図 20　　キューに送信する前のシーケンステンプレート、ブラケットを使用した周期的キャリブレーション

Line	サンプルロケーション	サンプル名	メソッド名	注入回...	サンプルタイプ	Cal レベル	RF 更新	RT 更新	Cal インターバル	サンプルアマウ
1	1	Calibration 1	BRACK	1	キャリブレー...	1	ブラケット	置き換え		
2	1	Calibration 1	BRACK	1	キャリブレー...	1	ブラケット	置き換え		
3	2	Calibration 2	BRACK	1	キャリブレー...	2	ブラケット	置き換え		
4	2	Calibration 2	BRACK	1	キャリブレー...	2	ブラケット	置き換え		
5	10	Sample A	BRACK	1	サンプル					
6	11	Sample B	BRACK	1	サンプル					
7	12	Sample C	BRACK	1	サンプル					
8	1	Calibration 1	BRACK	1	キャリブレー...	1	ブラケット	置き換え		
9	1	Calibration 1	BRACK	1	キャリブレー...	1	ブラケット	置き換え		
10	2	Calibration 2	BRACK	1	キャリブレー...	2	ブラケット	置き換え		
11	2	Calibration 2	BRACK	1	キャリブレー...	2	ブラケット	置き換え		
12										

図 21　　キューに送信した後のシーケンスファイル、ブラケットを使用した周期的キャリブレーション

ハイスループットオプションの使用

LC および GC オートサンプラでは、分析時間を最適化するためハイスループットオプションを提供しています。シーケンスオーバラップ注入であるこのオプションでは、現在の取り込みの実行中に、以降のバイアルのサンプルが準備されます。これにより、分析ごとの時間を大幅に節約できます。

シーケンスの一時停止

現在実行中の分析は、シーケンスを一時停止する前に完了します。

シーケンスの一時停止中は、シーケンステーブルファイル名およびデータファイル名の変更はできません。 まだ実行されていないシーケンス行の変更、または現在のシーケンス行のバイアル番号の変更のみ行えます。 未実行部分の分析用にシーケンス行の追加、削除、および変更はできます。

たとえば、サンプルの新しいバッチを追加するため、実行中のシーケンスを編集する必要があるとします。 これらのバイアルが、現在実行中のシーケンスラインのサンプルの後に、ChemStation で処理される次のサンプルになるように、シーケンスを編集できます。

シーケンスの停止

現在実行中の分析が、直ちに停止します。しかし、データ解析はこの分析で実行されます。中止されたシーケンスを再開することはできません。

シーケンス停止前に現在の分析を完了させたい場合、 シーケンスを一時停止して分析が完了するのを待ち、その後シーケンスを停止します。

シーケンスの中断

中断機能は、現在実行中のシーケンスを即時停止させます。データ解析は実行されません。中断機能は緊急停止として実行され、現在のセッションの再起動が必要となります。

シーケンスの選択分析

選択分析用の結果セットの選択

シーケンスの選択分析の取込は次のオプションから選択します。

- 新しい結果セットにシーケンスの選択分析を取り込む

または

- 既存の結果セットにシーケンスの選択分析を取り込む

データファイルを、シーケンスの選択分析の実行から既存の結果セットに取り込むと、以下のシナリオで役立つ可能性があります。

- 例えば、間違ったバイアルを使用していたので、単一のデータファイル（または複数のデータファイル）を上書きする必要がある場合。
- シーケンスの最初の部分のみが実行されており、シーケンスの選択分析を実行して未測定の残りのサンプルを追加する必要がある場合。これは、シーケンス取り込み中に機器障害が発生した場合などが考えられます。
- 既存のラインを取り込んだ後に、シーケンステンプレートにラインが追加された場合。追加の分析は、既存のデータに追加されるようになっています。

注記 シーケンステンプレートの既に取り込んだ部分からラインを削除したり、そこへラインを挿入したりすると、データファイルの名前付けに重大な不整合が生じます。

そのため、ユーザーが **［シーケンス］** メニューから **［シーケンスの選択分析］** を選択し、ダイアログにあるリストから既存の結果セットを選択するか、新しい結果セットを作成するかを選択します。

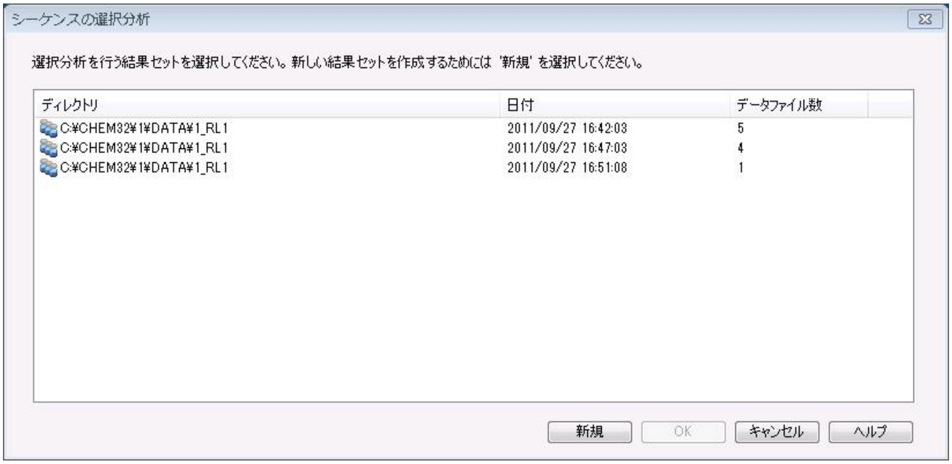


図 22　［シーケンスの選択分析］ ダイアログ

ただし、（**［データ解析］** で完全に再解析できるように）結果セットの一貫性を保つため、以下の特定の条件を満たす結果セットのみが選択取り込みを実行できます。

- シーケンステンプレート（ソースシーケンス）の名前と、結果セット内のシーケンス *.S ファイル（ターゲットシーケンス）の名前が同一である。

- シーケンスファイルに関して、データパスとサブディレクトリの両方が同一である。
- ソースシーケンスのシーケンスライン数が、ターゲットシーケンスのシーケンスライン数以上である。
- ターゲットシーケンスの各ラインで、サンプルタイプと注入回数が、ソースシーケンスの対応するラインの値と同一である。
- 2 つのシーケンスファイルのデータファイルの命名規則が同一である。

ユーザーは、**[OK]**（既存の結果セットの 1 つを選択する場合）または **[新規]**（新規結果セットを作成する場合）をクリックしてこのダイアログを閉じた後に、シーケンスの選択分析を実行するシーケンスラインを選択できます。

シーケンスの選択分析用のシーケンスラインの選択

[シーケンスの選択分析] ダイアログボックスがシステムにより表示され、分析用テーブルから個々のサンプルを選択できます。

[シーケンスの選択分析] ダイアログボックスの各行に、シングル分析が表示されます。各分析ごとに、バイアル、メソッド、データファイル、およびサンプル名が与えられます。加えて、シーケンステーブルおよびキャリブ:RF:RT 列にはそれぞれ、シーケンステーブルおよびすべてのキャリブレーションサンプルのエンコードされた情報が表示されます。これらのコードの説明は、オンラインヘルプを参照してください。

注記 シーケンスの選択分析によって、シーケンスの開始時にデータファイル名が表示されます。このため、日付トークンおよび時間トークンによって作られたファイル名は、注入の正確な日時ではありません。

[印刷] ボタンを選択すると、シーケンスの選択分析を印刷できます。

[メソッド更新...] では、**[メソッド更新]** ダイアログボックスを開きます。ここで、マスターメソッドと、シーケンステンプレートで使用されるメソッド間でメソッドをマニュアルで同期することができます。**[選択した分析のメソッドを自動更新]** オプションでは、対応するマスターメソッドを持つ選択済み分析で使用されたすべてのシーケンスメソッドを更新することができます。

注記 取込とデータ解析パラメータが更新されます。

例えば、**[シーケンスの選択分析]** ダイアログは以下のように表示される場合があります。固有のサンプルを解析用にマークすることが可能です。

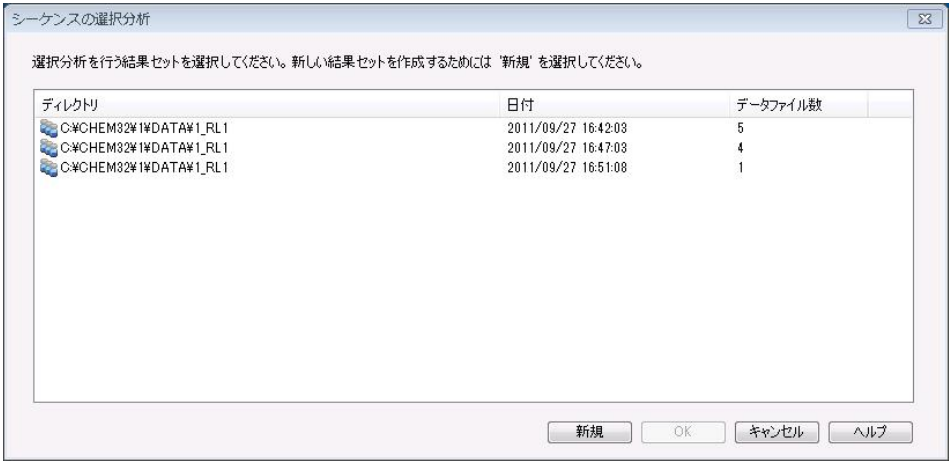


図 23　［シーケンスの選択分析］ダイアログボックス

シーケンスの選択分析を実行中は編集できません。

［シーケンスの選択分析］ダイアログではオーバーラップ注入をサポートしていません（「ハイスループットオプションの使用」107 ページを参照）。

新規結果セットの作成

［データ解析］ビューで**［シーケンス］** > **［新規結果セット作成］**コマンドを利用して、ナビゲーションテーブルに現在表示されているデータを使用して新しい結果セットを作成することができます。 新規結果セットの作成は、たとえば以下のような場合に役立ちます。

- 複数のシングルサンプル、複数のシーケンス、またはこれらが混在するデータを組み合わせて、特定のメソッドで再解析する場合。
- シーケンスの長さを短くしたい場合。

新規結果セットの作成方法

1 必要なデータファイルをナビゲーションテーブルに追加します。

2 ナビゲーションテーブルで、新規結果セットに含めるすべてのデータファイルを選択します。

3 **［シーケンス］** > **[新規結果セット作成]**を選択し、 **［新規結果セット作成］**ダイアログボックスを開きます。

4 新規結果セットに関連付けるメソッドを選択します。

5 新規結果セット用のフォルダーを指定します。

6 サンプルをソートします。

   出力データファイルの名前が自動的に更新されます。 必要な場合は、 (**［初期順序に戻す］**) ボタンを使用して、サンプルの当初の順番に戻すことができます。

   ブランクファイルのポジションは、ヨーロッパ薬局方で指定されたシグナル/ノイズ比の評価に重要です。 「ブランクサンプルを使用したシーケンス」 105 ページも参照してください。

7 設定を確認して OK し、選択したデータファイルリストで指定したフォルダーに結果セットを作成します。

シーケンスログファイル

シーケンス実行中に何が起こったかを示すシーケンスログファイルが生成されます。無人または終夜でシーケンスが実行されている場合にエラーが発生した時に認識するために役立ちます。ログブックファイルには、常に .log の拡張子が付きます。ログブックファイルは、シーケンスのデータが保存されているディレクトリにあります。

シーケンスの実行時に起こる事柄

シーケンスの開始

デフォルトのシーケンス実行モードで操作すると、シーケンスパラメータで定義されたパス、およびシーケンスプレファレンスに基づいて、結果セットがシステムにより作成されます。シーケンステンプレート（ファイル名.s）、このシーケンスに属するシーケンステーブルで定義されたすべてのメソッドは結果セットにコピーされます。インテリジェントレポートを使用している場合、メソッドまたはシーケンステンプレートで定義したすべてのレポートテンプレート（ファイル名.rdl）が、結果セットへとコピーされます。取り込み中、システムはこれらのファイルを使用します。シーケンスを開始すると、対応するシーケンス行のメソッドがこれらの結果セットから ChemStation に読み込まれます。

シーケンス実行モードの詳細については、「シーケンス実行モード」118 ページを参照してください。

シーケンス実行中にさらに実行されるステップ:

実行されるシーケンス行ごとに以下のステップが繰り返されます。

- オートサンプラがコンフィグレーションされている場合、ChemStation ソフトウェアは、バイアルの列に入力されている数字に従ってサンプルをセットします。
- メソッドパラメータを機器に読み込みます。
- プレランマクロを実行します。
- サンプルを機器に注入します（マニュアルまたは自動）。

- データが測定されます。
- メソッドデータ測定が終了します。ユーザー定義のマクロすべてを含む、積分、定量、およびレポート作成を実行します。実行中に追加のメソッド DA.M が保存されます。
- ポストランマクロが実行されます。
- 処理全体で、ChemStation ではシーケンスの進捗がリアルタイムで追跡管理され、シーケンスログファイルが作成されます。

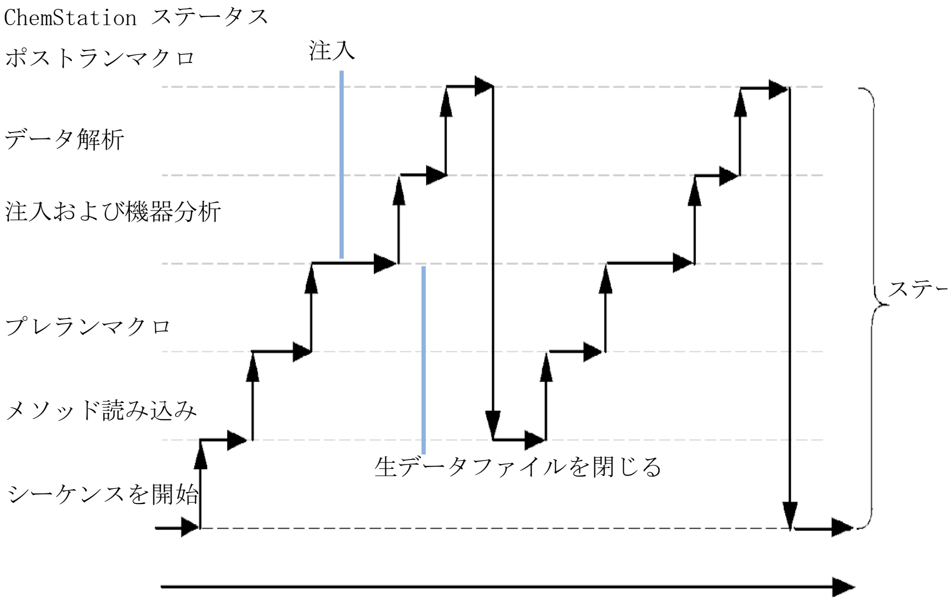


図 24　　シーケンスステータス

シーケンスデータファイルの構造

データファイルの構造

生データ、メソッド、結果セットの間には強い関連性があります。結果セットフォルダーには、シーケンスで取り込まれたすべてのデータファイル（*.D）が含まれます。

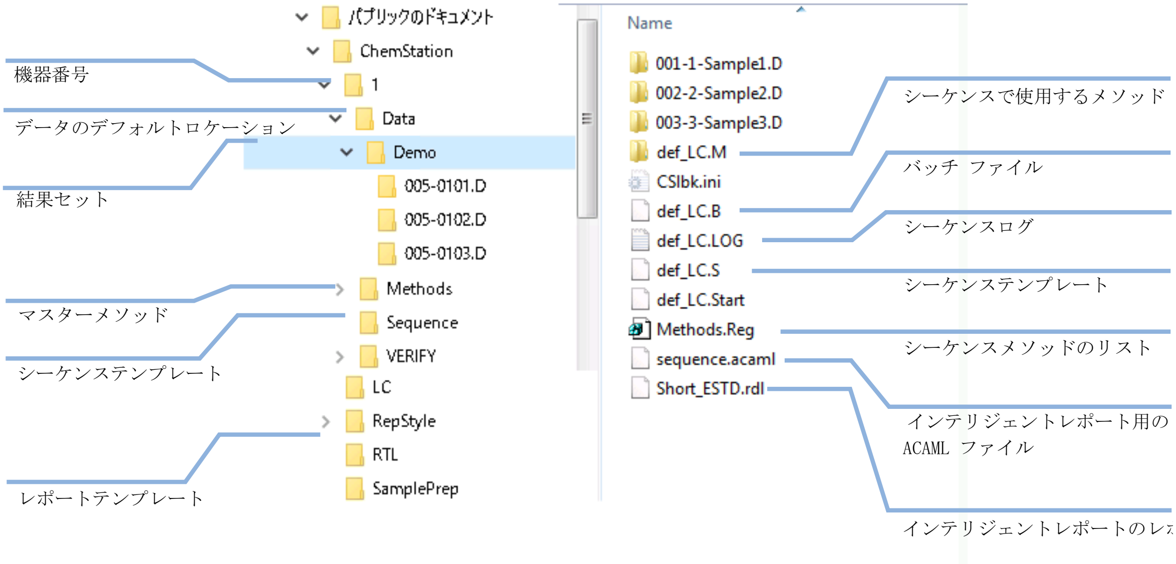


図 25　シーケンスデータファイルの構造

注記

結果セットには、完全なすべてのデータファイル（*.D）セットが常に含まれている必要があります。データファイルの一部を削除すると、中央データ記憶領域に結果セットをアップロードする際に問題が発生します。シーケンスを短くする必要がある場合は、シーケンスラインから一部抜粋した新規結果セットを作成します（「新規結果セットの作成」112 ページを参照してください）。

各データファイルは、シーケンスに取り込み済みであるか単一分析であるかに関わらず、データ解析に使用したメソッドにリンクされています。

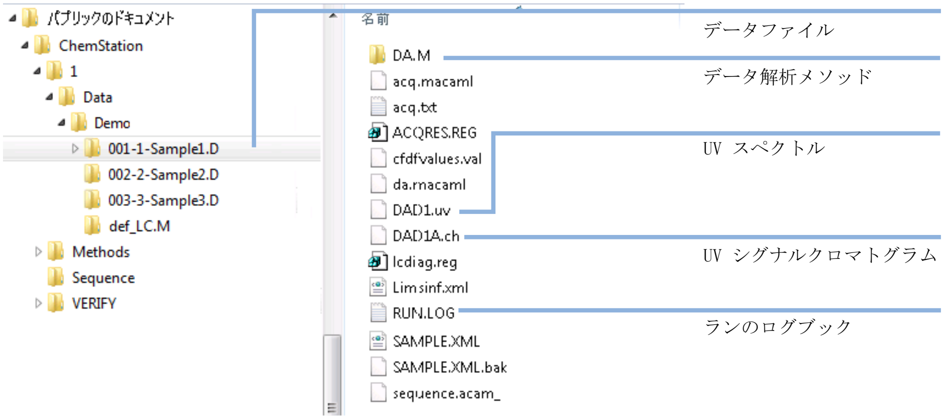


図 26　　データファイルコンテンツ

プレファレンス - シーケンスタブ

［**プレファレンス**］ダイアログの［**シーケンス**］タブで、シーケンス実行中に作成するフォルダーとファイル名を定義します。

シーケンスデータは、一意の結果セット名を使用して結果セットに保存されます。［**プレファレンス**］ダイアログボックスの［**シーケンス**］タブで、結果セットの命名規則（名前のパターン）を指定できます。名前のパターンが指定されていない場合、デフォルトのシーケンス名パターンが使用されます。［**シーケンス**］タブはデータ取り込み時に使用されるので、オンラインシステムのみに存在します。

シーケンス名のパターンには、さまざまなセクションを使用することができます。システムは、選択されたシーケンス名のパターンに含まれるセクションを使用して結果セットの名前を決定し、作成します。この特定のシーケンスに属するデータファイル、メソッド、シーケンスログブック、<sequence_name>.s ファイル、および <sequence_name>.b ファイルはすべて結果セットに保存されます。結果セットは、シーケンスが開始する際に作成されます。

シーケンスファイル（*.s）はシーケンステンプレートとして使用されるため、このコンセプトでは、既存のデータが上書きされることなく、またシーケンスパラメータが変更されることもなく、任意のシーケンスファイルを何度でも実行できます。カウンタと時間のどちらもシーケンス名パターンに使用されていない場合は、システムはカウンタを自動的に導入して、データが上書きさ

れないようにします。同じシーケンステンプレートを複数回使用する場合には、結果セット名にカウンタが追加されます。

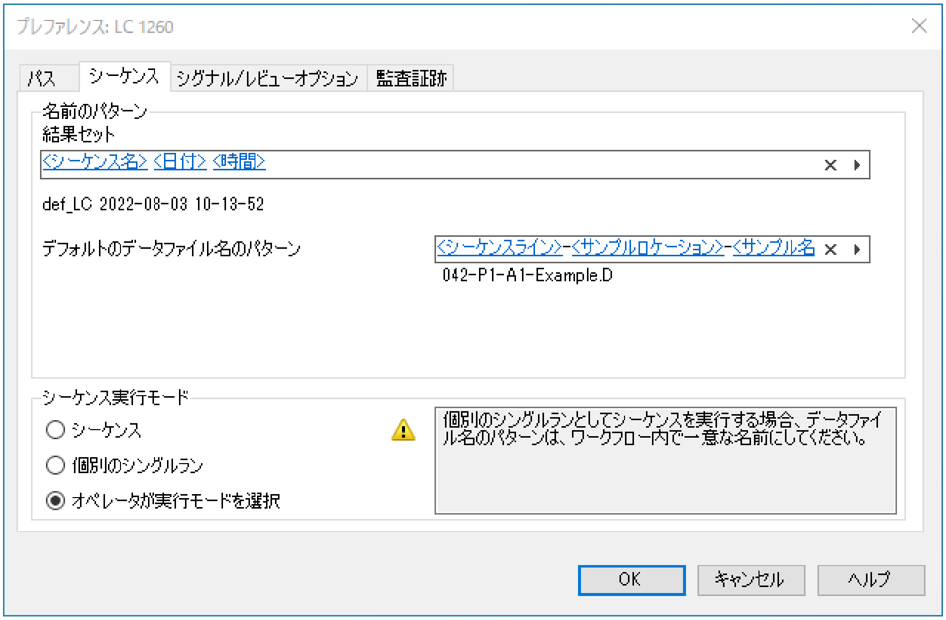


図 27　［プレファレンス］ ダイアログ / ［シーケンス］ タブ

結果セット名

結果セットフォルダーの名前のパターンを［**結果セット**］フィールドで定義します（117ページ 図27を参照）。デフォルトでは、<シーケンス名> <日付> <時間> という名前になりますが、トークンで設定したり、任意の名前を手動で入力することができます。トークンの詳細については、「ファイル名およびトークンの指定」14 ページを参照してください。結果セットフォルダーには、以下のトークンを使用できます。

- **現在の日付**
- **現在の時間**
- **ユーザー名**
- **機器名**
- **シーケンス名**
- **カウンター**
- **コンピュータ名**

結果セット名のパターンが一意の名前にならない場合、ChemStation はカウンターを付加して一意になるようにします。

結果セットフォルダーの保存場所は、［**シーケンスパラメータ**］ダイアログボックスで設定します（「シーケンスパラメータ」85 ページを参照）。

デフォルトのデータファイル名のパターン

［**プレファレンス**］ダイアログで、シーケンス実行中に作成されるデータファイルのデフォルトの名前のパターンを定義します。この設定は［**シーケンスパラメータ**］ダイアログのデフォルト値になります（「シーケンスパラメータ」85ページを参照）。［**シーケンスパラメータ**］ダイアログで、データファイル名の作成方法を定義します。

シーケンス実行モード

シーケンスを実行する場合、すべてのデータおよび関連ファイルが 1 つのフォルダーで利用できます。データはシーケンス全体のコンテキストで評価されます。これは、ブラケットキャリブレーションを実行する場合や、シーケンスサマリレポートを作成する場合などに必要です。

ただし、シングルランのほうがランキューをより柔軟に編集できます。

ChemStation では、ランシーケンスを**個別のシングルラン**として実行できます。この機能を使用すると、シーケンスの各ラインがシングルサンプルとしてランキューに追加されます。ファイルシステムに結果セットフォルダーは作成されません。シングルランのデータファイル（*.D）のみ作成されます。データファイル名は、［**デフォルトのデータファイル名のパターン**］フィールドで指定した定義に従います。

［シーケンス実行モード］で、以下のいずれかのオプションを選択します。

- **シーケンス**（デフォルト）：シーケンスを実行すると、結果セットフォルダーが常に作成されます。
- **個別のラン**：シーケンスはシングルランの一連として常に実施されます。このプレファレンスを設定している限り、結果セットは作成できません。
- **オペレータが実行モードを選択**：シーケンスを実行するごとに、［**シーケンス**］として実行するか、［**個別のラン**］として実行するか選択できます。

ChemStation の［すべてのラン］または［キューに追加］コマンドが対応するオプションによって拡張されます。以下に例を示します。

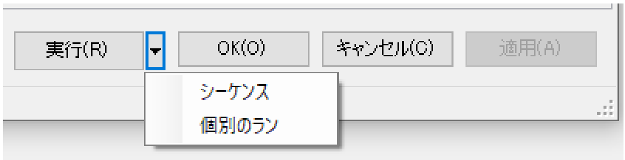


図 28　　シーケンステーブルのランオプション

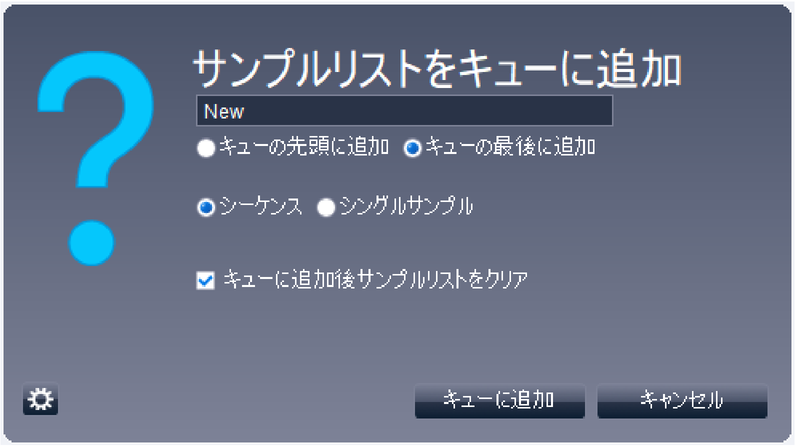


図 29　　［サンプルエントリ］タブのキューオプション

図 30　　シーケンスを個別のシングルランとして実行するための、シングルサンプル表示の［シーケンス］ボタン

データファイル名

シーケンスデータファイルの命名

シーケンスのデータファイル名を定義するには、シーケンスパラメータを設定します（「シーケンスパラメータ」 85 ページを参照）。

以下のオプションから選択します。

- 自動
- マニュアル
- プレフィックス/カウンター
- 名前のパターン

シーケンスのデータファイルの命名

バイアルトレイ内のサンプルバイアル

例： 017-0103.D

変数の意味は次のとおりです。

- 最初の 3 桁の数字（例では 017）は、バイアル番号です。
- 液体クロマトグラフィーとキャピラリー電気泳動の 4 桁目の数字は、区切り用のハイフン（-）です。ガスクロマトグラフィーでは、これはフロントの (F) またはバックの (B) になります。
- 5 桁目と 6 桁目は、シーケンスラインです。例えば、最初のシーケンスラインは 01 になります。
- 7 桁目と 8 桁目は、そのシーケンスラインでの繰り返し注入の番号です。例えば、3 回の繰り返し注入は 03 になります。

マルチサンプラ内のサンプル

例：D1F-A3-0201.D

変数の意味は次のとおりです。

- D1F：ドローア（この例では D1）内のサンプルコンテナの位置（この例ではフロント）
- A3：サンプルコンテナ内のサンプルの位置
- 0201：シーケンスライン 2、最初の注入

ブランクラン

例：NV--0499.D

変数の意味は次のとおりです。

- NV はバイアルなし（no vial）の頭文字です。
- - は、区切り用のハイフンです。
- 0499 は、シーケンスライン 4 の99 番目のブランクランです。

データファイル名のマニュアル入力

シーケンステーブルに、［**データファイル**］という列があります。その列にエントリがない場合は、シーケンスパラメータで指定されたデータファイル命名規則（自動、プレフィックスカウンター、または名前のパターン）でデータファイル名が作成されます。［**データファイル**］列に任意のテキストを入力すると、ChemStation ではそのテキストが分析のデータファイル名として使用されます。

マニュアルでデータファイル名を指定したラインで、バイアルごとに複数回の注入が指定されていると、ユーザーが入力した名前の末尾から文字が自動的に切り捨てられ、代わりに注入番号が追加されます。これにより、複数の注入で同じデータファイル名が使用されるのを防ぎます。

データファイルの命名にプレフィックス/カウンターを使用

［プレフィックス/カウンター］を使用してデータファイルに名前を付ける場合は、ChemStation では各分析の名前が割り当てられます。GC のようにデュアルシグナル分析をサポートする機器では、ChemStation ではシグナルごとに名前が付けられます。

シーケンス設定では、プレフィックス/カウンターに長いファイル名を使用できます。プレフィックス/カウンターにより定義されたデータファイル名には、最高 15 文字と .d の拡張子、つまり全体で 17 文字まで使用できます。

プレフィックス/カウンターのフィールドには、次のルールが適用されます。

- カウンターは、最大 6 文字まで
- プレフィックスに使用されている文字が 9 文字未満の場合、カウンターを自動的に 6 桁に拡張
- カウンター内で指定されている番号は、インクリメントの開始番号

表 8　ファイル名

プレフィックス	カウンタ	作成されるファイル名
long	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

データファイルの命名に名前のパターンを使用

以下のトークンを使用して各シーケンスラインのデータファイル名を作成できます。

サンプル名　情報はバーコード化されているか、［サンプル名］フィールドに入力されています。

> **注記**
>
> **バーコードは、データファイル名には表示されません。バーコードは、データファイルのパスと名前が展開される時に確認されます。**

サンプルタイプ　サンプルのタイプ：QC サンプル、キャリブレーション、サンプル。

サンプルロケーション　サンプルのバイアルまたはウェルプレートの位置。

メソッド　シーケンスラインに使用したメソッドの名前。

シーケンス ライン　実行中のシーケンスの、現在のライン番号。

注入回数　このバイアルからの注入回数。

日付　サンプルの測定開始時の日付。

時間　サンプルの測定開始時の時間。

機器がさまざまな注入ロケーションをサポートしている場合（バックおよびフロント インジェクタ搭載の GC など）、ロケーションごとに異なるパターンを指定できます。たとえば、プレフィックスを使用して注入ロケーションを表示することができます。

- フロントト注入の場合は **F-<シーケンス ライン>-<サンプルロケーション>-<サンプル名>**、
- バック注入の場合は **B-<シーケンス ライン>-<サンプルロケーション>-<サンプル名>**。

注記 分析が開始されるまでデータファイル名は変換されません。このため、シーケンステーブルにデータファイル名は記載されていません。

変換されるデータファイル名は 40 文字に制限されます。それより長いファイル名は切り詰められます。変換されたファイル名が一意でない場合、カウンターが追加されます。

結果セットのマイグレーション

ChemStation には、結果セットではないデータを結果セット形式に移行するツールがあります。このタスクを正常に実行するには、オリジナルのシーケンスファイルが使用できる必要があります。シーケンスのすべてのデータファイルを再処理するために、このファイルは、必要なすべてのシーケンス行を含み、元のデータのファイル命名規則に従っている必要があります。さらに、シーケンステーブルの [メソッド] 列に含まれるすべてのメソッドが利用できる必要があります。

マイグレーションを実行するには、**[データ解析]** ビューの **[シーケンス]** メニューから、**[結果セットマイグレーション]** を開始します。

結果セットのマイグレーションは、個別のシングルランとして実行されたシーケンスのデータをサポートしていません（「シーケンス実行モード」118 ページを参照）。

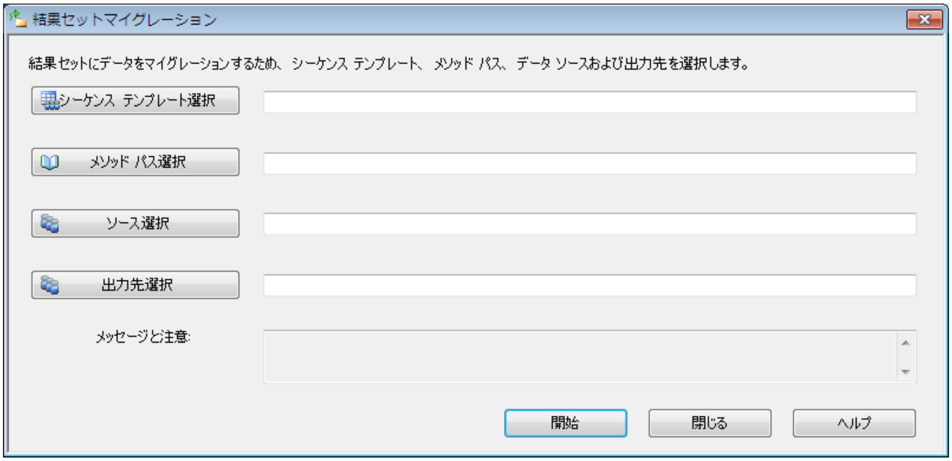


図 31　　結果セットのマイグレーション

以下の必須フィールドに入力します。

[シーケンステンプレート選択]：移行するデータセットを照合するシーケンステーブルを含むシーケンスファイル (*.S) を選択します。

[メソッドパス選択]：シーケンステーブルが参照しているメソッドが含まれるディレクトリを選択します。

[ソース選択]：移行するデータファイルを含むディレクトリを選択します。

[出力先選択]：作成する結果セットのパスおよび名前を指定します。既存のフォルダーを選択するか、新しいフォルダーを作成します。

すべてのフィールドへの入力が完了したら、マイグレーションを開始できます。

以下の手順が実行されます。

- 結果セットディレクトリが作成されます。
- シーケンステンプレートが結果セットにコピーされます。このテンプレートは、**[データ解析]** ビューでデータファイルを再処理できる状態に変換されます。
- シーケンステーブルで参照するメソッドは、指定したメソッドパスから結果セットフォルダーにコピーされます。
- データファイル、シーケンスログブック、およびバッチファイルが、データソースディレクトリから出力先ディレクトリにコピーされます。
- シーケンステーブルの情報に従って、対応するメソッドのコピーがデータファイルごとに DA.M としてコピーされます。

結果セットのマイグレーションが完了すると、成功のメッセージが **[メッセージと注意]** フィールドに表示されます。マイグレーション中に問題が発生した場合にも、それを表すメッセージが表示されます。警告メッセージをダブルクリックすると、警告に関する詳細が表示されます。

ポストシーケンス処理

通常実行中のシーケンスが完了した後、またはシーケンス処理中にChemStation にエラーが発生した後の処理を指定できます。これはシーケンスパラメータセクション［**シャットダウン**］の［**ポスト シーケンス コマンド/マクロ**］を有効にして行います。機器タイプ用に設定されたビルトインコマンドを選択できます。たとえば、

- 機器をスタンバイモード（STANDBY）に設定：すべてのランプ、ポンプ、サーモスタット、およびサンプルクーラーがオフになる
- ランプをすべてオフ（LAMPOFF）：すべてのランプがオフになる
- ポンプをすべてオフ（PUMPOFF）：すべてのポンプがオフになる
- デフォルトの SHUTDOWN マクロを使用するか、SHUTDOWN.MAC を変更して、特定の処理を決定する

  たとえば、シーケンスが完了した後は、システムのスイッチを切ることができます。シャットダウンマクロを使用すると、フローをゼロにセットしたり、フローを緩やかに減らしたりもできます。変更されていない SHUTDOWN マクロによって STANDBY コマンドが実行されます。

  使用可能なビルトインコマンドの詳細については、ChemStation オンラインヘルプの「コマンド」を参照してください。

シーケンスパラメータセクションの［**シャットダウン**］で、カスタムコマンドまたはマクロを指定できます。カスタムコマンドとその設定方法の詳細については、「ChemStationのカスタムコマンドまたはマクロの使用」29ページを参照してください。

ノットレディータイムアウト (LC および CEのみ)

シーケンスパラメータ内のノットレディータイムアウトは、機器の準備が整うまでシステムが待機する時間の長さです。この時間が経過すると、システムはシャットダウンします。

待機時間 (LC および CE のみ)

シーケンスパラメータでは、メソッドの読み込み後、そのメソッドを使用して注入するまでの待機時間を指定できます。これは、新しい分析条件を利用する場合に、カラム/キャピラリを再平衡化するために役立ちます。

自動リキャリブレーション

キャリブレーションは、たとえばカラムやキャピラリの変更など、操作条件を変更した後にしばしば実行されます。分析性能に影響を与えるファクタを補正するために、分析シーケンスの開始時またはシーケンス実行中に定期的にプログラムの一部として自動リキャリブレーションを実行します。

リキャリブレーション実施中、使用したメソッドのキャリブレーションテーブルは定義したメソッド設定に従って更新されます。リキャリブレーションされたメソッドは結果セット内で使用できます。この処理中、シーケンスメソッドのキャリブレーションテーブルは更新されます。DA.M に加え、個々のデータファイルのメソッドには結果作成に使用したキャリブレーションの更新が含まれます。

自動シーケンスリキャリブレーションを指定するには、2 つの方法があります。

- 明示的キャリブレーションシーケンス
- 周期的キャリブレーションシーケンス

シングルサンプルまたは個別のシングルサンプル実行時に、マスターメソッドのキャリブレーションテーブルを更新することもできます。

リキャリブレーションの指定

シーケンス用のリキャリブレーションパラメータは、シーケンステーブルに直接入力されます。これらのパラメータは、シーケンスの中でメソッドがどのようにリキャリブレーションされるかを定義します。

シーケンステーブルおよび［サンプル情報］ダイアログのリキャリブレーションパラメータ

レスポンスファクタ (RF) とリテンション/マイグレーションタイム (RT) は、いくつかの方法で更新できます。キャリブレーションレベル、レスポンスファクタの更新、およびリテンション/マイグレーションタイムの更新は、データ解析でキャリブレーションテーブルをリキャリブレーションする際に使用される手順です。

キャリブレーションをサンプルテーブルのサンプルタイプ列に入力すると、以下の列がアクティブになり、編集できるようになります。

- Cal レベル
- RT 更新
- RF 更新
- Cal インターバル

これらの各列に入力できる値を表に示します。

表 9　シーケンステーブル内のリキャリブレーションパラメータ

CAL レベル	RT 更新	RF 更新	インターバル
キャリブレーションテーブルレベル番号 (1-999)	更新せず	更新せず	周期的リキャリブレーションインターバル番号 (1-999)
	平均	平均	ブランク
	置換	置換	
		ブラケット	
		F %	

この表は、リキャリブレーションパラメータの入ったシーケンステーブル内の列と入力できる値を示しています。シングルメソッドランをキューに追加する時あるいは、ランキューで保留中のシングルメソッドランの変更時に、［サンプル情報］ダイアログに同じパラメータを入力できます。

更新なし

レスポンスファクタもリテンション/マイグレーションタイムも変更しません。

置き換え

以前のリテンション/マイグレーションタイムとレスポンス（面積または高さ）を現在のランのみから得たその値に置き換えます。このリキャリブレーションランで見つからなかったピークについては、レスポンスは変更されません。

平均

元のキャリブレーションランおよびそれ以降に平均化されたすべてのリキャリブレーションの各ピークのリテンション/マイグレーションタイムとレスポンス（面積または高さ）を平均します。リキャリブレーションのどれかでピークが見つからない場合、ピークの平均レスポンスは影響を受けません。

ブラケット

サンプルの分析前後にキャリブレーションを行います。分析後のキャリブレーションランが完了すると、その結果が評価されます。既存のキャリブレーションデータが、分析前のキャリブレーションランの結果で置き換えられます。分析後のキャリブレーションのデータと、そのキャリブレーションテーブルの値が平均されます。

インターバル

インターバルは、シーケンス中のキャリブレーション頻度を決定します。キャリブレーション頻度は、次のキャリブレーション注入を実行する前に何本のサンプル注入を行うかに相当します。分析の開始時に、キャリブレーションが行われ、結果（レスポンスファクタ）がキャリブレーションテーブルに入力されます。これらの結果は、その後の定量計算に用いられます。指定した注入回数が実行されると、別のキャリブレーションが実行され、その結果がキャリブレーションテーブルに入力されます。この時、前のキャリブレーション分析結果は上書きされます。

デルタ %

デルタ % の計算により、キャリブレーションテーブルにマニュアルで入力されたレスポンスファクタを持つ分析のレスポンスファクタの比較が可能になります。その後、デルタ % がテーブル内のキャリブレーションされたすべてのピークに適用されます。いくつかの内部標準を識別でき、その後、その測定されたレスポンスファクタを使用して、その他のピークの新しいレスポンスファクタが計算されます。キャリブレーションテーブル内の各ピークのデルタ % 計算にどの内部標準を使用するかを見極めます。

シーケンスのタイプ

シーケンスを準備する際には、以下のシーケンスタイプを使用できます。

- 明示的なキャリブレーションシーケンス
- 明示的なシングルレベル キャリブレーション シーケンス
- 周期的なマルチレベル キャリブレーション シーケンス
- 1 つのシーケンス内での明示的で周期的なキャリブレーション
- ブラケットされたキャリブレーションでの周期的なキャリブレーション シーケンス

注記

シーケンスをランキューに送信した後は、すべてのシーケンス（ブラケットされたキャリブレーションを持つシーケンスも含めて）が明示的なキャリブレーション シーケンスに変換されます。「シーケンスの実行」106 ページを参照してください。

分析中は、シーケンステーブルには、機器によって注入が処理されていくのに合わせて、単純にランごとの注入が表示されます。分析中にサンプルを追加すると、すべてのシーケンスサンプル（キャリブレーションサンプルも含む）がシーケンステーブルの下方へ移動します。

明示的キャリブレーションシーケンス

この種類のシーケンスは、シーケンステーブルでユーザーが定義したインターバルでリキャブレーションされます。

明示的キャリブレーションシーケンスには、シーケンステーブル内にインターバルのエントリを指定せずに、キャリブレーションサンプルがシーケンスに入れられます。シーケンステーブル内にあるキャリブレーションサンプルのエントリごとに、リキャリブレーションが 1 度行われます。

周期的シングルレベルキャリブレーションシーケンス

この種類のシーケンスは、同じバイアル、つまり、シーケンス内で規則的なインターバルのキャリブレーションサンプルを使用します。

シーケンステーブル内のインターバルエントリは、リキャリブレーションの実行方法を決定します。例えば、インターバル値が 2 の場合は、シーケンス内で 2 つのサンプルバイアルごとにリキャリブレーションされます。

周期的マルチレベルキャリブレーション シーケンス

このタイプのシーケンスは、異なるキャリブレーションサンプルを使用して、マルチレベルキャリブレーションメソッドをリキャブレーションします。

次に挙げる例では、2 つのグループのサンプルを分析するためにメソッド A およびメソッド B からなる 2 つのメソッドシーケンスについて説明します。メソッドの両方は、マルチレベルキャリブレーションメソッドで、定義されたインターバルごとに自動的にリキャリブレーションを行います。

シーケンステーブルには、メソッドごとに次の 3 つのエントリがあります。

- 2 つのキャリブレーションレベル:
  - メソッド A のシーケンスライン 1 および 2。
  - メソッド B のシーケンスライン 8 および 9。
- サンプル用の 5 つのエントリ:
  - メソッド A のシーケンスライン 3 から 7 まで。
  - メソッド B のシーケンスライン 10 から 14 まで。

シーケンスリキャリブレーションテーブルのリキャリブレーションインターバルによって、キャリブレーションは規則的なインターバルに実行されるように指定されています。

- メソッド A では、サンプルが 2 つ終わるごとにリキャブレーションされます。
- メソッド B では、サンプルが 3 つ終わるごとにリキャブレーションされます。

以下のシーケンステーブルでは、例を単純化するために省略してあります。

表 10 メソッド A および B 用のシーケンステーブル

ライン	サンプルロケーション	メソッド名	注入回数	サンプルタイプ	Cal レベル	RF 更新	RT 更新	Cal インターバル
1	1	メソッド A	1	キャリブレーション	1	平均	更新なし	2
2	2	メソッド A	1	キャリブレーション	2	平均	更新なし	2
3	10	メソッド A	1					
4	11	メソッド A	1					
5	12	メソッド A	1					
6	13	メソッド A	1					
7	14	メソッド A	1					
8	3	メソッド B	1	キャリブレーション	1	平均	更新なし	3
9	5	メソッド B	2	キャリブレーション	2	平均	更新なし	3
10	20	メソッド B	1					
11	21	メソッド B	1					
12	22	メソッド B	1					
13	23	メソッド B	1					
14	24	メソッド B	1					

メソッド A の分析順序

メソッド A は、2 つのメソッドを含むシーケンスの最初の部分のメソッドです。

表 11 メソッド A の分析順序

注入番号	メソッド	バイアル	操作
1	メソッド A	1	キャリブレーションレベル 1 およびレポート
2	メソッド A	2	キャリブレーションレベル 2 およびレポート
3	メソッド A	10	サンプル分析およびレポート
4	メソッド A	11	サンプル分析およびレポート
5	メソッド A	1	キャリブレーションレベル 1 およびレポート
6	メソッド A	2	キャリブレーションレベル 2 およびレポート
7	メソッド A	12	サンプル分析およびレポート
8	メソッド A	13	サンプル分析およびレポート
9	メソッド A	1	キャリブレーションレベル 1 およびレポート
10	メソッド A	2	キャリブレーションレベル 2 およびレポート
11	メソッド A	14	サンプル分析およびレポート

メソッド B の分析順序

メソッド B は、2 つのメソッドを含むシーケンスの 2 番目の部分のメソッドです。メソッド B はメソッド A とは異なり、キャリブレーションレベル 2 では、バイアルごとに 2 回の注入があります。インターバルエントリは、3 に設定されています。

表 12　　メソッド B の分析順序

注入番号	メソッド	バイアル	操作
12	メソッド B	3	キャリブレーションレベル 1 およびレポート
13	メソッド B	5	キャリブレーションレベル 2 およびレポート
14	メソッド B	5	キャリブレーションレベル 2 およびレポート
15	メソッド B	20	サンプル分析およびレポート
16	メソッド B	21	サンプル分析およびレポート
17	メソッド B	22	サンプル分析およびレポート
18	メソッド B	3	キャリブレーションレベル 1 およびレポート
19	メソッド B	5	キャリブレーションレベル 2 およびレポート
20	メソッド B	5	キャリブレーションレベル 2 およびレポート
21	メソッド B	23	サンプル分析およびレポート
22	メソッド B	24	サンプル分析およびレポート

135ページ表11 および 136ページ表12 に表示された結果は、シーケンステーブルの［シーケンスプレビュー］ボタンを使用して取得できます。

明示的および周期的キャリブレーション両方

この種類のシーケンスは、同じシーケンス内にある明示的および周期的キャリブレーションから構成されています。

この機能を使用すると、シーケンスの初めにメソッドを完全にリキャリブレーションすることができ (**明示的リキャリブレーション**)、その後、シーケンスの間にキャリブレーションの更新ができます (**周期的リキャリブレーション**)。

- **シーケンステーブル内で、キャリブレーションレベルごとに、キャリブレーション ラインを 2 行指定する必要があります。**キャリブレーション ラインの 1 つは、明示的リキャリブレーションエントリ用で、もう 1 つは、周期的リキャリブレーションエントリ用です。
- シーケンステーブルでは、キャリブレーション ラインごとのエントリを**必ず**含む必要があり、またすべての周期的リキャリブレーションバイアルは、**必ず**明示的リキャリブレーションおよびサンプルエントリの前に位置する必要があります。

例

以下のシーケンステーブルは、SimpReg と呼ばれるシングルレベルキャリブレーションメソッドを表しています。 例を単純化するために省略してあります。

表 13　SIMPREG 用のシーケンステーブル

ライン	サンプル ロケーション	メソッド名	注入回数	サンプル タイプ	Cal レベル	RF 更新	RT 更新	Cal インターバル
1	1	SimpReg	1	キャリブレーション	1	平均	平均	3
2	1	SimpReg	1	キャリブレーション	1	置き換え	置き換え	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

シングルキャリブレーションレベルごとに 2 つのエントリがあります。

- 最初のキャリブレーションラインは、同じレベル用ですが、キャリブレーションパラメータを平均化します。 インターバルのエントリは、サンプルが3つ終わるごとにリキャリブレーションが実行されるように指定します。
- 2 番目のエントリは、すべてのリキャリブレーションパラメータを置き換えます。つまり、リキャリブレーション全体が実行されます。 これには、リキャリブレーションインターバルが**ありません**。

シーケンステーブル

シーケンステーブルは 7 行で構成されています。 最初の行は、周期的リキャリブレーションサンプルを示しています。 2 番目の行は、シーケンスの始めに 1 度だけ実行される明示的リキャリブレーションを示しています。 3 行目から 7 行目までは、分析するサンプルです。

シーケンステーブルのエントリの順序はとても重要です。 周期的キャリブレーションを指定するすべての周期的リキャリブレーションバイアルのエントリは、サンプルエントリ、またはメソッド用の明示的なリキャリブレーションエントリよりも**必ず前に**位置する必要があります。

SimpReg の分析順序

以下の表は、SimpReg メソッドの分析順序です。

表 14　　SimpReg の分析順序

シーケンスライン	注入番号	メソッド	バイアル	操作
2	1	SimpReg	1	サンプルキャリブレーション
1	2	SimpReg	1	通常キャリブレーション
3	3	SimpReg	2	サンプル分析
3	4	SimpReg	3	サンプル分析
4	5	SimpReg	4	サンプル分析
5	6	SimpReg	1	通常キャリブレーション
6	7	SimpReg	5	サンプル分析
7	8	SimpReg	6	サンプル分析

ブラケットを使用した周期的キャリブレーションシーケンス

ブラケットを使用した周期的キャリブレーションシーケンスでは、現在のキャリブレーションと以前のキャリブレーションの結果を平均化するにより、不明の定量結果を計算するために使用されるキャリブレーションテーブルが生成されます。この新しいキャリブレーションテーブルは、サンプルの分析時の機器のレスポンスをより正確に表すものです。

例

次のような状況を考えてみてください。

- 機器のレスポンスがドリフトしている。
- 同一の 2 成分混合物が 3 回注入されるように指定されている。
- 2 回の注入は、キャリブレーションサンプルとして指定されており、残りの 1 回は、サンプルとして指定されている。
- 最初と 3 番目の注入は、キャリブレーションサンプルである。
- 2 番目の注入はサンプルです。

2 番目の注入 (サンプル) の正確な定量結果を取得するには、2 つのキャリブレーションサンプル間の線形補間行われる必要があります。図を参照してください。この処理は、ブラケットと呼ばれます。

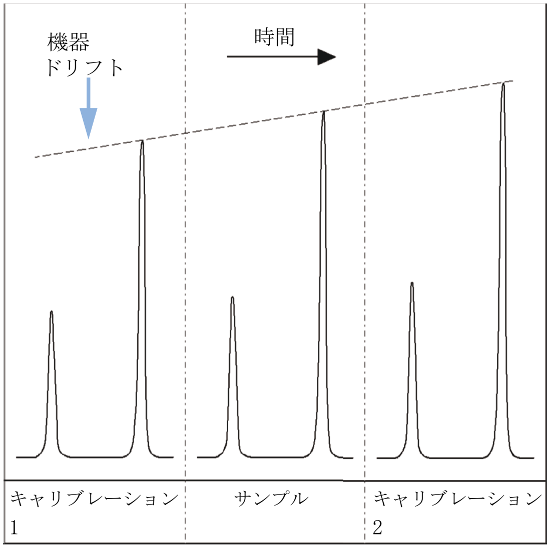


図 32　　ブラケット

ブラケットシーケンス処理

- 最初のキャリブレーションバイアルが分析される。
- サンプルバイアルが分析される。
- 次のキャリブレーションバイアルが分析される。
- 既存のレスポンスファクタを新しいものと取り替えて、以降のキャリブレーションランを新しいキャリブレーションテーブルに平均化して格納することにより、キャリブレーションテーブルが作成される。
- サンプルバイアルデータが解析され、レポートが生成される。
- 分析が必要なサンプルバイアルがさらにある場合は、ステップ 2 へシーケンスが戻る。

例

このセクションでは、Brack.M と呼ばれる 1 つのメソッドから構成されるブラケットシーケンスの例を説明します。Brack.M メソッドは、周期的キャリブレーションを使用した 2 レベルの内部標準メソッドです。

シーケンステーブル

Brack.M のシーケンステーブル（次ページ）は、例を単純化するために省略してあります。このシーケンステーブルは 7 行で構成されています。最初の 2 行は各レベル用にリキャリブレーション条件を定義します。残りの行は、分析するサンプルを定義します。

さらに具体的に説明すると、Brack.M メソッドのテーブルには次に挙げるものが含まれます。

- キャリブレーションサンプルを使用したサンプルのブラケットを指定する、[レスポンスファクタ更新] 列の中の「ブラケット」というエントリ。
- リテンション/マイグレーションタイムの置換を指定する、[リテンション/マイグレーションタイム更新] 列の中の「置き換え」というエントリ。
- 3 サンプルごとにリキャリブレーションを実行するように指定する、[リキャリブレーションインターバル] 列の中にある「3」というエントリ。

表 15 BRACK-M 用シーケンステーブル

ライン	サンプルロケーション	メソッド名	注入回数	サンプルタイプ	Cal レベル	RF 更新	RT 更新	Cal インターバル
1	1	BRACK-M	2	キャリブレーション	1	ブラケット	置き換え	3
2	2	BRACK-M	2	キャリブレーション	2	ブラケット	置き換え	3
3	10	BRACK-M	1					
4	11	BRACK-M	1					
5	12	BRACK-M	1					
6	13	BRACK-M	1					
7	14	BRACK-M	1					

```
--------------------------------------------------------------------------------------
Run  Method    Vial Inj  DataFile    Lvl  Upd   Upd   Operation
No.  Name      No.  No.  Name        No.  RF    Ret
--------------------------------------------------------------------------------------
 1   Brack.M    1    1   c1-03001.d  1    R     R     Report for Calibration Run No.1
 2   Brack.M    1    2   c1-03002.d  1    A     R     Report for Calibration Run No.2
 3   Brack.M    2    1   c2-03001.d  2    R     R     Report for Calibration Run No.3
 4   Brack.M    2    2   c2-03002.d  2    A     R     Report for Calibration Run No.4
                                                      Print Calibration Table
 5   Brack.M   10    1   010-0301.d                   Sample Analysis, no report
 6   Brack.M   11    1   011-0301.d                   Sample Analysis, no report
 7   Brack.M   12    1   012-0301.d                   Sample Analysis, no report
 8   Brack.M    1    1   c1-03003.d  1    A     R     Calibration Analysis, no report
 9   Brack.M    1    2   c1-03004.d  1    A     R     Calibration Analysis, no report
10   Brack.M    2    1   c2-03003.d  2    A     R     Calibration Analysis, no report
11   Brack.M    2    2   c2-03004.d  2    A     R     Calibration Analysis, no report
                                                      Print Calibration Table
                         010-0301.d                   Report for  Sample     Run No.5
                         011-0301.d                   Report for  Sample     Run No.6
                         012-0301.d                   Report for  Sample     Run No.7
                         c1-03003.d  1    R           Report for Calibration Run No.8
                         c1-03004.d  1    A           Report for Calibration Run No.9
                         c2-03003.d  2    R           Report for Calibration Run No.10
                         c2-03004.d  2    A           Report for Calibration Run No.11
12   Brack.M   13    1   013-0301.d                   Sample Analysis, no report
13   Brack.M   14    1   014-0301.d                   Sample Analysis, no report
14   Brack.M    1    1   c1-03005.d  1    A     R     Calibration Analysis, no report
15   Brack.M    1    2   c1-03006.d  1    A     R     Calibration Analysis, no report
16   Brack.M    2    1   c2-03005.d  2    A     R     Calibration Analysis, no report
17   Brack.M    2    2   c2-03006.d  2    A     R     Calibration Analysis, no report
                                                      Print Calibration Table
                         013-0301.d                   Report for Sample Run No.12
                         014-0301.d                   Report for Sample Run No.13
                         c1-03005.d  1    R           Report for Calibration Run No.14
                         c1-03006.d  1    A           Report for Calibration Run No.15
                         c2-03005.d  2    R           Report for Calibration Run No.16
                         c2-03006.d  2    A           Report for Calibration Run No.17
--------------------------------------------------------------------------------------
                                             Where A = average
                                                   R = replace
```

図 33　ブラケットシーケンスの分析順序

標準の同じ希釈率を含むマルチバイアルを使用した周期的リキャリブレーションシーケンス

「ラウンドロビン」キャリブレーションバイアルを使用した周期的リキャリブレーションシーケンス

周期的リキャリブレーションを実行する、つまり決まった数のサンプル注入の後に自動リキャリブレーションを実行する大きなシーケンスを分析する場合、シーケンスの過程においてキャリブレーションバイアルの容量が空になってしまうという潜在的リスクがあります。ChemStation シーケンステーブルは、**ラウンドロビン**形式で使用される標準と同じ希釈率を含む一連のバイアルを使用する方法を提供します。

この機能のおかげで、複数のキャリブレーションを使用する大きなシーケンスを、決まったインターバルで自動リキャブレーションを行うように定義でき、各キャリブレーションバイアルは同一程度に消費されます。

適切な数のキャリブレーションバイアルを定義することで、各キャリブレーションバイアルが一度だけ使用されることを保証することもできます。たとえば、すべてのリキャリブレーションに新しいキャリブレーションバイアルが必要とされる場合には、以上のことは重要な要件です。なぜなら、いったんセプタムが破裂したり、スチールニードルと接触して劣化し始めると、検体が蒸発するからです。以下のセクションでは、ChemStation シーケンステーブルを以上の要件を満たすように設定するにはどうしたらよいかについて説明します。

シーケンス全体におけるキャリブレーション化合物の予想使用量に基づいて、各レベル用のキャリブレーションバイアルの全体の数を決定してください。

キャリブレーションバイアルごとに、個別の周期的リキャリブレーション行を設定します。同一のキャリブレーションレベル用に定義された行は、隣接するシーケンス行の中にある必要があり、定義されたバイアルの位置も、隣接している必要があります。すべてのキャリブレーション行に対して、同一のリキャリブレーションインターバルを選択します。たとえば、使用するシーケンスでサンプル注入を 6 回行うたびにリキャブレーションすル必要がある場合、リキャブレーションインターバルを 6 に設定します。

表 16　各レベルに定義された 3 つのバイアルを使用する周期的リキャリブレーションシーケンス

バイアル番号	サンプル名	サンプルタイプ	メソッド名	注入回数	レベル	RT 更新	RF 更新	インターバル
1	Cal1a	Calib	メソッドA	1	1	平均	平均	6
2	Cal1b	Calib	メソッドA	1	1	平均	平均	6
3	Cal1c	Calib	メソッドA	1	1	平均	平均	6
5	Cal2a	Calib	メソッドA	1	2	平均	平均	6
6	Cal2b	Calib	メソッドA	1	2	平均	平均	6
7	Cal2c	Calib	メソッドA	1	2	平均	平均	6
10	サンプル10	サンプル	メソッドA	6				
11	サンプル11	サンプル	メソッドA	6				
12	サンプル12	サンプル	メソッドA	6				
13	サンプル13	サンプル	メソッドA	6				
14	サンプル14	サンプル	メソッドA	6				

実行の順序は次のとおりです。

- バイアル 1 (Cal1a)
- バイアル 5 (Cal2a)
- バイアル 10 (サンプル 10) から 6 回注入
- バイアル 2 (Cal1b)
- バイアル 6 (Cal2b)
- バイアル 11 (サンプル 11) から 6 回注入
- バイアル 3 (Cal1c)
- バイアル 7 (Cal2c)
- バイアル 12 (サンプル 12) から 6 回注入
- バイアル 1 (Cal1a)
- バイアル 5 (Cal2a)
- バイアル 13 (サンプル 13) から 6 回注入
- バイアル 2 (Cal1b)

- バイアル 6 (Cal2b)
- など

キャリブレーションごとに異なるバイアルを使用する周期的リキャリブレーション

すべてのキャリブレーションバイアルが、確実に 1 度だけ注入されるようにするために、シーケンスは十分な数の異なるキャリブレーションバイアルを定義し、 前の例で説明した**ラウンドロビン**順が適用されないようにする必要があります。たとえば、サンプル10 個ごとに要求されるリキャリブレーションに、シーケンスが 80 個のサンプルバイアルを処理する場合、シーケンステーブルには、各レベルごとに 80/10 + 1= 9 で計算される 9 個のキャリブレーション行が含まれている必要があります。

前の例にあったように、キャリブレーション行は、隣接するバイアルの位置を参照する隣接するシーケンス行である必要があります。

開始および終了ブラケットに異なるバイアルを使用するブラケットシーケンス

同じ機能がブラケットシーケンスでも利用可能です。キャリブレーションバイアルの適切なバイアル範囲を定義することにより、異なるキャリブレーションバイアルが開始および終了ブラケットに使用されるようにブラケットシーケンスを定義できます。この場合もまた、キャリブレーションバイアルのバイアルの位置と同じく、シーケンス内のキャリブレーション行は隣接している必要があります。

ブラケットキャリブレーションバイアルがラウンドロビンモードで使用されるか、1 回のシングル注入のみに使用されるかは、各レベル用のキャリブレーションバイアルの合計数、およびシーケンスが要求するリキャリブレーションの数に単に依存します。

以下の例では、キャリブレーションによりブラケットされている 3 回のサンプル注入を定義しています。開始ブラケットは、終了ブラケットとは異なるキャリブレーションを使用します。サンプル注入が行われるごとに、リキャリブレーションを実行する必要があります。このため、リキャブレーションインターバルは 1 にします。レベルごとのキャリブレーション行の数は、サンプルの数に 1 を足した数です。

表 17　開始および終了ブラケットに使用される異なるバイアル

バイアル番号	サンプル名	サンプルタイプ	メソッド名	注入回数	レベル	RT 更新	RF 更新	インターバル
1	Cal1a	Calib	メソッドA	1	1	Brkt	Brkt	1
2	Cal1b	Calib	メソッドA	1	1	Brkt	Brkt	1
3	Cal1c	Calib	メソッドA	1	1	Brkt	Brkt	1
4	Cal1d	Calib	メソッドA	1	1	Brkt	Brkt	1
10	サンプル10	サンプル	メソッドA	1				
11	サンプル11	サンプル	メソッドA	1				
12	サンプル12	サンプル	メソッドA	1				

このシーケンスの実行順序は次のとおりです。

- バイアル 1 (Cal1a)、開始ブラケット 1
- バイアル 10 (サンプル 10)
- バイアル 2 (Cal1b)、終了ブラケット 1 および開始ブラケット 2
- バイアル 11 (サンプル 11)
- バイアル 3 (Cal1c)、終了ブラケット 2 および開始ブラケット 3
- バイアル 12 (サンプル 12)
- バイアル 4 (Cal1b)、終了ブラケット 3

5 ランコントロール

ランキューについて　148
ランキューの使用　150
ランキューのシングルサンプルおよびシーケンス　151
ランキューの一時停止　152
ランキューのコマンド　153
キュープランの使用　154
コマンドのスケジュール　155
イベントのスケジュール　155
スケジューラ操作モード　156

この章では、ランキューとキュープランの概念について説明します。シングルサンプル、シーケンス、一時停止、またはコマンドをランキューに追加する方法について説明します。毎日のラボの作業をスケジュールできるコマンドスケジューラについても説明します。

ランキューについて

ランキューは、1 台の機器で多数のサンプル（シングルサンプルまたはシーケンス）を短時間で分析しなければならない場合に非常に便利です。その機器に対して作成されたすべてのシングルサンプルまたはシーケンスが［ランキュー］タブに表示されます。一時停止やカスタム機器コマンドをキューに追加できます（ビルトイン機器コントロールコマンドの例については、「ポストシーケンス処理」126 ページを参照）。この方法で、夜間や週末のジョブなどの時間のかかるタスクを自動化できます。

［ランキュー］タブに表示された作業を機器が処理中の間も、以下のような作業はできます。

- キューに追加されたアイテムの順番を変更するか、一時停止を追加（「ランキューの一時停止」152 ページを参照）。
- シングルサンプルおよびシーケンスをキューに追加（「ランキューのシングルサンプルおよびシーケンス」151 ページを参照）。
- ランキューの既存のアイテムを編集（「ランキューの既存アイテムを編集」152 ページを参照）。
- シングルサンプルまたはシーケンスをすぐに実行（「シングルサンプルまたはシーケンスの分析」152 ページを参照）。
- 実行後にシステムをシャットダウンするなど、ビルトインまたはカスタムコマンドを追加（「ランキューのコマンド」153 ページを参照）。
- **［キュープラン］**で作成された定義済みのシーケンスセットでキュープランを追加（「定義済みのシーケンスセットでキュープランを追加」154 ページを参照）。

ChemStation ステータスバーにランキューのステータスが表示されます。ステータスは**［再開］**、**［一時停止］**、または**［ブロック］**となります（メソッドまたはシーケンスの変更内容が保存されていない場合は、分析が開始されると上書きされます）。

［ランキュー］タブの**［キュー履歴］**に、現在の機器で実行済みの分析が表示されます。

ランキューおよびキュープランは、オンライン ChemStation セッションの**［メソッド & ランコントロール］**ビューのみで使用できます。

ランキューでは長期的なジョブが可能なため、ランキューの処理中に他のユーザーによってセッションが引き継がれる可能性が高くなります。セッションを引き継いだ個々のユーザーがレポートに記録されます。レポートには、ログオンした**取込オペレータ**のユーザーと、シングルサンプルまたはシーケンスをランキューに追加した**サンプルオペレータ**のユーザーが表示されます。

ランキューの使用

ランキューは、［**機器コントロール**］タブまたは［**ランキュー**］タブの両方から使用可能です。［機器コントロール］タブでは、［**表示 > ランキュー**］コマンドを使ってランキューを表示または非表示にできます。

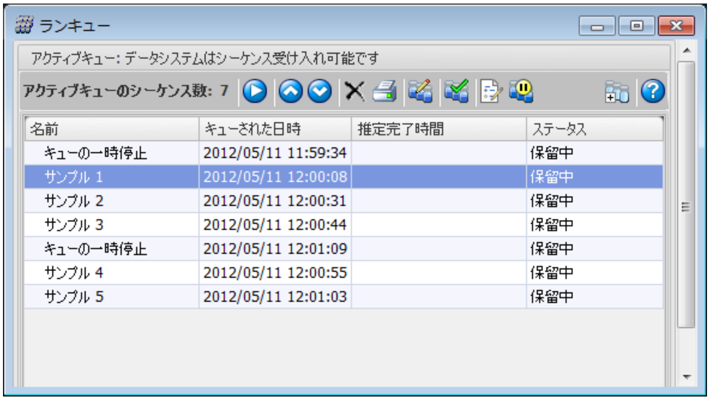


図 34　　［ランキュー］ダイアログ

キューの先頭または最後にアイテムを追加することができます。キュー内のアイテムのステータスが「保留中」の場合、実行の順序とアイテムのプロパティを変更することができます。［**アクティブキューオプション**］ の設定に応じて、キューの最初のアイテムがデータシステムの準備が完了したときに開始されるか、またはキューを再開するときに開始されます。

ランキューは、シングルサンプル、イージーシーケンステンプレート、および従来の ChemStation シーケンスもサポートします。ただし、シーケンスの選択分析、プライオリティラン、機器から直接開始されるランは、ランキューに追加することはできません。

イージーシーケンスについての詳細は、オンラインヘルプを参照してください。［**イージーシーケンスセットアップ**］のチュートリアルは、オンラインヘルプにあります。

ランキューのシングルサンプルおよびシーケンス

シングルサンプルをキューに追加する

1 **［ランコントロール］** > **［キューメソッド...］** を選択します。

2 **［キューメソッド］** ダイアログで、サンプル パラメータを編集します。

3 サンプルをキューに追加します。

キューが一時停止されている場合を除き、データシステムがレディになると最初にキューに追加されたアイテムが開始されます。

シーケンスまたは個別のシングルサンプルをキューに追加する方法

1 **［ランコントロール］** > **［キューシーケンス...］** を選択します。

2 ChemStation シーケンステンプレートまたはイージーシーケンステンプレートを選択します。

3 シーケンステーブルおよびシーケンスパラメータを編集またはレビューします。現在読み込まれているシーケンスを変更せずに、シーケンステーブルおよびシーケンスパラメータを修正することができます。

4 設定を保存します。 **［キューシーケンスの完了］** ダイアログで、シーケンスをキューに追加するか、新規シーケンステンプレートとして保存するかを選択できます。プレファレンスの設定（「シーケンス実行モード」 118 ページを参照）によっては、シーケンスを個別のシングルメソッドランとしてキューに追加することもできます。

［キューシーケンスの完了］ ダイアログには、 **［完了後、一時シーケンステンプレートを削除］** のチェックボックスもあります。ChemStation では、キューに追加したシーケンステンプレートのコピーが一時ディレクトリに常に保持されます。この一時シーケンステンプレートを使用して、キューからのシーケンスを実行します。異なるパラメータを使用して同じシーケンスが複数回キューに追加される場合があるため、ChemStation ではキューされたそれぞれのアイテムに個別のコピーが必要になります。チェックボックスの設定によって、この一時シーケンステンプレートは、キューが次のアイテムでも続く場合に保持されたり削除されたりします。

［完了後、一時シーケンステンプレートを削除］ チェックボックスのデフォルト設定はオンです。再解析に必要なすべての情報は、結果セットですでに利用することができます。そのため、一時シーケンステンプレートのコピーは必要ではありません。このチェックボックスをオンにした場合、コピーはデフォルトで **C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥<機器>¥TEMP¥AESEQ** に保存されます。

ランキューの既存アイテムを編集

ランキューの既存のアイテムを編集できます。たとえば、シーケンスのシングルサンプルまたは複数のサンプルに異なるバイアルポジションを割り当てたり、パラメータが変更された異なるメソッドを割り当てたりできます。

1 ランキューで、編集するシングルサンプルまたはシーケンスを選択します。

2 ランキューのツールバーで、 ［**選択したアイテムを編集...**］を選択します。

   シングルサンプルかシーケンスのどちらを編集するかに応じて、［**キューメソッド**］ダイアログまたは［**シーケンステーブル**］が開きます。

3 パラメータを編集し、エントリを確認します。

   ランキューのアイテムに設定が適用されます。

シングルサンプルまたはシーケンスの分析

シングルサンプルまたはシーケンスをただちに分析するには、［**ランコントロール**］>［**ランメソッド**］または［**ランコントロール**］>［**ランシーケンス**］コマンドを選択します。

シングルサンプルまたはシーケンスはランキューの最初に追加されると、ただちに開始されます。

現在ランキューが一時停止になっている場合、アイテムがただちに実行されるように自動的に有効になります。機器は分析が終了した後で一時停止状態に戻ります。

ランキューの一時停止

キューで一時停止をスケジュールするには、［ランキュー］ツールバーで［**キューに一時停止を追加**］をクリックします。一時停止では、ChemStation はカスタマイズ可能なメッセージを表示し、ユーザーが確認するまで待機します。

ランキューのコマンド

ビルトインコマンドやカスタムコマンドをランキューに追加するには、メニュー［**ランコントロール**］>［**キューコマンド...**］を使用します。または、機器の待機中に実行するカスタムコマンドを［**アクティブキューオプション**］で設定します。

この機器に割り当てられたすべてのコマンドがドロップダウンリストに表示されます。リストからコマンドを選択するか、独自のコマンドを設定します。カスタムコマンドを設定するには、**コマンドライン**権限が必要です。

コマンドを使用できる場所の詳細については、「ChemStation のカスタムコマンドまたはマクロの使用」29 ページを参照してください。

キュープランの使用

キュープランでは、シーケンス（ChemStation シーケンステンプレート *.s またはイージーシーケンステンプレート *.es）、一時停止、またはコマンドのセットを順序を含めて定義することができます。ランキューの最初または最後に、キュープラン全体を追加することができます。

図 35　　キュープラン

定義済みのシーケンスセットでキュープランを追加

キュープランでは、実行するシーケンスのキュープランを作成でき、一時停止やコマンドを組み込むこともできます。キュープランの準備：

1 ［**ランコントロール**］ > ［**キュープラン...**］コマンドを選択します。

2 キュープランを準備し、シーケンスを挿入します。

3 ランキューと同様に、一時停止を追加したりカスタムメッセージを［**詳細**］欄に入力できます。キューが一時停止になると ChemStation は停止し、入力したカスタムメッセージが画面に表示されます。キューを再開するためには、ユーザーがメッセージを確認し OK する必要があります。

4 キュープランを保存します。キュープランは *.qpl ファイルとして保存されます。

5 キュープランを実行するときにキュープランを開き、キュープランを読み込んでランキューに追加します。

ユーザインターフェースについての詳細は、オンラインヘルプを参照してください。

コマンドのスケジュール

コマンドスケジューラを使用して、ChemStation が以下のようなタイムベースイベントのコマンドを自動的に実行するように設定します。

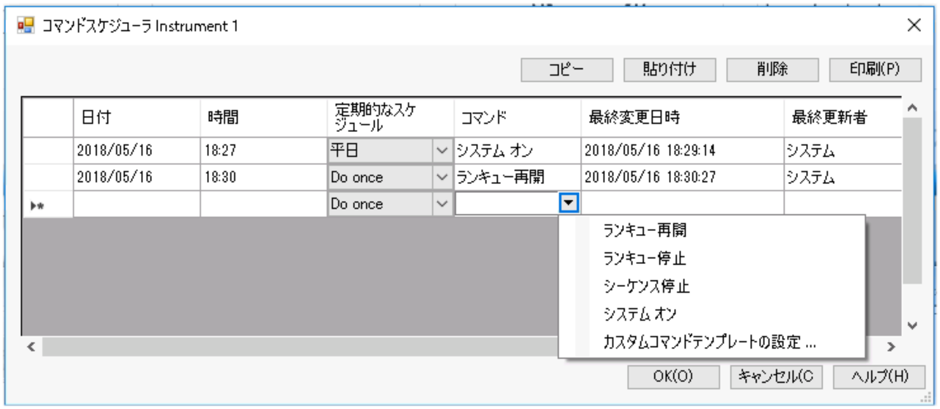
- システム オン
- 一時停止したキューを再開し、その日の機器を準備
- MS オートチューンの実行
- 検出器オフセットの調整
- メソッドまたはシーケンスの読み込み
- シーケンスまたはランキューの開始

コマンドスケジューラでは、指定の日付と時刻でこれらのイベントをスケジュールしたり、繰り返しのスケジュールを設定したりできます。以下のスケジュールがサポートされています。

- 1 回
- 毎日
- 平日
- 毎週（同じ曜日）
- 毎月（同じ日）

イベントのスケジュール

イベントはコマンドスケジューラのインターフェイスでスケジュールします。テーブルで、コマンドおよび対応する日付、時間、繰り返しを指定する必要があります。



［**コマンド**］フィールドのドロップダウンリストには、ビルトインコマンドが表示されます。コマンドのリストはユーザー定義のコマンドで拡張できます。カスタムコマンドテンプレートを設定するには、**コマンドライン**権限が必要です。詳細については、「ChemStation のカスタムコマンドまたはマクロの使用」 29 ページを参照してください。権限のないユーザーでも、ドロップダウンリストからコマンドを選択できます。

ビルトインコマンドとマクロの詳細については、ChemStation オンラインヘルプの「コマンド」および「マクロ」を参照してください。

スケジューラ操作モード

スケジューラは、既存のコマンドを毎分スキャンします。実行されたマクロは機器のログブックおよび OpenLab のアクティビティログに表示されます。実行日から 2 週間過ぎると、［**1 回**］に設定されているタスクは自動的に削除されます。

スケジュールされた時間に ChemStation がビジーの場合、タスクの実行が遅れる場合があります。ChemStation がレディになると実行されます。繰り返しタスクの実行の前提条件は、機器が分析中であることです。

注記

タスクは機器固有で、機器名に関連付けられています。機器名が変更された場合、その機器でスケジュールされたすべてのタスクが削除されます。

6 データ解析とレビューの概念

データ解析　158
ナビゲーションテーブルのコンフィグレーション　160
データ解析モード　160
再計算モード　161
前回の結果モード　163
再解析モード　164
メソッドの更新　169
データ解析のレポートビューア　169
バッチレビュー　172
レビュー　177
インテリジェントレポート要件　177
データファイル選択　177
レポートテンプレート選択　178
レポートプレビュー　179
レビューワークフローの例　179

ChemStation でデータの解析およびレビューができます。この章では、ChemStation のデータ解析およびデータレビューのオプションについて説明します。

データ解析

一度データが取得されると、**[ChemStation データ解析]** ビューでそれらを解析できます。 ChemStation エクスプローラの **[データ]** タブを選択した場合、該当する記号をダブルクリックすることで、指定したフォルダー内のすべてのシーケンスデータまたはすべてのシングルランを読み込めます。 その後、該当するデータセットをナビゲーションテーブルから利用できます。

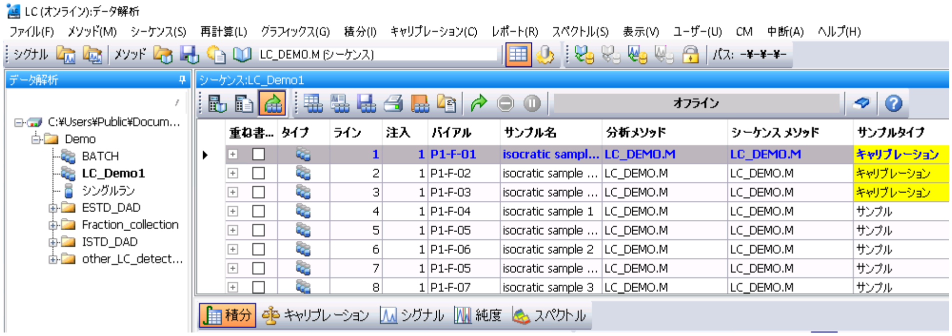


図 36 ChemStation エクスプローラからナビゲーションテーブルへのシーケンスの読み込み

ナビゲーションテーブルすべての分析のセットのリストで構成されます。ナビゲーションテーブルの該当する行をダブルクリックすることで、ChemStation メモリに分析を読み込むことができます。さらに、分析を右クリックすると、ファイルからの特定シグナルの読み込みまたは重ね描き、データのエクスポート、あるいは取り込みメソッドパラメータの表示などさまざまなオプションが使用できます。

シーケンス分析は（再解析モードで）、取込または再解析で使用したシーケンスメソッドと共に読み込まれます。このメソッドの名前はツールバー、およびナビゲーションテーブルの **[シーケンスメソッド]** 列に表示されます。取込メソッドの名前は **[分析メソッド]** 列に表示されます。

シングルランは関連する解析メソッドと一緒に読み込まれます。このメソッドの名前はナビゲーションテーブルおよび詳細の **[解析メソッド]** に表示されます。メソッドが元のパスに存在しない場合、エラーが表示されます。

取込メソッドの名前は **[分析メソッド]** 列に表示されます。

ChemStation により、データファイルがナビゲーションテーブルから読み込まれる時に自動的に実行されるデフォルトのアクションを指定することができます。これには、読み込み後にそのままクロマトグラムを積分する、各シングル

注入のレポートを表示する、または 1 回のステップで積分し、印刷するなどのデータ解析タスクが含まれます（下図を参照）。

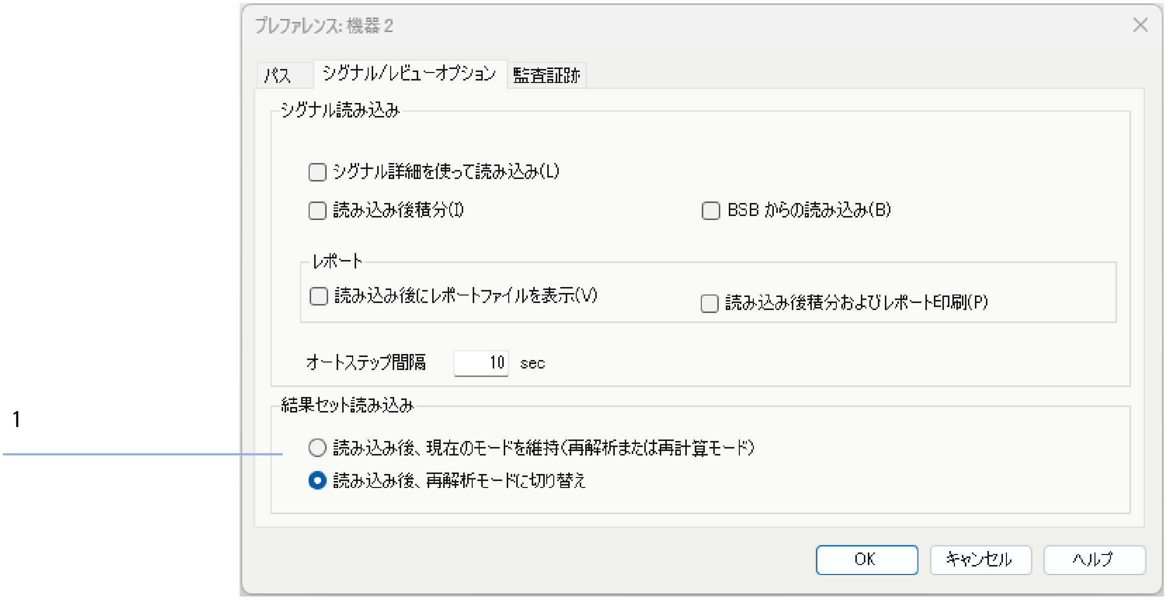


図 37 [プレファレンス] ダイアログの [シグナル/レビュー] オプションタブ

ナビゲーションテーブルのコンフィグレーション

ナビゲーションテーブルには、ソートおよびカラムを別な場所に移動するためのドラッグアンドドロップオプションなど、標準のテーブルコンフィグレーション機能が含まれています。また、ナビゲーションテーブルに表示するカラムを選択することもできます。

さらに、カラム固有のグループ化が可能です。たとえば、［**オペレータ**］カラムで読み込まれたファイルをグループ化することで、特定のオペレータのシングルランを表示することができます。

ナビゲーションテーブルでは、マウスを右クリックする機能によって、シグナルの読み込み、シグナルの重ね書き、データのエクスポート、レポートの印刷、メソッドの取込パラメータの表示などが可能です。ナビゲーションテーブルの各ラインは、ラインの左側の +（プラス）記号をクリックして展開して、シグナル指定オプションを設定できます。

- **シグナル**：取り込んだシグナルを一覧表示し、読み込むシグナルを指定することができます。シグナル表示の選択は、実行するたびに個別に適用されます。
- **一般情報**：分析に関するヘッダーの詳細を一覧表示します。
- **機器カーブ**：クロマトグラム/エレクトロフェログラムと併せて、画面と出力に表示する機器データカーブを選択することができます。

データ解析モード

以下のデータ解析モードの中から選択することが可能です。

- 再計算モード
- 前回の結果モード
- 再解析モード

上記モードは、**[ビュー]** メニューから、またはツールセットからアクセス可能です（下図を参照）。

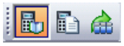


図 38　　モードの選択

各モードのツールセットには、固有の機能が含まれています。 モードとそれぞれの機能については、次のセクションで説明します。 **[プレファレンス]** ダイアログボックスの **[シグナル/レビュー] オプション**タブで、結果セットを読み込む時にデフォルトでどのモードを有効にするかを選択することができます（159ページ 図37、マーカー 2 を参照）。

再計算モード

分析を読み込むと、データ解析パラメータの調整、シグナルの積分、最終的なレポートの印刷など、レビューすることができます。 この場合、シーケンスコンテキストを考慮しない、またはシーケンステーブルの機能を使用せずに、シングルランとして分析を解析します。 このタイプのデータ解析用のナビゲーションテーブルには、下図に示すツールセットが用意されています。

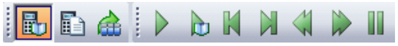


図 39　　ナビゲーションテーブルの再計算ツールセット

このツールセットを使用して、ナビゲーションテーブルの始めにジャンプ、次または前の分析に進む、分析全体にオートステップを行う、オートステップの停止、指定したメソッドを使用しての分析再計算、ナビゲーションテーブルのクリアなどを行うことができます。

再計算は分析ごとの解析を意味します。 ナビゲーションテーブルには、分析済みのランのみが表示されます。 ナビゲーションテーブルにフィルタを適用した場合、実際にテーブルに表示された分析のみが再計算されます。 ナビゲーションテーブルの並び替えも考慮されます。

再計算は、たとえば以下のワークフローなどで使用できます。

- ワークフローで個々の取り込みメソッドとデータ解析メソッドを採用しているために、取り込みに使用されていない結果セット内に存在しないマスターメソッドなど、異なるメソッドを用いて結果セットのデータファイルをレビューする場合。
- シーケンスメソッドを編集し、これらのパラメータが異なる分析にどの程度適用するかをチェックするために、このメソッドを使用して特定の分析をレビューする場合。
- 特定の解析メソッドでシングルランをレビューする場合。再計算モードでは、シングルデータファイルと一緒に読み込まれる解析メソッドはありません。

シングルランのデータ解析メソッド

以前のリリースでは、再計算モードでメソッドがデータファイルと共に自動的に読み込まれることはありませんでした。 リリース C.01.05 から、チェックボックスを選択して前回のデータ解析に使用されたマスターメソッドを自動的に読み込むことができるようになりました（159ページ 図37、マーカー 1 を参照）。 このチェックボックスが選択されると、与えられた場所にメソッドが依然として存在する場合、シングルランは対応するマスターメソッドと共に読み込まれます。

指定したメソッドによる再計算

この機能では、指定したマスターメソッドを使用して、ナビゲーションテーブルに表示された分析を再計算することができます。**[メソッドで再計算]** ダイアログで、必要なマスターメソッドを指定します（下図を参照）。選択済みのマスターメソッドがインテリジェントレポート（「レポート」 195 ページを参照）を使用している場合、シングル注入レポートで使用するレポートテンプレートを指定することもできます。

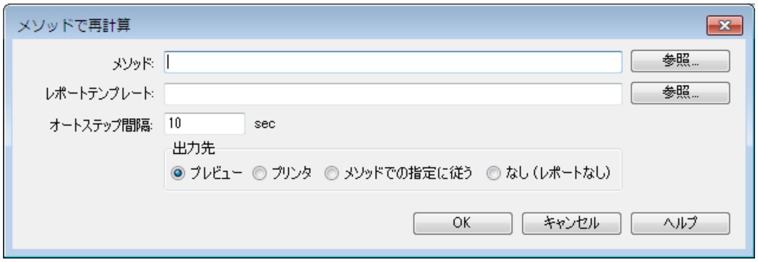


図 40　　［メソッドで再計算］ ダイアログ

[マスターメソッドを参照] ダイアログと **[マスターパスのレポートテンプレートを参照]** ダイアログでは、プレファレンスで指定したすべてのファイルロケーションを閲覧することができます。

注記

ChemStation の以前のリビジョンでは、ツールバーから **[現在のメソッド使用]**、**[データファイルからメソッド使用]**、**[シーケンスメソッド使用]** のいずれかを選択することで、指定したメソッドを利用しての再計算が可能です。

[リファレンスを使用] チェックボックスをオンにする場合は、リファレンスシグナルを含むデータファイルを選択できます。ChemStation では、ヨーロッパ薬局方の定義に準じてノイズ/シグナル比を計算するためにこのシグナルを使用します。ドロップダウンリストは、現在のセッションで使用したデータファイルを提供します。**[参照]** ボタンを使用すると、ナビゲーションテーブルに入っている任意のデータファイルを選択できます。別のリファレンスファイルを使用したい場合は、まず、ナビゲーションテーブルに追加する必要があります。

新しいリファレンスが以前のリファレンスファイルを上書きし、その後のすべてのレポートにおけるシグナル/ノイズ比の計算に使用されます。**[リファレンスを使用]** チェックボックスをオンにし、ファイルを選択していない場合は、再計算されたすべてのデータファイルに対してリファレンスがクリアされ、その後にシグナル/ノイズ比の値が計算されなくなります。

サンプルの再計算を行う度に、またはレポートを生成する度に、使用されるメソッドのデータ解析パラメータでデータファイルメソッド（DA.M）は自動的

に更新されます。指定したメソッドへのパスは、データファイルにリファレンスとして保存されます。

前回の結果モード

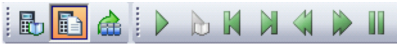


図 41　ナビゲーションテーブルの前回の結果モードツールセット

このモードでは、各分析のデータファイルメソッド（DA.M）が読み込まれます。DA.M は、前回のデータ解析（取り込み、再解析、再計算）に使用したメソッドのコピーです。そのため、一時的にシーケンスメソッドが変更された場合にも、前回の結果を最初に使用したメソッドで再生することができます。この方法で、例えば、結果セットの連続的な再計算手順でメソッドに加えられた変更を追跡することができます。

ツールバー内のメソッド名には DA.M が表示されており、データファイルメソッドが読み込まれていることを示します。マウスをメソッド名フィールドの上に移動すると、ツール チップに完全なパスとメソッドの名前が表示されます。さらに、データ解析のために前回使用されたメソッドの名前（DA.M にコピーされている）は、ナビゲーションテーブルの **[解析メソッド]** 列に表示されます。この列のツール チップには、このメソッドの完全なパスが表示されます。

注記

DA.M は通常、読み取り専用です。DA.M は、マニュアルで読み込むことはできません。再計算用に前回の結果モードで ChemStation によってのみ読み込まれます。編集は可能ですが、手動で保存することはできません。

メソッドを変更した場合で、レポートを印刷する場合は、この操作で新しい結果が生成されるため、確認を求めるメッセージボックスが表示されます。確認したら、最後に使用されたデータ解析メソッドに変更内容が保存されます。対応するエントリが、メソッドの監査証跡に追加されます。

前回の結果モードでは、読み込まれたマスターメソッド、またはその他のマスターメソッドを、DA.Mからの現在のデータ解析パラメータで更新するか、変更された DA.M メソッドを完全に新しいマスターメソッドとして保存することができます。例えば、数週間前、または数ヶ月前に解析したデータセットを読み込むと、現在の作業のために使用することができる DA.M に保存されたデータ解析パラメータを見つけることができます。そして、設定を自分が選択したマスターメソッドに転送することができます。詳細については、「メソッド管理」 60 ページ を参照してください。

再解析モード

シーケンスの再解析モード

データを解析する方法に、シーケンス全体の **[再解析]** があります。再計算とは対照的に、すべての分析がシーケンスコンテキストで再解析されます。つまり、キャリブレーション分析の場合にはシーケンスメソッドのキャリブレーションテーブルが更新され、倍率、アマウントなどをシーケンステーブルで変更できます。

結果セットには再解析に必要なすべてのファイルが含まれます。データファイル、シーケンス ファイルのコピー、すべてのシーケンスメソッド、最初に取り込みに使用したすべてのレポートテンプレートです。そのため、再解析するには、シーケンスをナビゲーションテーブルに読み込み、必要な再解析ツールセットを選択します。

今後の分析のために、シーケンスメソッドでの変更を対応するマスターメソッドに反映させる必要がある場合には、**[マスターメソッドを更新]**機能により簡単に反映できます（「マスターメソッド内の DA パラメータの更新」 64 ページを参照）。

データファイルを再解析するたびに、DA.M が自動的に更新されます。

シーケンスの再解析では、ナビゲーションテーブルが以下のツールセットを提供しています。

図 42　　ナビゲーションテーブルのシーケンス再解析ツールセット

このツールセットにより、シーケンステーブルの編集、シーケンスパラメータの編集、現在のシーケンスの保存、現在のシーケンスの印刷、シーケンスログブックの表示または非表示、保存したシーケンスサマリレポートの表示、シーケンスの再解析、またはシーケンスの停止を行うことができます。

ナビゲーションテーブルの再解析アイコンは ChemStation B.02.01 以降で作成された結果セットにだけ使用できることに注意してください。B.02.01 以前で作成されたデータ、およびレガシーユニークフォルダモードで取り込まれたデータについては、 **［データ解析］** では再解析できません。そのようなシーケンスは、**[メソッド & ランコントロール]** のシーケンスパラメータで **[メソッド実行部分]** を **[データ再解析のみ]** に選択し、再解析する必要があります。ChemStation B.02.01 以降で作成されたシーケンスでは、**[メソッド & ランコントロール]** の再解析オプションは削除され、ナビゲーションテーブルの **[データ解析タスク]** として再解析が提供されます。

他の方法としては、新規にユーザーが編集した結果セットにサンプルまたはシーケンスを追加する方法があります。そこでシーケンスメソッドを割り当てた後に、シーケンス全体を再解析することが可能です（「自己編集した結果セット」 168 ページを参照）。

再解析をする際には以下の規則に注意が必要です。

- 結果セットをナビゲーションテーブルに読み込むと、ChemStation はこの結果セット内にあるシーケンスファイル（*.S）も自動的に読み込みます。このシーケンスファイルには、この結果セットに属するデータファイルに関連するすべてのシーケンスラインが含まれます。
- すべてのアクションがシーケンスメソッドに対して実行されます。変更した解析パラメータを適用する場合は、シーケンスメソッドを変更する必要があります。
- 再解析中、バッチ（*.b）、シーケンス/シングルランログ（*.log）、ナビゲーションテーブルが更新されます。処理された各データファイルの個々のデータ解析メソッド（DA.M）は、このシーケンスメソッドで上書きされます。
- 新規メソッドをマスターメソッドディレクトリからシーケンステーブルへと追加する場合には、まず ChemStation エクスプローラを使用してマスターメソッドを結果セットにコピーするか、**［メソッド］** > **［メソッドの更新］** をクリックします。その後、シーケンステーブルから新しいシーケンスメソッドを選択します。シーケンステーブルでは、行の追加または削除はできません。
- ［シーケンスパラメータ］ダイアログでは、シーケンスコメント、シーケンス情報の使用法のみを変更できます。その他のフィールドはすべてデータ取り込み時に設定しておく必要があります。再解析では変更できません。

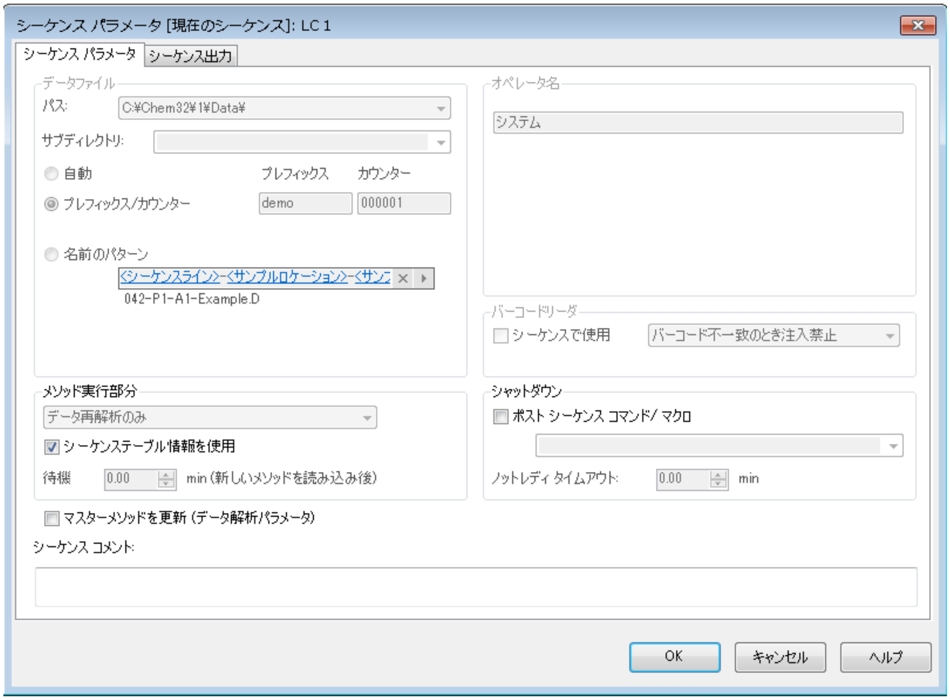


図 43　　データ解析のシーケンスパラメータ

シングルランの再解析モード

シングルランをナビゲーションテーブルに読み込むと、ChemStation は関連する解析メソッドを読み込みます。このメソッドの名前は［**解析メソッド**］ 列に表示されます。フルパスは、コンテキストメニュー（［**ラン詳細の表示**］）から確認できます。

オリジナルのパスのため解析メソッドが利用できない場合、エラーが表示されます。解析メソッドが使用されていない測定のみのランでは、測定メソッドが解析メソッドとして読み込まれ、使用されます。

シングルランの再解析には、ナビゲーションテーブルに以下のツールセットが提供されます。

図 44　　ナビゲーションテーブルのシングルラン再解析ツールセット

このツールセットを使うことで、ランを順番に再実行し、関連する解析メソッドで再解析することができます。［**読み込み後にレポートファイルを表示**］オプション（159ページ 図37を参照）と組み合わせることで、このモードではデータを変更することなく、複数のシングルラン結果を簡単に確認できます。

注記

メソッドに保存されているキャリブレーションデータは、シングルランがキャリブレーションサンプルの場合でも、再解析時には更新されません。リキャリブレーションについては、「リキャリブレーション」 192 ページを参照してください。

マニュアル積分イベントの処理

ベースラインの手動描画などのマニュアル積分イベントは、タイム積分イベントよりもさらにデータファイル固有のものです。複雑なクロマトグラムの場合、これらのイベントを再解析に使用できることが非常に有効です。

そのため、ChemStation B.04.01 以降では、メソッドの代わりにデータファイルに直接、マニュアル積分イベントを保存できるようになりました。データファイルをレビューまたは再解析する時はいつでも、データファイル中のマニュアル積分イベントが自動的に適用されます。マニュアル積分イベントを含む分析は、[ナビゲーション] テーブルの対応する列に印が付けられます。

手動によるベースライン描画やピーク削除のツールのほかに、以下の操作を行う 3 つのツールがユーザーインタフェースに用意されています。

- データファイルに現在表示されているクロマトグラムのマニュアルイベントを保存
- 現在表示されているクロマトグラムからすべてのイベントを削除
- 最後のマニュアル積分イベントを元に戻す（イベントが保存されるまで使用可能）

[ナビゲーション] テーブルのレビュー中に次のデータファイルで操作を続ける場合、ChemStation は未保存のマニュアル積分イベントを確認し、イベントを保存するかユーザーに尋ねます。

[ナビゲーション] テーブルのレビュー中にデータファイルに保存されたマニュアルイベントは、**[バッチ]** モードでのレビュー中に保存されたマニュアル積分イベントと結合しません。データファイルのマニュアルイベントに関して、これら 2 つのレビュー方法は完全に分離されています。

リビジョン B.04.01 より前の ChemStation では、マニュアル積分イベントはメソッドだけに保存できます。B.04.01 でもこのワークフローを使用することができます。メソッドでマニュアル積分イベントを処理するために、**[データ解析]** ビューの **[積分]** メニューには以下の項目があります。

[メソッドのマニュアルイベントアップデート]: メソッドに新しく記載されたマニュアルイベントを保存します。

[メソッドからマニュアルイベント適用]: 現在メソッドに保存されているマニュアルイベントを現在読み込まれているデータファイルに適用します。

[メソッドからマニュアルイベント削除]: メソッドからマニュアルイベントを削除します。

メソッドに保存されたマニュアルイベントをデータファイルのストレージに変換するには、メソッドからイベントを使用し、データファイルに結果を保存します。必要に応じて、メソッドからイベントを削除します。

メソッドの **[積分イベントテーブル]** の **[マニュアルイベント]** チェックボックスを選択した場合、このメソッドを用いるデータファイルを読み込む際に、メソッドのマニュアルイベントが常に適用されます。データファイルに追加マニュアルイベントが含まれる場合は、データファイル内のイベントが使用されます。**[マニュアルイベント]** チェックボックスを選択した場合、データファイルにイベントを保存するかどうかユーザーが尋ねられることはありません。

自己編集した結果セット

［データ解析］ ビューでは、ナビゲーションテーブルに読み込まれたシングルランまたはシーケンスの内容が表示されます。ナビゲーションテーブルへと、データファイルを読み込み、解放、追加することができます。 **［シーケンス］ > ［新規結果セット作成］** コマンドを使用して、ナビゲーションテーブルに表示中のデータから、新しい自己編集した結果セットを作成することができます (「新規結果セットの作成方法」 112 ページを参照)。自己編集した結果セットは、自動的に作成された結果セットと同様に再解析可能です。

現在のデータセットの解放

［ナビゲーションテーブル］のコンテキストメニューから、 **［現在のデータセットの解放］** コマンドを利用して、［ナビゲーションテーブル］を ChemStation 起動直後のように空の状態に戻すことができます。保存されていないデータがある場合、保存するようメッセージが出ます。

選択データファイルの削除

ナビゲーションテーブルのコンテキストメニューから **[選択したデータファイルの削除]** コマンドを利用して、ナビゲーションテーブルから選択した行を削除することができます。これにより削除できるのはナビゲーションテーブル内のリファレンスのみであり、ファイルシステム上に読み込まれた結果セットまたはシングルランから、物理的データファイルを削除することはできません。追加/重ね描きファイルのリファレンスのみを削除することができます。

メソッドの更新

[データ解析] ビューには、マスターメソッドディレクトリと結果セットとの間でメソッドをコピーするためのオプションをいくつか用意しています。詳細は、「メソッド管理」60 ページを参照してください。

データ解析のレポートビューア

コンフィグレーションに応じて、ChemStation はシングル注入レポートおよびシーケンスサマリレポートを決まったタイミングでファイルシステムに自動的に保存します。データ取り込み、再解析、または再計算からの結果をチェックするために、レポートビューアを使用して保存したレポートファイルを容易に表示することができます。

図 45　　レポートビューアー

レポートビューアには以下の利点があります。

- ChemStation からレポートファイルを直接開くことができます。ファイルシステム内のファイルを検索する必要はありません。
- 各レポートが個別のフローティングウィンドウに開きます。そのため、複数のウィンドウを並べて異なるレポートを容易に比較できます。
- フルスクリーンを使用してレポートファイルを表示できます。
- Adobe Reader の機能を使用して、.pdf レポートを表示することができます。

- .txt レポートに加え .pdf レポートで特定のテキストを検索できます。
- シーケンスを再解析する場合、全シーケンスの再解析が完了するまで待つ必要はありません。すでに完了しているシーケンスのサンプルについては、保存されているレポートファイルを開くことができます。

レポートビューアの起動

レポートビューアは、メニュー、ツールバーのアイコン、またはナビゲーションテーブルのコンテキストメニューから開くことができます。シーケンスサマリレポートおよびシングル注入レポートにはそれぞれ異なるアイテムがあります。

シングル注入レポートを表示するには:

- **［レポート］** > **［レポートファイルの表示］** メニューを選択して、レポートファイル、または読み込んだシグナルのファイルを表示します。
- ナビゲーションテーブルでサンプルのコンテキストメニューから、**［保存したレポートファイルの表示］** コマンドを選択します。このコマンドによって、現在読み込まれていないファイルの場合でも、レポートファイルまたはシグナルファイルが読み込まれます。
- ワークスペースツールバーから **［保存したレポートファイルの表示］** アイコンをクリックして、レポートファイル、または読み込みシグナルのファイルを表示します。

シーケンスサマリレポートを表示するには:

- **［シーケンス］** > **［サマリレポートファイルを表示］** メニューを選択します。
- ナビゲーションツールバー（再解析モード）から **［保存したシーケンスサマーリレポートファイルの表示］** アイコンをクリックします。

レポートビューアウィンドウの設定

レポートビューアの動作に関していくつかのオプションを設定することができます。これらの設定はすべて、レポートビューアウィンドウの **［オプション］** ボタンからアクセスします。

同時に開くレポートビューアウィンドウの最大数を定義することができます。ウィンドウは循環して再利用されます。レポートビューアの最大ウィンドウ表

示数よりも多いレポートファイルを表示すると、最初に開いたウィンドウの内容が更新されます。

注記 複数のレポートを比較する必要がない場合は、レポートビューアウィンドウの表示数を 1 に設定することをお勧めします。

複数のレポートを比較する場合は、レポートビューアウィンドウのタイトルバーを調整すると便利な場合があります。レポートビューアウィンドウにはさまざまなトークンが利用できます。シーケンスサマリレポート、シーケンスサンプル用のシングル注入レポート、またはシングルラン用のシングル注入レポートごとに設定できます。これらのトークンを使用して、各レポートビューアウィンドウを区別することができます。

レポートビューアウィンドウは、常に ChemStation アプリケーションの前面に表示されます。ChemStation とレポートビューアを同時に操作する場合は、これらを両方見られるように双方のウィンドウの大きさを調整して配置します。ChemStation を閉じるときに、ウィンドウのサイズと位置は保存されます。ChemStation を次回起動するときは同じ設定が使用されます。

レポートビューアウィンドウの位置調整

レポートビューアウィンドウは、常に ChemStation アプリケーションの前面に表示されます。 ChemStation とレポートビューアを同時に操作する場合は、これらを両方見ながら操作できるように双方のウィンドウの大きさを調整して配置します。

ChemStation を閉じるときに、ウィンドウのサイズと位置は保存されます。ChemStation を次回起動するときは同じ設定が使用されます。

レポートビューアの操作

レポートビューアは、たとえば以下のようなワークフローに従い使用します。

- メソッドとシーケンスで、ファイルシステムに PDF レポートを保存するように設定します。 シーケンスの実行が完了したら、レポートビューアで ChemStation から直接レポートファイル（シーケンスサマリレポートまたはシングル注入レポート）を開きます。 ズームや検索などの Adobe Reader の機能を使用して、レポートの詳細を確認します。
- 中央データ記憶領域から、既にレポートファイルが含まれているシーケンスをダウンロードします。

 - 最終結果を確認するには、ナビゲーションテーブルで関連するサンプルを選択し、レポートビューアを使用して ChemStation から直接レポートファイルを開きます。
 - 必要に応じて、メソッドを変更してシーケンスを再解析することができます。 再解析の実行中に、すでに完了しているサンプルのレポートを表示することができます。

   レポートビューアでは、左上にあるリストから新旧のレポートを両方とも選択することができます。 リストのエントリとして表示される作成日時を確認して、レポートを区別することができます。 転送設定に応じて、新しいレポートファイルなどのデータは、再解析の終了後に中央データ記憶領域に自動的にアップロードされる場合があります。

- TXT レポートファイルのみを保存するシーケンスを実行します。 レポートビューアでは、これらのレポートファイルも確認できます。
- さまざまなレポートスタイルやテンプレートに基づき、同じシーケンスサンプルの異なるレポートをレビューします。

  まず、拡張パフォーマンスレポートを保存するシーケンスを作成します。 シーケンスを実行または再解析してレポートファイルを保存します。 レポートに表示されている結果が満足できるものであれば、シーケンスメソッドを変更して、簡易レポートを作成します（たとえば、異なるレポートテンプレートやクラシックレポートスタイルで［**簡易**］を選択します）。 次に、シーケンスを再解析して簡易レポートを保存します。 レポートビューアでレポートを表示するときは、左上のリストからレポートを選択して 2 つの異なるレポートの表示を切り替えることができます。各ファイルの作成日時はリストのエントリとして表示されます。

バッチレビュー

バッチレビューとは

バッチレビューとは、データ解析に含まれる機能で、分析者がシーケンスの結果の「最初の」レビューを行ったり、分析の選択を迅速、容易にするのに役立つように設計されています。このバッチレビューは、たくさんのサンプルを再解析する場合に特に時間を節約できます。シーケンスが分析されると、必ずバッチファイル (拡張子 .b を持つ) が自動的に生成され、データファイルとともにデータディレクトリ内に配置されます。このバッチファイルには、バッチレビューそれ自体の中にあるデータファイルへのポインタを含んでいます。バッチを読み込む際、分析者はバッチに使用するメソッドを選択し、バッチ内で分析する任意のデータファイルを個別に選択するだけです。キャリブレーションの正確さ、機器のパフォーマンス、および個別の積分を結果を承認する前

にチェックすることができます。変更されたクロマトグラム特有のパラメータは、データの追跡を可能にするために、データファイルといっしょに保存できます。この対話式の環境では、ピーク純度、ライブラリ検索など、その他すべてのデータ解析機能の全体にアクセスできます。

バッチレビューでは、標準データ解析と同じデータ解析レジスタ (ChromReg および ChromRes) を使用するため、分析を実行中のオンラインセッションでは使用すべきではありません。

バッチ設定

バッチとは、ユーザー定義のメソッドを使用して処理される、ユーザーが選択した一連のデータファイルのことです。バッチ内のすべてのデータファイルは、同じメソッドを使用して処理されます。レビューのために新しいサンプルが読み込まれるごとに実行される処理ステップを選択することができます (積分、同定/定量、レポート)。

バッチ内のすべてのキャリブレーションランが、平均化されたレスポンスファクタを使用して 1 つのシングルキャリブレーションテーブルを生成するために使用されます。このテーブルは、その後、定量するのに使用されます。

バッチテーブル

ユーザーが設定できるランがバッチテーブルに表示されます。

- テーブルの列の数と内容を指定できます。
- 分析は次に挙げる指標でソートできます。
  - 他のすべての条件から独立しているランインデックス (分析が取り込まれた順序)
  - サンプルタイプ(コントロールサンプル、キャリブレーションサンプル、ノーマルサンプルの順) と各サンプルタイプ内の分析インデックス
  - メソッドと (データ取り込みをするのに複数のメソッドが使用された場合は) 各メソッド内の分析インデックス
- サンプル、キャリブレーションサンプル、およびコントロールサンプルはテーブルに表示することも隠すこともできます。

選択された分析ごとに、バッチテーブルの 1 行を使用します。サンプルタイプを「削除」に変更することで、バッチテーブルの分析を除外できます (キャリブレーションからなど)。

化合物テーブル

化合物の結果がユーザー設定が可能な化合物テーブルに表示されますが、化合物テーブルの内容はバッチテーブル内のサンプルのタイプに依存します。

- 化合物リストは、バッチレビュー用に読み込まれたメソッド内で検出されたすべての化合物を含んでいます。
- キャリブレーションサンプルのみがバッチテーブルに表示される場合は (サンプルとコントロールサンプルは隠されている)、化合物テーブルにはキャリブレーション関連情報のための列が追加表示されます (予想アマウント、相対エラー、および絶対エラー)。
- コントロールランのみがバッチテーブルに表示される場合は (サンプルとキャリブレーションサンプルは隠されている)、化合物テーブルには定義済みのコントロールリミット用の列が追加表示されます。

化合物特有の情報を含む列には、%s をカラムの仕様に追加することにより、化合物の名前をテーブルタイトルに含めることができます。

バッチレポート

バッチレポートには、通常、バッチテーブルと化合物テーブルに類似した 2 つのテーブルが含まれます。これらのテーブルも、ユーザー設定が可能です。

化合物特有の情報を含む列には、%s をカラムの仕様に追加することにより、化合物の名前をテーブルタイトルに含めることができます。複数行のヘッダーが使用できます。記号「|」を改行する位置に挿入します。

ユーザーインターフェイス

バッチレビューでは、次の 2 つのユーザーインタフェースの中から選択できます。

- 標準インターフェイスには、バッチメニューのアイテムのほとんどに対応するボタンバー、バッチテーブル、化合物テーブルが含まれています。
- 最低限のインターフェイスには、標準インターフェイスと同様のボタンバーが含まれていますが、バッチテーブルと化合物テーブルがバッチテーブルに特化した情報のみを含むコンボボックスに置き換えられています。最低限のインターフェイスのボタンバーには、バッチテーブル関連または化合物テーブル関連のボタンが含まれていません。

レビュー機能

次の 2 つの方法でデータファイルを表示できます。

- テーブルから表示したい分析を選択する、マニュアルによる表示
- データファイルごとのインターバルを事前定義した、自動表示自動表示では、テーブルに表示されているサンプルタイプのみが表示されます。分析は、テーブル内の順序に従って表示されます。自動レビューは一時停止ができ、その後再開したり、停止したりできます。

バッチレビューでは、ChemStation が提供する標準機能が使用できます。これには、キャリブレーション、たとえばスムージングやマニュアル積分によるクロマトグラムのマニュアル操作が含まれます。データファイルに加えられたすべての変更は、マークされバッチファイルとともに保存されます。レビューされたクロマトグラムは、バッチテーブル内でアスタリスクでマークされます。現在のクロマトグラムのみに加えられた変更、またはバッチ内のすべてのクロマトグラムに加えられた変更を破棄することもできます。

注記 バッチレビューでは、分析ごとにマニュアル積分イベントを保存できます。バッチレビュー外部のデータファイルと一緒にマニュアルイベントを保存することも可能です。2 つのマニュアル積分設定の矛盾を避けるため、データファイルと一緒に保存されたマニュアルイベントはバッチレビューでは適用されません。

レビューが開始されると、選択された処理オプションが実行されます。その処理がすでに実行され、変更が保存されていると、処理済の結果が読み込まれます。これは、未処理を読み込むよりも処理が必要ないので短時間ですみます。

バッチレビュー内のキャリブレーション

バッチレビュー内のキャリブレーションは、シーケンステーブルのリキャリブレーション設定とは独立して働きます。バッチキャリブレーションの最初のステップでは、必ずキャリブレーションテーブルのレスポンスおよびリテンションタイムのエントリ両方が置き換えられます。以降のキャリブレーション標準に対しては、レスポンスおよびリテンションタイムの値が平均化されます。

バッチレビューツールバーをクリックすると、バッチにあるすべてのキャリブレーションランでシステムがリキャリブレーションし、リキャリブレーションされたキャリブレーションテーブルが作成されます。次に、バッチレビューツールバーをクリックすると、キャリブレーションされた化合物ごとのアマウントが再計算されます。すべてのサンプルのアマウントが、リキャリブレーションされたキャリブレーションテーブルから計算されます。

バッチレポート

ユーザー設定が可能な「バッチテーブル」173 ページ は、プリンタへ直接印刷したり、画面に表示したり、次に挙げるフォーマットのうちの 1 つを使用して、ユーザ指定のプレフィックスを付けてファイルに出力することもできます。

- 拡張子 .TXT を持つ UNICODE テキスト
- 拡張子 .DIF を持つデータ交換フォーマット
- 拡張子 .CSV を持つ CSV (値がコンマで区切られた) フォーマット
- 拡張子 .XLS を持つ Microsoft Excel フォーマット

レポートオプションは、バッチテーブル内のソートメソッドとは独立したサンプルソート (ラインインデックス、サンプルタイプ、またはメソッドによる) も可能にします。ソートの優先順序は、「バッチテーブル」173 ページ に従います。

バッチ履歴

バッチレビューでは、現在のバッチ処理に関連するすべてのアクションがログに記録されます。バッチを変更するすべてのアクション (たとえば、表示されたクロマトグラムの変更、サンプルタイプの変更、バッチの読み込みおよび保存など) に対しては、日付とタイムスタンプ、現在のオペレーター名、およびイベントの説明を記録する行がバッチ履歴に 1 行追加されます。

バッチ履歴には、自分のコメントを追加することもできます。既存のバッチ履歴のエントリは編集不可能で、履歴リストは、バッチ履歴のメニューアイテムからはでないとアクセスできません。

レビュー

ChemStation では、データ解析の純粋なデータレビューのワークフローに使用するビューがあります。この［**レビュー**］ビューでは、シーケンス全体、シーケンスのサブセット、異なるシーケンス/シングルサンプルからのデータファイルのレポートを作成することができます。

［**レビュー**］ビューにメソッドを読み込むことはできません。また、再計算または再解析のとおりに新規結果を作成することもできません。［**レビュー**］ビューで作成するレポートは、すでに計算済みの結果のみを表示します。

レポートテンプレートを選択して、特定の選択したデータファイルに適用することができます。テンプレートとデータファイル選択の組み合わせにより、作成レポートの出力内容が決定されます。

［**レビュー**］ビューには、既存の結果が表示され、新しい結果バージョンを作成せずに、レビューを行いコンプライアンスのワークフローに利用することができます。

注記

［**レビュー**］ビューは、OpenLab Control Panel 上で［機器コンフィグレーション］のインテリジェントレポートが有効となっている場合にのみ利用可能です。

インテリジェントレポート要件

ChemStation は、インテリジェントレポートに使用される特定のフォーマット（*.ACAML）で結果データを作成します。ChemStation バージョン A または B で取り込んだデータのレポートを作成したい場合、まず OpenLab ChemStation リビジョン LTS 01.11 を使用して結果を再生成する必要があります（たとえば、データ解析ビューでデータを再計算するか、シングル注入レポートを生成する）。結果を必要なフォーマットで入手できない場合、[レビュー] ビューで生成するレポートには何のデータも含まれません。

データファイル選択

ChemStation エクスプローラのナビゲーションツリーからシーケンスまたはシングルランを読み込むことで、必要なデータファイルを選択することが可能です。その後、すべての利用可能なデータファイルがナビゲーションテーブルに表示されます。ナビゲーションテーブルでは、レポートとして結果を確認するデータファイルを選択します。

データファイルの読み込み

シーケンス全体またはシングルランフォルダから、すべてのデータファイルを読み込むことができます。ChemStation エクスプローラの **[データ]** タブで、シーケンスをダブルクリックするか、コンテキストメニューの **[読み込み]** コマンドを利用するかのいずれかにより、そこに含まれるすべてのデータファイルを読み込むことができます。

データファイル読み込むと、新しいデータファイルを表示する前にナビゲーションテーブルが自動的にクリアされます。その後、**シングルサンプルレポート**または**シーケンスサマリレポート**のいずれかのデータを作成することができます。

データファイルの追加

異なるシーケンスの結果を比較するには、まず 1 つのシーケンスを読み込み、その後別のシーケンスからの必要なデータファイルを追加します。ChemStation エクスプローラの **[データ]** タブで、コンテキストメニューから **[データファイルの追加]** コマンドを利用して、特定データファイルのみをすでに読み込まれた選択肢へ追加します。ダイアログが開き、そこで必要なデータファイルを選択できます。

データファイルを追加すると、ナビゲーションテーブルはすでに読み込んだデータファイルリストにデータファイルを付け加えます。その後、例えば**クロスシーケンスレポート**といったデータを作成することができます。

レポート用データファイルの選択

ナビゲーションテーブルは、ChemStation エクスプローラでダブルクリックして選択したシーケンスまたはシングルサンプルコレクションから、すべてのデータファイルを表示します。ナビゲーションテーブルで、レポートを作成しようとするデータファイルを選択します。選択した行のみが、生成するレポートに含まれます。

レポートテンプレート選択

ChemStation エクスプローラの **[レポートテンプレート]** タブから必要なレポートテンプレートを選択できます。ナビゲーションツリーは、RepStyle ディレクトリにあるすべてのレポートテンプレートを表示します。

デフォルトでは、RepStyle ディレクトリは C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation にあります。このパスはインストール時に定義されます。

ChemStation メニュー［**ファイル**］>［**Windows エクスプローラーを開く...**］を使用して、現在の機器のパス（C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥1 など）を開きます。または、［スタート］メニューの［**機器データ**］へのショートカットを使用します。

レポートプレビュー

生成されるレポート内容は、データの選択とレポートテンプレートによって決定されます。そのため、データファイルを選択してレポートテンプレートを読み込むと、ChemStation は対応するレポートを生成しレポートプレビューを表示します。

レポートはプリンターに送信することや、ファイル（.PDF、.XLSX、.DOCX、.TXT、または .CSV）として保存することができます。中央データ記憶領域を使用する場合は、レポートを中央リポジトリに直接アップロードすることもできます。

レビューワークフローの例

[レビュー] ビューは、たとえば以下のワークフローで使用できます。

- シーケンスを読み込み、そのシーケンスのすべてのデータファイルを選択します。レポートテンプレートを読み込み、**シーケンスサマリレポート**を生成します。
- シーケンスサマリレポート生成後に、異なるレポートテンプレートを読み込みます。**異なるレポートレイアウト**を利用して同一データをレビューします。
- シーケンスを読み込み、データファイルのサブセットのみを選択します。レポートテンプレートを読み込み、**そのシーケンスの部分のみ**についてシーケンスサマリレポートを生成します。
- データファイルのサブセットを読み込んだ後に、その他のデータファイルを追加します（シーケンス、またはシングルサンプルコレクションから）。レポートテンプレートを読み込み、**クロスサンプルまたはクロスシーケンスレポート**を生成します。

7 キャリブレーション

用語の定義　181
キャリブレーションの種類　182
シングルレベルキャリブレーション　182
マルチレベルキャリブレーション　183
キャリブレーション範囲　185
検量線の近似　185
原点処理　186
キャリブレーションテーブル　189
ピーク和(S)　190
化合物グループ　190
未知サンプル　191
リキャリブレーション　192
リキャリブレーションとは　192
なぜリキャリブレーションするのか?　192
マニュアルリキャリブレーション　192
ピーク和を使用したリキャリブレーション　193
リキャリブレーション方法　193
ピークが見つからない場合のリキャリブレーション　194
バッチレビューでのリキャリブレーション　194

本章では、キャリブレーションの概念について説明します。

用語の定義

キャリブレーション キャリブレーションとは、特別に用意されたキャリブレーションサンプルを注入して、成分の絶対濃度を計算するためのレスポンスファクタを決定するプロセスのことです。同定のために、キャリブレーションテーブルも使用します。

化合物 化合物は、マルチシグナルキャリブレーションの場合は複数のピークから構成されることがありますが、通常はシグナルごとに 1 つです。シングルシグナルキャリブレーションでは、化合物は 1 つのピークを参照します。

キャリブレーションレベル キャリブレーションレベルは、1 つのキャリブレーションサンプル濃度用の複数のキャリブレーションポイントから構成されます。マルチシグナルキャリブレーションでは、異なるシグナルを使用してさまざまな化合物をキャリブレーションできます。

キャリブレーションポイント キャリブレーションポイントは、検量線上のピークに対応するアマウント/レスポンス比を参照します。

キャリブレーションサンプル キャリブレーションスタンダードまたは標準混合物とも言われるキャリブレーションサンプルは、定量する化合物の既知アマウントを含むサンプルです。ソフトウェアでは、キャリブレーション標準バイアルからの注入をキャリブレーションサンプルと呼びます。

キャリブレーションサンプルは、化学薬品供給業者から購入するか、正確に計量した純粋化合物の一部を使用します。キャリブレーションサンプル内の化合物のアマウントは、一般的に ng/µl を単位とする濃度で表現されます。

キャリブレーションの種類

ChemStation には、シングルレベルおよびマルチレベルキャリブレーションという、2 種類のキャリブレーションがあります。

シングルレベルキャリブレーション

182ページ 図46 に示されているキャリブレーションカーブには、1 つのポイント、つまり 1 つのレベルが含まれています。シングルレベルキャリブレーションカーブでは、検出器のレスポンスは、対象となるサンプル用の濃度の実用範囲に対して、直線になると仮定されます。任意のコンポーネントピークのレスポンスファクタは、ポイントと原点とを結んだキャリブレーションカーブの線のスロープを逆にすることで得られます。シングルレベルキャリブレーションの欠点は、サンプル濃度に対する検出器レスポンスが直線になると仮定され、濃度対レスポンスのプロット上で原点を通過するという点です。これは常に正確であるとは言えず、不正確な結果につながる可能性があります。

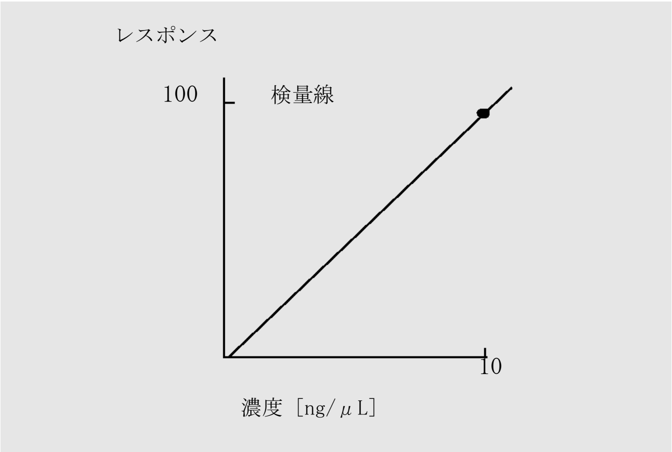


図 46　　シングルレベル検量線

正確な定量結果を得るには、キャリブレーションカーブに少なくとも 2 つのレベルがなければなりません。これらのレベルは、未知サンプル内で見つかると予想されるアマウントを含んでいる必要があります。

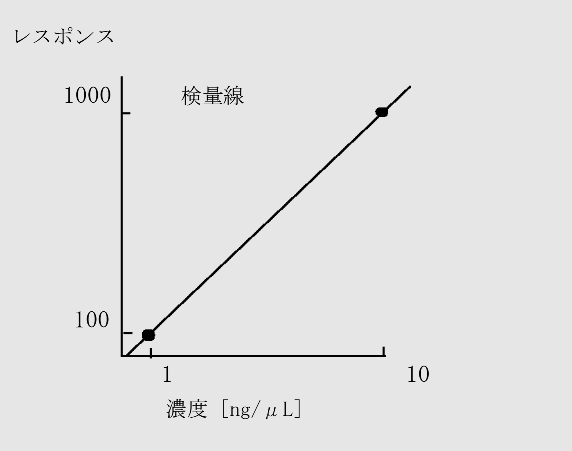


図 47 2 レベル検量線

たとえば、化合物を定量する際に、未知サンプルが 1 ～ 10 ng/µl の範囲であると予想される場合は、キャリブレーションカーブは 183ページ 図47 のように少なくとも 2 レベルを持つ必要があります。

アマウントの限界

ChemStation では、各コンポーネントに対する絶対アマウントに基づいて有効な定量範囲を定義することができます。

マルチレベルキャリブレーション

ある成分が直線のレスポンスを表していると仮定したり、キャリブレーション範囲の直線性を確認するのに正確さに欠ける場合には、マルチレベルキャリブレーションを使用できます。各キャリブレーションレベルは、特定の成分濃度を持つキャリブレーションサンプルに対応します。キャリブレーションサンプルは、未知サンプル内で予想される濃度範囲内で、各成分濃度が変化するように準備する必要があります。これにより、検出器のレスポンスが濃度に従って変化することが可能になり、それに応じてレスポンスファクタを計算できます。

このマルチレベル検量線には 3 つのレベルがあり、原点までの直線の近似が表示されます。この原点までの直線の近似方式は、シングルポイントメソッドキャリブレーションに似ています。濃度に対する検出器のレスポンスは直線だと仮定されます。2 つのキャリブレーションタイプの違いは、直線の近似を使

用すると、検出器のレスポンスのスロープが各レベルに 1 つずつ、複数のポイントに基づく最適な近似により決定できるという点です。

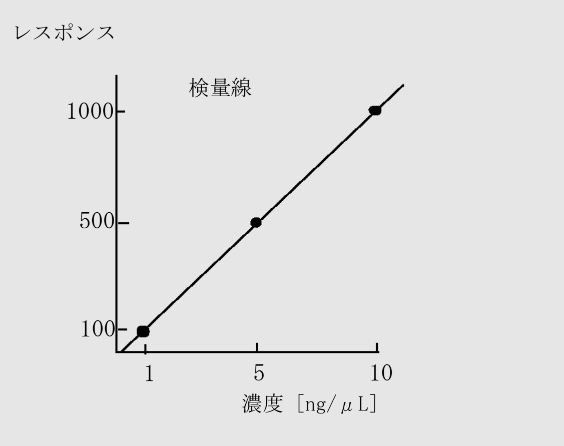


図 48　　3 レベルのマルチレベル検量線

この曲線を作成するために使用される情報の表形式である該当のキャリブレーションテーブルは、184ページ表18 の表と同じように見えるかもしれません。

表 18　　キャリブレーションテーブル

レベル	アマウント (ng/µL)	レスポンス (面積カウント)
1	1	100
2	5	500
3	10	1000

この例では、3 つのレベルを生成するのに使用されたキャリブレーションサンプルは、1、2、および 3 と識別されています。

キャリブレーション範囲

各マルチレベルキャリブレーションは、キャリブレーションサンプルで使用されている濃度範囲に有効です。検量線の外挿は、（特に）検量線が直線ではない場合は、近似値に過ぎません。各化合物の有効なキャリブレーションは、[**化合物の詳細**] ダイアログボックスで定義できます。その化合物の各エントリは、上限および下限で表すことができます。これらの限界を超えると、注釈レポートが付けられます。

検量線の近似

さまざまな検量線の近似計算が、マルチレベルキャリブレーションに使用できます。

- 折れ線
- 直線
- 対数
- べき乗
- 指数
- 二次式
- 三次式
- 平均 (レスポンス/アマウント)

非直線の近似

サンプル濃度内の変化に対する検出器のレスポンスは、直線ではない場合があります。このような種類の分析には、直線回帰キャリブレーションメソッドは適切ではなく、マルチレベルキャリブレーション計算を使用する必要があります。

原点処理

レスポンスカーブがプロットされる際の原点の処理方法には 次の4 つがあります。

- 原点無視
- 原点含む
- 原点強制通過
- 原点結合

検量線に原点を含めるように強制するには、キャリブレーションポイントが、第 1 象限から第 3 象限に原点を中心として対称に置かれます。回帰の計算にすべてのポイントを使用すると、結果として生じる検量線が原点を確実に通過するようになります。これは、186ページ 図49 でも説明されます。

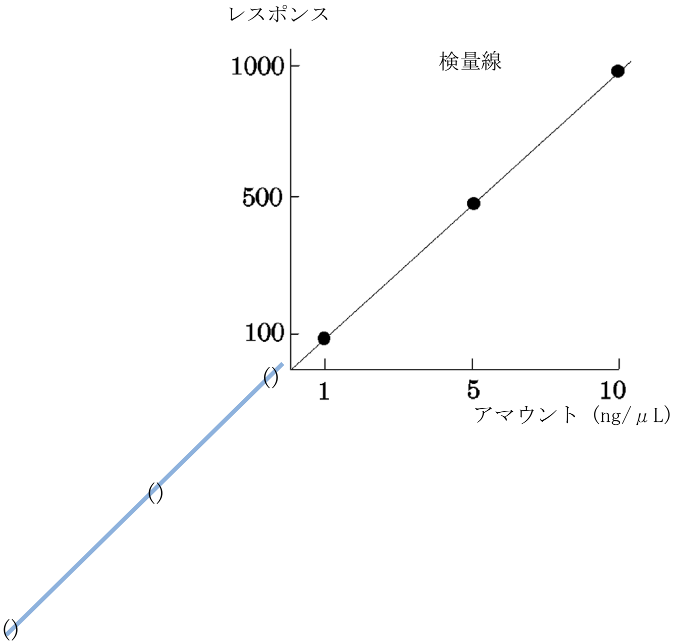


図 49　　原点強制通過

検量線の近似および原点処理の詳細については、**オンラインヘルプ**ファイルを参照してください。

キャリブレーションポイントの重み付け

デフォルトの検量線を設定する場合、カーブを生成するさまざまなキャリブレーションポイントに、相対的な重み付け (または重要性) を指定できます。

次の重み付けオプションを選択できます。

重み付け	説明
均等	すべてのキャリブレーションポイントが同等の重み付けを持ちます。
直線 (アマウント)	アマウント x のキャリブレーションポイントは、最小アマウントに対して 1/x で標準化された重みを持つので、最大の重み付けは 1 です。標準化は、重み付けを最小アマウントと掛け合わせることで行われます。たとえば、アマウント x のキャリブレーションポイントの重みは (1/x) x a です。ここで a は、キャリブレーション標準で調製されたキャリブレーション済み化合物の最小アマウントです。 原点が含まれると、他のキャリブレーションポイントの重み付けの平均値が割り当てられます。
直線 (レスポンス)	レスポンス y のキャリブレーションポイントは、最小レスポンスに対して 1/y で標準化された重みを持つので、最大の重み付けは 1 です。標準化は、重み付けを最小レスポンスと掛け合わせることで行われます。たとえば、アマウント y のキャリブレーションポイントの重みは、(1/y) x b です、ここで b は、キャリブレーション標準で調製されたキャリブレーション済み化合物の最小アマウントに対応するレスポンスです。 原点が含まれると、他のキャリブレーションポイントの重み付けの平均値が割り当てられます。
二次式 (アマウント)	アマウント x のキャリブレーションポイントは、最小アマウントに対して $1/x^2$ で標準化された重みを持つので、最大の重み付けは 1 です。標準化は、重み付けを最小アマウントと掛け合わせることで行われます。たとえば、アマウント x のキャリブレーションポイントの重みは $(1/x^2) \times a^2$ です。ここで a は、キャリブレーション標準で調製されたキャリブレーション済み化合物の最小アマウントです。

重み付け	説明
二次式(レスポンス)	レスポンス y のキャリブレーションポイントは、最小レスポンスに対して $1/y^2$ で標準化された重みを持つので、最大の重み付けは 1 です。標準化は、重み付けを最小レスポンスと掛け合わせることで行われます。たとえば、レスポンス y のキャリブレーションポイントの重みは、$(1/y^2) \times b^2$ です、ここで b は、キャリブレーション標準で調製されたキャリブレーション済み化合物の最小アマウントに対応するレスポンスです。
キャリブレーション数	キャリブレーションポイントは、ポイントのリキャリブレーション回数に従って重み付けされます。標準化は行われません。

二次式キャリブレーションポイントの重み付けは、たとえば、キャリブレーションポイントの散らばりに合わせて調整するのに使用できます。これにより、一般的に比較的正確に計測できる原点により近いキャリブレーションポイントが、原点からさらに遠く散らばっている可能性のあるキャリブレーションポイントよりも高い重み付けを得るようになります。

使用するキャリブレーションポイントの重み付けの種類を決定するには、メソッドの要件を基礎に考える必要があります。

キャリブレーションテーブル

キャリブレーションテーブルは、選択した計算手順に従って、ピーク面積または高さを選択した単位に変換します。このテーブルには、キャリブレーション分析からのリテンション/マイグレーションタイムのリストが含まれます。このリテンション/マイグレーションタイムは、サンプル分析から得られたピークのリテンション/マイグレーションタイムと比較されます。一致するものがあれば、サンプル内のピークは、キャリブレーションテーブル内にある成分と同じものを示しているとみなされます。分析中またはレポートの生成中、各ピーク用に入力されたアマウントは、レポート用に選択された計算手順用のアマウントを計算するのに使用されます。キャリブレーションテーブルを作成するのに必要な情報の種類とアマウントは、目的とする計算手順の種類によって異なります。

キャリブレーションテーブルを作成するには、次の情報が必要です。

- 各キャリブレーション混合成分ピークのリテンション/マイグレーションタイム
- キャリブレーション混合物を作成するのに使用した各成分のアマウント（一貫した単位で表したもの）

ピーク和(S)

ピーク和テーブルは、石油化学および製薬業界向けの特定アプリケーションのために提供されています。代表的なアプリケーションは、合計不純物または分解生成物のレポートや、特定の範囲内にあるキャリブレーションされていないピーク面積和です。

ピーク和テーブルは、標準キャリブレーションテーブルと似ていても異なります。キャリブレーション テーブルのように、現在のメソッドと関連しています。ピーク和は、マルチシグナルデータファイル用には設計されていません。

特定の時間範囲からの面積の和は、キャリブレーションテーブルからの化合物の検量線を使用してアマウントとして表されます。固定レスポンスファクタを使用することも可能です。

注記 ピーク和テーブルを作成する前に、分析のためのキャリブレーションテーブルを作成する必要があります。

化合物グループ

化合物グループは、キャリブレーションテーブルの個々の化合物をレポートする目的でグループ化することができます。1 つの化合物は単一のグループにのみ含めることができます。グループはキャリブレーションテーブルで作成します。キャリブレーションテーブルには、グループごとの番号のみ含まれています。別のボックスでグループ名を番号に割り当て、1 つまたは複数の化合物を追加します。グループアマウントキャリブレーションを実行することができ、これによってアマウント合計がグループに割り当てられます。グループ内の化合物のアマウントは、トータルレスポンスに対するレスポンスの割合に従って計算されます。一般的な例に、異性体の混合があり、ここではアマウント合計のみ既知ですが、異性体の検出器レスポンスは同一です。

未知サンプル

未知サンプルとは、定量する化合物のアマウントがどれぐらい含まれているかが不明なサンプルのことです。

未知サンプルに含まれる化合物の割合を知るには、次のことが必要です。

- 化合物の検量線を作成する
- 未知サンプルの一部を注入し、およびキャリブレーションサンプルとまったく同じ方法で分析を実行する
- 化合物のアマウントが不明なために生じるピークの面積または高さを表すレスポンスを、シグナルから決定する
- 検量線を使用して、未知サンプル内の化合物のアマウントを計算する

たとえば、未知サンプル内のピークの面積が 500 である場合、191ページ 図 50 に示した検量線を使用して、未知サンプル内のアマウントは 5 ng/μL と決定できます。

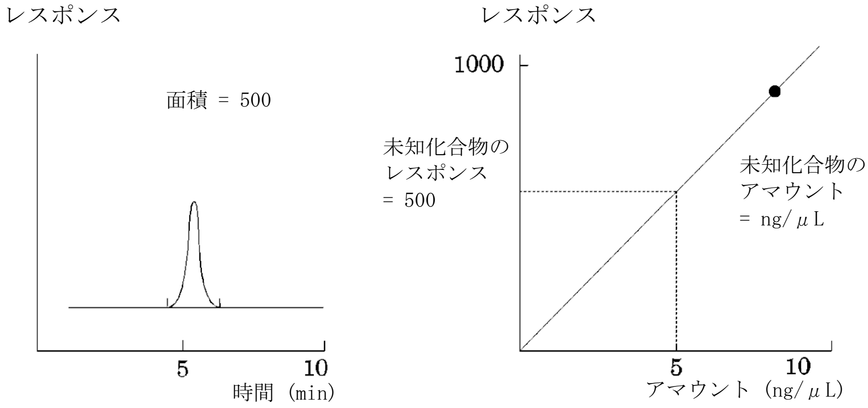


図 50 未知サンプルからのシグナルおよび検量線

リキャリブレーション

リキャリブレーションとは

リキャリブレーションは、検量線上のレベルを更新したい場合に使用するプロセスです。リキャリブレーションをする場合、元と同じで同量 (これが最も重要) のキャリブレーション化合物を含んだサンプルを分析します。キャリブレーションサンプルを分析すると、更新されたレスポンスファクタおよびリテンション/マイグレーションタイムが取得されます。何度もキャリブレーション分析を行ってレスポンスファクターを平均化させ、レスポンスファクタが同等に重み付けされるようにすることもできます。

なぜリキャリブレーションするのか?

ほとんどのキャリブレーションの寿命には、クロマトグラフィにおける変化のため、限界があります。リキャリブレーションは、分析の正確性を保持するために必要です。たとえば、カフェインを含むサンプルを定量するためのカフェイン用化合物のキャリブレーションテーブルを作成します。ある時点で、カラム/キャピラリを取り替える必要があります。カラム/キャピラリは、まったく同じ種類のものと取り替えますが、最初にカフェイン用にキャリブレーションテーブルを作成した場合には、それが以前のカラム/キャピラリとまったく同じ動作をするわけではありません。したがって、一貫性を保持するために、キャリブレーションテーブル内のレベルをリキャリブレーションする必要があります。これを行うことで、同じシステム条件下で分析されたサンプルを定量することになります。

マニュアルリキャリブレーション

［新規のキャリブレーションテーブル］ダイアログボックスの［マニュアル設定］オプションボタンを使用して、ピークキャリブレーション情報のマニュアル入力およびキャリブレーションテーブルの標準化することができます。通常、新しいキャリブレーションメソッドは、キャリブレーション標準混合物の分析、キャリブレーションテーブルの作成、そしてすべてのキャリブレーションピークのアマウントを入力してレスポンスファクタを入手することで、生成されます。この方法は、長年にわたって同じ化合物が分析され、さまざまな化

合物のレスポンスファクタや検出器を簡単に利用できるようになっている、たとえば石油化学業界で使用されるようなアプリケーション向けに有効です。

キャリブレーションテーブルをマニュアルで作成するには、ピークおよびそのレスポンスファクタをキャリブレーションテーブルに入力し、少なくとも 1 つのレスポンスリファレンスのピークを含む標準でメソッドをリキャリブレーションし、デルタ% の更新を選択します。

リテンションタイム比率を計算するために特定のピークを参照するには、今ピークをリテンションタイム比率リファレンスピークに設定することができます。その後、同一の RT 比率リファレンス番号のあるすべてのピークは、このピークにリファレンスされます。

ピーク和を使用したリキャリブレーション

リキャリブレーションが実行される場合は、メソッドのピーク和テーブルにおけるリテンション/マイグレーションタイムの範囲は、実際にリキャリブレーションが実行される前に更新されます。ピーク和リキャリブレーションはこの方法で実行され、デルタが時間計算に統合されることが確認されます。

リキャリブレーション方法

ChemStation のソフトウェアを使用すると、2 通りの方法でリキャリブレーションができます。自動化された分析の間に、対話的または自動的にリキャリブレーションできます。対話的リキャリブレーションとは、1 つまたは複数のキャリブレーションサンプルを注入した後、ChamStation ソフトウェアを使用してリキャリブレーションの手順を直接に順番に行うことを指します。シーケンスを使用するリキャリブレーションとは、リキャリブレーションが行われる際に、自動化ソフトウェアがリキャリブレーションを実行するように指定することを指します。詳細は、「自動リキャリブレーション」128 ページ を参照してください。

ソフトウェアを使用したリキャリブレーションの実行方法については、ヘルプシステムの「方法」の部分を参照してください。

ピークが見つからない場合のリキャリブレーション

同定されていないピークをリキャリブレーションするには、3 つの方法があります。

リキャリブレーションなし

キャリブレーションテーブル内の化合物が、積分結果の中で同定できなかった場合、キャリブレーションは中断されます。シーケンス中でこれが起こると、シーケンスも中断されます。

部分リキャリブレーション

この機能は、同定されたピークのみのリキャリブレーションが可能です。ピークが見つからないと、キャリブレーションは中断はされませんが、ピークが見つからないというレポートとランログが注釈として付けられます。

リテンション/マイグレーションタイムのリキャブレーション

この機能により、同定されたピークおよび同定されてないピークすべてのリテンション/マイグレーションタイムのリキャリブレーションが可能になります。これは、同定された化合物のリテンション/マイグレーションタイムを使用して行われます。同定されたピークには、レスポンスファクタの更新はありません。

バッチレビューでのリキャリブレーション

バッチレビューでのリキャリブレーション方法は、オリジナルのシーケンスでリキャリブレーションされたものとは異なります。

バッチレビューツールバーの［**キャリブレーション更新**］ボタンをクリックすると、すべてのキャリブレーションランがバッチにある状態でシステムがリキャリブレーションし、リキャリブレーションされたキャリブレーションテーブルが作成されます。次にバッチレビューツールバーの［**スタート**］ボタンをクリックすると、キャリブレーションされた各化合物のアマウントが再計算されます。すべてのサンプルのアマウントが、リキャリブレーションされたキャリブレーションテーブルから計算されます。

8 レポート

レポートとは 196
結果のレポート 198
定量方法 200
クラシックおよびインテリジェントレポート 202
インテリジェントレポートの有効化がもたらすもの 202
インテリジェントレポート 203
インテリジェントレポートの利点 203
インテリジェントレポートの制限事項 204
インテリジェントレポート用レポートテンプレートエディタ（RTE） 204
レポートテンプレートの保存 207
生成レポートの保存 209
中央データ記憶領域のレポートテンプレート 209
クラシックレポート 210
カスタムフィールド値のレポート 210
レポートスタイル 210
他のレポートスタイルパラメータ 212
シーケンスサマリレポート 213
レポートファイルフォーマット 216

この章では、インテリジェントレポートとクラシックレポートの概念について説明します。

レポートとは

レポートは、分析するサンプルの定量的および定性的情報から構成されます。レポートは紙に印刷したり、画面に表示したり、電子ファイルに出力したりできます。レポートには、分析中に検出されたピークの詳細、および取り込んだシグナルのプロットが含まれます。

さまざまな目的用のレポート

データ取り込みやデータレビューなど、目的に合ったレポートを指定することができます。

- **シーケンスサマリレポート**は、**[シーケンスパラメータ]** ダイアログの **[シーケンス出力]** タブで定義されます。 このレポートは、シーケンス取り込みの完了後、またはシーケンス再解析後に、ChemStation により自動的に作成されます。
- **シングル注入レポート**は、**[レポート条件]** ダイアログで定義します。 このレポートは、シーケンス取り込みまたはシーケンス再解析の実行中に各シングルサンプルに関するものが作成されます。

インテリジェントレポートでは、レポートの目的に応じて異なるレポートタイプでテンプレートを作成できます。 詳細情報は、「レポートタイプ」 204 ページを参照してください。

レポート出力先

レポートは以下の出力先に送信されます。

- **スクリーン**

  レポート（テキストとグラフィックを含む）は、画面上のレポートプレビューウィンドウに表示され、そこから印刷することができます。
- **プリンタ**

  テキストとグラフィックから構成されるレポートは、現在選択されているプリンタに印刷されます。
- **ファイル**

  レポートは、たとえば Adobe PDF ファイルなどのファイルに保存されます。

タイムゾーンの検討

データ取り込み時に、ChemStation や結果のさまざまな場所で注入日時を確認できます。ローカルタイムゾーンと Windows の地域設定に応じて、表示される注入日時はローカルタイムゾーンまたは日付/時刻の形式に合わせて変換される場合があります。

- ログブック：

  この日時は、常にデータが取り込まれた場所のローカル日時で表示されます。異なるタイムゾーンで表示した場合や、レポートに印刷した場合は変換されません。

- データファイルの［**ファイル情報**］ウィンドウ：

  この日時は、常にデータが取り込まれた場所のローカル日時で表示されます。異なるタイムゾーンで表示した場合や、レポートに印刷した場合は変換されません。

- レポート：

  このフィールドは、レポートが作成された地域のローカルタイムゾーンおよび時刻形式に変換されます。

データ取込とレポート作成が同じタイムゾーンで行われた場合、すべての日時（ログブック、データファイル、レポート）には同じ時刻が表示され、印刷書式のみ異なります。

データ取込と異なるタイムゾーンでレポートを作成した場合：レポートには、取り込みの時刻が地域のローカル時刻に変換されて表示されます。

以下の例では、ローカルタイムゾーンと Windows の地域設定に応じて、取込日が ChemStation 内のさまざまな場所でどのように表示されるのかを示しています。

表 19　例: 協定世界時（UTC）2021-07-30 15:00:00 に取り込まれたデータの時刻表示

イベント	ローカル形式に変換された取込日時	Windows ローカル設定の時刻形式	表示される取込日時
ニューヨークでデータ取込とレポート作成 タイムゾーン UTC-05:00	2021-07-30 10:00:00	MM/dd/yyyy HH:mm:ss tt	ログブック： 2021-07-30 10:00:00 AM データファイル：2021-07-30 10:00:00 AM クラシックレポート：07/30/2021 10:00:00 AM インテリジェントレポート： 2021/07/30 10:00:00+05:00
チューリッヒでレポート作成（UTC+01:00）。	2021-07-30 16:00:00	dd.MM.yyyy HH:mm:ss	ログブック：2021-07-30 10:00:00 AM データファイル：2021-07-30 10:00:00 AM **クラシックレポート： 30.07.2021 16:00:00** **インテリジェントレポート：** **2021-07-30 16:00:00+01:00**
ニューヨークで 2 回目のレポート作成（UTC-05:00）	2021-07-30 10:00:00	yyyy-MM-dd HH:mm:ss	ログブック：2021-07-30 10:00:00 AM データファイル：2021-07-30 10:00:00 AM クラシックレポート： 2021-07-30 10:00:00 インテリジェントレポート： 2021-07-30 10:00:00 +05:00

結果のレポート

次の 2 種類のレポートが利用可能です。

- 検出器のレスポンスを修正しない、キャリブレーションされていないレポート
- 検出器のレスポンスにある相違点をサンプルのさまざまな成分に修正した結果を表示する、キャリブレーションされたレポート。

キャリブレーションされていないレポート

キャリブレーションされていないレポートには、**面積%**および**高さ%**レポートが含まれます。 これらのレポートは主に、キャリブレーションされたレポートの準備に使用されます。 対象となる化合物用の単位面積または高さのレスポンスを生成するのに必要な化合物の量が類似していれば、最終レポートとしての価値もあります。

キャリブレーションされたレポート

キャリブレーションされたレポートは、検出器のレスポンスにある相違点をレポートされた化合物に修正します。レポートされた化合物の既知アマウントを含む 1 つまたは複数のキャリブレーションサンプルを、未知のサンプルに使用されるのと同じ条件のもとで分析する必要があります。これらのキャリブレーションサンプルから取得した積分データは、キャリブレーションデータの準備に使用されます。このデータは、レポート生成に使用される、リテンション/マイグレーションタイム、量およびレスポンスのリストです。キャリブレーションされたレポートは、外部標準および内部標準とよばれる 2 つのキャリブレーション手順に基づいています。

外部標準レポート

ESTD レポートは、選択した単位、または存在するすべての化合物に占める各化合物の割合を使用して、結果を一覧表示します。キャリブレーションテーブル内のすべての化合物およびサンプルアマウントに対して 1 つのアマウントが使用されます。外部標準の手順には、キャリブレーションサンプルと未知サンプルの両方が注入された相対量が正確に分かっている必要があります。外部標準レポートの信頼性は、注入の再現性、およびサンプルごとに違うその他の要因による限界があります。

内部標準レポート

外部標準手順の限界は、内部標準のアプローチを使用することで克服することができます。内部標準の正確な既知アマウント (同じアマウントである必要はない) がキャリブレーションサンプルと未知サンプルの両方に加えられます。対象の各化合物のレスポンスは、内部標準のレスポンスで分割され、レスポンス比を提供します。検量線は、このレスポンス比とアマウント比のプロットで、この情報はレポートされる結果の計算で使用されます。このようにして、すべての化合物に等しく影響を与えるクロマトグラフ/エレクトロフェログラフシステムにおける注入量またはわずかな変更に関する不注意によるエラーがなくなります。ISTD レポートは、選択した単位で結果を一覧表示します。

コントロールチャートレポート

コントロールチャートレポートは、特定のキャリブレーション化合物に対する複数の分析から、単一の結果を追跡管理します。 **コントロールチャート**機能は、ChemStation が稼動した後にインストールされます。この機能を使用するメソッドは、各分析の後、追跡管理の結果を Microsoft Excel のワークシートに渡します。その後、Excel を使用してレポートを印刷します。

定量方法

レポートタイプは、たとえば ISTD レポートのように、それを作成するのに使用された計算方法の名前で識別されます。以下は、各タイプの簡単な説明です。

面積%は最も簡単なレポートで、サンプル成分の検出器レスポンスの差異に対しては修正が行われないため、キャリブレーションデータを必要としません。面積% レポートは、他のレポートオプションとともに使用するキャリブレーションテーブルを作成するのに特に役立ちます。このレポートは、成分の検出器レスポンスでの相違が重要ではない分析に適しています。

高さ% は、面積% レポートと同様のレポートですが、ピークの面積の代わりにピークの高さが計算に使用される点が異なります。

Norm% は、各コンポーネントが、存在するすべてのコンポーネントのアマウントの割合として報告されるレポートです。

ISTD は、各物質の実際のアマウントのレポートを作成します。アマウントは、以前に作成されたキャリブレーションテーブルを使用して計算されます。外部標準を使用するには、注入されたキャリブレーション混合物の量を知っている必要があります。

ESTD% は、注入されたサンプルアマウントの割合として各物質の相対アマウントのレポートを作成します。アマウントは、以前に作成されたキャリブレーションテーブルを使用して計算されます。外部標準を使用するには、注入されたキャリブレーション混合物の量を知っている必要があります。

ISTD は、各物質の実際のアマウントのレポートを作成します。アマウントは、以前に作成された検量線を使用して計算されます。サンプル混合物とキャリブレーション混合物の両方で内部標準を使用すると、注入されたサンプルの量を調べて管理する手間が省けます。これにより、分析ごとに機器のパフォーマンスに生じる偏差も修正されます。

ISTD% は、注入されたサンプルの割合として各物質の相対アマウントのレポートを作成します。サンプル混合物とキャリブレーション混合物の両方で内部標準を使用すると、注入されたサンプルの量を調べて管理する手間が省けます。これにより、分析ごとに機器のパフォーマンスに生じる偏差も修正されます。

クラシックおよびインテリジェントレポート

ChemStation では使用するレポートのタイプを選ぶことができます。ChemStation B バージョンと同様の**クラシック ChemStation レポート**、または**インテリジェントレポート**（OpenLab CDS と共有）。

以下のセクションで、この 2 つのタイプのレポートについて説明します。

インテリジェントレポートの有効化がもたらすもの

インテリジェントレポートを利用する場合、OpenLab Control Panel で [機器コンフィグレーション] の [インテリジェントレポート] を有効にする必要があります。

インテリジェントレポートを有効にすると、ChemStation に以下の変化をもたらせます。

- **［レポートレイアウト］**ビューに、インテリジェントレポート用のレポートテンプレートエディタが表示されます。クラシックレポートテンプレートの代わりに、このビューでインテリジェントレポートのレポートテンプレートを編集できるようになりました。
- **［レビュー］**ビューが表示できます。
- **［シーケンスパラメータ］**ダイアログと**［レポート条件］**ダイアログで、クラシックレポートとインテリジェントレポートのどちらかを選択できます。クラシックレポートの設定は引き続き使用でき、その機器用にすでに存在する「クラシック」レポートテンプレートも引き続き使用できます。

インテリジェントレポート

インテリジェントレポートの利点

インテリジェントレポートには以下の利点があります。

- ［**レビュー**］ビューを使用できます。
- クラシックレポートの設定およびダイアログで使用可能な多くの機能は、レポートテンプレートの含まれます。［**レポートレイアウト**］ビューを使用してレポートテンプレートを作成または編集できます。このレポートレイアウトにはインテリジェントレポート用の新しいレポートテンプレートエディタが含まれています。このレポートテンプレートエディタには効果的な機能があります。
  - ChemStation で作成された結果データに対応するフィールドを選択することにより、すべての結果データにアクセスできます。
  - データフィールドで計算を行うために、独自の式を作成できます。Microsoft Visual Basic で記述された任意の有効な式を使用できます。
  - ChemStation カスタムフィールドで計算を行う場合に式を作成できます。
  - 結果へのフラグ付け：特定の結果の値に基づいて、その結果を強調表示するための式を設定できます。
  - スニペット：レポートテンプレートエディタにはスニペットと呼ばれるプレコンフィグ済みのレポート項目があり、これをドラッグ & ドロップでレポートテンプレートに挿入できます。
- レポートテンプレートドキュメントツールを使用して、レポートテンプレートの説明を作成できます。
- ヨーロッパ薬局方の定義に準じて、次の値をレポートできます (クラシックレポートでは、ピーク谷比も使用できます。必要なフィールドについて詳しくは、『リファレンスガイド』を参照してください)。
  - シグナル/ノイズ比
  - 相対リテンション
  - 相対リテンションタイム

インテリジェントレポートの制限事項

インテリジェントレポートで作成されたレポートは、常に生のシグナルに基づいています。ブランク減算、スムージング、シグナル位置合わせ、またはバックグラウンド減算が適用された、変更されたシグナルはレポートできません。

インテリジェントレポート用レポートテンプレートエディタ（RTE）

レポートタイプ

さまざまなタイプのレポートが作成可能です。レポートタイプに応じて、異なるデータフィールドがレポートテンプレートに用意され、さまざまな形でレポート項目がグループ化されます。

以下のレポートタイプが利用可能です。

- **シングル注入**

  生成されたレポートには、現在のデータの各注入に関して別々のテンプレートからレポート項目を表示します。注入ごとのデータを表示することはできますが、1 つのテーブルまたはマトリックス内の異なる注入の結果と比較することはできません。

- **シングルシーケンスサマリ**

  生成されたレポートには、現在のデータの各シーケンスに関する別々のテンプレートからレポート項目を表示します。1 つのテーブルまたはマトリックス内の異なる注入の結果を比較することはできますが、異なるシーケンスのデータを表示することはできません。

- **クロスシーケンスサマリ**

  このレポートタイプでは、データは自動的にグループ化**されません**。したがって、レポート項目をグループ化するためにより注意を払う必要がありますが、その代わり、異なるシーケンスのデータを比較するレポート項目を作成することができます。

テンプレートフォーマット

すべてのレポートテンプレートは、Microsoft が提供する標準の XML フォーマットであるレポート定義言語（RDL）に基づいています。

RTE は、数ステップでレポートテンプレートを作成できる使いやすいインターフェイスを提供します。すべてのタイプのレポート項目および対応するコンフィグレーションオプションのほとんどをサポートしています。

データフィールド

取り込み中に ChemStation により生成された、すべての結果データにアクセスできます。 それぞれのデータ値が保存されている各データフィールドを選択することができます。 要件に応じて、レポートテンプレートのデータフィールドを調整することができます。 以下のカテゴリのデータフィールドを調整可能です。

- シーケンス
- サンプル
- 注入
- シグナル
- 化合物
- ピーク
- 検量線
- 機器
- ファイル
- プロジェクト

レポート項目

要件に応じて、さまざまなレポートアイテムをレポートテンプレートに追加可能です。各レポート項目について、フォントフォーマット、背景色、式といった複数のプロパティを設定することができます。以下のレポートアイテムが利用可能です。

- テキストフィールド
- データフィールド
- テーブル
- マトリックス
- 複合グループ
- イメージ
- クロマトグラム

- 検量線
- スペクトル
- チャート
- メソッド情報

スニペット

レポートテンプレートエディタではスニペット（定義済みのレポート項目またはレポートアイテムのグループ）が用意されており、ドラッグ&ドロップでレポートテンプレートへと挿入することが可能です。

これらのスニペットは、例えば化合物結果またはシステムスータビリティの構成済みテーブル、シングルシグナルプロットまたはマルチシグナルプロットのクロマトグラム、キャリブレーション精度やリテンションタイム安定性のコントロールチャートなどがあります。スニペットは開始点として使用することができ、要件に応じて調整することが可能です。

カスタム計算

レポートテンプレートエディタでは、データフィールドの値を ChemStation で生成されたとおりに表示したり、またはさまざまな目的に合わせて新しい値を計算することが可能です。既存のデータフィールドあるいはカスタムフィールドを利用して、式を作成することができます。

値を変数として保存して、その後に利用するテンプレートのレポート項目からこれらの変数にアクセスすることができます。

レポートテンプレートエディタには、有効な式の作成に役立つエクスプレッションエディタが用意されています。すべての式は、Microsoft Visual Basic に基づきます。

条件付フォーマット

式から生成される値に応じて、フィールドまたはセル内のあるプロパティを設定することが可能です。例えば化合物アマウントが表示されている場合、そのアマウントが一定の値を超えている場合に背景色を赤とするよう条件設定することができます。

デモデータ

[レポートレイアウト] ビューで新しいレポートテンプレートを開発すると、ChemStation からデモデータが提供されます。デモデータは、テンプレートを編集またはプレビューする時にレポートテンプレートエディタに表示されます。デモデータは、**[データ解析]** ビューのナビゲーションテーブルで現在選択中のデータセット（シーケンスまたはシングルラン）に対応します。 シーケンスサマリレポート用のテンプレートを開発する場合、[データ解析] ビューのシーケンスを読み込みサンプルサブセットを選択する必要があります。シングル注入レポート用のテンプレートを開発する場合は、[データ解析] ビューのサンプルを 1 つ選択するだけで十分です。

レポートテンプレートの保存

ChemStation では複数の定義済みレポートテンプレートがあります。これらのデフォルトテンプレートは、パブリックのドキュメントフォルダーの RepStyle ディレクトリ にあります。

デフォルトでは、RepStyle ディレクトリは C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation にあります。このパスはインストール時に定義されます。ChemStation メニュー **［ファイル］** > **［Windows エクスプローラーを開く...］**を使用して、システム内のパス（C:¥ユーザー¥パブリック¥パブリックのドキュメント¥ChemStation¥1 など）を開きます。または、［スタート］メニューの **［機器データ］** へのショートカットを使用します。

シーケンスについては、シーケンスサマリレポートおよびシングル注入レポートに使用するレポートテンプレートは、結果セットの中のシーケンスメソッドと同じロケーションに保存されています。シーケンスのデータファイル内には、レポートテンプレートは保存されていません。

テンプレートダイアログの参照

［シーケンスパラメータ］ダイアログまたは **［レポート条件］**ダイアログでレポートテンプレートを参照する場合、デフォルトテンプレートディレクトリと結果セットのテンプレートを同期することができます。

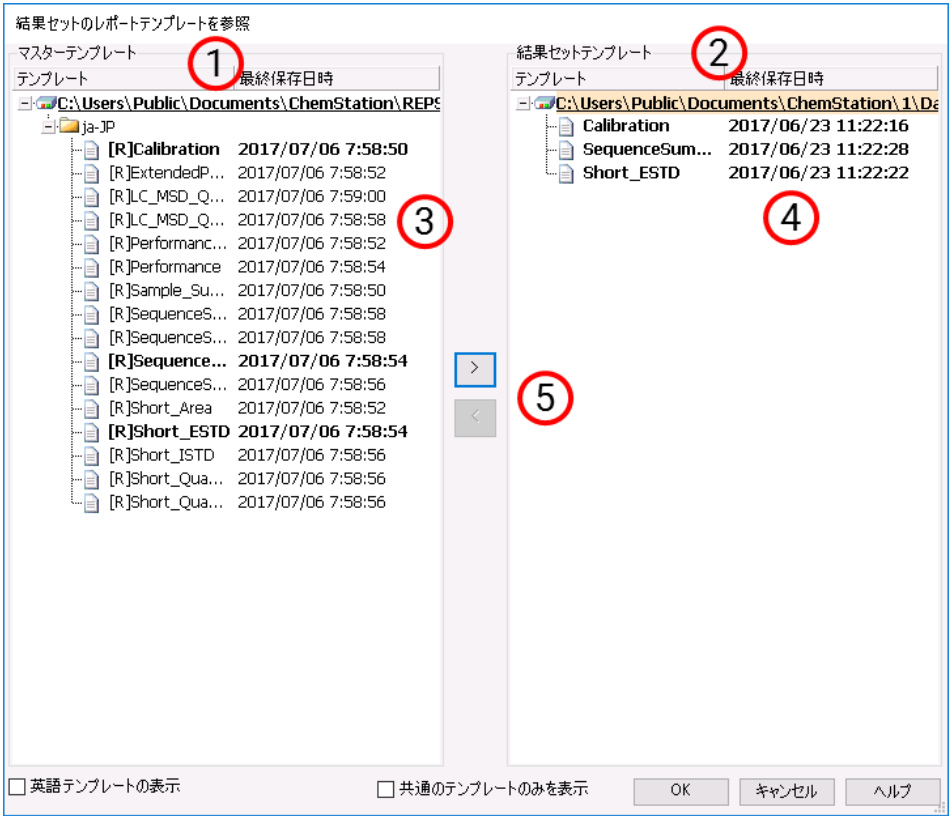


図 51 [結果セット] ダイアログでのレポートテンプレートの参照

1 左側に、デフォルトテンプレートディレクトリ（インストールの間に定義される）のテンプレートが表示されます。

2 右側には、現在読み込まれている結果セットのテンプレートが表示されます。

3 それぞれのテンプレートには、前回保存された日付が表示されます。日付のツール チップにはテンプレートの最終履歴が表示されます。

4 結果セットとデフォルトメソッドディレクトリに共通のテンプレートは、太字で表示されています。テンプレートは名前によってのみ比較しています。

5 デフォルトテンプレートディレクトリから結果セットにテンプレートをコピーするには、ドラッグ&ドロップを使用するか、［>］ボタンを使用します。

生成レポートの保存

シングル注入レポートのファイル名

［レポート条件］ダイアログにシングル注入レポート用のファイル名を入力する場合、以下のトークンが使用可能です。

- <Date> 現在の日付
- <Time> 現在の時間
- <SeqName> シーケンスファイル名（シングルサンプル用は “_” となります）
- <ResultSet> 結果セット名（シングルサンプル用は “_” となります）
- <SampleName> サンプル名
- <LimsID> LimsID
- <InjDateTime> 注入日時
- <DataFile> データファイル名
- <SampleLoc> サンプルロケーション

シーケンスサマリレポートのファイル名

［シーケンスパラメータ］ダイアログの**［シーケンス出力］**タブにシーケンスサマリレポートのファイル名を入力する場合、以下のトークンが使用可能です。

- <Date> 現在の日付
- <Time> 現在の時間
- <SeqName> シーケンスファイル名
- <ResultSet> 結果セット名
- <LimsID> LimsID

中央データ記憶領域のレポートテンプレート

中央データ記憶領域システムを利用する場合、レポートテンプレートは個別の文書タイプとして扱われます。 中央データ記憶領域にテンプレートをアップロードし、中央データ記憶領域からテンプレートをダウンロードすることができます。または、中央データ記憶領域からの最新バージョンで、すべてのローカルレポートテンプレートを更新することができます。

クラシックレポート

カスタムフィールド値のレポート

取り込みメソッドに従い特定のサンプルに取り付けられたカスタムフィールドの値を、レポートに追加できます。元のサンプル情報を含むレポートヘッダーの最後に、サンプルカスタムフィールドが一覧表示されます。化合物カスタムフィールドは、レポートの最後に表示されます。

レポートスタイル

［レポート条件］ダイアログボックスの適切なボックスにチェックを入れて、クラシックレポートスタイルにシグナルを追加します。

以下のレポートスタイルが利用可能です。

- **［なし］** - 文章はレポートされません。［クロマトグラム出力の追加］オプションが選択されている場合のみ、クロマトグラムがレポートされます。
- **［簡易］** - 定量結果テキストから構成されます。
- **［詳細］** - ヘッダー、定量結果、検量線などから構成されます。ヘッダーはメソッドディレクトリに保存されている RPTHEAD.TXT ファイルです。テキストエディタを使用してヘッダーを変更し、メソッド固有のテキストを使用することができます。
- **［ヘッダー + 簡易］** - ヘッダー、定量結果、検量線などから構成されます。ヘッダーはメソッドディレクトリに保存されている RPTHEAD.TXT ファイルです。テキストエディタを使用してヘッダーを変更し、メソッド固有のテキストを使用することができます。
- **［GLP + 簡易］** - ヘッダー、サンプル情報、装置条件、ログブック、シグナル、定量結果から構成されます。ヘッダーはメソッドディレクトリに保存されている RPTHEAD.TXT ファイルです。テキストエディタを使用してヘッダーを変更し、メソッド固有のテキストを使用することができます。
- **［GLP + 詳細］** - ヘッダー、サンプル情報、機器条件、ログブック、シグナル、定量結果、検量線から構成されます。ヘッダーはメソッドディレクトリに保存されている RPTHEAD.TXT ファイルです。テキストエディタを使用してヘッダーを変更し、メソッド固有のテキストを使用することができます。

- ［フル］- ヘッダー、サンプル情報、機器条件、ログブック、シグナル、定量結果から構成されます。ヘッダーはメソッドディレクトリに保存されている RPTHEAD.TXT ファイルです。テキストエディタを使用してヘッダーを変更し、メソッド固有のテキストを使用することができます。スペクトルを含むデータファイルの場合、ピークごとのピーク頂点スペクトルもレポートされます。
- ［パフォーマンス］ -「システムスータビリティ」メニューにある［パフォーマンスリミット編集］ダイアログボックスで指定されたリミット値に従ってレポートを作成します。

  キャリブレーションされていないメソッドの場合、レポートパラメータには各ピークのピーク番号、リテンション/マイグレーションタイム、ピーク面積、ピークの高さ、シグナルの説明、真の半値幅（リファレンスガイドの「真のピーク幅 Wx [min]」を参照）、対称度、k'、効率（プレート）、および分離度が含まれます。

  キャリブレーションされたメソッドの場合、レポートには各ピークのピーク番号、リテンションタイム/マイグレーションタイム、化合物名、アマウント、シグナル情報、半値幅、対称度、k'、カラム効率（理論段数）、分離度が含まれます。

  このピークの半値幅の計算式は、インテグレータで使用される複雑な式とは異なります。カラム効率および分離度の値は、ここで計算したピーク幅に基づきます。レポートのヘッダーには、機器、カラム/キャピラリ、サンプル、取り込みパラメータなどのメソッド関連情報がすべて含まれます。シグナルもプロットされます。
- ［パフォーマンス + ノイズ］-［システムスータビリティ］メニューの［ノイズ範囲の編集］ダイアログボックスで定義したノイズ範囲のノイズ計算とパフォーマンスレポートスタイルを組み合わせます。ノイズには 6σ（標準偏差の 6 倍）、ピーク-to-ピーク、ASTM ノイズが含まれます。ドリフトとうねりも計算されます。
- ［パフォーマンス + 拡張］- ピークパフォーマンスの計算や各ピークの個別プロットから、すべてのパラメータを含む拡張レポートが作成されます。プロットには、ベースライン、タンジェント、および定義済みの高さのピーク幅を含みます。このレポートタイプにはキャリブレーションピークのみが含まれます。

  パフォーマンスレポートスタイル用に印刷されたパラメータに加えて、ピーク開始とピーク終了タイム、歪み、超過、ピーク幅、USP テーリングファクター、データポイントの時間間隔、データポイントの数、統計モーメント、理論段数、1メーター当たりの理論段数、選択性、各ピークの分離度がキャリブレーションピークに対して決定され印刷されます。ピーク幅、理論段数、メーター当たりの理論段数、選択性、および分離度は、真の半値幅、5 シグマ、タンジェント、テーリングメソッドにより計算され

ます（詳細については、リファレンスガイドの「パフォーマンステスト定義」を参照してください）。

レポートのヘッダーには、機器、カラム/キャピラリ、サンプル、取り込みパラメータ、およびシグナルのプロットなどのメソッド関連情報がすべて含まれています。ピークパフォーマンスパラメータアルゴリズムの完全なリストは、リファレンスガイドの「パフォーマンステスト定義」を参照してください。

スペクトルのレポートスタイル（**［簡易 + スペクトル］**、**［詳細］ + ［スペクトル］**、**［性能+ライブラリサーチ］**）は、**『スペクトルモジュールの概要』**に記載されています。

カスタマイズレポートのレポートスタイルへの追加

ChemStation の［レポートのレイアウト］ビューで作成したカスタムレポートテンプレートを、利用可能なレポートスタイルのリストに追加できます。

注記

パフォーマンスレポート以外のすべてのレポートは、インテグレータがより複雑な式を使用して計算したピーク幅をリストにします（ピーク幅計算の詳細については、リファレンスガイドの「ピーク幅」を参照してください）。

他のレポートスタイルパラメータ

ピーク和テーブル

レポートが作成されると、ChemStation はピーク和テーブルを使用し、標準レポート計算後に印刷されるピーク和レポートを生成します。

キャリブレーションされていないピークのレポートレイアウト

キャリブレーションされていないピークのレポートレイアウトを変更するには、[レポート条件] ダイアログボックス内で次のいずれかを選択します。

- リテンション/マイグレーションタイムでの並べ替えを選択している場合は分割された 1 つのテーブルで、シグナルでの並べ替えを選択している場合は分割された複数のテーブルで、[分割] を選択して、キャリブレーションされていないピークをレポートします。
- [キャリブレーションピークと一緒] を選択して、キャリブレーションされていないピークをキャリブレーションピークと一緒にレポートします。
- [レポートしない] を選択して、キャリブレーションされていないピークのレポートを非表示にします。

シーケンスサマリレポート

概要

ChemStation では、個別のサンプル分析ごとに、さまざまな標準レポートを印刷できます。シーケンスサマリレポートは、レポート出力の別な方法であり、多様な分析にわたってパラメータを計算し、レポートすることができます。たとえば、機器の安定性や新しいメソッドの堅牢性をテストするのに役立ちます。

シーケンスサマリレポートには以下のものが含まれます。

- タイトルページ
- 機器のリビジョン番号および使用される分析カラム/キャピラリーを含む、機器コンフィグレーション
- どの分析の自動シーケンスが実行される必要があるかを記述しているシーケンステーブルのリスト
- シーケンスが行った内容およびシーケンス分析中に発生した予期しないイベントのログブック記述
- メソッドのリスト
- サンプルごとの個別レポート
- 選択した基準に基づく分析に関する統計—**統計はキャリブレーションされた化合物のみに対して計算される**
- レポートの詳細セクションを参照するページ番号付きの目次

シーケンスサマリレポートの設定

シーケンスサマリレポートを作成する際、適切なチェックボックスをオンにし、必要に応じてテンプレート選択からレポートスタイルを選び、次の 9 つのカテゴリーの任意の組み合わせを選択できます。各テンプレートは、シーケンスサマリレポート全体の特定のセクションの内容とレイアウトを指定します。

次のシーケンスサマリレポートスタイルが選択できます。

ヘッダーページ

GLP テンプレートは、以降のレポートのために GLP をタイトルページとして、大きな文字で印刷します。日付および署名する場所も含まれます。

コンフィグレーション

レポートに機器コンフィグレーションおよび分析カラム/キャピラリーの仕様を含める場合は、［**コンフィグレーション**］を選択します。

シーケンステーブル

レポートにサンプル、サンプル定量パラメータ、およびメソッド名のリストを含めるには、［**シーケンステーブル**］を選択します。このリストは、システムが分析した内容を表示します。

ログブック

機器の状態およびサンプル分析中に発生した異常イベントを含めて、システムが実行した分析のリストを取得するには、［**ログブック**］を選択します。

メソッド

一連の自動分析で使用されたすべての分析メソッドを一覧表示するには、［**メソッド**］を選択します。

分析レポート

メソッド用に設定されたレポートスタイルに従って個別の分析レポートを取得するには、［**分析レポート**］を選択します。

個別の分析レポートは、**シーケンスサマリレポート**で指定されたレポートセクションに加えて、対象のメソッド用に指定されたレポートスタイルに従って、分析ごとに印刷できます。以下の「シーケンス出力」を参照してください。

キャリブレーション済みランおよびサンプルランの統計

キャリブレーションランの統計を選択すると、キャリブレーションサンプルの統計的トレンド分析が生成されます。サンプルランの［**統計**］を選択すると、サンプル（不明）分析の統計的トレンド分析が生成されます。どちらの選択でも、標準統計法および拡張統計法のテンプレートスタイルを使用できます。**拡張統計法**は分析の統計トレンドをグラフで印刷するのに対し、**標準統計法**はテキストのみ印刷します。［**拡張統計法用のアイテムおよびリミット**］ダイアログボックスで選択した内容は、［**シーケンスサマリパラメータ**］ダイアログボックスの［**拡張統計法**］オプションを選択した場合にのみ使用されます。

［シーケンスサマリパラメータ］ダイアログボックスの**［標準統計法］**オプションを選択した場合、レポートされる統計は次のとおりです。

- リテンション/マイグレーションタイム
- 面積
- 高さ
- アマウント
- ピーク幅（レポートスタイルに基づく。「レポートスタイル」210 ページを参照）
- 対称度

統計計算では、マルチレベルキャリブレーションメソッドを使用するシーケンス内のさまざまなキャリブレーションレベルが区別されません。 これは、たとえば、面積、高さ、アマウントのような濃度に依存するアイテム（［拡張統計法用のアイテムおよびリミット］ダイアログ ボックスを参照）はすべて、キャリブレーションレベルに関わらずひとまとめにして考えられることを意味します。 このため、**［キャリブレーションランの統計］**の値は、シーケンス内のマルチレベルキャリブレーションメソッドには役立ちません。

サマリ

［サマリ］を選択すると、分析された一連のサンプルの概要、および使用されたメソッドが印刷されます。 サマリが他のシーケンスサマリとともに選択されている場合、シーケンスサマリレポートの別の部分を参照するページ番号が含まれます。次の 2 つのサマリスタイルが利用可能です。

［サンプルサマリ］は、サンプル名、データファイル名、メソッド、およびバイアル番号のようなサンプル情報とともに、シーケンス内のサンプル分析ランの詳細を表にします。

［化合物サマリ］は、キャリブレーションされた化合物またはピークごとの基本定量結果とともに、メソッド内で指定されたレポートのタイプに基づいてサンプル分析を表にします。

シーケンス出力

［シーケンス出力］ダイアログボックスでは、シーケンスサマリレポートの印刷場所を定義できます。

［ファイルへのレポート］を選択してファイル名を入力すると、指定したファイルにレポートが出力されます。デフォルト設定では、データはファイル GLPrprt.txt に保存されます。デュアル注入機能を持つ GC システムでは、フロントインジェクタとバックインジェクタのデータはそれぞれ GLPrptF.txt および GLPrptB.txt に保存されます。

［PDF へのレポート］を選択すると、レポートは PDF 文書として保存されます。レポートは、GLPrprt.PDF という名前のシーケンスフォルダに保存されます。

［HTM へのレポート］を選択すると、レポートはHTML形式で印刷されます。レポートは、データサブディレクトリまたはシーケンスコンテナディレクトリの HTM ディレクトリに保存されます。HTML レポートには、インデックスファイル（index.htm）のほかに、コンテンツファイル（contents.htm）およびレポートの各ページの GIF（グラフィックス交換フォーマット）ファイル（page1.gif など）という少なくとも 2 つのファイルが含まれています。HTML レポートを参照するには、ご使用のブラウザでインデックスファイルを開いてください。

［プリンタへのレポート］を選択すると、システムのプリンタでレポートが印刷されます。［測定ごとにレポートを印刷］では、各分析後にサンプルレポートを印刷します。これらのレポートは、シーケンス全体の終了時に生成されるよう指定したシーケンスサマリレポートとは別に追加で印刷されます。これらのレポート用に［シーケンス出力］ダイアログで新しい出力先を指定したり、個々のメソッド内で指定した出力先を使用することができます。

レポートファイルフォーマット

レポートは、さまざまなフォーマットで保存できます。各フォーマットには固有の拡張子があります。1 つのレポートに複数のフォーマットを選択することもできます。

.TXT レポートテキストを UNICODE テキストファイルとして印刷します。

.EMF それぞれのレポートグラフィック（シグナルまたは検量線）は、Microsoft Windows メタファイル (WMF) に保存されます。1 つのレポートに複数の .WMF ファイルを持たせることもできます。作成されたファイルフォーマットは、Windows のソフトウェア開発ドキュメントで定義されて いる Microsoft 標準メタファイルフォーマットに従っています。これらのファイルには、さまざまな独自仕様のソフトウェアパッケージで使用されている Aldus Placeable Metafile (APM) フォーマットとの互換性があります。

.DIF 表形式のレポートは、データ交換フォーマット（DIF）で保存されます。このフォーマットは、Microsoft Windows EXCEL などのスプレッドシートプログラムで利用できます。選択されたレポートスタイルとは関係なく、「簡易」のレポートスタイルに含まれる情報のみ保存されます。

注記 DIF ファイルは、パフォーマンスレポート用には作成されません。

.CSV このレポートは、値がコンマで区切られた（CSV）フォーマットです。これは表形式データ用の非常に単純な形式で、多くのスプレッドシートやデータベースで利用可能です。選択されたレポートスタイルとは関係なく、「簡易」のレポートスタイルに含まれる情報のみが保存されます。

単一のレポート用に、複数の .DIF および .CSV ファイルを使用できます。レポートブロックごとに、たとえば REPORT00.CSV のような最初のファイルにレポートヘッダー情報が含まれます。それに続くファイルには、表形式の結果が含まれます。

結果がリテンション/マイグレーションタイムによって並べ替えられる場合、全体のテーブルに、たとえば REPORT01.CSV のようなファイルが 1 個のみ必要です。

結果がシグナルによって並べ替えられる場合、シグナルごとに個別の表が必要です。この場合、ファイルは Report01.CSV から ReportNN.CSV（NN はシグナルの番号を表す）という形式で名前が付けられます。

注記 CSV ファイルは、パフォーマンスレポート用には作成されません。

.XLSX レポートは、Microsoft Excel スプレッドシートに（.XLSX）フォーマットでエクスポートされます。データは、一般的に追加の処理が必要です。

.PDF レポートは、.pdf ファイルに出力されます。ChemStation セッションを実行中は、ChemStation PDF プリンターが **［スタート］メニュー/［デバイスとプリンター］** に表示されます。**［固有のPDF ファイル名］** オプションでは、<sequence_container_name>_<data_file_name>.pdf というファイル名で、レポートとは無関係に .pdf レポートを保存することができます。

9 CE 特有のコンセプトと機能

メソッド & ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能 219
バイアルテーブル 219
メソッド競合テーブル 220
シーケンス競合テーブル 221
ピークトップタイプ 222
キャリブレーションタイプ 223
マイグレーションタイムベースキャリブレーション 224
移動度補正を使用したキャリブレーション 224
CE-MS 226
バックグラウンド減算 226
CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ 227

この章は、ChemStation を使用して CE 機器をコントロールする場合にのみ関連する内容です。

メソッド & ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能

バイアルテーブル

注記 **[バイアルテーブル]** 機能は、オンライン ChemStation セッションだけで使用できます。

[バイアルテーブル] は、バイアルトレー内のバイアルとサンプルとの関連付けを行うテーブルですが、さらに重要なのは、バイアルに固有のタスク（用途）を関連付けられる点です。たとえば、バッファ、フラッシュバイアル、チューブ用バイアル、廃液バイアルなどです。**[バイアルテーブル]** はシーケンステーブルにリンクされています。シーケンスが読み込まれると、シーケンステーブルからの情報がバイアルテーブルにコピーされます。ただし、バイアルテーブルエントリは、シーケンステーブルに書き戻されません。**[バイアルテーブル]** で **[拡張]** ボタンを選択すると、**[バイアルテーブル拡張設定]** ダイアログボックスが表示されます。すると、**[バイアルテーブル]** とメソッドまたはシーケンスの間の競合を警告する機能と、シンボリック名の使用を有効にできます。**[バイアルテーブルのチェックと警告を有効にする]** を選択して、**[バイアルテーブル]** とメソッドやシーケンスの間の競合をチェックする必要があります。

メソッドまたはシーケンスが読み込まれると、**[バイアルテーブル]** のバイアル割り当てと、読み込まれたメソッドまたはシーケンスのバイアル割り当てとの間で、一貫性のチェックが行われます。バイアルに競合がある場合、**[競合]** テーブルを使用して簡単に解決できます。

注記 バイアルトレイ内のポジション 49 は、ニードル洗浄バイアルに使用され、ポジション 50 は、バイアルリフトが元の位置に戻せるように空のままです。これらのポジションは **[バイアルテーブル]** では利用できません。

バイアルテーブルの**[使用]**の列により、バイアルの用途が指定できます。**[使用]**フィールドには 5 つの有効なエントリがあります。

無関係 一貫性チェックなし

メソッド メソッド内で参照

シーケンス シーケンステーブル内で参照

システム これは、システムコンフィグレーションに属する特別なバイアルです。[名前] は、以下のシンボリック名の中の 1 つにする必要があります。

- **[@INLET]** インレットバイアル
- **[@OUTLET]** アウトレットバイアル
- **[@FLUSH]** フラッシュバイアル
- **[@WASTE]** 廃液バイアル
- **[@clean tubes]** リプレニッシュメントチューブの洗浄に使用されるバイアル
- **[@USER X]**（ここで X は 1 ～ 10）シーケンスプレースホルダ

  このオプションにより、メソッドで使用するシンボリック名に対して個々のバイアル番号の仕様を指定できます。これにより、ユーザがシーケンス内の各行の [インホーム]、[アウトホーム]、[リプレニッシュ]、[プレコンディショニング]、[ポストコンディショニング] などに対して、異なるバイアルをユーザー設定することが可能となります。

使用されていません このポジションにはバイアルなし

メソッド競合テーブル

[メソッド競合テーブル] は、バイアルテーブルで定義されたバイアルと競合するように定義されたバイアルを含むメソッドを読み込むと表示されます。 **[メソッド競合テーブル]** は 2 つの部分に分けられます。左半分は、**[バイアルテーブル]** のイメージです。右半分には、競合バイアルが表示されます。

競合を解決するには、場所を変えるか (一重線の矢印)、メソッド上の **[バイアルテーブル]** 内の次の空きポジションにバイアルを移動するか (二重線の矢印) のどちらかを選択できます。これは、テーブル内の競合するバイアルのそれぞれに対して実行可能です。

ユーザ定義のバイアル (シンボリック名 @User1、@User2 などを持つ) が使用される際には、競合テストはこれらのバイアルに対して実行することができません。これは、シーケンスの情報がなければ競合が存在するか否かの判断ができないためです。

シーケンス競合テーブル

[シーケンス競合テーブル] は、バイアルテーブル上で定義されたバイアルと競合するように定義されたバイアルを含むシーケンスを設定または読み込むと表示されます。 **[シーケンス競合テーブル]** は 2 つの部分に分けられます。左半分は、**[バイアルテーブル]** のイメージです。右半分には、競合バイアルが表示されます。

競合を解決するためには、**[バイアルテーブル]** 情報を **[シーケンステーブル]** の情報で上書きするように選択できますが、システムエントリによって競合が引き起こされている場合は、情報を上書きできません。 競合を解決せずに **[シーケンス競合テーブル]** を閉じることも選択できます。

ユーザ定義のバイアル (User1、User2 などの列の中) が使用される際には、競合テストをこれらのバイアルに対して実行することができません。これは、メソッド情報がなければ競合が存在するか否かの判断ができないためです。

ピークトップタイプ

LC、GC、または MS ピークと違い、CE のピークが非対称になることは極めて一般的です。このため、定量結果で高いレベルの精度と再現性を得るために、積分パラメータを選択能力が非常に重要です。

[積分] ドロップダウンメニューで **[ピークトップタイプ]** を選択すると、以下のピークトップタイプが使用できます。

最高ポイント

- ピークが三角形の場合
- 異なる濃度で作業する場合

放物線補間

- テーリング、つまり分離されていないピークに使用

重心

- 三角形の形状のピークに、より正確な計算を提供
- 濃度範囲がほぼ一定のサンプル

ガウシアンフィット

- 対称ピークに使用

キャリブレーションタイプ

標準キャリブレーションは、ピーク面積またはピーク高さに基づいています。**［標準キャリブレーション］**を選択すると、**［シグナルを別々に計算］**または**［補正された面積で計算］**のオプションが使用できます。

Norm% レポートの計算で、別々にレポートされたシグナルのアマウントパーセントが、各シグナルに対して合計 100% になるようにしたい場合は、［シグナルを別々に計算］を選択します。**［シグナルを別々に計算］**が選択されていない場合、すべてのシグナルのアマウントパーセントの合計が 100% になります。**［シグナルを別々に計算］**を選択するときは、キャリブレーションテーブル内のシグナルでソートしてください。

マイグレーションタイムに基づいたピーク面積の補正を行うには、**［補正された面積で計算］**を選択します。このモードでは、面積がマイグレーションタイムで分割されます。これにより、マイグレーションタイムが不安定な場合の定量分析での再現性を改善できます。

標準キャリブレーションに加え、シグナルのマイグレーションタイムをベースとしたキャピラリー電気泳動に特有のキャリブレーションが 3 つあります。

キャリブレーションテーブルのドロップダウンリストには、以下のキャリブレーションタイプがあります。

- **標準キャリブレーション**
- **分子量キャリブレーション**
- **塩基対キャリブレーション**
- **cIEF pI**

キャピラリー電気泳動固有のキャリブレーションについての詳細は、『OpenLab ChemStation データ解析リファレンス』（CDS_CS_Reference.pdf）を参照してください。

マイグレーションタイムベースキャリブレーション

シーケンスでのマイグレーションタイムベースキャリブレーションの使用

マイグレーションタイムベースキャリブレーションおよびリキャリブレーションは 1 つのシーケンスに含めることができますが、通常のキャリブレーションおよび反復リキャリブレーションのみサポートされています。ブラケットリキャリブレーションはサポートされていません。マイグレーションタイムベースキャリブレーションには、シーケンスサマリレポートはありません。

マイグレーションタイムベースキャリブレーション用のレポートスタイル

マイグレーションタイムベースキャリブレーションに使用できるレポートスタイルは、**簡易版** (定量テキスト結果) と**完全版** (ヘッダ、サンプル情報、機器条件、ログブック、定量結果、ピーク純度プロット) に限られます。

移動度補正を使用したキャリブレーション

バッファ組成、分析温度や粘度のほか、キャピラリー壁への吸着のわずかな変動も、電気浸透流（EOF）に影響を及ぼし、不安定にさせる原因となります。その結果、EOF が変化し、かなり大きなマイグレーションタイムの標準偏差が生じます。移動度リファレンスピークのマイグレーションタイムをモニタリングすることで、移動度の補正をすることにより、分析毎でのマイグレーションタイムシフトを著しく低減させることができます。そしてマイグレーションタイム再現性を著しく向上させることができます。

以下の優先順位で、移動度リファレンスピークを選ばなければなりません。

- 一番高いシグナルでピークを選択します
- 最も分離されたピークを選択します
- 移動度リファレンスピークとして、EOF マーカーまたは内部標準も使用できます
- 検索ウィンドウを拡大して、移動度リファレンスピークを常に探します
- 検索ウィンドウでいくつかのピークが降下すると、最も高いシグナルを持つピークが、移動度リファレンスピークとして自動的に選ばれます。

2 つの移動度補正タイプが使用可能です。

実効移動度補正

［**実効移動度補正**］は、すべてのピークの実効移動度を使用し、エレクトロフェログラムと一緒に電圧傾斜データを使用できるようにする必要があります。さらに、実効移動度補正で作業すると、すべてのサンプルコンポーネントの実際の実効的移動度を測定できます。

相対移動度補正

［**相対移動度補正**］は、電圧データがない状態で操作でき、すべての測定に対して一定電圧であると仮定します。

CE-MS

バックグラウンド減算

［バックグラウンド減算］（BSB）メニュー項目を選択すると、最後に選択したマススペクトルが、現在のエレクトロフェログラム内の各ポイントから減算されます。 結果データは、元のデータファイルと同じディレクトリ内に同じ名前で保存されますが、ファイル名拡張子だけ .BSB に変更されます。

新しいデータファイルが現在のデータファイルになり、バックグランド減算されたエレクトロフェログラムが表示されます。 実行したバックグランド減算数の記録は、データファイルヘッダの Operator (演算子) 項目に保存されます。

BSB データを表形式で表示すると、データ表示の精度に起因する違いが表れることがあります。

注記

LC/MS のヘルプテキストファイルには、LC パラメータのみ記載されています。CE のパラメータはありません。 LC/MS ソフトウェアで使える機能のなかには、CE/MS アプリケーションでは使用できないまたは適用できないが LC では使用されるものがあります。 **ピークマッチング**の機能は、CE-MS では適用できないため、有効になっていません。 CE-MS では、UV 検出と MS 検出は分離キャピラリの異なる有効長で発生します。有効長が異なると分離度も異なるため、ピークマッチングは行えません。

CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ

CE でのメソッドは、選択した CE モードに依存します。そのため、各メソッドはそれぞれ異なるメソッドサブディレクトリに格納されます。

CE CE モードのメソッドを格納

CEC CEC モードのメソッドを格納

CEp CE plus 圧力モードのメソッドを格納

CEMS CE MS モードのメソッドを格納

CEMSp CE MS plus 圧力モードのメソッドを格納

本書の内容

本ガイドは Agilent OpenLab ChemStation のさまざまなコンセプトについて説明しています。ChemStation の動作についての理解を深めることを目的としています。以下についての情報を記載しています。

- 基本概念
- データ取込
- 自動化/シーケンス
- ランコントロール
- データ解析とレビューの概念
- キャリブレーション
- レポート
- CE 固有のコンセプトと機能

www.agilent.com

© Agilent Technologies Inc. 2010-2025

エディション : 2025 年 4 月

文書番号: D0013748ja Rev. B

Agilent