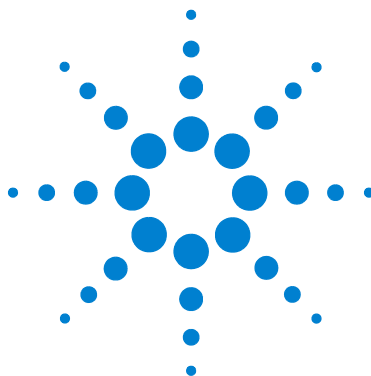




Agilent G1701DA GC/MSD ChemStation

入門



Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2005

米国著作権法および国際著作権法に定められているとおり、Agilent Technologies Inc. の事前の合意および書面による許諾なしに、このマニュアルの全部または一部をいかなる形態（電子データや検索用データ、または他国語への翻訳など）あるいはいかなる手段をもって複製することはできません。

マニュアル製品番号

G1701-96056

版

第 1 版 2005 年 6 月

Printed in USA

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Boulevard
Santa Clara, CA 95052

保証

このマニュアルに記載されている内容は、「現時点」の状況を前提としており、以後の改訂版では事前の通知なしに変更されることがあります。また、適用法が許容する最大限の範囲において、Agilent はこのマニュアルおよびこのマニュアルに記載されているすべての情報に関し、商品性や特定用途への適合性についての黙示保障など、明示または黙示を問わず、一切の保証はいたしません。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、使用または行使に関連して生じた過失、あるいは付随的損害または間接的損害に対し、責任を負わないものとします。このマニュアルに記載されている要素に関して保証条件付きの書面による合意が Agilent とお客様との間に別途にあり、その内容がここに記載されている条件と矛盾する場合、別途に合意された保証条件が優先されるものとします。

安全上の注意

注意

注意は、取り扱い上、危険があることを示します。正しく実行または遵守しないと、この製品が破損したり、重要なデータを損失したりする可能性のある操作手順や操作法などに注意を促すマークです。注意の部分でいったん作業をやめ、記載されている条件を完全に理解し、すべてを満たすまでは、先に進まないでください。

警告

警告は、取り扱い上、危険があることを示します。正しく実行または遵守しないと、怪我または死亡につながる可能性のある操作手順や操作などに注意を促すマークです。警告の部分でいったん作業をやめ、記載されている条件を完全に理解してすべて満たすまでは、先に進まないでください。

目次

1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス

このマニュアルの内容	6
ヘルプ情報	7
今回の改訂内容	15
ハードウェア	16
ChemStation の画面とメニュー	21
一般的な ChemStation の作業	41
エラーメッセージとトラブルシューティング	63

2 定量を理解する

定量	70
定量データベース	73
チュートリアル – AutoQuant Setup の使用	81

3 Custom Reports を使用する

Custom Reports	98
レポートテンプレートの作成	100
レポートのカスタマイズ	104
セル、行、列の選択	110
レポートの印刷	112
Custom Reports データベースの作成	115
複数のデータファイルの選択	119

グラフの表示と印刷	121
Custom Reports メニュー	123
Custom Reports ツールバーボタン	124



1

GC/MSD ChemStation クイックリ ファレンス

このマニュアルの内容	6
ヘルプ情報	7
今回の改訂内容	15
ハードウェア	16
ChemStation の画面とメニュー	21
一般的な ChemStation の作業	41
エラーメッセージとトラブルシューティング	63



このマニュアルの内容

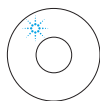
このマニュアルでは、お使いのシステムに装備されているアイテムについて概要を説明します。GC/MSD システムを初めて使用するとき役に立つように構成されています。

以下のような内容があります。

- 追加のヘルプを見つけるための詳細手順
- 主要な部品を示したハードウェアの写真
- GC/MSD ChemStation ソフトウェアの各メニューとツールバー
- 一般的な ChemStation の操作手順
- メンテナンススケジュールの概要
- 操作のヒント、エラーメッセージ、およびトラブルシューティングに関する簡単な説明
- GC/MSD ChemStation を使用した定量の仕組みの概要と、時間節約を可能にする AutoQuant 機能を初めて使用するとき役に立つチュートリアル
- Custom Reports ソフトウェアの使用法に関するクイックガイド

詳細については、付属の CD-ROM に含まれているオンラインヘルプ、電子マニュアル、およびビデオを参照してください。

ヘルプ情報



システムには、印刷物のマニュアル、オンラインヘルプファイル、および CD-ROM の電子マニュアルを含む、幅広い参照資料が付属しています。

各ハードウェアには CD-ROM が同梱されています（GC、MSD にそれぞれ 1 枚ずつ）。各 CD には、何百ページもの詳細な参照資料とともに、装置の操作、メンテナンス、トラブルシューティングの方法を説明するメンテナンスビデオが含まれています。

このハードウェア参照資料には、以下に関する詳細な情報が含まれています。

- ハードウェアの操作
- ハードウェアのメンテナンス
- ハードウェアのトラブルシューティング

1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス



オンラインヘルプファイルには、広範なソフトウェア操作手順とともに、GC/MSD ChemStation（拡張、ガソリン芳香族、薬剤分析、環境）ソフトウェアを使用する際のチュートリアルが含まれています。以下に関する作業と参照情報も含まれています。

装置制御

- ・ 装置制御の使用
- ・ メソッドの使用
- ・ シーケンスの使用
- ・ データの分析
- ・ バッチモードの使用
- ・ MSD のチューニング（キャリブレーション）
- ・ MSD のトラブルシューティング
- ・ セキュリティ制御
- ・ レポートマネージャ
- ・ コマンドと関数
- ・ マクロの使用と記述
- ・ 用語集

データ分析

- ・ データの分析
- ・ コマンドと関数
- ・ マクロの使用と記述
- ・ 用語集

MSD システム設定

- ・ 装置の設定
- ・ GPIB カードの設定方法
- ・ ネットワークのトラブルシューティング
- ・ MSDCHEM. INI 内の一般的な PCS 情報



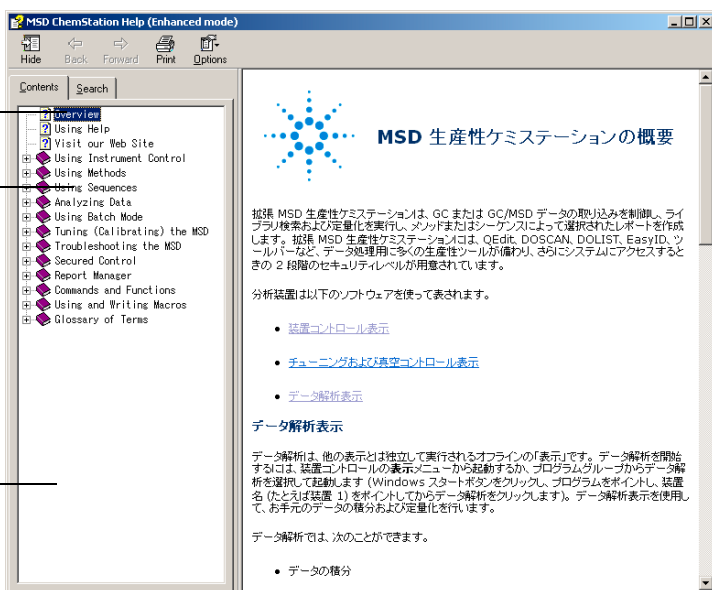
印刷物のマニュアルは、最初に装置を稼働させるまでの作業に役立つように構成されています。次のようなマニュアルがあります。

- ・ GC/MSD ChemStation 入門（このマニュアル）
- ・ サイトの準備
- ・ ソフトウェアインストールガイド
- ・ ハードウェア設置マニュアル

オンラインヘルプファイルの使用

オンラインヘルプファイルには、装置コントロール、データ取込、データ解析、メソッド、シーケンス、チューニング、トラブルシューティング、およびシステムコマンドと変数の使用方法に関する広範な情報とチュートリアルが含まれています。

オンラインヘルプにアクセスするには、ウィンドウの [ヘルプ (Help)] メニューから [ヘルプ (Help)] トピックを選択するか、ダイアログボックスでヘルプボタンをクリックします。



ヘルプアイコン



詳細なヘルプトピックを含むブックを示します。ブックを開くには、選択してダブルクリックします。

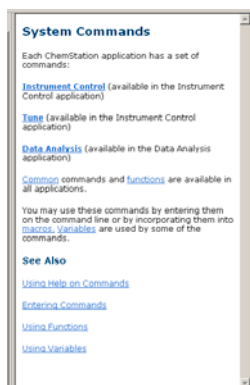


開かれているヘルプトピックのブックを示します。ブックを閉じるには、選択してダブルクリックします。



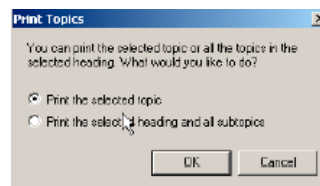
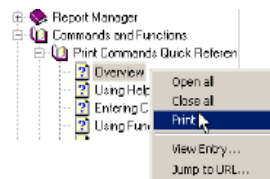
ヘルプトピックを示します。ヘルプトピックにジャンプするには、選択してダブルクリックします。

項目	説明
隠す / 表示	ヘルプトピックのリストの表示 / 非表示を切り替えます。
戻る	前のヘルプトピックに戻ります。
印刷	現在のブックまたはヘルプトピックを印刷できます。
目次	ヘルプトピックのリストを表示します (上記を参照)。
索引	キーワードを使用してヘルプインデックスに特定のトピックがあるかどうか検索できます。
検索	語または句を入力すると、オンラインヘルプ内のそれらの語句を含むトピックすべてのリストを表示します。
オプション	タブの表示など、さまざまなヘルプオプションを変更します。



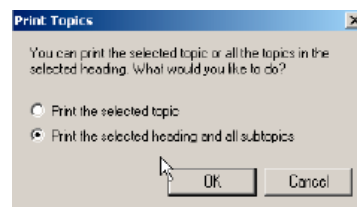
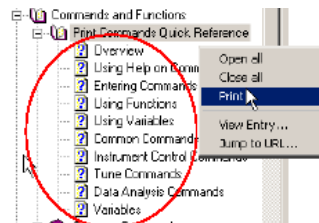
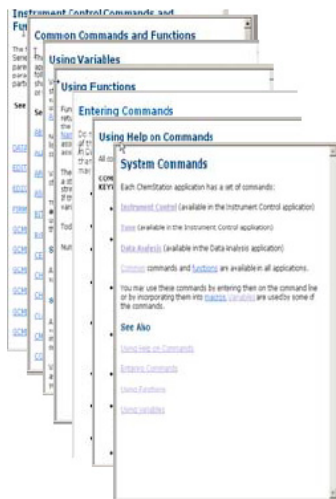
1 つのヘルプトピックを印刷するには

- 1 印刷するトピックを選択します (たとえば [概要 (Overview)]。)
- 2 右のマウスボタンをクリックし、[印刷 ... (Print...)] を選択します。
- 3 [選択したトピックを印刷する (Print the selected topic)] を選択して、[OK] をクリックします。
- 4 選択されているプリンタを確認し、[印刷 (Print)] をクリックします。
- 5 その 1 つのトピックに含まれる情報が印刷されます。それにリンクしているトピックは印刷されません。



1 つの見出しに含まれるサブトピックを一度にすべて印刷するには

- 1 印刷するトピックを選択します (たとえば [コマンドクイックリファレンスの印刷 (Print Commands Quick Reference)]。)
- 2 右クリックし、[印刷 (Print...)] を選択します。
- 3 [選択した見出しとすべてのサブトピックを印刷する (Print the selected heading and all subtopics)] を選択して、OK をクリックします。
- 4 選択されているプリンタを確認し、[印刷 (Print)] をクリックします。
- 5 選択したトピックの見出しに含まれるすべてのトピックについて情報が表示されます。この場合、[コマンドクイックリファレンスの印刷 (Print Commands Quick Reference)] の下にあるすべてのトピック (約 26 ページの情報) が印刷されます。



注

[すべてのトピックを印刷 (Print all topics)] を選択したときに、カーソルが見出しの下 の 1 つのトピック (たとえば [チューニングコマンド (Tune Commands)] 上にあったとしても、偶然カーソル位置にあった 1 個のトピックではなく、見出しの下のすべてのトピックが印刷されます。

CD-ROM のハードウェアマニュアル

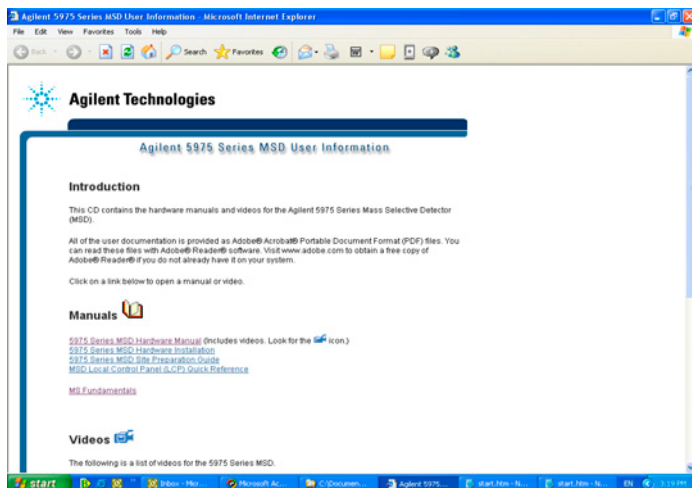
各ハードウェアには、何百ページもの参照資料とともに、装置の操作、メンテナンス、トラブルシューティングの方法を説明するビデオが含まれた CD-ROM が同梱されています。

CD-ROM のマニュアルを使用する

- 1 CD のマニュアルは Adobe Acrobat PDF 形式で収録されています。ビデオは PDF マニュアルに組み込まれます (QuickTime が必要になる場合があります)。Microsoft Media Player を使用して CD-ROM から直接視聴することもできます。
 - Adobe Acrobat Reader がない場合は、Adobe.com にアクセスして無料でダウンロードできます。
 - QuickTime は Apple.com/quicktime にアクセスして無料でダウンロードできます。

1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス

- 2 CD をディスクドライブに挿入すると、自動的に開始メニューが表示され、CD に含まれる全ブックのリストが以下のように表示されます。

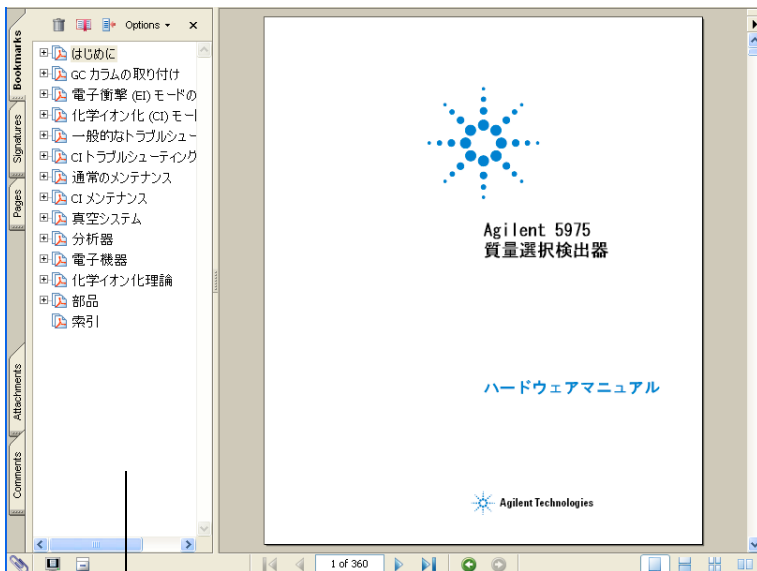


Learning Products CD の開始メニュー例

- 3 リストされたブックの上にカーソルを置きます。カーソルが選択を表す手に変わったら、左のマウスボタンをクリックし



てそのブックを選択します。ブックの最初のページとブックマークが表示されます。

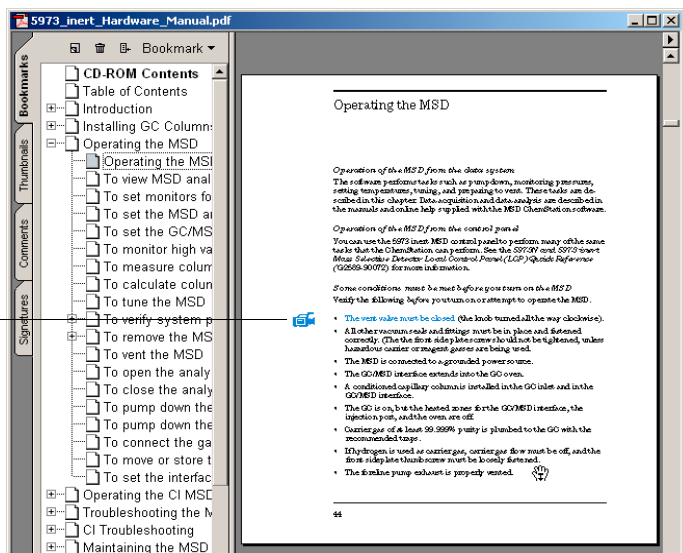


ブックマーク

ページ番号

- 4 左側の欄で（[ブックマーク (Bookmark)]、[MSD の操作 (Operating the MSD)] など）をクリックすると、対応するページが表示されます。

ビデオ
アイコン



- 5 ビデオアイコンは、ビデオが含まれるセクションを示します。メンテナンス手順の実行方法を見るには、このアイコンをクリックします。左のマウスボタンでクリックすると、ビデオクリップが開始します。ビデオは終了すると自動的に停止します。または [Escape] を押すいつでも停止できます。

1 Vent the MSD. See page 64.

- 6 クロスリファレンスの上にカーソルを移動すると、カーソルが人差し指に変わり、テキストが示されたページに電子的にリンクしていることを知らせます。示されたページにジャンプするには、クロスリファレンスをクリックします。前のページに戻るには、右クリックします。



- 7 任意の 1 ページ、または複数のページを印刷できます。[印刷 (Print)] を選択し、画面最下部に表示されているページ番号を使用して印刷するページ (複数可) を入力します。

今回の改訂内容

このバージョンで加えられた更新内容すべてに関する説明を表示するには、次の 2 つの方法があります。

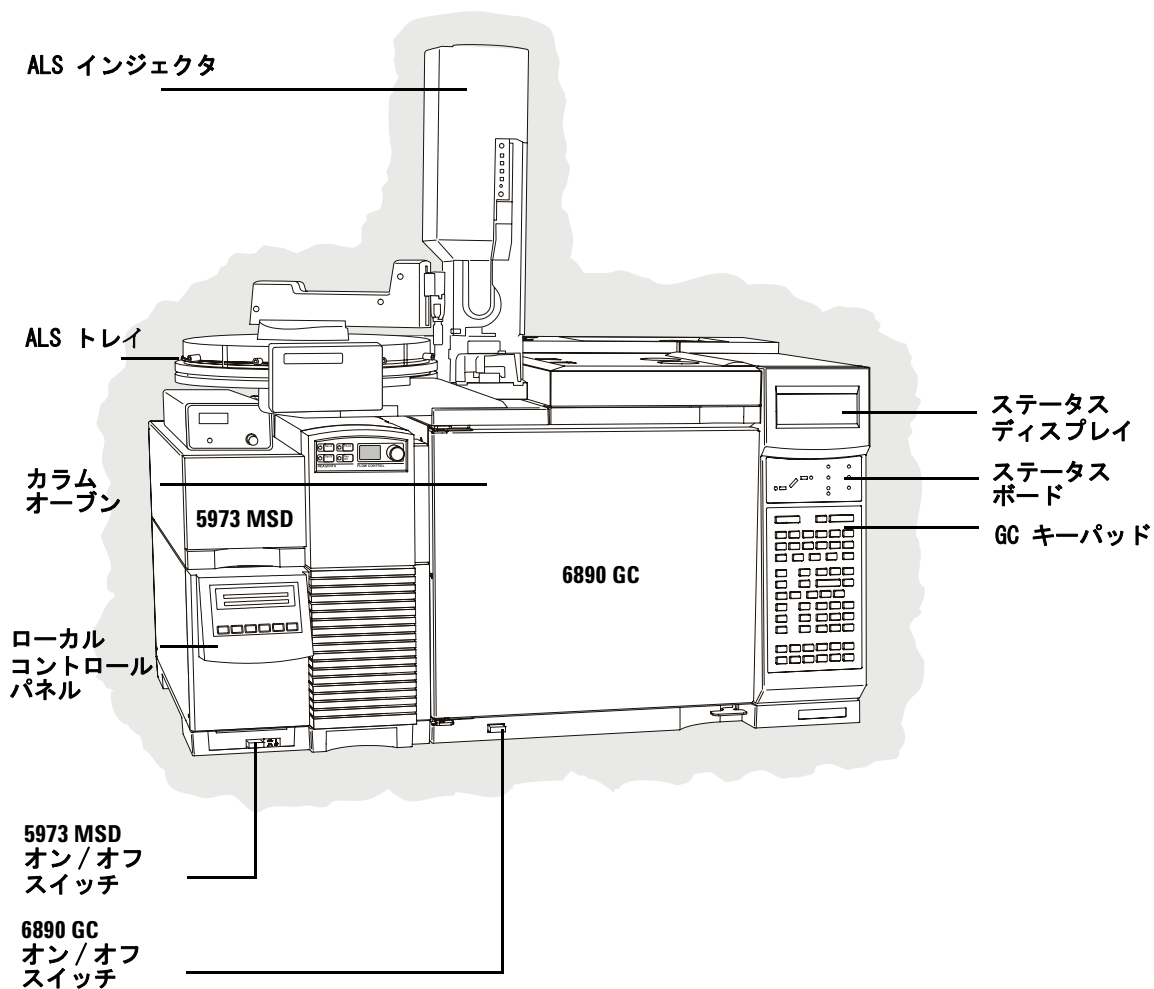
- 初期設定の後、「今すぐ Readme ファイルを表示しますか (Do you want to view the Readme file now)」とプロンプトが表示されたら [はい (Yes)] を選択する。
- [データ解析 (Data Analysis)] ビューまたは [装置コントロール (Instrument Control)] ビューで、[ヘルプ (**Help**) / **改訂 Readme ファイルの表示 (View Revisions Readme File)**] を選択する。

ポップアップウィンドウにテキストファイルが表示されます。必要に応じて、このテキストをスクロールしてオンラインで読んだり、電子的な検索やコピーをすることもできます。

必要な作業が終わったら [**ファイル (File)** / **終了 (Exit)**] を選択してアプリケーションに戻ります。

ハードウェア

5973 MSD / 6890 GC



5973N MSD / 6850 GC (G2570 MSD システム)

G2613A
ALS インジェクタ (オプション)

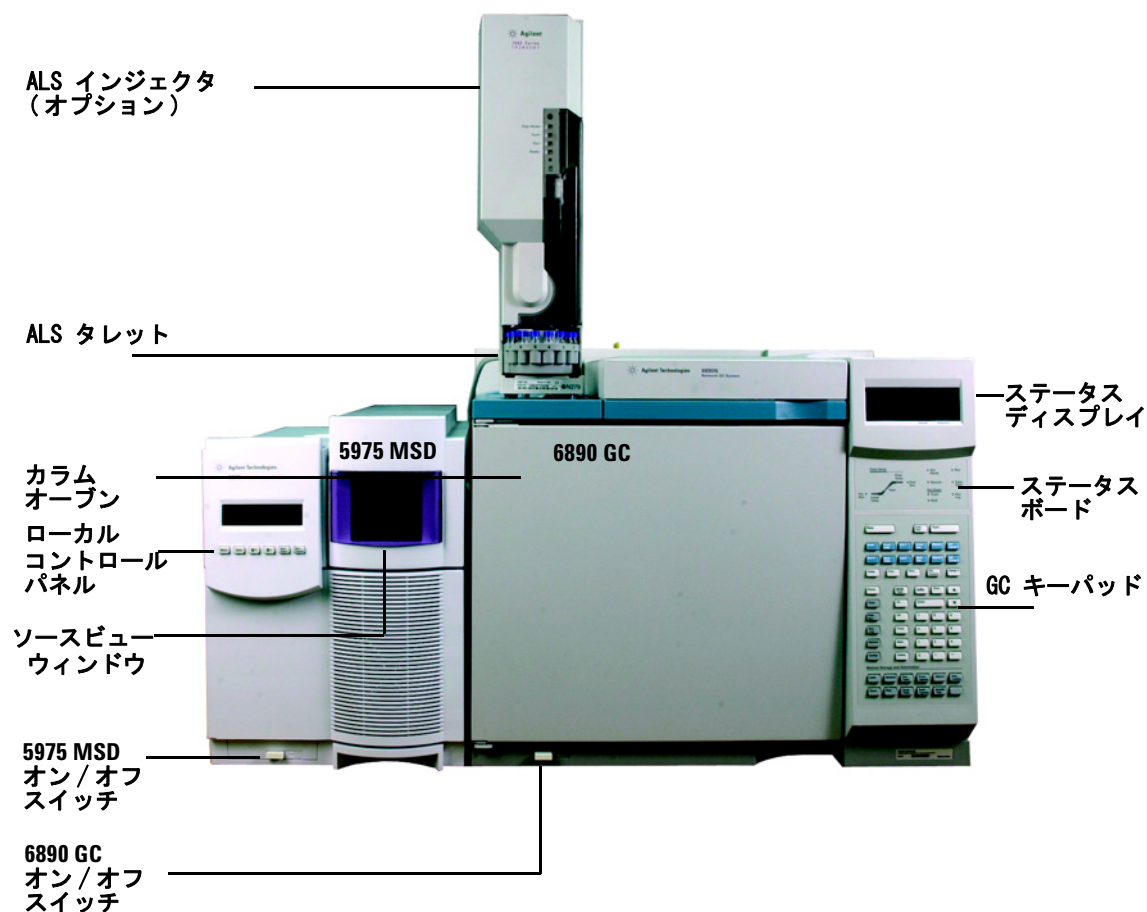
5973N MSD
(G2577A 拡散
ポンプモデル)

6850 GC
(G2630A MSD 対応
6850)

G2629A
ハンドヘルドコントローラ (オプション)



5975 MSD / 6890 GC

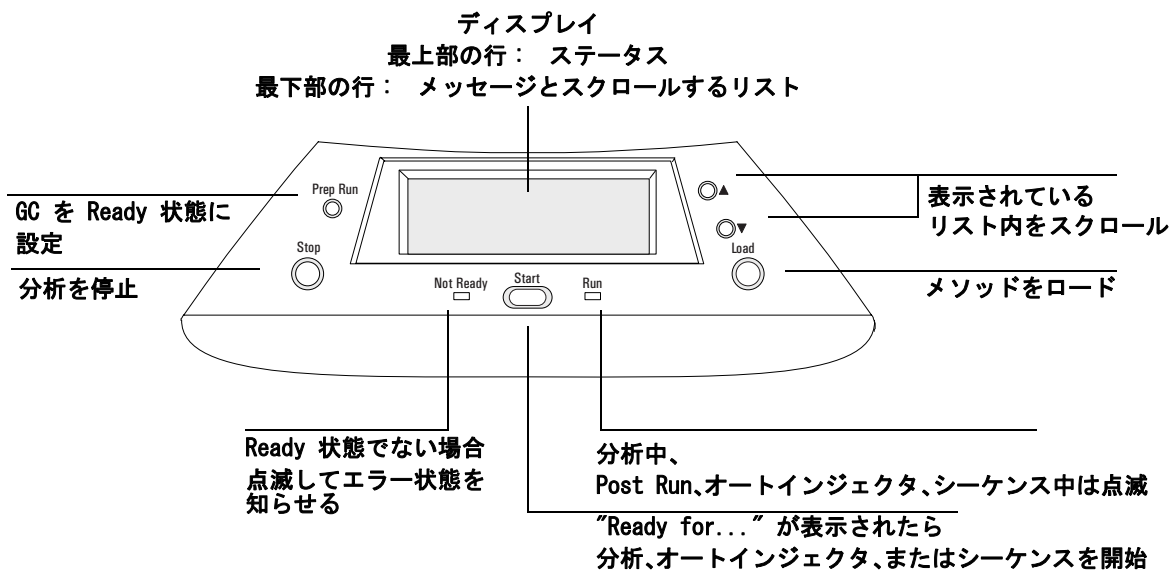


6850 GC のキーパッドとディスプレイ

GC/MSD ChemStation ソフトウェアは、6850 GC 用の装置制御機能を提供します。これにより、GC キーパッドの代わりにソフトウェアを使用して装置をプログラムすることができます。ただし、以下のような作業を素早く実行するためにキーパッドを使用する場合があります。

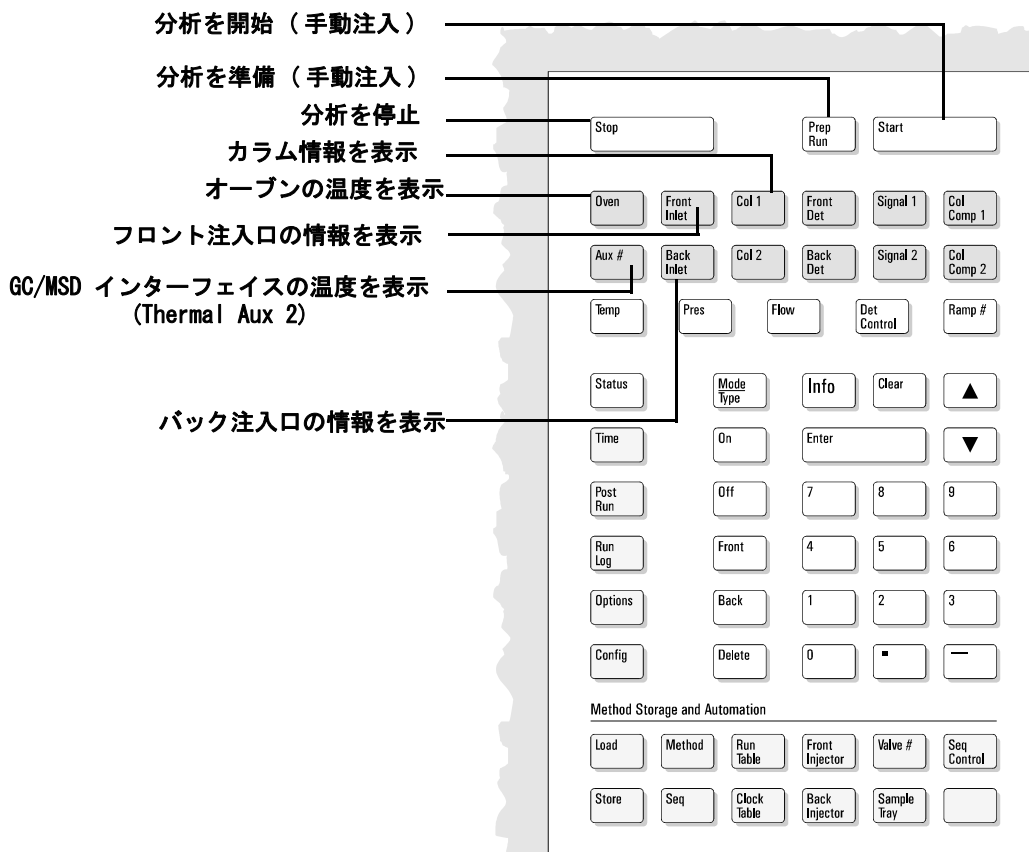
制御モジュールまたは GC/MSD ChemStation で行われた設定に応じて、分析中に、ディスプレイ画面がスクロールして以下を表示することがあります。

- ・ オープンの温度
- ・ 注入口の圧力
- ・ カラム流量
- ・ 検出シグナル
- ・ メッセージ
- ・ シーケンス情報
- ・ 分析時間



6890 GC 用キーパッド

GC/MSD ChemStation ソフトウェアは、6890 GC 用の装置制御機能を提供します。これにより、GC キーパッドの代わりにソフトウェアを使用して装置をプログラムすることができます。ただし、以下のような作業を素早く実行するためにキーパッドを使用する場合があります。



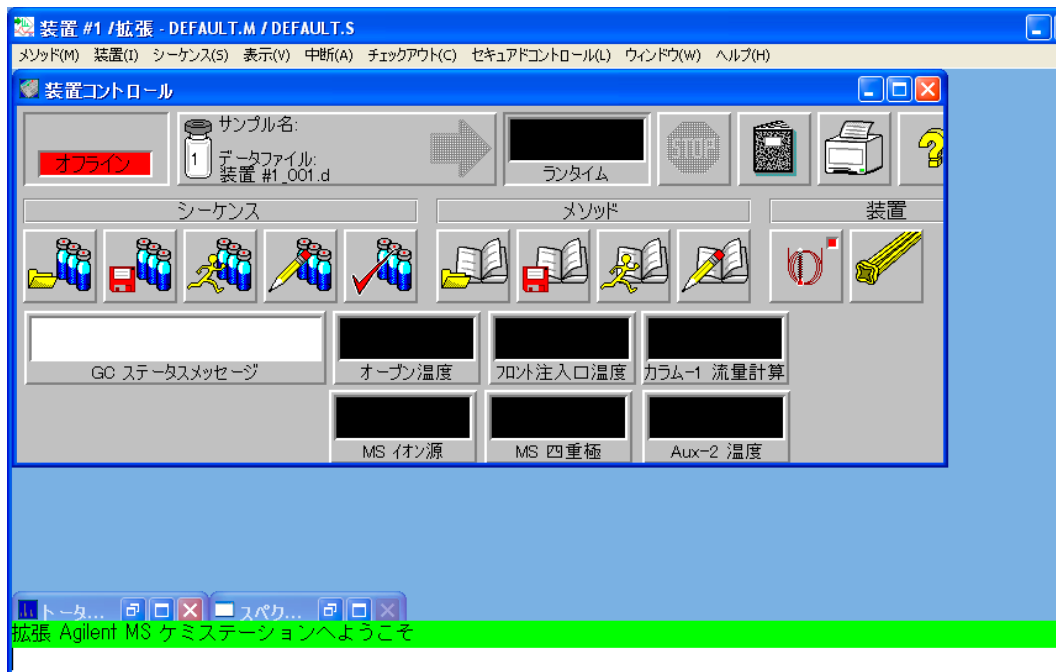
ChemStation の画面とメニュー

装置コントロール (Instrument Control) 画面

GC/MSD ChemStation を開始すると、装置コントロール (Instrument Control) 画面が表示されます。ここから、装置パラメータを設定してモニタします。別のビューが表示されている場合、システムをデータ取得のためにセットアップする準備ができれば「表示 (View)/ 装置コントロール (Instrument Control)」を選択します。

注

ソフトウェアで使用するメニュー、ボタン、ウィンドウの詳細については、オンラインヘルプを参照してください。





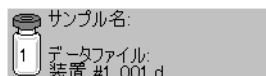
取込ステータスインジケータ

現在の分析のステータスを表示します。



分析時間

分析の残り時間を表示します。



分析開始

分析準備のできているサンプル名とデータファイルを表示します。



停止

停止ボタンは、分析の進行中は赤、進行していないときは灰色です。プレラン、分析、ポストランの間、システムを停止するにはこのボタンを使用します。分析中の場合、システムはポストランに進みます。ポストラン中の場合、システムは待機状態になります。



ログブック

ログブックポップアップメニューを表示します。



メンテナンス期限

[Early Maintenance Feedback 設定 (early maintenance feedback (EMF))] ダイアログボックスを表示します。



印刷

シーケンスログ、現在のシーケンス、装置パラメータ、データ解析パラメータ、詳細データ分析パラメータなどの印刷可能項目が含まれるダイアログボックスを表示します。



ヘルプ

装置コントロール (Instrument Control) 画面のヘルプを表示し、他のヘルプシステムへもアクセスできるようにします。



シーケンスのロード

[シーケンス読み込み (Load Sequence)] ダイアログボックスを開きます。



シーケンスの保存

[シーケンス保存 (Save Sequence)] ダイアログボックスを開きます。



シーケンスの実行

[シーケンス開始 (Start Sequence)] ダイアログボックスを開きます。



シーケンスの編集

[サンプルログテーブル (Sample Log Table)] ダイアログボックスを開きます。



シーケンスのシミュレーション

シーケンスをテストします。



メソッドのロード

[メソッド読み込み (Load Method)] ダイアログボックスを開きます。



メソッドの保存

現在のメソッドを保存します。



メソッドの実行

[分析開始 (Start Run)] ダイアログボックスを開きます。



メソッドの編集

現在のメソッドを編集できます。



GC パラメータ

GC パラメータと GC モニタを編集できます。



MS パラメータ

MS パラメータと MS モニタを編集できます。



チューニングパラメータ

MSD をチューニングできます。

装置コントロール (Instrument Control) メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[表示 (View)/ 装置コントロール (Instrument Control)] を選択します。

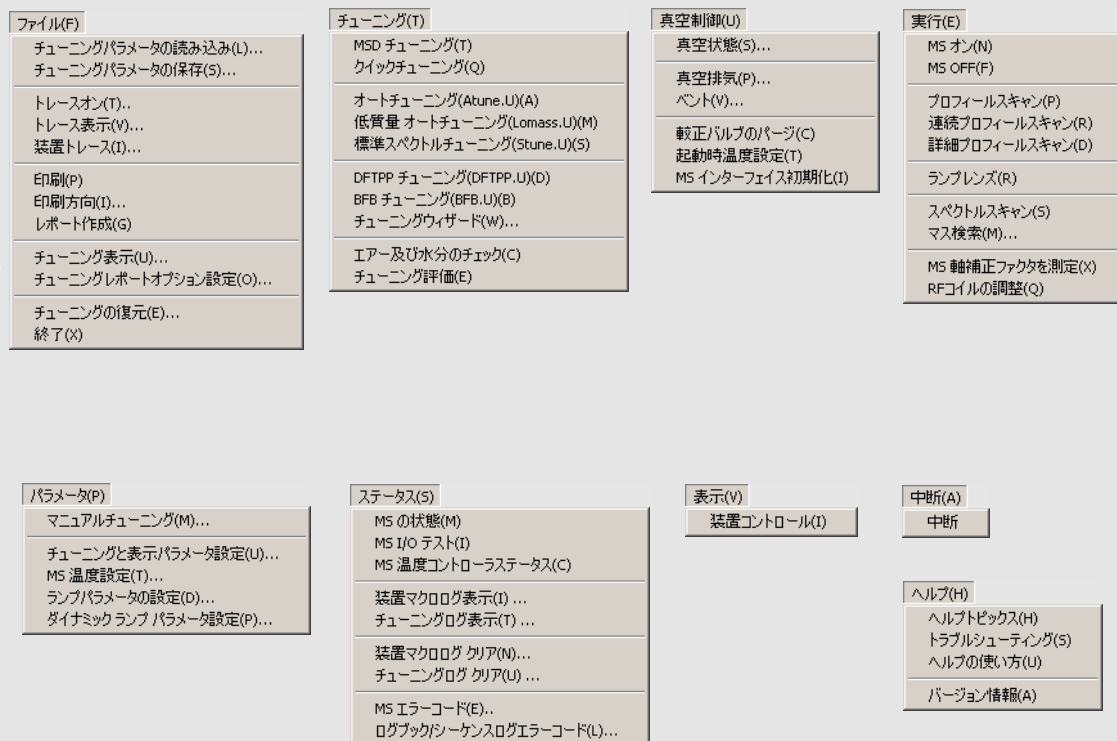


注

このマニュアルに記載されているソフトウェアメニューは拡張モードの GC/MSD ChemStation のものです。

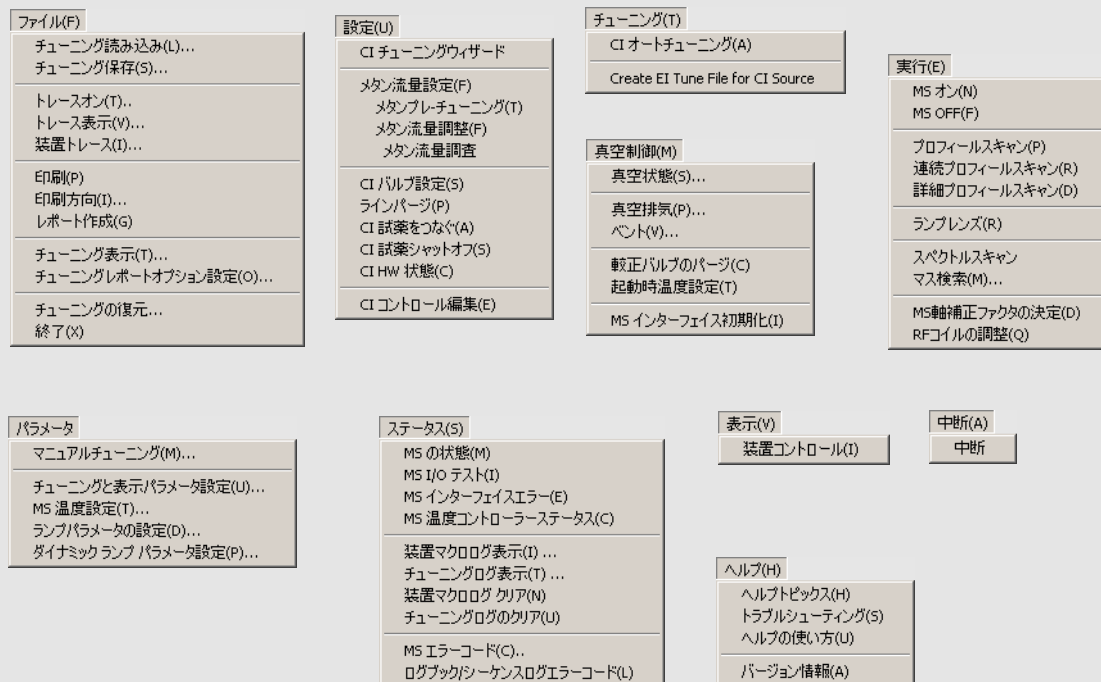
チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control) メニュー - EI モード (EI mode)

これらのメニューにアクセスするには、[装置コントロール (Instrument Control)] から [表示 (View)/ チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control)] を選択します。



チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control) メニュー - CI モード (CI mode)

これらのメニューにアクセスするには、[装置コントロール (Instrument Control)] から [表示 (View)/ チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control)] を選択します。



データ解析 (Data Analysis) 画面

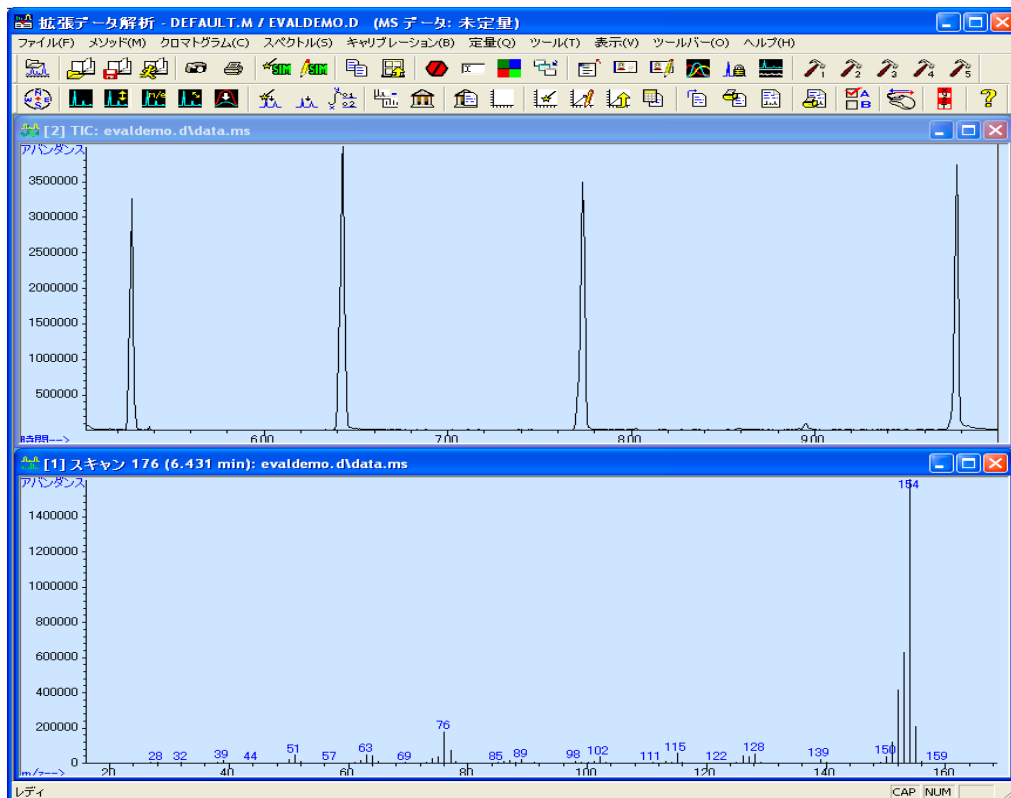
[データ解析 (Data Analysis)] 画面は、データ解析セッションを開始するか、または [装置コントロール (Instrument Control)] 画面から [表示 (**View**)/ データ解析 (**Data Analysis**) (**オフライン**)] を選択すると表示されます。[データ解析 (Data Analysis)] 画面を使用して以下のような作業を実行します。

- 積分パラメータの設定
- メソッドのキャリブレーション
- データの定量
- レポートのカスタマイズと印刷

注

ソフトウェアで使用するメニュー、ボタン、ウィンドウの詳細については、オンラインヘルプを参照してください。

1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス



[データ解析 (Data Analysis)] ツールバーボタン



データファイルの読み込み

選択したデータファイル (.D) をロードし、そのファイルの全イオンクロマトグラム (TIC) を表示します。



メソッドの読み込み

ディレクトリツリーからメソッドファイル (*.M) を選択してロードできます。



メソッドの保存

現在のメソッドへの変更を保存します。



メソッドの実行

現在のメソッドのデータ解析部分のみを実行します。印刷する出力ファイル名を選択する必要があります。この出力ファイルによって、文書の保管先となるファイル名が指定されます。文書は、印刷に使用したプログラムではなく、プリンタで読み取り可能な形式で保管されます。



スナップショット

スナップショットがアクティブになった時点までに取り込まれたデータを表示します。この機能は GC のみのデータには使用できません。



印刷

選択したウィンドウ、TIC とスペクトル、または現在のメソッドを印刷できます。



AutoSIM メソッドの生成

[自動 SIM 設定 (AutoSIM Setup)] ダイアログボックスを開きます。



SIM パラメータの編集

SIM グループテーブル内の SIM パラメータを編集できます。



コピー

選択したウィンドウをクリップボードにコピーできます。



ウィンドウのリセット

グラフィックウィンドウをデフォルトの位置に再配置します。



中止

コマンドまたはマクロを停止します。



コマンド行

コマンド行の表示と非表示を切り替えます。



色の編集

[データ解析 (Data Analysis)] のさまざまな表示項目の色を調整できます。



グラフィックのアイコン化 / 復元

表示されているグラフィックウィンドウを最小化または最大化できます。



画面レポートを閉じる

開かれている画面レポートをすべて閉じます。



イージー ID (EasyID)

既存の定量データベースに含まれている MS データの予想リテンションタイムとイオン比を化合物単位で更新できます。



QEdit

データファイルが定量されていれば、定量結果を確認および編集できます。



ピーク純度

クロマトグラムのオーバーラップした複数のピーク（複数コンポーネントのピーク）を検出できるようにします（GC/MS のみ）。



リテンションタイムロック

リテンションタイムロック作業に使用する RT ロック設定 (RTLock Setup) ビューにアクセスします。



S/N 比

S/N 比チェックを実行してから、レポートを表示または印刷できます。



CUSTOM TOOL 1

ユーザーが作成したマクロを実行できます。最初にマクロを作成してから、CUSTOMTOOL1 と名前を付けます。オンラインヘルプの「マクロの使用法と作成方法 (Using and Writing Macros)」および「データ解析コマンド (Data Analysis Commands)」を参照してください。



CUSTOM TOOL 2

ユーザーが作成したマクロを実行できます。最初にマクロを作成してから、CUSTOMTOOL2 と名前を付けます。オンラインヘルプの「マクロの使用法と作成方法 (Using and Writing Macros)」および「データ解析コマンド (Data Analysis Commands)」を参照してください。



CUSTOM TOOL 3

ユーザーが作成したマクロを実行できます。最初にマクロを作成してから、CUSTOMTOOL3 と名前を付けます。オンラインヘルプの「マクロの使用法と作成方法 (Using and Writing Macros)」および「データ解析コマンド (Data Analysis Commands)」を参照してください。



CUSTOM TOOL 4

ユーザーが作成したマクロを実行できます。最初にマクロを作成してから、CUSTOMTOOL4 と名前を付けます。オンラインヘルプの「マクロの使用法と作成方法 (Using and Writing Macros)」および「データ解析コマンド (Data Analysis Commands)」を参照してください。



CUSTOM TOOL 5

ユーザーが作成したマクロを実行できます。最初にマクロを作成してから、CUSTOMTOOL5 と名前を付けます。オンラインヘルプの「マクロの使用法と作成方法 (Using and Writing Macros)」および「データ解析コマンド (Data Analysis Commands)」を参照してください。



ナビゲーションの表示 / 非表示

アイコンをトグルして Explorer ペインの表示 / 非表示を切り替えます。



クロマトグラムの描画

現在のデータについて元のクロマトグラムをラベルや積分マークなしで再描画します。



クロマトグラムの拡大縮小

指定した倍率で選択したクロマトグラムを拡大縮小します。



イオンクロマトグラム

現在のデータファイルのトータルイオンクロマトグラム (TIC) から抽出イオンクロマトグラム (EIC) を抽出して表示します (GC/MS のみ)。



重ね書き表示

複数の EIC を重ね書きして表示します (GC/MS のみ)。



クロマトグラムの重ね書き

複数のクロマトグラムを選択し、重ね合わせて表示できます。



自動積分

現在のクロマトグラムについて最良の積分パラメータを見つけ、クロマトグラムを積分します。この操作は、RTE インテグレータがメソッドに設定されている場合は実行できません。



積分

現在のインテグレータ用に設定されたパラメータを使用して現在のクロマトグラムを積分します。



積分パラメータ

現在のインテグレータのパラメータまたはイベントを編集するためのダイアログボックスを開きます。



減算

あるスペクトルを別のスペクトルから減算し、差を表示します。



ライブラリの選択

[ライブラリ検索パラメータ (Library Search Parameters)] ダイアログボックスを表示し、現在選択されているスペクトルの PBM 検索に使用するライブラリを選択できるようにします。



ライブラリ検索レポート

現在の TIC を積分し、各ピークに一致するものがあるかどうか現在のライブラリを検索して、レポートを作成します。



定量セットアップ

定量データベースをセットアップするために、定量データベースのグローバルを指定し、データベースに化合物を入力します。



自動定量

定量データベースを作成するための半自動化された方法を提供します。



化合物の編集

定量データベースの情報を化合物単位で確認および編集できます。



キャリブレーションの更新

現在の定量データベース内のキャリブレーションレベルを追加、削除、または更新できます。



定量レポートの計算

現在のファイルを定量し、定量レポートを生成します。



定量レポートの生成

既に定量済みのファイルについて定量レポートを生成します。



定量レポートの印刷

定量レポートを印刷します。



カスタムレポート

Custom Reports ソフトウェアを開始します。メソッドに定量データベースがない場合、またはデータファイルがロードされていない場合、デフォルト値を使用できます。



カスタムレポートの印刷

現在のデータファイルを使用してメソッドで指定されたカスタムレポートテンプレートを印刷します。



データ解析オプション

[データ解析 (Data Analysis)] ダイアログボックスを開きます。



データ解析マウス動作の切り替え

マウスの右クリックで実行される機能を、一般的な動作と新しい右クリックメニューオプションの間で切り替えます。



スタックの表示 / 非表示 (変数監視)

スタック (変数監視) ウィンドウの表示 / 非表示を選択できます。



オンラインヘルプ

GC/MSD ChemStation のオンラインヘルプを表示します。

[データ解析 (Data Analysis)] メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[表示 (View) / データ解析 (Data Analysis) (オフライン)] を選択します。

ファイル(F) データファイル読み込み(L)... 次のデータファイル(N) ヘッダー情報を見る(H)... ファイル情報編集(F)... スナップショット(T) バックグラウンド減算(BSB)(B) シグナル選択(E)... プリンタ選択(S)... プリンタ設定(S)... 印刷(P)... 中断(A) CSV ファイルへのエクスポート(D) AIA フォーマットへのエクスポート(O)... AIA ファイルをデータファイルに変換(M)... 1(1) evaldemo.d 2(2) 3(3) 終了(X)	メソッド(M) メソッド実行(R)... カスタム解析用マクロの実行(U) メソッド読み込み(D)... メソッド保存(M)... メソッド編集(E)... カスタム解析用マクロの編集(D)... SIM メソッドの自動作成(G)... SIMパラメータの編集(S)... 1(1) 2(2) 3(3) パッチモード(B)...	クロマトグラム(C) クロマトスケール調整(L)... クロマトグラムを描く - ラベルなし(D) クロマトグラムを描く - ラベル付き(W) クロマトラベル選択(H)... イオンクロマトグラム抽出(C)... イオンクロマト重ね描き(M) 積分方式の選択(E)... MS シグナル積分パラメータ(N)... シグナル 2 の積分パラメータ(T)... 自動積分実行(A) 積分(I) 積分結果(S)... パーセントレポート(R)	スペクトル(S) 加算(A) 減算(S) テーブル表示(T) ライブラリの選択(E)... 検索ストラテジ編集(D)... ライブラリの編集(I)... ライブラリ検索レポート(L)... スペクトル表示変更(C)... マススペクトルの検索(F)
キャリブレーション(B) 定量データベース設定(S)... 自動定量設定(A) 化合物編集(E)... 更新(U)... メソッド情報をリスト(L)... 消去(C)...	定量(Q) 計算(C) レポート作成(G)... 標準定量レポートを使用(U) レポートオプション(O)... ノンターゲットピークレポート(N)... メソッドで位置合わせしたGCトレース使用(M) トレースモード定量(Q)... Custom Reports... Print Report Update Database Select Template/Database...	ツール(T) リスト処理(DOLIST)(L)... スキャンをリストアップ(DOSCAN)(S)... スキャンリストを処理(P) 3-D データのエクスポート(X)... 化合物を探す(C)... 全ての化合物を探す(A) 重ね描きパラメータ設定(O)... クロマトグラムの重ね描き(V)... シグナル/ノイズ比チェック(G)... データ状態変更(N)... オプション(T)... レポートヘッダーのコンフィグ(H)... スクリーン結果の作成(U) スクリーンレポートの作成(U) スクリーンレポートの作成と印刷(F) 複数ファイルに対してのスクリーンレポートの作成と印刷(F)... スクリーンデータベースの指定(M)... スクリーンデータベースパラメータの変更(D)... スクリーンデータベースをリスト(I)... ゼロクオリファイアを除く(E) ウィンドウをコピー(Y)... ウィンドウをリセット(R)	表示(V) イージーID(E) 定量結果の編集(Qedit)(D) ノンターゲットピーク編集(N) パラメータ検索(R) GC 位置合わせ(A) ピーク純度レビュー(V)... 結果スクリーナ(S) RT ロック設定(U)
ツールバー(O) ✓ ツールバー 1 の表示(1) ✓ ツールバー 2 の表示(2) ✓ ナビゲーションパネルの表示(N) コマンドラインの表示(C) デフォルトにリセット(R)	ヘルプ(H) ヘルプボックス(H) ヘルプの使い方(U) インストールされたソフトウェアのリビジョンを表示します。 Readme ファイル表示(V) バージョン情報(A)... About...		

[データ解析 (Data Analysis)] の [表示 (View)] メニューから、[データ解析 (Data Analysis)] 内の他のユーティリティにアクセスできます (後述)。

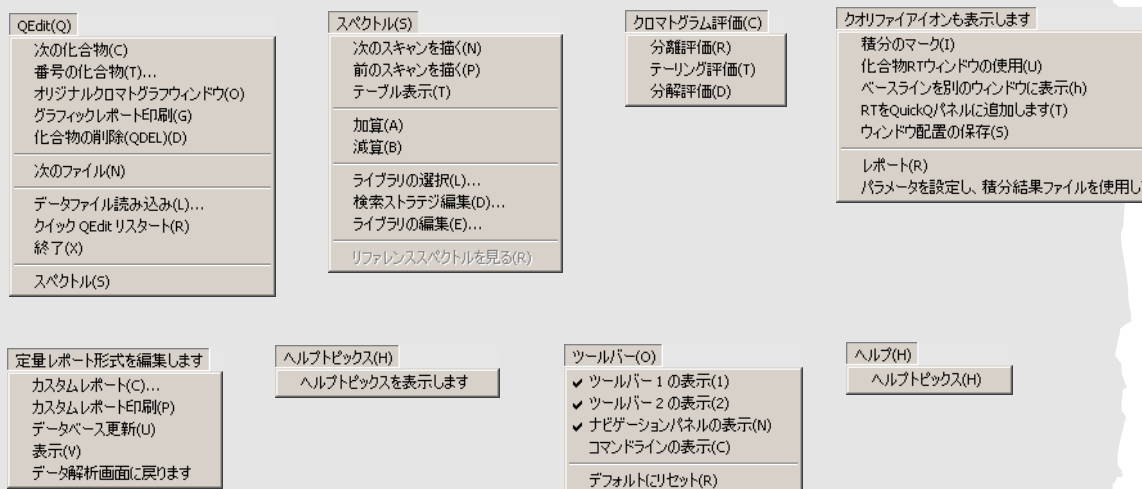
[イージー ID (EasyID)] メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[データ解析 (Data Analysis)] で [表示 (View)/ イージー ID (EasyID)] を選択します。

次の化合物(C) 次の化合物を表示します 表示する化合物の番号を入力します 抽出 ウィンドウを拡張します オリジナル時間範囲にウィンドウをリセットします レポートを印刷します クイックイージーID ダイアログボックスを表示します 抽出ウィンドウの開始点を設定します 抽出ウィンドウの終了点を設定します データ解析を終了します	次のスキャンを描く(N) 次のスペクトルを X に入れてウィンドウ1に表示します 前のスペクトルを X に入れてウィンドウ1に表示します X のスペクトル一覧を表示します 2つのスペクトル (Y+X) を加算し、ウィンドウ 1 に表示します 2つのスペクトル (Y-X) を減算し、ウィンドウ 1 に表示します 検索に使用するライブラリを選択します。 PBM ストラテジパラメータを編集します スペクトルライブラリの編集を行います 化合物のリファレンススペクトルを表示します 化合物のリファレンススペクトルを更新します		
データ解析画面に戻る(D) データ解析画面に戻ります	ツールバー(O) ☒ ツールバー 1 の表示(1) ☒ ツールバー 2 の表示(2) ☒ ナビゲーションパネルの表示(N) コマンドラインの表示(C) デフォルトにリセット(R)	ヘルプ(H) ヘルプビュアを表示します	積分パラメータ(P) ☒ 化合物の積分パラメータを編集します 化合物の積分パラメータを保存します 化合物の積分パラメータファイル名を削除します メソッドパラメータを使用して 化合物を積分します
			分離評価(R) 2つのピークをそれぞれ積分して分離を計算します ウィンドウ #6 のピークを積分してテーリングを評価します ウィンドウ #6 の2つのピークをそれぞれ積分して分解を評価します

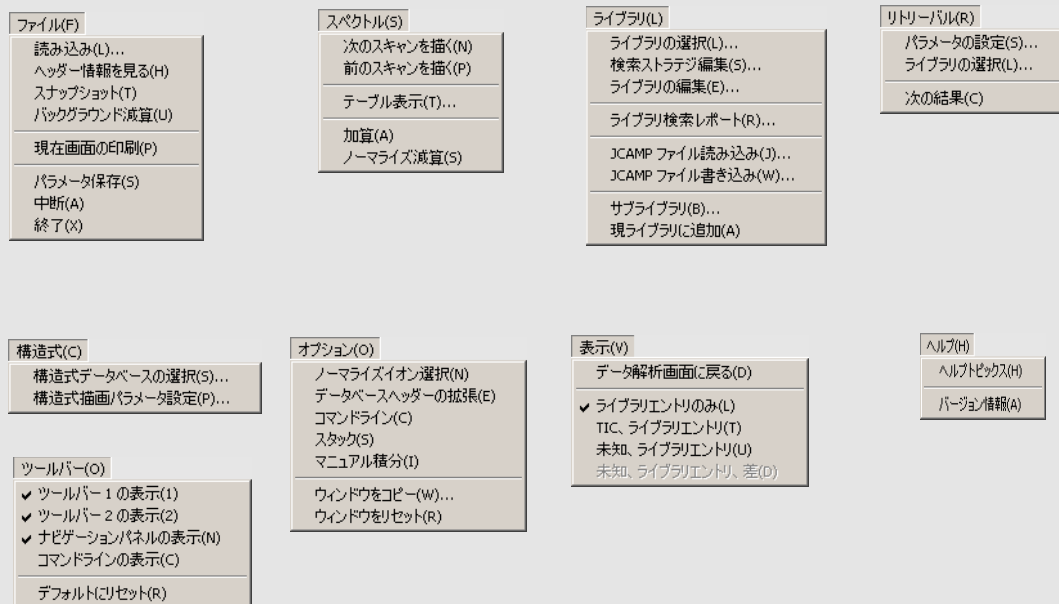
[QEdit 定量結果 (QEdit Quant Result)] メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[データ解析 (Data Analysis)] で [表示 (View)/QEdit 定量結果 (QEdit Quant Result)] を選択します。



[パラメータ検索 (Parametric Retrieval)] メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[データ解析 (Data Analysis)] で [表示 (View)/パラメータ検索 (Parametric Retrieval)] を選択します。



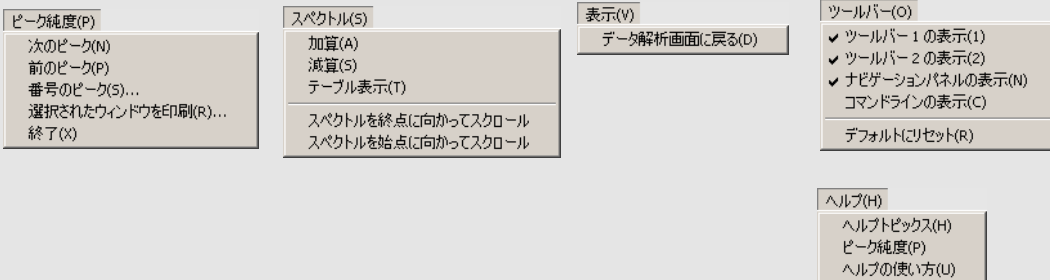
[Align GC (GC 位置合わせ)] メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[データ解析 (Data Analysis)] で [表示 (View)/GC 位置合わせ (Align GC)] を選択します。

位置合わせ(A)	表示(V)
現メソッドの位置合わせポイント表示(S)	位置合わせクロマトグラムを個別に表示(I)
現設定の位置合わせポイント表示(H)	位置合わせクロマトグラムを重ねて表示(M)
位置合わせ実行(P)	データ解析画面に戻る(D)
位置合わせポイント保存(S)	
位置合わせしたクロマトグラムを元に戻す(R)	
メソッドから位置合わせ値を削除(M)	
終了(X)	

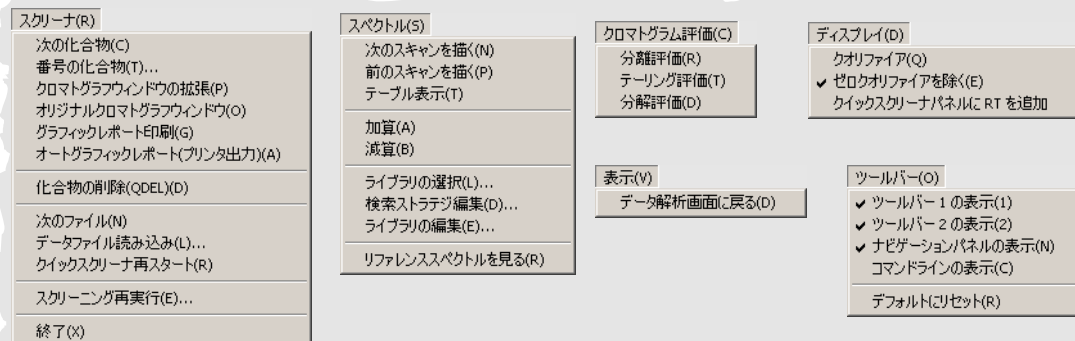
[ピーク純度レビュー (Review Peak Purity)] メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[データ解析 (Data Analysis)] で [表示 (View) / ピーク純度レビュー (Review Peak Purity)] を選択します。



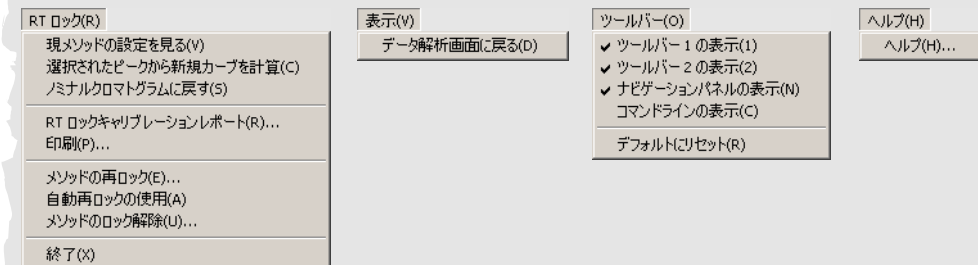
[結果スクリーナ (Results Screener)] メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[データ解析 (Data Analysis)] で [表示 (View)/結果スクリーナ (Results Screener)] を選択します。



RTLock メニュー

これらのメニューにアクセスするには、[データ解析 (Data Analysis)] で [表示 (View)/RTロック設定 (RTLock Setup)] を選択します。



一般的な ChemStation の作業

MSD の排気（開始）

- 1 排気の前に、システムが以下の条件をすべて満たしていることを確認してください。
 - ☐ 排気バルブが閉じている（ノブが時計回りにいっぱいまで回されている）。
 - ☐ 他のすべての真空シールとフィッティングが取り付けられ、正しく締められている（サイドプレートは**固く締め**ないでください）。
 - ☐ MSD が接地された電源に接続されている。
 - ☐ GC/MSD インターフェイスが GC オープン内に引き込まれている。
 - ☐ コンディショニング済みのキャピラリカラムが GC 注入口と GC/MSD インターフェイスに取り付けられている。
 - ☐ GC はオンになっているが、GC/MSD インターフェイスの加熱部分、注入口、およびオープンがオフになっている。
 - ☐ 純度 99.999% 以上のキャリアガスが、推奨トラップを使用して GC に配管されている。
 - ☐ 水素をキャリアガスとして使用する場合、キャリアガスの流入がオフになっており、サイドプレートの前側の蝶ねじが緩く締められている。
 - ☐ フォアラインポンプの排気が適切に換気されている。

警告

お使いの MSD が上記の条件すべてを満たすことを確認してください。満たしていないと、怪我につながる恐れがあります。

- 2 [表示 (View)/ チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control)] を選択します。
- 3 [真空 (Vacuum)/ 真空排気 (Pump Down)] を選択します。
- 4 プロンプトが表示されたら、MSD のスイッチをオンにします。

- 5 サイドプレートを手で押してマニホールドに取り付けます。
- 6 [装置コントロール (Instrument Control)] メニューがロードされます。
- 7 正しく密閉されていることを確認するために、サイドプレートを軽く押します。

フォアラインポンプがゴボゴボという音をたてます。この音は 1 分以内に止まるはずですが、音が止まらない場合、システム内、おそらくサイドプレートのシール、インターフェイスカラムナット、または排気バルブに大量の空気漏れがあります。

- 8 PC との接続が確立されたら、**OK** をクリックします。10 分から 15 分以内に、拡散ポンプが加熱するか、またはターボポンプが 80% まで加速します。ターボポンプは最終的に 95% 以上に達するはずですが。

注意

これらの条件が満たされない場合、フォアラインポンプが遮断されます。その場合は、MSD の電源をオフオンします。MSD が正しく排気しない場合、空気漏れおよびその他の真空中に関する問題のトラブルシューティングについてオンラインヘルプを参照してください。

- 9 プロンプトが表示されたら、GC/MSD インターフェイスヒーターと GC オーブンをオンにします。終わったら **OK** をクリックします。ソフトウェアがイオン源と四重極ヒーターをオンにします。温度設定は現在のオートチューニングファイル (*.u) に保管されます。

注意

キャリアガスを流すまで、どの GC 加熱部分もオンにしないでください。キャリアガスの流入なしにカラムを加熱すると、カラムに損傷を与えます。

- 10 メッセージ「**OK で実行します (Ok to run)**」が表示されたら、MSD が熱平衡状態になるまで 2 時間待ちます。

注意

MSD が熱平衡状態になる前に取得したデータは再現できない場合があります。

注意

アンモニアなどの有毒ガスを使用する場合は、MSD の側面板のネジを固く締めます。真空状態になる前にこれらのネジを固く締めると、シールが歪み、漏れが発生する可能性があります。

MSD の排気（停止）

- 1 5975 シリーズ MSD にMicroイオンゲージコントローラが装備されている場合、[チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control)] ビューから[(真空 (Vacuum)/ 真空ゲージのチューニングオン / オフ (Turn Vacuum Gauge on/off)] を選択します。5973 シリーズ MSD については、外部イオンゲージコントローラがオフになっていることを確認します。
- 2 ゲージをオフにします。
- 3 5973 シリーズ CI MSD を排気する前に、[ガスオフ (Gas Off)] を押します。これにより、試薬ガスの流入がオフになり、アイソレーションバルブが閉じられます。

警告

5973 CI MSD では、MSD の排気中は Gas Off ライトが点灯していなければなりません。

- 4 [チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control)] 画面から、[真空 (Vacuum) メニュー / ベント (Vent)] を選択します。表示された指示に従います。

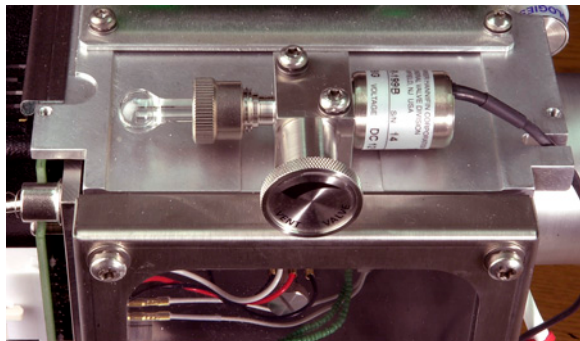
警告

水素をキャリアガスとして使用している場合、MSD の電源をオフにする前にキャリアガスの流入をオフにしておく必要があります。フォアラインポンプがオフの場合、水素が MSD 内に蓄積し、爆発する危険性があります。水素キャリアガスを使用して MSD を操作する前に、マニュアル (5955-5398) の「Hydrogen Carrier Gas Safety Information」を読んでください。

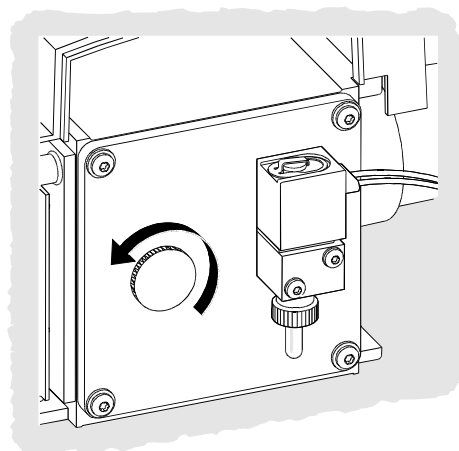
注意

キャリアガスの流入をオフにする前に、必ず GC オープンと GC/MSD インターフェイスを冷却してください。

- 5 プロンプトが表示されたら、MSD の電源スイッチをオフにします。
- 6 MSD の電源コードを抜きます。
- 7 MS のカバー (5973 シリーズ)、またはフロントウィンドウのカバー (5975 シリーズ) を外します。
- 8 排気バルブのノブを反時計回りに 3/4 ほど回すか、または真空マニフォールドに空気が流入するシューという音が聞こえるまで回します。



5975 排気バルブ



5973 排気バルブ

注意

ノブを回しすぎないでください。回しすぎると O リングが溝から外れることがあります。排気の前に、必ずノブを締め直してください。

警告

アナライザに触る前に、アナライザを室温近くまで冷却します。

注意

真空マニフォールドに入れる部品を扱うときは、常に出荷キットに付属しているリントフリー手袋を着用してください。

MSD のチューニング

最適な性能を維持するために、MSD を定期的にチューニングする必要があります。チューニングとは、装置が一定の性能基準を満たすように MSD パラメータを調整するプロセスのことです。チューニングの頻度は、分析するサンプルの数と種類、ならびにシステムの全体的な状態によって決まります。

注

MSD は、必ず同じ GC オープン温度とカラム流量で、データ取得に使用されるのと同じ MS 温度のもとでチューニングします。

チューニングレポートをノートに記録し、連続するレポートを簡単に比較できるようにします。

MSD をチューニングするには

[装置コントロール (Instrument Control)] ビューから以下の手順を実行します。

- 1 [チューニングパラメータ (Tune Parameters)] アイコン (ステップ 2 に挙げた最初の 2 つのメニューでのみ表示されます)、または [表示 (View)/チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control)] を選択します。



- 2 Tune メニューから、アプリケーションに要求される装置の性能に応じて以下のいずれかを選択します。
 - ☐ **MSD チューニング (Tune MSD)**
フルスキャン範囲全体で感度が最大になります。
 - ☐ **クリックチューニング (QuickTune)**
イオン比を変えずにピーク幅、質量数決定、およびアバランダンスを調整します。
 - ☐ **オートチューニング (Autotune) (Atune.U)**
フルスキャン範囲全体でレスポンスが最大になるようにチューニングします。

- ❑ **低質量オートチューニング (Low Mass Autotune) (Lomass.U)**
低質量範囲をチューニングします。
 - ❑ **標準スペクトルチューニング (Standard Spectra Tune) (Stune.U)**
フルスキャン範囲全体でレスポンスが標準になります。
このオプションによって感度が低下する可能性があります。
 - ❑ **DFTPP チューニング (DFTPP Tune) (DFTPP.U)**
EPA メソッド 625 に特化してチューニングします。
 - ❑ **BFB チューニング (BFB Tune) (BFB.U)**
EPA メソッド 624 に特化してチューニングします。
 - ❑ **チューニングウィザード... (Tune Wizard...)**
一連のダイアログボックスを表示して、アバンダンスを設定し、チューニング基準を調整できるようにします。
目標のチューニングに使用されます。
 - ❑ **エアおよび水分のチェック (Air and Water Check)**
PFTBA 質量 69 に対する、システムの空気 (窒素 m/z 28) と水 (m/z 18) の相対的なレベルを標準化した測定値とレポートを生成します。この項目を使用して漏れがないかどうか確認します。存在量 m/z 28 は、 m/z 18 の存在量より小さくしなければならず、そのどちらもが m/z 69 の 5% 未満でなければなりません。
 - ❑ **チューニング評価 (Tune Evaluation)**
現在のチューニングファイルを評価します。
- 3** チューニングレポートを確認します。
- 4** チューニング結果の履歴を表示するには、[チューニング (Tune)/ チューニング表示 (View Tunes)] を選択します。

マニュアルチューニングを使用するには

マニュアルチューニングにより、個別にレンズ電圧やチューニングマスなどの MSD パラメータを特定の分析目的に合った値に設定できます。マニュアルチューニングを使用すると、多くの場合オートチューニングよりも高い感度を得られます。

また、個別のパラメータを上昇させたり、上昇の範囲やステップ幅を指定したりすることができます。上昇の結果は視覚的に表示され、プロット上にパラメータの最適値がはっきりとマークされます。

マニュアルチューニングでは、2 種類のデータを取り込みできます。プロファイルスキャン（チューニングマスのアバウンダンスとピーク時の形状をプロットします）およびスペクトルスキャン（質量範囲全体にわたってプロットレスポンスをスキャンします）です。

マニュアルチューニングの詳細については、オンラインヘルプを参照してください。

データの取り込み

MSD と一緒に使用するために GC をセットアップするには

[装置コントロール (Instrument Control)] 画面から以下の手順を実行します。

- 1 装置メニューから、[試料導入 / 注入のタイプ (Inlet/Injection Types)] を選択します。適切なソースを選択し、**Use MS** チェックボックスを選択します。**OK** をクリックします。
- 2 装置メニューから、[GC パラメータの編集 (Edit GC Parameters)] を選択します。
- 3 **Aux** をクリックします。Aux#2 を使用していること、ヒーターがオンになっていて必要な温度に設定されていること、および Type として *MSD* が選択されていることを確認します。
- 4 [カラム (Columns)] をクリックします。検出器が *MSD* であること、出口に [真空 (*Vacuum*)] が選択されていることを確認します。**OK** をクリックします。

オートサンプラを使用してサンプルを注入するには

[装置コントロール (Instrument Control)] 画面から以下の手順を実行します。

- 1 オートサンプラのトレイにサンプルが入ったサンプルバイアルを置きます。
- 2 **メソッド実行 (Run Method) アイコン**をクリックするか、[メソッド (Method)/メソッド実行 (Run Method)]を選択します。
- 3 Start Run ボックスが表示されたら、サンプル情報を以下のよう指定します。
 - ☐ サンプル用に固有のデータパスを指定します。
 - ☐ サンプル用に固有のデータファイル名を指定します。
 - ☐ [バイアル (Vial)] フィールドに、サンプルバイアルの位置番号 (1 ~ 100) を入力します。
 - ☐ (オプション) この注入を文書化するために [オペレータ名 (Operator Name)]、[サンプル名 (Sample Name)]、および [一般情報 (Misc Info)] フィールドに入力します。
 - ☐ データ測定オプションが選択されていることを確認します。メソッドで指定したレポートを作成する場合は、[データ解析 (Data Analysis)] オプションを選択します。
- 4 [メソッド実行 (Run Method)] をクリックして分析を開始します。

注意

オートサンプラを使用する場合、分析の開始に GC の [開始 (Start)] を使用しないでください。

手動でサンプルを注入するには

[装置コントロール (Instrument Control)] 画面から以下の手順を実行します。

- 1 装置メニューから、[試料導入 / 注入のタイプ (Inlet/Injector Types)] を選択します。
- 2 試料導入 & 注入パラメータダイアログボックスで、注入ソースとして [マニュアル (Manual)] を選択します。

- 3 GC キーパッドで [Prep Run] を押します。これによりガスセーバー機能を取り消され、注入口からの流量が設定値になり、スプリットベントバルブが閉じられます（スプリットレス注入のみ）。
- 4 [メソッド (Method)/メソッド実行 (Run Method)] を選択します。
- 5 メソッド実行ボックスが表示されたら、サンプル情報を以下のように指定します。
 - ☐ サンプル用に固有のデータパスを指定します。
 - ☐ サンプル用に固有のデータファイル名を指定します。
 - ☐ (オプション) この注入を文書化するために [オペレータ名 (Operator Name)]、[サンプル名 (Sample Name)]、および [一般情報 (Misc Info)] フィールドに入力します。
 - ☐ データ測定オプションが選択されていることを確認します。
 - ☐ (オプション) メソッドで指定した データ測定レポートのいずれかを作成する場合は、[データ解析 (Data Analysis)] オプションを選択します。
- 6 [メソッド実行 (Run Method)] をクリックして分析を開始します。温度が安定している場合は、Prepare To Inject ボックスが表示されます。それ以外の場合は、メッセージ「GC レディー待ち (Waiting for GC ready)」が表示されます。
- 7 GC の温度が安定したら (6890 GC の場合：GC の Pre Run ライトが点灯、6850 GC の場合：Not Ready ライトがオフ)、サンプルを注入して GC の [開始 (Start)] を押します。

注意

GC が Ready 状態になるまで注入しないでください。結果が矛盾する原因となります。

MS データの分析

[ナビゲーション (Navigation)] パネルか、または データ解析画面から [データファイル読み込み (Load Data File)] を選択して、データファイルをロードできます。

データファイルをロードするには

[データ解析 (Data Analysis)] でデータファイルをロードするには、以下の手順を実行します。

- 1 [データファイル読み込み (Load Data File)] アイコンを選択するか、File メニューから [データファイル読み込み (Load Data File)] を選択します。



- 2 データファイルを選択します (ファイル名をダブルクリックするか、ファイル名を入力して **OK** をクリックします)。データファイルのクロマトグラムがロードされて、ウィンドウ [2] に表示されます。

注意

このセクションの作業を実行する場合は、いずれもデータファイルをロードする必要があります。

クロマトグラムを積分するには

- 1 使用する積分方法が現在選択されていない場合、Chromatogram メニューを開いて [積分方式の選択 (Select Integrator)] をクリックします。積分方法を選択し、**OK** をクリックします。
- 2 [クロマトグラム (Chromatogram)/ 積分 (Integrate)] を選択します。
- 3 (オプション) [クロマトグラム (Chromatogram)/ 積分結果 (Integration Results)] を選択します。表形式の結果レポートが画面上に表示されます。結果を確認したら、[閉じる (Close)] をクリックします。

スペクトルを選択するには

注

ウィンドウ [1] または [2] でマウスを右クリックするとメニューが表示される場合、[データ解析マウス操作の切り替え (Switch Data Analysis Mouse Actions)] を使用して右クリックモードを切り替えることができます。

クロマトグラム上の目的とする時点で右マウスボタンをダブルクリックします。ウィンドウ [1] にスペクトルが表示されます。

ズームインするには

- 1 クロマトグラムまたはスペクトルで拡大したい領域のいずれかの隅にポインタを置きます。
- 2 左マウスボタンを押したままドラッグして、拡大する領域を選択します。
- 3 マウスボタンを放します。選択した領域が既存のウィンドウいっぱいに拡大されます。

ズームアウトするには

- 1 ズームされたウィンドウ内のいずれかの場所にマウスを置きます。
- 2 左マウスボタンをダブルクリックします。

スペクトルを平均するには

- 1 クロマトグラムの平均を取る範囲の開始時点にポインタを置きます。
- 2 右マウスボタンを押して、平均を取る範囲の終わりまでマウスをドラッグします。
- 3 マウスボタンを放します。選択した範囲内のスペクトルが平均され、結果のスペクトルがウィンドウ [1] に表示されます。

2 つのスペクトルを加算するには

- 1 スペクトルを選択します（クロマトグラム上で右マウスボタンをダブルクリックします）。
- 2 2 つ目のスペクトルを選択します（クロマトグラム上で右マウスボタンをダブルクリックします）。
- 3 [**スペクトル (Spectrum)/ 追加 (Add)**] を選択します。2 つのスペクトルが加算され、結果のスペクトルがウィンドウ [1] に表示されます。

2 つのスペクトルを減算するには

- 1 スペクトルを選択します（クロマトグラム上で右マウスボタンをダブルクリックします）。
- 2 差し引くスペクトルを選択します（クロマトグラム上で右マウスボタンをダブルクリックします）。
- 3 [**スペクトル (Spectrum)/ 減算 (Subtract)**] を選択します。

ステップ 2 で選択したスペクトルがステップ 1 で選択したスペクトルから差し引かれ、結果のスペクトルがウィンドウ [1] に表示されます。

バックグラウンドスペクトルを減算するには

- 1 データファイルから差し引くスペクトルまたはスペクトルの平均範囲を選択します。
- 2 [**ファイル (File)/ バックグラウンド減算 (BSB) (Subtract Background (BSB))**] を選択します。システムが以下の作業を実行します。
 - 選択したスペクトルが、現在のデータファイルの各スキャンから差し引かれる。
 - 差し引かれたデータは、データファイルと同じディレクトリにある BSB サブディレクトリに保管される。
 - 差し引かれたデータファイルが現在のデータファイルになり、ウィンドウ [2] に表示される。

スペクトルライブラリの使用

ライブラリを選択するには

- 1 [データ解析 (Data Analysis)] で、[スペクトル (Spectrum)/ ライブラリの選択 (Select Library)] を選択します。
- 2 [ライブラリ検索パラメータ (Library Search Parameters)] ダイアログボックスで、第 1 行にライブラリの名前を入力します。

追加の検索ライブラリを 2 つまで入力できます。追加のライブラリが検索されるかどうかは、検出された化合物が指定した任意のヒット率を満たしているかどうかによって異なります。

ピークの積分と検索を行うには

以下の手順を使用して、トータルイオンクロマトグラムを積分し、検出されたピークごとに自動的にライブラリ検索レポートを作成します。

- 1 [データ解析 (Data Analysis)] で、データファイルをロードします。TIC が表示されます。
- 2 [スペクトル (Spectrum)/ ライブラリ検索レポート (Library Search Report)] を選択します。
- 3 [ライブラリ検索レポートオプション (Library Search Report Options)] ダイアログボックスが表示されたら、以下のようにライブラリ検索レポートのオプションを選択します。
 - [サマリ (Summary)] または [詳細 (Detailed)] を選択してレポートフォーマットを決定します。
 - 出力先を 1 つ以上選択します (画面 (Screen)、プリンタ (Printer)、およびファイル (File))。
 - 積分パラメータファイル (Integration Parameter File) を選択します (GC/MSD ChemStation インテグレータを使用して自動積分するには、フィールドをブランクのままにします)。
 - 各ピークからどのスペクトルを使用するかを選択します (頂点、頂点 - ピークの開始点、頂点 - 指定バックグラウンド、平均ピークのいずれか)。

4 OK をクリックして検索を開始します。

クロマトグラムが積分され、各ピークからのスペクトルが検索されます。積分の結果が画面上に表示されます。ライブラリ検索レポートが、**ステップ 3** で選択された出力先に送られます。

5 表形式の積分結果を表示するには、[クロマトグラム (Chromatogram)/ 積分結果 (Integration Results)] を選択します。

1 つのスペクトルを検索するには

- 1 [データ解析 (Data Analysis)] で、データファイルをロードします。
- 2 スペクトルを選択します。
- 3 スペクトルを含むウィンドウ内で右マウスボタンをダブルクリックします。

注

ウィンドウ [1] または [2] でマウスを右クリックするとメニューが表示される場合、[データ解析マウス操作の切り替え (Switch Data Analysis Mouse Actions)] を使用して右クリックモードを切り替えることができます。

検索が終了すると、検索結果が画面上に表示されます。未知のスペクトル、検索結果のリストから選択した参照スペクトル、さらに、可能な場合は参照化合物の化学構造が表示されます。

- 4 その他のスペクトルデータを表示するには、以下の手順を実行します。
 - 異なる参照スペクトルを表示するには、検索結果リストから別の化合物をクリックします。
 - 未知のスペクトルと参照スペクトルの差異を表示するには、[差 (Difference)] チェックボックスを選択します。
- 5 その他の情報を表示するには、以下の手順を実行します。
 - リスト内の各検索結果の品質に関する情報を表示するには、[統計 (Statistics)] をクリックします。

- 現在の参照スペクトルのライブラリに保管されているヘッダ情報を表示するには、[テキスト (Text)] をクリックします。
- 6 表示されているスペクトルを印刷するには、[印刷 (Print)] をクリックします。
- 7 ライブラリ検索結果を画面からクリアするには、[完了 (Done)] をクリックします。

リテンションタイムロッキングの使用

リテンションタイムロッキング (RTL) は、特定のメソッドの特性 (カラム、流量設定、オープンパラメータ) を評価する手順です。カラムに対する変更は通常リテンションタイムに影響を与えるため、これをすべて無効になるようにします。この手順では、現在のメソッド設定を中心としたさまざまな注入口圧力 (-20%、-10%、公称、+10%、+20%) で化合物 (望ましいリテンションタイムがわかっている) のデータが収集されます。その結果、5 つの分析が評価され、特定の装置の特性を示す圧力 / リテンションタイム曲線が作成されます。曲線から、望ましい時間にロック化合物を溶出させる予想圧力が計算され、メソッドがその圧力で実行されるように保管されます。

MS メソッドをロックするには

- 1 [装置コントロール (Instrument Control)] から、ロックするメソッドをロードします。必要ならば、メソッドパラメータを編集します。
- 2 ALS 注入については、バイアルをポジション 1 番に置きます。
- 3 [装置 (Instrument)/RTロックキャリブレーションデータ取込 (Acquire RTLock Calibration Data)] を選択します。これにより、RTL キャリブレーションファイルの収集が開始されます。
- 4 -20%、-10%、+10%、+20% のキャリブレーション範囲について仮注入圧が評価され、自動的に 5 つの分析が実行されます。プロンプトで 5 つの分析が実行されることが通知されます。また前のキャリブレーションデータが存在する場合は、それについても警告されます。5 つのデータファイルは

RTLOCK フォルダの下にあるメソッドディレクトリに、RTLOCK1 ～ RTLOCK5 のデータファイル名で保管されます。

- 5 データ収集に続いて、データ解析の新しいセッションが開始され、仮注入圧での分析 (RTLOCK3.D) がロードされます。RTL キャリブレーション計算に使用するピークを選択します (右マウスボタンをクリックしてドラッグします)。
- 6 選択したピークのスペクトルが表示されます。ソフトウェアに残りの 4 回の分析からロックする化合物のピークを自動的に検出させるには、[はい (Yes)] をクリックします。これでソフトウェアが、スペクトルの比較と曲線の当てはめ判定を実行できるようになりました。選択した 5 つのピークが表示されます。
- 7 曲線方程式 (リテンションタイムと圧力の比較に基づく) が表示され、続行するかどうかを確認されます。[はい (Yes)] をクリックします。
- 8 次に、使用するロックリテンションタイムを入力して、OK をクリックします。
- 9 [はい (Yes)] をクリックして、ロック圧力情報をメソッドに保存します。使用するロックする化合物名を入力して、OK をクリックします。
- 10 ここで、キャリブレーションデータファイル (RTLOCK1.D ～ RTLOCK5.D) を削除するかどうかを選択できます。[はい (Yes)] または [いいえ (No)] を選択します。これでメソッドがロックされました。

ロックされたメソッドが装置コントロールにロードされるときは常に、メソッドがロックされていることと、ロックにどの化合物が使用されたかがタイトルバーに表示されます。圧力 (オンライン装置のみ) がロックされた圧力に設定されます。

注

ロックされたメソッドが実行されると、GC キーパッドまたは [装置コントロール (Instrument Control)] から圧力を変更していても、ロックされた圧力値に復元されます。

メンテナンススケジュール

詳細なメンテナンス作業については、システムに付属するハードウェアマニュアルに説明されています。システムメンテナンス実行の頻度はシステムによって異なります。メンテナンス記録を付けてください。

毎日

- ☐ セプタムをチェックし、必要ならば交換します。
- ☐ 注入口ライナーが締まっているかどうかチェックします。
- ☐ カラムナットが締まっているかどうかチェックします。

毎週

- ☐ フォアラインポンプのオイルレベルをチェックします。
- ☐ 注入口ライナーと O- リングを交換します。

毎月

- ☐ スプリット / スプリットレス注入口排気管トラップをクリーニングします。
- ☐ 漏れがないかどうかチェックします（注入口、カラムインターフェイス）。

3 か月ごと

- ☐ ガスボンベを交換します（500 psig 未満の場合）。

6 か月ごと

- ☐ フォアラインポンプのオイルを交換します。
- ☐ キャリブレーションバイアルをチェックし、必要ならば補充します。

毎年

- ☐ 拡散ポンプのオイルをチェックし、必要ならば交換します。

- ☐ GC の内部および外部トラップとケミカルフィルタを再調整または交換します。

随時

- ☐ MSD をチューニングします。
- ☐ イオン源をクリーニングします。
- ☐ キャリアガストラップを交換します。
- ☐ 消耗した部品（フィラメント、EM など）を交換します。
- ☐ カラムを交換します。
- ☐ シールをグリースアップします。

安全上の注意事項

警告

MSD に付属するマニュアルで特に指示されない限り、MSD をオンにした状態または MSD の電源を接続した状態でメンテナンスを行わないでください。

MSD がオフになっていても、GC/MSD インターフェイスがオンになり、危険なほど高温に達することがあります。オフになった後、GC/MSD インターフェイスが冷却されるまで時間がかかります。必ずすべての部品が冷却されてから扱ってください。

GC の背後で作業するときは注意してください。オープンな冷却中、高温の排気が放出され、やけどの原因となる恐れがあります。

フォアラインポンプ用のオイルミストトラップは、フォアラインポンプオイルミストのみを止めます。有毒な薬液を分析したり、有毒な溶剤を使用している場合は、オイルミストトラップを外し、ホースを使用してフォアラインポンプの排気を試験室の外に誘導してください。

ポンプのオイルを交換するときは、耐薬液手袋と保護めがねを着用します。決してオイルに触れないようにしてください。

注入口、検出装置、バルブボックス、および絶縁カップの周辺の絶縁体には耐熱セラミック繊維（RCF）が使用されています。RCF の粒子を吸い込まないようにしてください。作業場所を換気し、長袖、手袋、保護めがね、および使い捨てマスクを着用してください。絶縁体はビニール袋に入れ、密閉して廃棄します。RCF を扱ったら、石けんと冷水で手を洗ってください。

操作上のヒント

- ☐ 定期的にデータとメソッドをバックアップします。
- ☐ 使用するチューニングファイルがサンプルに適したものであることを確認します。

- 後で参照できるようにチューニングレポートをノートに記録します。
- GC および MSD のハードウェアマニュアルに指示されているメンテナンススケジュールに従ってシステムメンテナンスを実行します。 実行したメンテナンスすべての記録を保存しておきます。
- MSD を排気しているときには、冷却された GC を利用して注入口ライナーやセプタム等の交換などのメンテナンスを行います。
- 排気の後、MSD が熱平衡状態になるまで少なくとも 2 時間待ってから、チューニングまたはデータ取得を行います。
- 最適な感度は、一般的に 1.2 mL/min 以下のカラム流量のときに得られます。
- 1 マイクロリットルを超える量を注入するときは、パルススプリットレスモードを使用して、オープン初期温度を 10 ~ 20 °C 上昇させます。
- スプリットレス注入では、パルスドスプリットレスモードによって、より定量的なサンプルがカラムに送られます。パルス圧力は、注入口の初期圧力の 2 倍が一般的です。
- **コンスタントフロー (Constant Flow) モード**を選択すると、多くの場合最も効果的な分離が得られます。
- 新しいカラムについては、使用を始めてから数回オープンの温度が上下した後、カラムナットがまだ固く締まっているかどうかをチェックします。
- 6890 GC キーパッドの [Config Status] キーを使用して、最も重要な 3 つの表示項目を設定します (残り時間 (**time remaining**)、オープン温度 (**oven temp**) など)。これらの項目は、GC/MSD ChemStation のどの画面が最前面にあっても常に表示されています。
- オートサンブラ洗浄ボトルを洗い流して補充します。途中まで残っているボトル瓶に溶剤を追加しないでください。

- SIM や スキャン取込みモードを使用する際のガイドとして以下の表を使用します。

作業	モード
未知の化合物との混合物を分析する。	スキャン、 または SIM スキャン
未知の量における既知の化合物との混合物を分析する（定量）。	スキャン、 または SIM、または SIM スキャン
混合物内に低レベルで含まれるいくつかの既知の化合物の存在を同定する。	SIM

- SIM の質量を選択するとき、スペクトル表示に注記されている公称質量ではなく、表形式のレポートに印刷されたものと同じ質量を使用します。これによりより正確なデータが得られます。
- SIM 分析を行うときには、1 つの amu の比率を他とは区別して判定するのでない限り、低分解能モードを使用します。低分解能により、感度と再現性が最大になります。
- スキャン範囲は、適正なライブラリ検索結果を得られるだけの範囲を選択します。これにより、ピーク全体でスペクトルが増え、よりよい定量結果が得られます。

エラーメッセージとトラブルシューティング

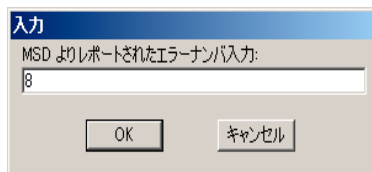
エラーメッセージ

MSD で発生した問題によって GC/MSD ChemStation ソフトウェアにエラーメッセージが表示される場合があります。一部のエラーメッセージはチューニング時にのみ表示されます。他のメッセージは、チューニングまたは装置制御時に表示されます。

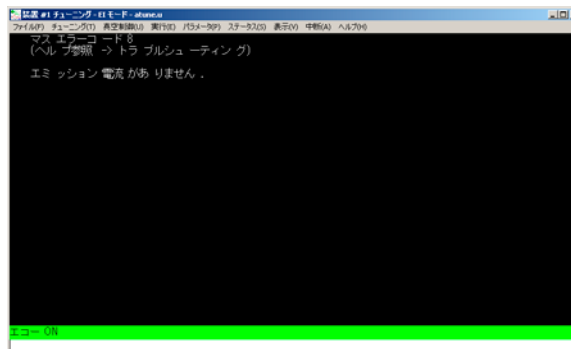
メッセージの代わりに番号のみが表示される場合もあります。この番号は 1 つ以上のエラーメッセージを表す場合があります。

番号をエラーメッセージに解釈するには、以下の手順を実行します。

- 1 番号をメモします。
- 2 [装置コントロール (Instrument Control)] で、[表示 (View)/チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control)] を選択します。
- 3 [ステータス (Status)/MS エラーコード (MS Error Codes)] を選択します。
- 4 表示されたボックス内にエラー番号を入力し、OK をクリックします。 .



対応するエラーメッセージ（複数の場合もあり）が表示されます。



トラブルシューティングのヒント

MSD LAN エラー

MSD はオンになっていますが、「*Server not found! Check LAN connection*（サーバーが見つかりません。LAN 接続を確認してください）」というステータスが表示されています。

MSD を最初にオンにしたときであれば、これは正常な状態です。GC/MSD ChemStation がまだ MSD との接続を確立していないことを意味します。排気が開始した後も依然として表示されている場合、以下の原因が考えられます。

- ・ 一時的な電源障害により通信が中断された。
- ・ MSD と、GC/MSD ChemStation、Agilent Bootp 設定、スイッチ / ハブとの間の接続が不良である。
- ・ LAN 用の Agilent Bootp 設定に MSD の MAC アドレスと IP アドレスが正しく設定されていない。

ベースラインの上昇

- ・ カラムブリード
- ・ その他の汚染

フォアラインまたは真空マニホールドの圧力が極端に上昇

- ・ カラム流量が多すぎる
- ・ 空気漏れ
- ・ 拡散ポンプのオイルレベルが低すぎる
- ・ 拡散ポンプのオイルが汚染されている
- ・ フォアラインポンプのオイルレベルが低すぎる
- ・ フォアラインポンプオイルが汚染されている
- ・ フォアラインホースの閉塞（これにより真空マニホールド圧力は極端に上昇するがフォアライン圧力は極端に低下する）

質量スペクトルの高バックグラウンド

- ・ 空気漏れ
- ・ フォアラインまたは真空マニホールドの圧力が高すぎる
- ・ その他の汚染

 m/z 18、28、32、44 のイオン

- ・ 検出装置が十分に排気されていない（空気と水の残留）
- ・ 空気漏れ

アイソトープの欠落またはアイソトープ比の不正

- ・ チューニングの誤り
- ・ イオン源の汚染
- ・ 高バックグラウンド
- ・ EM の電圧が高すぎる
- ・ リペラー電圧が高すぎる
- ・ スキャン速度が高い（スキャンモード）
- ・ ドウエルタイムが低い（SIM モード）
- ・ ピークの幅が広すぎる、または狭すぎる
- ・ リペラーとイオンフォーカスのリード線が逆になっている

ピークがない

- サンプル濃度の誤り
- 分析物が存在しない
- シリンジがない、または正しく取り付けられていない（ALSのみ）
- サンプルバイアルが空
- スプリットレスモードではなくスプリットモードでの注入

ピークテーリング

- サンプルパスに活性点がある
- 注入量が多すぎる
- 注入口の温度が低すぎる
- カラム流量が少なすぎる
- GC/MSD インターフェイスまたはイオン源の温度が低すぎる

ピークトップが平ら

- 溶媒待ち時間が短すぎる
- 表示倍率が誤っている
- 注入量が多すぎる
- EM の電圧が高すぎる

ピークトップが分割

- 注入方法の誤り
- 注入量が多すぎる

ピーク幅に一貫性がない

- チューニングの誤り
- キャリブレーションバイアルに PFTBA がない

- ・ キャリブレーションバルブの故障
- ・ イオン源の汚染
- ・ EM の損耗
- ・ MSD が熱平衡に達するだけの時間が経っていない
- ・ 試験室温度の変動幅が大きい

再現性が悪い

- ・ シリンジのニードルが汚れている
- ・ 注入口からの漏れ
- ・ 注入口ライナーと注入量の不一致
- ・ カラムインターフェイスの緩み
- ・ 圧力、カラム流量、温度の変動
- ・ イオン源の汚染
- ・ アナライザのインターフェイスの緩み
- ・グラウンドがとれていない

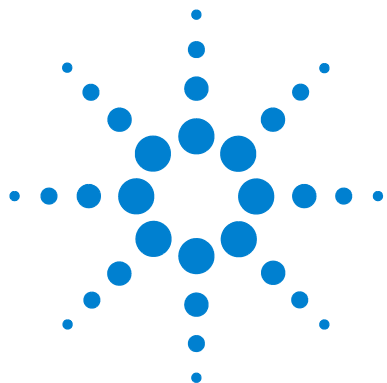
感度が悪い

- ・ チューニングの誤り
- ・ チューニングファイルが分析のタイプに合っていない
- ・ 温度の誤り
- ・ サンプル濃度の誤り
- ・ 注入口からの漏れ
- ・ スプリット比の誤り
- ・ スプリットレスモードでのスプリットレス時間が短すぎる
- ・ MSD 内の圧力が高すぎる
- ・ イオン源の汚染
- ・ 空気漏れ
- ・ 検出器が正常に作動していない
- ・ フィラメントが十分に動作していない
- ・ マスフィルタの極性の誤り

リテンションタイム (RT) のドリフト

- カラムが短くなった (RT の短縮)
- カラムが古い (RT の短縮)
- サンプルパスに活性点がある (RT の延長)
- カラム流量が削減された (RT の延長)
- 注入口からの漏れ (RT の延長)
- オーブンの初期温度が変更された (上昇 = RT の短縮、下降 = RT の延長)

詳細については、オンラインヘルプの「MSD のトラブルシューティング」セクションを参照してください。



2 定量を理解する

定量	70
この章の内容	70
はじめに	70
GC/MSD ChemStation における定量の仕組み	70
定量データベース	73
はじめに	73
マニュアルで定量データベースをセットアップする方法	75
AutoQuant Setup の仕組み	80
チュートリアル – AutoQuant Setup の使用	81
手順：AutoQuant Setup を使用した定量データベースの作成	82



定量

この章の内容

この章では、定量データベースを作成するための基本的な手順の流れを説明します。これは、このソフトウェアに習熟するための第一歩となります。

慣れてきたら、この章の最後にあるチュートリアルをやってみてください。それから、独自のデータファイルをもとに定量データベースを作成してみるとよいでしょう。この機能とその仕組みの詳細については、オンラインヘルプを参照してください。

はじめに

定量とは何をするものですか

定量とは、サンプルのなかに含まれる化合物の量を同定することです。

定量はいつ行うのですか

定量は、サンプル分析の最後の部分（化合物の同定後）に実行します。

定量はどのように行うのですか

定量は、化合物の未知の量からのレスポンス（分析から抽出したデータ）を計測された量からのレスポンス（定量データベースに保管されている）と比較して行います。

定量データベースについては、このマニュアルで後述します。

GC/MSD ChemStation における定量の仕組み

以降に、ChemStation がどのようにしてサンプルに含まれる化合物の量を測定するかを、きわめて一般的な用語を使って説明します。定量は 2 つの部分からなるプロセスです。

パート 1 — データ取込

プロセスの最初の部分では、データ取込が行われます。以下に概要を説明します。

GC/MSD で未知のサンプルを分析すると、GC 内でサンプルが加熱され、加圧され、個々の化合物に分離されて、最後に検出器を通過します。これらすべては、指定したメソッドに従って行われます。

検出器は、各化合物のパターンを確認します。続いて ChemStation がそのパターンを、メソッドに関連付けられたライブラリに登録されている既知のパターンと比較します。一致するものがあれば、ChemStation によりレポートされます。

したがって、サンプルから検出されたいずれかの化合物のパターンが、メソッドで設定されたライブラリに登録されている xxx のパターンと一致した場合、ChemStation はサンプルで xxx が検出されたことをレポートできます。

メソッドのデータ取込条件の作成はきわめて専門的なプロセスであり、このマニュアルの範囲を超えています。メソッド作成の詳細については、オンラインヘルプを参照してください。

この章の最後にあるチュートリアルでは、AutoQuant Setup の仕組みを説明するために、ChemStation に付属しているデフォルトのメソッド、デモ用データファイル、およびデモ用スペクトルライブラリを使用します。

パート 2 — データ定量

プロセスの 2 番目の部分では、サンプル内に含まれる化合物の量を求めます。これが、プロセスのデータ定量部分であり、81 ページの「チュートリアル — AutoQuant Setup の使用」に詳細が説明されています。以下に、概要を説明します。

サンプル内に含まれる化合物の量を測定するためには、ChemStation が検出したもの（xxx の未知の量）と xxx の既知の量の比率を求めて答えを出せるように、この 2 つを比較できなければなりません。

ここで定量データベースが必要になります。

ライブラリには既知の化合物のパターンが保管されていますが、定量データベースには、これに加えて以下のような追加の詳細が保管されています。

- ・ 特定の量（たとえば 10 ppb）における化合物のレスポンス
- ・ 化合物のターゲットイオン

2 定量を理解する

- ・ ターゲットイオンのクオリファイアイオン

したがって、ソフトウェアが化合物を（ライブラリと比較して）*同定*した後、さらに未知のサンプル内で検出された装置レスポンスを、定量データベースにリストされているレスポンスと比較することで、その量を定義することができます。

たとえば、定量データベース内のエントリが 10 ppb を表し、サンプル内から検出された量がその量の 2 倍である場合、20 ppb となります。

注

この説明では、プロセスを極端に簡略化しています。また、この説明はデータ取込とデータ定量の全般的な概念を伝えるためのものであり、具体的な方法とまったく同じというわけではありません。

定量データベースのセットアップについては、81 ページの「[チュートリアル – AutoQuant Setup の使用](#)」を参照してください。

定量データベース

はじめに

定量データベースとは何ですか

定量データベースは、探している各化合物に関連する詳細情報をリストします。

定量データベースに必要なデータとはどのようなものですか

定量する各化合物について、定量データベースには以下のデータが含まれている必要があります。

- 以下の詳細を含め、探している化合物を同定する 1 つのエントリ
 - リテンションタイム
 - 定量パラメータ
 - 同定のための選択基準
 - クオリファイアイオン比を計算するためのメソッド
 - 相対的レスポンスの許容範囲
 - 化合物のキャリブレーションデータに適用される相関係数
 - キャリブレーション曲線で使用されるデータポイント
- 探している化合物内のターゲットイオン（通常は基準ピークイオン）を同定するための 1 つのエントリ
- 化合物の存在をさらに確認するためのクオリファイアイオンの複数のエントリ（たとえば、これらのイオンは常に化合物のピークイオンとともに、常に同じ比率で出現する）
- 使用する内部標準

難しいことのように思えますが、AutoQuant Setup では、これらのイオンを自動的に同定できます。この仕組みの詳細については、78 ページの「[AutoQuant を使用して定量データベースをセットアップする方法](#)」を参照してください。

定量データベースのサイズはどのくらいですか。

1 つの化合物を定量するために、定量データベースには少なくとも以下の 3 つのエントリが必要です。

2 定量を理解する

- 化合物の基準ピークイオン
- そのピークイオンの存在を確認する、追加の 2 つのクオリファイアイオン

多くのユーザーが追加のオプションエントリとして内部標準を選択しています。

定量データベースのサイズは、定量するターゲット化合物の数とキャリブレーション曲線に定義するデータポイントの数に応じて拡大します。

どうすれば定量データベースを作成できますか

定量データベースに化合物を追加するには、以下の 2 つの方法があります。

- マニュアル
- AutoQuant Setup を使用した半自動

以降に概要を説明します。

マニュアルで定量データベースをセットアップする方法

このセクションでは、定量データベースをマニュアルでセットアップする際の手順について概要を説明します。

定量データベースをマニュアルで作成するには、クロマトグラムを目視で検査し、当該の各化合物、ターゲットイオン、クオリファイアイオンを個別に選択してから、名前を付けて定量データベースに保存する必要があります（これは 76 ページの「[マニュアルで定量データベースをセットアップする方法の概要](#)」のステップ 2 ～ 8 に該当します）。

定量データベースのマニュアルセットアップの説明に続いて、AutoQuant Setup を使用した定量データベースのセットアップ方法に関するセクションがあります。AutoQuant Setup は、半自動化されたプロセスであり、ソフトウェアがクロマトグラムを確認し、指定したアバンダンスとライブラリに基づいて化合物、ターゲットイオン、クオリファイアイオンを選択します。

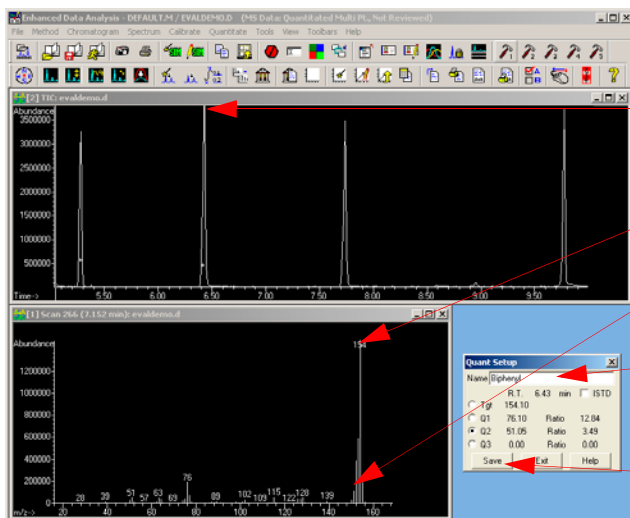
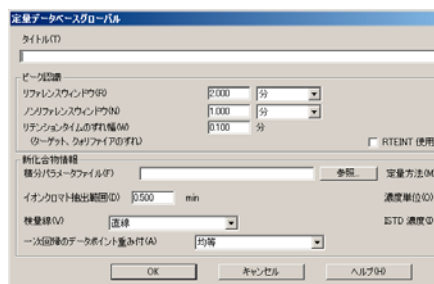
これに関しても、以降の 2 つのセクションでは概要情報のみを説明しています。AutoQuant Setup を使用した定量データベースのセットアップに関する詳細な手順については、81 ページの「[チュートリアル – AutoQuant Setup の使用](#)」を参照してください。

2 定量を理解する

マニュアルで定量データベースをセットアップする方法の概要

定量データベースをマニュアルでセットアップするには、以下の手順に従います。

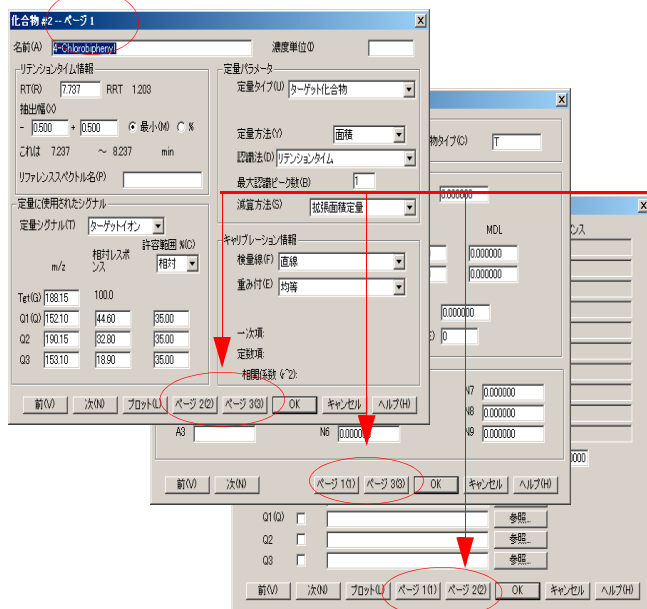
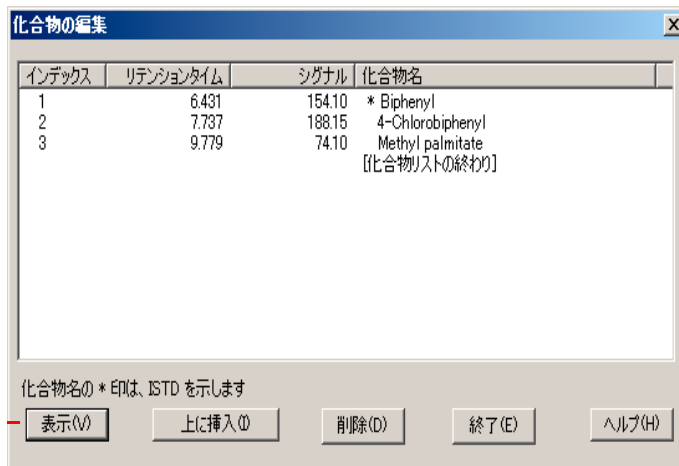
- 1 Quantitation Globals ページで、キャリブレーションしたい化合物標準を含むファイルを読み出します。それから、定量データベース中にリストされるすべての化合物の一般情報を入力します。終わったら **OK** をクリックします ([グローバル定量データベース (Quantitation Database Globals)] ページにアクセスするには、[校正



(Calibrate)/ 定量データベース設定 ... (Set Up Quantitation...) を選択します)。

- 2 測定済みサンプルデータファイルによって作成されたクロマトグラムをマニュアルで確認します。
- 3 各化合物を、クロマトグラムにあるそのピークをクリックして個別に選択します。
- 4 表示されたスペクトルからターゲットイオンを選択します。
- 5 この化合物のクオリファイアイオンを選択します。
- 6 化合物に名前を付け、この化合物が内部標準に含まれている場合は、それを示すチェックボックスをマークします。
- 7 この化合物のスペクトルプロファイルを定量データベースに保存します。

- 8 定量データベースに追加する各化合物について、ステップ 2 ~ 7 を繰り返します。
- 9 必要な化合物をすべて追加したら、[校正 (Calibrate) / 化合物編集 ... (Edit Compound...)] を選択して定量データベースに作成したエン트리全体のリストを ([化合物編集 (Edit Compounds)] 画面上に) 表示します。



- 10 [化合物編集 (Edit Compounds)] 画面から、化合物を選択して [表示 (View)] をクリックすると、その化合物について保存されているデータの最初のページが表示されます。各化合物について 3 ページの情報があり、定量データベースレコードのページ 1、2、および 3 として保管されています。

3 つの画面を切り替えるには、ページボタンを使用します。

スペクトル情報と Globals 画面で入力した情報はこれらのページに転送されます。

処理を終了するには、定量データベースの各エン트리について、個々

の化合物画面（ページ 1、2、3）をマニュアルで更新します。

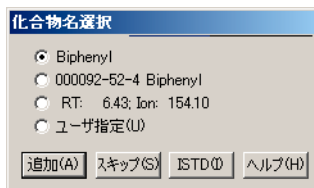
AutoQuant を使用して定量データベースをセットアップする方法

マニュアル処理では、クロマトグラムをマニュアルで確認し、定量データベースに加えるそれぞれの化合物とイオンを個別に選択し、名前を付けて保存する必要がありました。一方、AutoQuant Setup は半自動化された処理であり、ソフトウェアがデータファイルを確認し、指定したアバンダンスとライブラリに基づいて、自動的に化合物、ターゲットイオン、およびクオリファイアイオンを同定します。

AutoQuant を使用して定量データベースをセットアップする方法の概要

AutoQuant Setup を使用して定量データベースを作成するには、以下の手順に従います。

- 1 最初のステップは、マニュアルによる定量データベースのセットアップの場合と同じです。詳細については、76 ページの「[マニュアルで定量データベースをセットアップする方法の概要](#)」を参照してください。
- 2 化合物とイオンのマニュアル選択に関する、マニュアル処理のステップ 2 ～ 8 です。ただし、AutoQuant を使用する場合、これらのステップは以下のように自動化されます。[データベースグローバル (Database Globals)] 画面での作業を終了して、OK をクリックすると（[ステップ 1](#)）、ソフトウェアが自動的にデータファイルにある関連するピークの検索を開始します。検出した各ピークについて、データが指定されたライブラリと比較され、以下のような画面に化合物が表示されます。



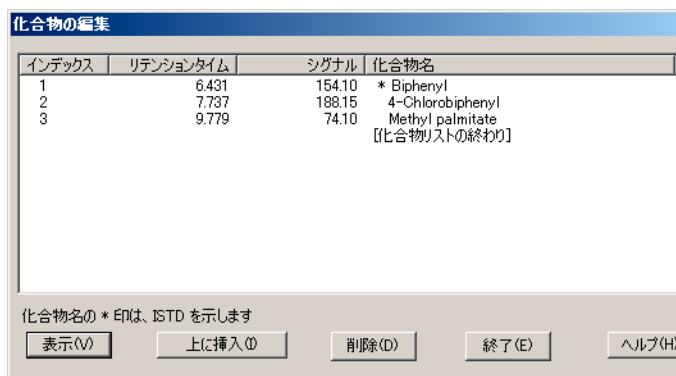
この画面から以下の操作を実行できます。

- Add** この化合物、そのターゲットイオン、および 3 つのクオリファイアイオンを定量データベースに追加します。
- Skip** データファイル内で検出された次の化合物を表示します。
- ISTD** この化合物を定量データベースに追加し、内部標準として同定します。

注

エントリリスト内で ISTD は化合物などよりも前になければなりません。また、アスタリスクで示されます。

- 3 データファイル内で検出されたすべての化合物が表示されると、「Do you want to Quantitate Now? (今すぐ定量しますか)」とプロンプトが表示されます。Yes を選択すると、キャリブレーション画面、続いて [化合物編集 (Edit Compound)] 画面が表示されて、最終的な定量データベースを確認することができます (これはマニュアル処理の [ステップ 9](#) に相当します)。



[化合物編集 (Edit Compounds)] 画面から、化合物を選択し

2 定量を理解する

て **View** をクリックすると、マニュアル処理の [ステップ 10](#) の説明とまったく同じように、その化合物に対して保存されているデータの 1 ページ目が表示されます。

AutoQuant Setup の仕組み

AutoQuant Setup は、指定したスペクトルライブラリを使用してデータファイル内の化合物を同定し、その化合物内のアバンドランスに基づいて、各化合物のターゲットイオンとクオリファイアイオンを選択します。選択内容をユーザーが確認すると、AutoQuant Setup は自動的に定量データベース内に必要なエントリを作成します。

前提条件： AutoQuant Setup を使用するためには、ターゲット化合物を含むライブラリがなければなりません。また、キャリブレーション標準には、同時溶出する化合物を含めることはできません。

チュートリアル – AutoQuant Setup の使用

このチュートリアルでは、AutoQuant Setup を使用して定量データベースを作成する手順の流れを説明します。この演習は、AutoQuant Setup を使用すると定量データベースをいかに短時間で作成できるかを具体的に示すことを目的としています。所要時間は約 5 分です。

この演習では、ビフェニル、クロロビフェニル、およびメチルパルミテートの同定と定量が可能な定量データベースを含むメソッドを作成します。

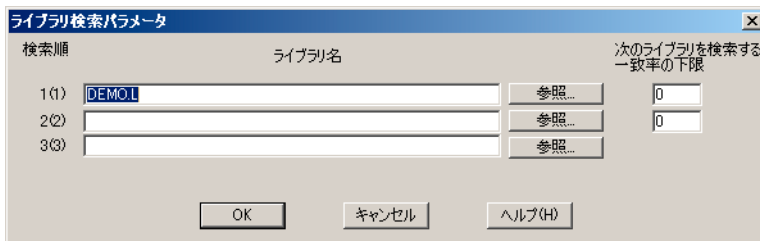
このために、以下の手順を実行します。

- 1 ChemStation 内のデフォルトのメソッド **DEFAULT.M** をロードします。
- 2 ChemStation 内のデモ用データファイル **EVALDEMO.D** をロードします。
- 3 ChemStation 内のデモ用スペクトルライブラリ **DEMO.L** をロードします。
- 4 AutoQuant Setup を使用して、以下の化合物を含む定量データベースを作成します。
 - ドデカン
 - ビフェニル
 - クロロビフェニル
 - メチルパルミテート

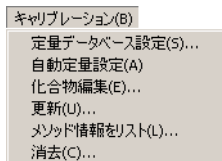
作成されたメソッドと定量データベースでは、ビフェニル、クロロビフェニル、およびメチルパルミテートの同定と定量が可能になります。

手順：AutoQuant Setup を使用した定量データベースの作成

- 1 DEFAULT.M と EVALDEMO.D をチュートリアルで使用する前に、それぞれコピーをとっておきます。
- 2 *Data Analysis* で、以下の 2 つのファイルをロードします。
 デモ用メソッド C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M
 デモ用データファイル C:\MSDCHEM\1\DATA\EVALDEMO.D
 これを実行して独自の定量データベースを作成すると、このデモデータファイルはキャリブレーションされます。
- 3 [スペクトル (Spectrum)/ライブラリ選択 (Select Library)] を選択するか、アイコンをクリックします。 DEMO.L を選択します。



- 4 [校正 (Calibrate)/自動定量設定 (AutoQuant Setup)] を選択するか、アイコンをクリックします。



- 5 [グローバル定量データベース (Quantitation Database Globals)] ダイアログボックスが表示されたら、表示されたデフォルト情報（この前に表示した内容から取り込まれる）を確認します。必要ならば、この情報をメソッドに合わせて修正します。

この画面は「グローバル」と呼ばれます。ここに表示されている情報はすべての化合物について共通であり、定量データベースに追加する各化合物に対して自動的に埋め込まれます。

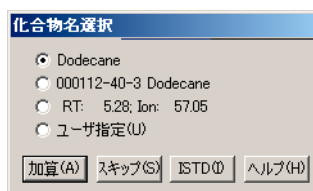
- 6 このチュートリアルでは、[グローバル定量データベース (Quantitation Database Globals)] ダイアログボックスが表示されたら、以下を入力します。
- a [校正タイトル (Calibration Title)] フィールドに、**AutoQuant Tutorial** と入力します。この行は、各定量レポートのタイトルに表示されます。
 - b RTE インテグレータを使用するには、[RTEINT 使用 (Use RTEINT)] ボックスをチェックします。
 - c OK をクリックします。

OK をクリックすると、ソフトウェアはデータファイル内にある関連するピークの検索を開始します。最初のピークを検出すると、指定されたライブラリと比較し（ステップ 3）、ラ

2 定量を理解する

イブラリで見つかった最初の化合物の名前を表示します。各化合物が表示されるので、その化合物が必要かどうかを判断します。

- 7 この場合、見つかった最初の化合物はドデカンです。この化合物に対する処理として、以下の 3 つがあります。



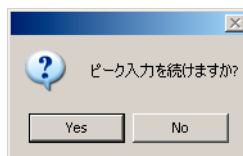
追加 (Add) この化合物、そのターゲットイオン、および 3 つのクオリファイアイオンを定量データベースに追加します。

スキップ (Skip) データファイル内で検出された次の化合物を表示します。

ISTD この化合物を定量データベースに追加し、内部標準として同定します。

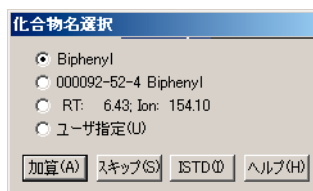
ドデカンについて [化合物名選択 (Choose Compound Name)] ダイアログボックスが表示されたら、[スキップ (Skip)] をクリックします。デモの目的上、ここではこの化合物をスキップします。後でこの処理を再実行し、これを定量データベースに追加します。

[ピーク入力続けますか? (Continue peak entry?)] ボックスが表示されたら、[はい (Yes)] をクリックします。

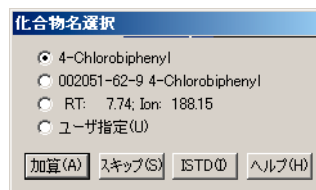


([いいえ (No)]) をここでクリックすると、[ステップ 11](#) のように [定量しますか? (Quantitate now?)] ダイアログボックスが表示されます)。

- 8 ビフェニルが次に表示されます (サンプル内でドデカンの後に溶出したため)。デフォルト名のままにして、[追加 (Add)] をクリックし、この化合物を定量データベースに追加します。



- 9 4-クロロビフェニルが次に表示されます。デフォルト名のままにして、[追加 (Add)] をクリックします。



- 10 メチルパルミテートが次に表示されます。

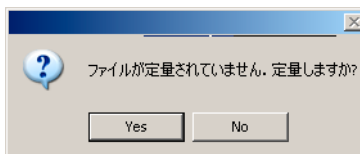
2 定量を理解する

これを内部標準として指定するために、**ISTD** をクリックします。このデモでは、これを内部標準として同定します。内部標準とは、標準ファクタとして利用するために各サンプルに注入する化合物のことで、比較の基礎となります。



ISTD をクリックすると、この化合物が定量データベースに追加され、**定量データベース内の化合物リストの最上位**に配置されます。すべての化合物が内部標準に対して相対的に定量されるように、定量データベース内では化合物よりも内部標準が前になければならないため、これはきわめて重要です。

- 11 [**定量しますか? (Quantitate now?)**] というプロンプトが表示されたら、[**はい (Yes)**] をクリックします。



ファイルが定量されたら、[**キャリブレーションの更新 (Update Calibration)**] ダイアログボックスが表示されます。

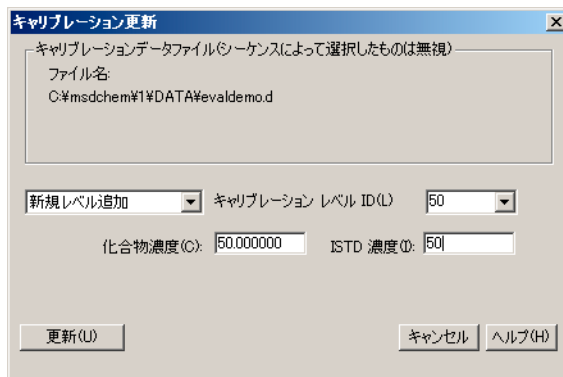
- 12 [**新規レベルの追加 (Add New Level)**] を選択し、以下を入力します。

キャリブレーションレベル ID (Calib Level ID) = 50
これは説明用のラベルとしのみ使用されます。

化合物濃度 (Cmpd Conc) = 50
化合物の濃度。

ISTD 濃度 (ISTD Conc) = 50
内部標準の濃度。

続いて、[更新の実行 (Do Update)] をクリックします。

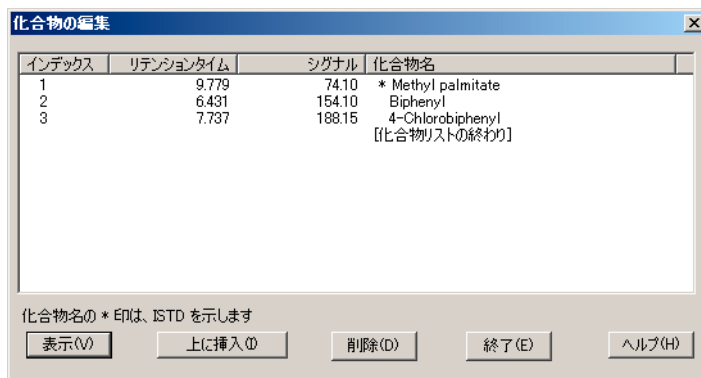


13 [化合物編集 (Edit Compounds)] ボックスが次に表示され、定量データベース内にある化合物全体のリストが表示されます。以下の点に注意してください。

- メチルパルミテート（内部標準として同定した化合物）は、（グループの他の 2 つの化合物よりも後に溶出したにもかかわらず）リストの最上位に移動し、名前にアスタリスクがついています。
- アスタリスク (*) は、内部標準であることを示します。

2 定量を理解する

- 内部標準は、参照元となる化合物よりも *前*にある必要があります。その点以外では、定量データベース内での順序は重要ではありません。



- 14** これで単一レベルの定量データベースのエントリが作成されました。

リストから化合物を選択し、[表示 (View)] をクリックしてページ 1 と 2 で化合物のパラメータを調べます。[化合物編集 (Edit Compounds)] ボックスに戻るには、OK または [キャンセル (Cancel)] をクリックします。

- 15** ダイアログボックスを閉じるには、[終了 (Exit)] をクリックします。

化合物 #4 -- ページ 1

名前 (A) 4-Chlorobiphenyl 濃度単位 (U)

リテンションタイム情報
RT (P) 7.737 RRT 0.791
抽出幅 (O)
- 0.500 + 0.500 最小 (M) 最大 (M)
これは 7.237 ~ 8.237 min
リファレンススペクトル名 (P)

定量に使用されたシグナル
定量シグナル (T) ターゲットイオン
m/z 相対レスポンス 許容範囲 % (C) 相対
Tet (G) 188.15 100.0
Q1 (Q) 152.10 44.60 35.00
Q2 190.15 32.80 35.00
Q3 153.10 18.90 35.00

前 (V) 次 (N) プロット (U) ページ 2 (C) ヘルプ (H)

定量パラメータ
定量タイプ (U) ターゲット化合物
定量方法 (V) 面積

化合物 #4: 4-Chlorobiphenyl (ページ 2)
スペシャル化合物
CAS # (S) 化合物タイプ (C) T
スペシャルレポートパラメータ
サロゲートアmount (Q) 0.000000 マトリックス スパイク アmount (S) 0.000000
低 高 % Dev MDL
マトリックス A (濃度) (M) 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
マトリックス B (濃度) (T) 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
シグナルレベル 最小 (O) 0.000000
MS データベース名 (D)

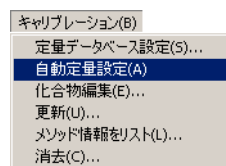
ユーザー定義アイテム (U)
A1 N4 0.000000
A2 N5 0.000000
A3 N6 0.000000
前 (V) 次 (N) ページ 1 (V) ヘルプ (H)

化合物 #4: 4-Chlorobiphenyl (ページ 3)
レベル ID 濃度 (C) レスポンス
50 50000000 18794920.890
レベル ID 濃度 レスポンス
面積補正マス (M) 0.00 補正ファクター (F) 0.000000
加算? 積分パラメータファイル
Tet (T) 参照...
Q1 (Q) 参照...
Q2 参照...
Q3 参照...
前 (V) 次 (N) プロット (U) ページ 1 (V) ページ 2 (C) OK キャンセル ヘルプ (H)

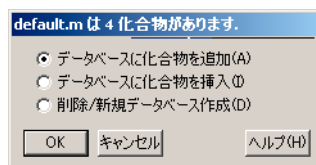
2 定量を理解する

- 16 ここで元に戻り、**ステップ 7** でスキップした化合物を追加します。

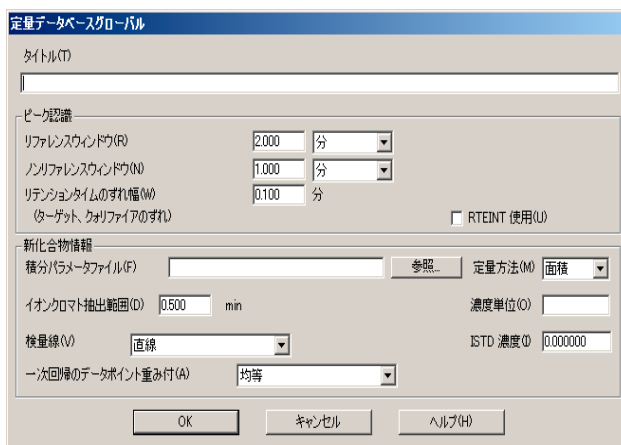
この化合物を定量データベースに挿入するには、まず [**校正 (Calibrate)/ 自動定量設定 (AutoQuant Setup)**] を選択するか、アイコンをクリックします。



- 17 [**データベースに化合物を挿入 (Insert Compounds in Database)**] を選択して、**OK** をクリックします。



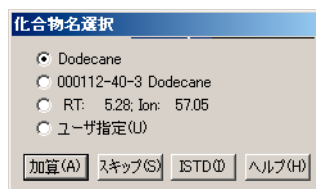
- 18 [**グローバル定量データベース (Quantitation Database Globals)**] ダイアログボックスが表示されたら、パラメータを変更しないでください。



OK をクリックします。ソフトウェアが、サンプルのピークを同定する処理を再び開始します。

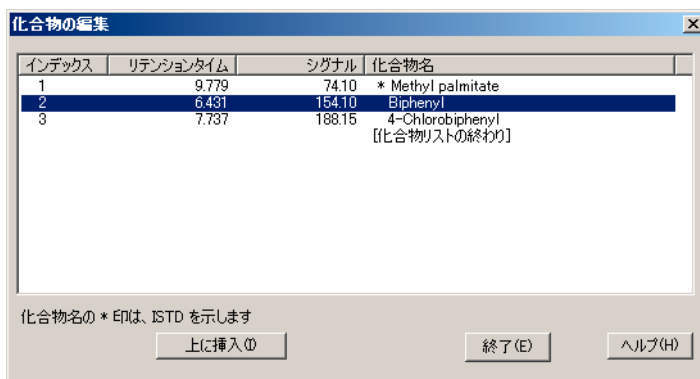
[化合物名選択 (Choose Compound Name)] ダイアログボックスが表示されます。

- 19 ダイアログボックスにドデカンが表示されたら、デフォルト名のままにして [追加 (Add)] をクリックします。



[化合物編集 (Edit Compounds)] ボックスが表示されます。

- 20 ビフェニルを選択し、[上に挿入 (Insert Above)] をクリックして、挿入ポイントを選択します。

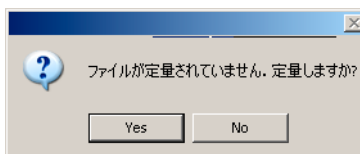


- 21 残りの化合物について、[化合物選択 (Choose Compounds)] ボックスが表示されます。データファイルにある残りの 3 つの化合物のそれぞれについて、化合物名を選択するように要求されたら [スキップ (Skip)] をクリックし、[ピーク入力

2 定量を理解する

を続けますか？ (Continue Peak Entry?)]] に対して [はい (Yes)] をクリックします。

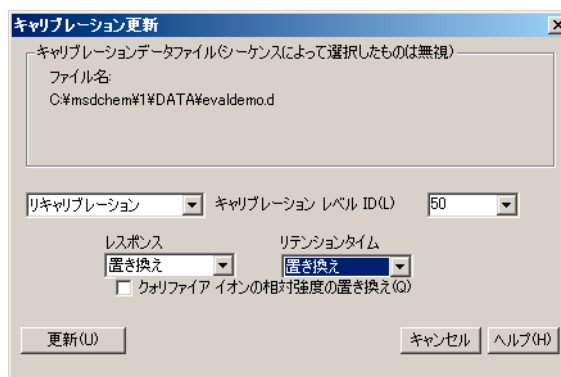
- 22 データベースを定量するかどうか確認されたら、[はい (Yes)] をクリックします。



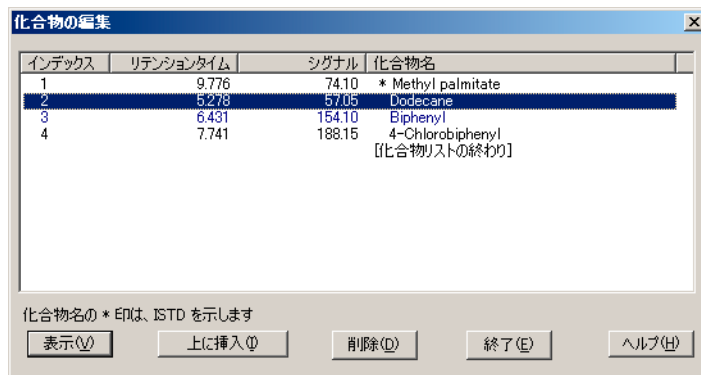
- 23 [キャリブレーションの更新 (Update Calibration)] ダイアログボックスが表示されたら、Responses フィールドと Retention Times フィールドに (ド롭ダウンリストから) [再校正 (Recalibrate)], [置換 (Replace)] を選択します。

Recalibrate により、指定されたレベル ID について、すべての装置レスポンス値とリテンションタイムが、ロードされたデータファイル内で検出された値で更新されます。化合物に対して指定したその他のすべてのエントリが戻されます。

[更新の実行 (Do Update)] をクリックします。



- 24 [化合物編集 (Edit Compounds)] ボックスが表示されたら、**View** をクリックし、ページ 3 で、定量データベースにある 4 つの化合物のそれぞれについて調べます。



インデックス	リテンションタイム	シグナル	化合物名
1	9.776	74.10	* Methyl palmitate
2	5.278	57.05	Dodecane
3	6.431	154.10	Biphenyl
4	7.741	188.15	4-Chlorobiphenyl

化合物名の *印は、ISTD を示します

表示(V) 上に挿入(I) 削除(D) 終了(E) ヘルプ(H)

追加したばかりのドデカンには、濃度値がないことに注意してください。

他の化合物のページ 3 を調べるには、[戻る (Prev)] または [次へ (Next)] をクリックします。他の化合物は、濃度に値 50 が設定されています。

2 定量を理解する

これは、このレベルが最初に作成されたときに（ステップ 12）、グローバルに入力されたものです。

化合物 #2: Dodecane (ページ 3)

レベル ID	濃度 (C)	レスポンス	レベル ID	濃度	レスポンス
50		976863.000			

面積補正マス(M): 0.00 補正ファクター(F): 0.000000

加算? 積分パラメータファイル

Tgt(T)		参照...
Q1 (Q)	☐	参照...
Q2	☐	参照...
Q3	☐	参照...

前(N) 次(N) プロット(L) ページ 1(1) ページ 2(2) OK キャンセル ヘルプ(H)

- 25 レベル 50 について、Concentration フィールドに 50 と入力します。OK をクリックし、[はい (Yes)] をクリックして変更内容を保存します。

化合物 #2: Dodecane (ページ 3)

レベル ID	濃度 (C)	レスポンス	レベル ID	濃度	レスポンス
50	50	975853.000			

面積補正マス (M): 0.00 補正ファクター (F): 0.000000

加算? 積分パラメータファイル

T_g (T) 参照...

Q1 (Q) ☐ 参照...

Q2 ☐ 参照...

Q3 ☐ 参照...

前 (V) 次 (N) プロット (L) ページ 1 (P) ページ 2 (P) OK キャンセル ヘルプ (H)

化合物 #2: Dodecane (ページ 3)

 化合物を更新しますか?

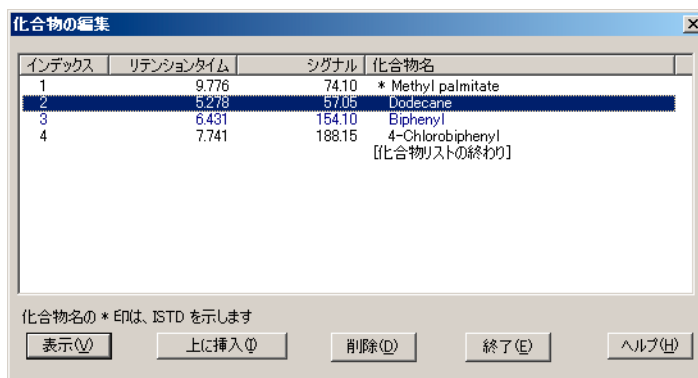
Yes No Cancel

2 定量を理解する

26 [化合物編集 (Edit Compounds)] 画面に戻りました。定量データベースが更新され、使用できる状態になっています。

処理を終了するには、[終了 (Exit)] をクリックします。

ビフェニル、ドデカン、クロロビフェニル、およびメチルパルミテートの同定と定量が可能な定量データベースを含むメソッドが作成できました。

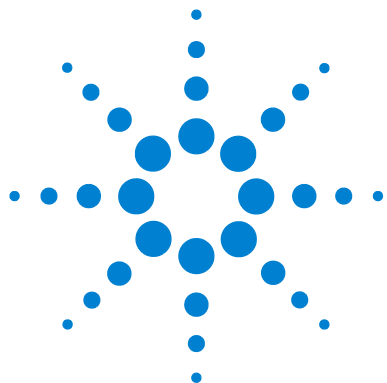


1 これでチュートリアルは終了です。必要な化合物を使用して独自の定量データベースを簡単にセットアップできるようになりました。

注

GC/MSD ChemStation の操作方法に関する詳細な手順については、オンラインヘルプを参照してください。

ハードウェアの操作、メンテナンス、およびトラブルシューティングの詳細については、装置に付属している CD-ROM を参照してください。



3

Custom Reports を使用する

Custom Reports	98
レポートテンプレートの作成	100
レポートのカスタマイズ	104
セル、行、列の選択	110
レポートの印刷	112
Custom Reports データベースの作成	115
複数のデータファイルの選択	119
グラフの表示と印刷	121
Custom Reports メニュー	123
Custom Reports ツールバーボタン	124



Custom Reports

概要

Custom Reports を使用すると、データ分析の定量結果をカスタムレポートスプレッドシートプログラムに転送し、独自のカスタムレポートを作成できます。

また、複数のサンプルからカスタムレポートデータベースをセットアップし、そのデータのグラフを表示および印刷できます。

レポートテンプレートまたはデータベースを作成し、メソッドにリンクすれば、メソッドを実行するたびに自動的にレポートを印刷したり、カスタムレポートデータベースを更新したりできます。

カスタムレポートは定量されたデータに対してのみ使用できます。

はじめに

この章では、カスタムレポートテンプレートまたはデータベースを作成するための基本的な手順を説明します。これは、Custom Reports ソフトウェアに習熟するための第一歩となります。

慣れたら、このソフトウェアでいろいろと試してみてください。編集機能や書式設定機能を使用してみましょう。この機能とその仕組みの詳細については、オンラインヘルプを参照してください。

Custom Reports ソフトウェアの開始

Data Analysis 画面で、**Quantitate/Custom Reports** をクリックするか、カスタムレポートアイコンをクリックします。



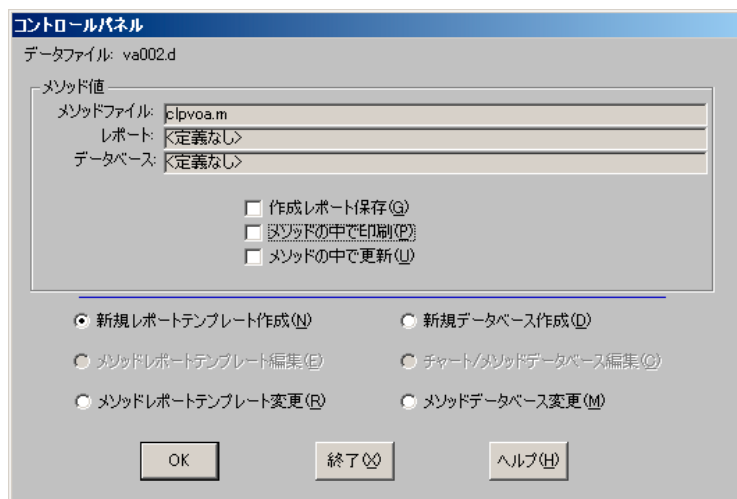
現在のメソッドに定量データベースがない場合、またはデータファイルがロードされていない場合は、デフォルト値を使用するかどうか確認されます。

OK をクリックします。[**カスタムレポート用紙サイズ (Custom Reports Paper Size)**] ボックスが次に表示されます。用紙サイズを選択して **OK** をクリックします。

レポートテンプレートの作成

Custom Reports ソフトウェアを開始すると、数秒後にコントロールパネル（下図参照）が表示されます。

- 1 [新規レポートテンプレートの作成 (Create New Report Template)] を選択して、OK をクリックします。



Create New Report
Template

Report ウィザードを使用して、カスタムレポートテンプレートを作成できます。

Edit Method Report
Template

カスタムレポートテンプレートを修正できます。

Change Method Report
Template

メソッドで使用するレポートテンプレートを選択できます。

Create New Database

Database ウィザードを使用して、カスタムレポートデータベースを作成できます。

Chart/Edit Method
Database

グラフの表示とカスタムレポートデータベースの修正ができます。

Change Method Database

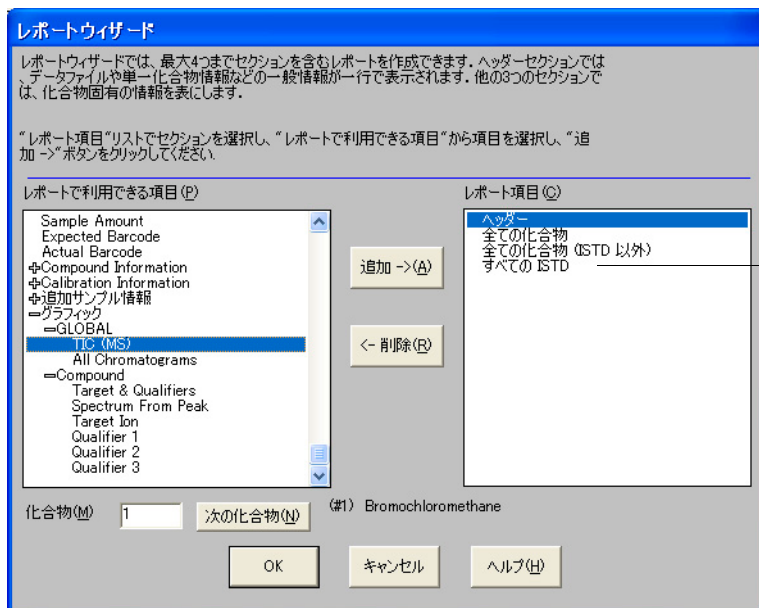
メソッドで使用するデータベースを選択できます。

- 2 レポートウィザードが表示されたら、右側の [**レポート項目 (Report Contents)**] リストから項目を選択します。左側のパネルの [**レポート項目選択 (Possible Items for Report)**] に、レポートテンプレートに選択可能な全項目がリストされます。右側のパネルの [**レポート項目 (Report Contents)**] に、選択した項目がリストされます。
- 3 左側の [**レポート項目選択 (Possible Items for Report)**] リストから項目を選択します。
- 4 選択した項目をダブルクリックするか、[**追加 (Add)**] をクリックします。選択した項目が、右側のリストされた項目の下に追加されます。
- 5 ステップ 1 ~ 4 を繰り返してレポートテンプレートのすべての項目を追加します。[**削除 (Remove)**] を使用して、右側の [**レポート項目 (Report Contents)**] リストから項目を削除できます。
- 6 左側の [**レポート項目選択 (Possible Items for Report)**] リストをスクロールダウンすると、レポートテンプレートに追加できる Graphics 項目があります。Graphics の下にある Globals 項目が [**レポート項目ヘッダー (Reports Content Header)**] セクションに追加されます。一方、化合物項目は、[**すべての化合物 (All Compound)**] セクションに追加されます。
- 7 レポートウィザードを使用したレポート項目の選択が終了したら、**OK** をクリックします。

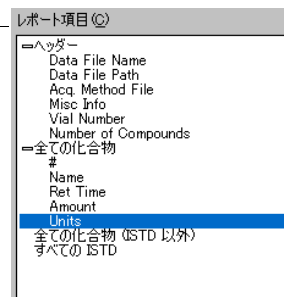
選択内容に基づいてレポートテンプレートが作成されます。

- 8 カスタムレポート Sheet1 が表示されます (下図参照)。ここで、[**ファイル (File)/保存 (Save)**] を選択するか、[**保存 (Save)**] アイコンをクリックして、レポートテンプレートを保存できます。
- 9 [**メソッドとのリンク (Link with Method)**] ボックスが次に表示されます。このダイアログボックスによって、このテンプレートがメソッドのデフォルトとして選択され、メソッドが実行されるたびに自動的に印刷されます。
- 10 [**ファイル (File)/終了 (Exit)**] を選択して Custom Reports プログラムを終了します。

3 Custom Reports を使用する



例



+ サブ項目リストを開くには
プラス記号をクリックする

- サブ項目リストを閉じるには
マイナス記号をクリックする

レポート項目 (Q)

- ヘッダー
 - Data File Name
 - Data File Path
 - Acq. Method File
 - Misc Info
 - Vial Number
 - Number of Compounds
- 全ての化合物
 - #
 - Name
 - Ret Time
 - Amount
 - Units
- 全ての化合物 (STD 以外)
- すべての STD

カスタムレポート - Sheet1

ファイル(F) 編集(E) フォーマット(O) 表示(V) ツール(T) ヘルプ(H)

A1							
	A	B	C	D	E	F	G
1							
2			Data File Name	DLWV002.D			
3			Data File Path	D:\ENV\DEMO\VOADATA\			
4			Acq. Method File	RTE method: DANNY			
5			Misc Info				
6			Vial Number				
7			Number of Compounds	40.			
8							
9	#	Name	Ret Time	Amount	Units		
10	1)	Bromochloromethane	7.95	50.00	ug/l		
11	2)	Chloromethane	0.94	56.44	ug/l		
12	3)	Bromomethane	1.59	50.33	ug/l		
13	4)	Vinyl Chloride	2.06	52.84	ug/l		
14	5)	Chloroethane	2.80	55.83	ug/l		
15	6)	Methylene Chloride	4.66	52.92	ug/l		
16	7)	Acetone	5.28	58.84	ug/l		
17	8)	Carbon Disulfide	6.05	49.70	ug/l		
18	9)	1,1-Dichloroethene	7.41	52.35	ug/l		
19	10)	1,1-Dichloroethane	8.73	50.53	ug/l		
20	11)	1,2-Dichloroethene (total)	9.54	52.79	ug/l		
21	12)	Chloroform	10.16	51.17	ug/l		

Sheet1

レポートのカスタマイズ

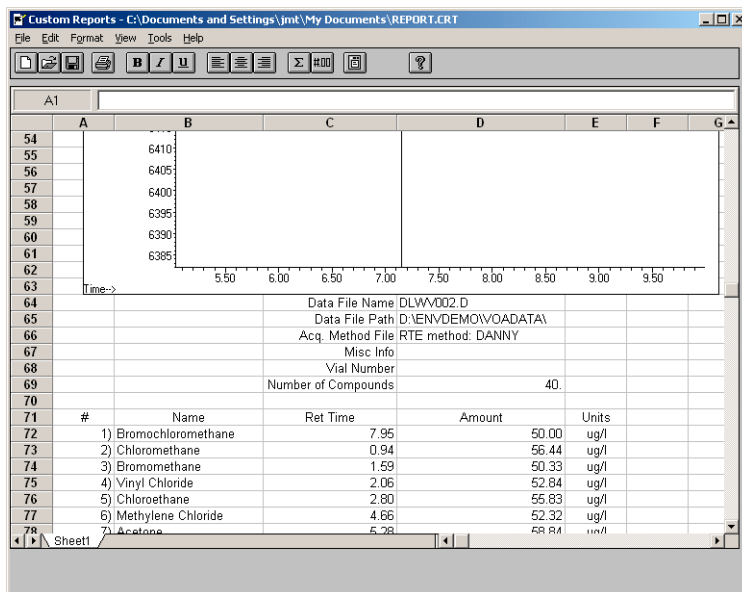
レポートの編集

- 1 [定量 (Quantitate) / カスタムレポート (Custom Reports)] を選択するか、カスタムレポート (Custom Report) アイコンをクリックします。Control Panel が表示されます。コントロールパネルで、[メソッドレポートテンプレート編集 (Edit Method Report Template) <report.CRT>] を選択します。Report under Method Values が表示されます (<report.CRT> は修正するレポートテンプレートの名前)。



必要とするレポートの名前が表示されない場合、Control Panel で [メソッドレポートテンプレート変更 (Change Method Report Template)] を選択し、必要なレポートを選択します。Control Panel が再表示されたら、[メソッドレポートテンプレート編集 (Edit Method Report Template)] を選択します。

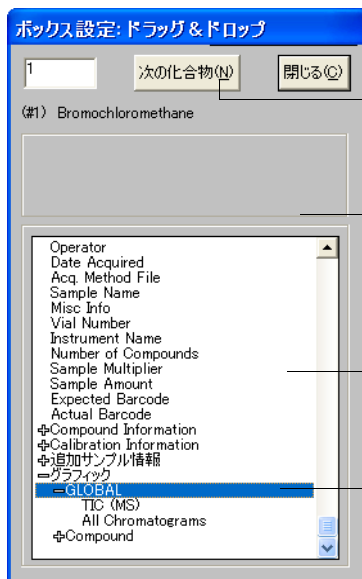
OK をクリックして、レポートテンプレート <report.CRT> を表示します。



- 2 スプレッドシートのすべてのセルを変更できます。変更するには、[編集ボックス (Edit Box)] (下図参照) を使用します。レポートを定期的に保存して変更内容が失われないようにしてください。
- 3 このダイアログボックスにアクセスするには、[表示 (View)/編集ボックス (Edit Box)] を選択するか、ツールバーの [編集ボックス (Edit Box)] アイコンをクリックします。

3 Custom Reports を使用する

4 変更が終わったら、レポートテンプレートを保存します。



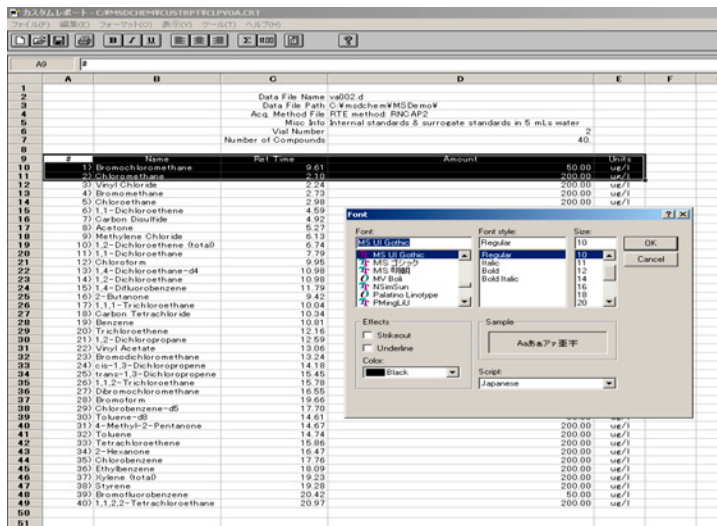
Next Cmpd（次の化合物）ボタンを使用するか、番号を入力して、他の化合物を表示します。

選択された項目の説明と現在の値が表示されます。

項目を選択し、その値をスプレッドシートのセルにドラッグできます。

レポートにグラフィックを追加できます。

レポートの書式設定



レポートテンプレートを作成するとき、レポートの書式は自動的に設定されます。マウス操作またはツールバーを使用して、Format メニューからレポートの書式をカスタマイズできます。レポートテンプレートが保存される時、書式の変更も保存されます。

- 1 書式を設定するセル（複数可）を選択します。
- 2 以下のいずれかの方法で書式を選択します。
 - [フォーマット (Format)] メニューから項目を選択します。ダイアログボックスで選択し、OK をクリックします。
 - ツールバーの書式ボタンをクリックします（太字や左揃えなど）。
 - 列の幅または行の高さを調整します（後述）。
- 3 レポートが希望する書式になるまで続けます。
- 4 定期的にレポートを保存して書式の変更が失われないようにしてください。終了したらレポートテンプレートを保存します。

行の高さまたは列の幅の調整

行の高さを調整する

- 1 カーソルを行番号ボックスの最下部近くにおきます。カーソルが変わります。
- 2 クリックして上下にドラッグし、行を希望する高さに調整します。

列の幅を調節する

- 1 カーソルを列文字の近くに置きます。カーソルが変わります。
- 2 クリックして上下にドラッグし、列を希望する幅に調整します。

複数の行を同じ高さにする

- 1 行番号をクリックアンドドラッグして複数の行を選択します。
- 2 いずれかの行の高さを調整すると、他のすべての行も同じ高さに設定されます。

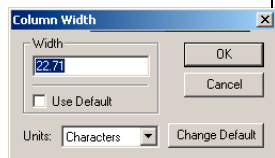
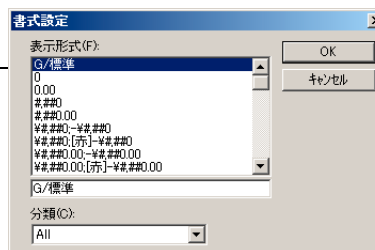
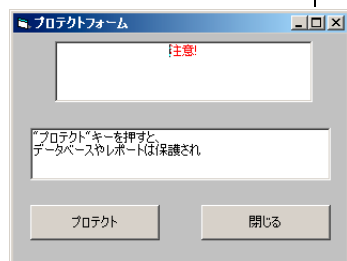
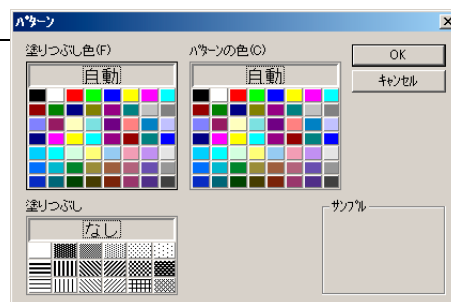
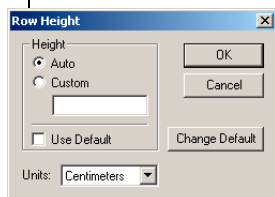
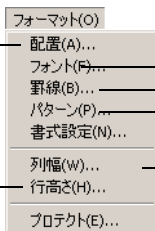
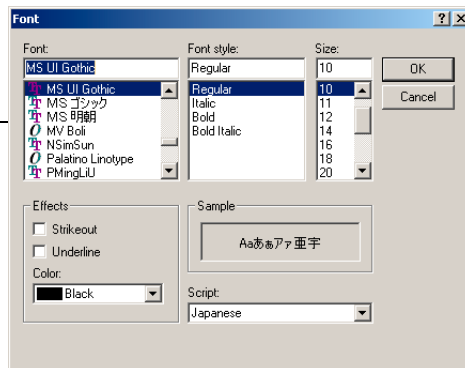
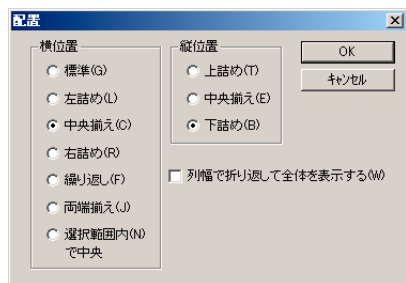
複数の列を同じ幅にする

- 1 列文字をクリックアンドドラッグし複数の列を選択します。
- 2 いずれかの列の幅を調整すると、他のすべての列も同じ幅に設定されます。

レポートの保存

- 1 [ファイル (File)/ 保存 (Save)] を選択するか、ツールバーの [保存 (Save)] をクリックします。
- 2 ファイル名を入力し (拡張子 .CRT を入力しないでください)、[保存 (Save)] をクリックします。[メソッドとのリンク (Link with Method)] ダイアログボックスが次に表示されます。このダイアログボックスによって、このテンプレートがメソッドのデフォルトとして選択され、メソッドが実行されるたびに自動的に印刷されるようにできます。
- 3 適切なチェックボックスを選択 / 選択解除し、OK をクリックします。
- 4 [ファイル (File)/ 終了 (Exit)] を選択するか、タイトルバーの [閉じる (Close)] をクリックして Custom Reports を終了します。

フォーマット (Format) メニュー



セル、行、列の選択

セルのグループを選択する

スプレッドシート内でクリックアンドドラッグし、希望するセルのグループを選択します。

行または列を選択する

行番号または列文字をクリックします。

複数の行または列を選択する

行番号または列文字をクリックアンドドラッグします。

複数の連続していない単体セルを選択する

[Ctrl] を押したまま、セルをクリックします。

複数の連続していない行または列を選択する

[Ctrl] を押したまま、行番号または列文字をクリックします。

複数の連続する項目を選択する

選択対象の最初の項目（セル、列、または行）をクリックし、[Shift] を押したまま、グループの最後の項目をクリックします。最初と最後の項目の間にあるすべての項目が選択されます。

列文字
スプレッドシート
全体を選択するに
はここをクリック
します。
行番号
スプレッドシート
セル

#	Name	Ret. Time	Amount	Units
10	10 Bromochloromethane	9.81	50.00	ug/l
11	20 Chloromethane	2.10	200.00	ug/l
12	30 Vinyl Chloride	2.04	200.00	ug/l
13	40 Bromomethane	2.70	200.00	ug/l
14	50 Chloroethane	2.99	200.00	ug/l
15	60 1,1-Dichloroethane	4.59	200.00	ug/l
16	70 Carbon Dioxide	4.92	200.22	ug/l
17	80 Acetone	5.27	200.00	ug/l
18	90 Methylene Chloride	6.13	200.00	ug/l
19	100 1,2-Dichloroethane Total	6.74	200.00	ug/l
20	110 1,1-Dichloroethane	7.79	200.00	ug/l
21	120 Chloroform	9.95	200.00	ug/l
22	130 1,4-Dichlorobenzene-d6	10.98	50.00	ug/l
23	140 1,2-Dichloroethane	10.98	200.00	ug/l
24	150 1,4-Difluorobenzene	11.79	50.00	ug/l
25	160 2-Methanol	8.42	200.00	ug/l
26	170 1,1,1-Trichloroethane	10.04	200.00	ug/l
27	180 Carbon Tetrachloride	10.34	199.85	ug/l
28	190 Benzene	10.91	200.00	ug/l
29	200 Trichloroethane	12.16	200.00	ug/l
30	210 1,2-Dichloropropane	12.59	200.00	ug/l
31	220 Vinyl Acetate	13.09	200.00	ug/l
32	230 Bromodichloromethane	13.24	200.00	ug/l
33	240 cis-1,2-Dichloropropane	14.18	200.00	ug/l
34	250 trans-1,2-Dichloropropane	15.45	200.00	ug/l
35	260 1,2-Trichloroethane	15.78	200.00	ug/l
36	270 Dibromodichloromethane	16.85	200.00	ug/l
37	280 Bromoform	19.66	200.00	ug/l
38	290 Chlorobenzene-d5	17.70	50.00	ug/l
39	300 Toluene-d8	14.81	50.00	ug/l
40	310 4-Methyl-2-Pentanone	14.67	200.00	ug/l
41	320 Toluene	14.74	200.00	ug/l
42	330 Tetrahydrofuran	15.86	200.00	ug/l
43	340 2-Heptanone	16.47	200.00	ug/l
44	350 Chlorobenzene	17.73	200.00	ug/l
45	360 Diisobutylene	18.09	200.00	ug/l
46	370 Xylene Total	19.20	200.00	ug/l
47	380 Styrene	19.29	200.00	ug/l
48	390 Bromodifluorobenzene	20.42	50.00	ug/l
49	400 1,1,2,2-Tetrachloroethane	20.97	200.00	ug/l

レポートの印刷

レポートテンプレートの作成（またはロード）

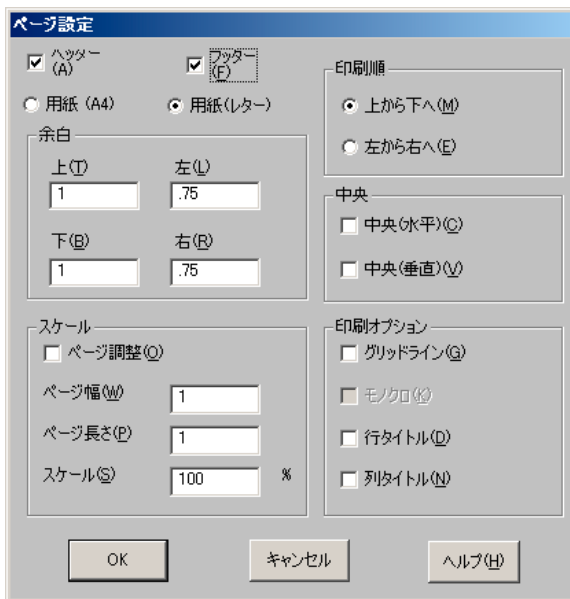
印刷する前にレポートをプレビューする

- 1 [ファイル (File)/印刷プレビュー (Print Preview)] を選択します。レポートがプレビューパネルに表示され、印刷したときにどのように見えるかを確認できます。
- 2 ページ間を移動するには、[次ページ (Next Page)] および [前ページ (Prev Page)] を使用します。
- 3 [印刷 (Print)] をクリックします。プレビューパネルが閉じて、レポートが印刷されます。

レポートを印刷する

- 1 [ファイル (File)/印刷 (Print)] を選択するか、ツールバーの [印刷 (Print)] をクリックします。[印刷 (Print)] ダイアログボックスが表示されます。
- 2 印刷オプション（印刷範囲、部数、印刷品質）を選択し、OK をクリックします。

〔ファイル (File)/ ページ設定 (Page Setup)〕ダイアログボックスを使用して、ページの印刷方法を設定します（詳細については、〔ヘルプ (Help)〕をクリックしてください）。



レポートを自動的に印刷する

メソッドが実行されたときにレポートが自動的に印刷されるようにセットアップするには、以下の 2 つの方法があります。

- レポートテンプレートを作成（またはロード）し、コントロールパネルの〔メソッド値 (Method Values)〕セクションで〔メソッドの中で印刷 (Print as part of Method)〕を選択します。
- レポートテンプレートを保存すると、〔メソッドとのリンク (Link with Method)〕ダイアログボックスが表示されます。〔メソッド実行の中で レポートを印刷 (Print Report as part of the Run Method)〕を選択し、OK をクリックします。

複数のレポートを自動的に印刷する

- 1 レポートテンプレートを作成（またはロード）します。
- 2 [ファイル (File)/ 複数ファイル選択 (Multiple File Select)] を選択します。[複数ファイル選択 (Multiple File Select)] ダイアログボックスが表示されます。
- 3 データファイルがあるディレクトリを選択します（まだ選択されていない場合）。
- 4 印刷するデータファイルを選択します。
 - データファイル名を選択します。
 - 選択したファイルをダブルクリックします（または右向き矢印をクリックします）。
 - [選択ファイル (Files Selected for Processing)] セクションにデータファイルすべてがリストされるまで繰り返します。

注

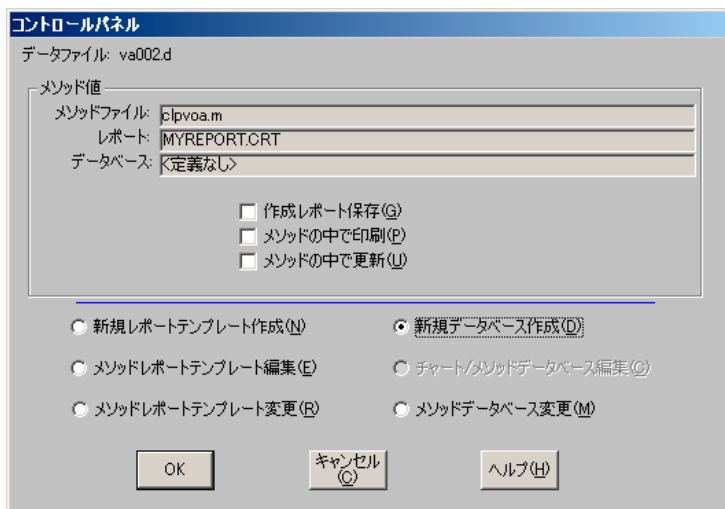
ファイルを個別に選択することも、Windows 標準のファイル選択方法を使用してファイルをグループとして選択することもできます。

- 5 OK をクリックします。データファイルは、リストされている順序で現在のレポートテンプレートを使用して印刷されます。

Custom Reports データベースの作成

始める前に

- ・ [データ解析 (Data Analysis)] 画面で、[定量 (Quantitate)/ カスタムレポート (Custom Reports)] を選択します。
- ・ 現在のメソッドに定量データベースがない場合、またはデータファイルがロードされていない場合は、デフォルト値を使用するかどうか確認されます。[はい (Yes)] をクリックすると、コントロールパネルが表示されます (下図参照)。



データベースの作成手順

- 1 コントロールパネルで [新規データベース作成 (Create New Database)] を選択し、OK をクリックします。
- 2 データベースウィザードが表示されます。左側の [データベース項目選択 (Possible Item for Database)] に、カスタムレポートのデータベース内容として選択可能な項目がすべてリストされます。右側の [データベース項目 (Database

3 Custom Reports を使用する

Contents)) に、カスタムレポートデータベースに組み込むように選択された項目がすべてリストされます。

データベースウィザード

データベースウィザードでは、最大 250 列までのデータベースを作成できます。データベースは、各データファイルからの結果を簡単に比較するための方法です。入力されたすべての番号についてチャートは自動的に作成されます。

“データベース項目”リストでセクションを選択し、“データベースで利用できる項目”から項目を選択し、“追加 →(A)” ボタンをクリックしてください。

注意: 測定データとデータのファイル名の項目では正しいデータベース操作が必要であり、自動的にデータベースに挿入されます。

データベースで利用できる項目 (P)

Data File Path
Operator
Acq. Method File
Sample Name
Misc Info
Vial Number
Instrument Name
Number of Compounds
Sample Multiplier
Sample Amount
Expected Barcode
Actual Barcode
⊕Compound Information
⊕Calibration Information
⊕追加サンプル情報

追加 →(A)

← 削除 (R)

データベース項目 (Q)

ヘッダー
全ての化合物
全ての化合物 (STD 以外)
すべての STD

化合物 (M) 1 次の化合物 (N) Bromochloromethane

OK キャンセル ヘルプ (H)

例

データベース項目 (Q)

⇒ヘッダー
Acq. Method File
Sample Name
⇒全ての化合物
Ret Time
Amount
全ての化合物 (STD 以外)
すべての STD

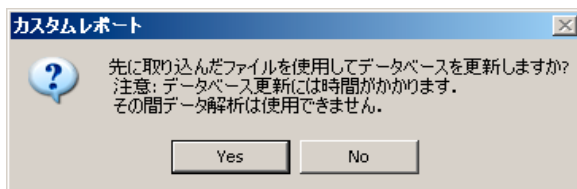
+ サブ項目リストを開くには
プラス記号をクリックする

- サブ項目リストを閉じるには
マイナス記号をクリックする

- 右側のリストから [データベース項目 (Database Contents)] のいずれかのセクションを選択します。
- 左側の [データベース項目選択 (Possible Item for Database)] リストから項目を選択します。
- 選択した項目をダブルクリックするか、[追加 (Add)] をクリックします。選択した項目が、右側のリストされた項目の下に追加されます。
- 項目の選択が終わったら、OK をクリックします。

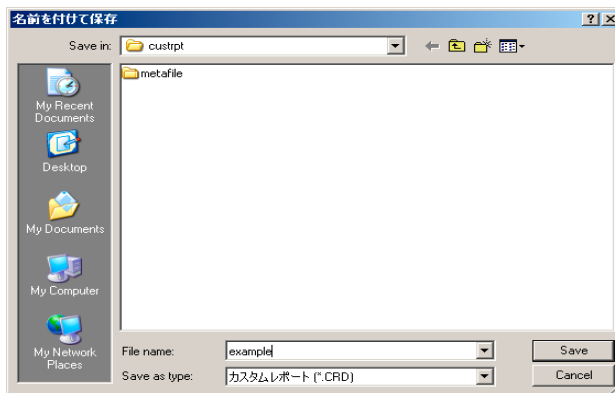
データベースウィザードで OK をクリックすると、次のプロン

プトが表示されます。



データベースを更新しない場合は、[いいえ (No)] をクリックします。コントロールパネルが表示されます。

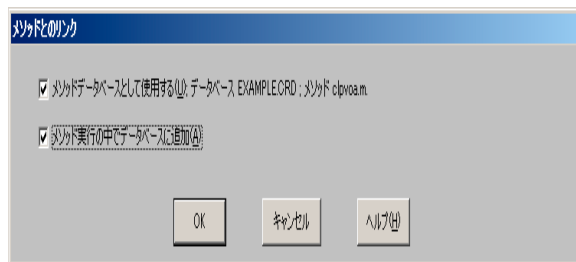
- 3 上記以外の場合、データベースを更新するには、以下を実行します。
 - [はい (Yes)] をクリックします。[複数ファイル選択 (Multiple File Select)] ダイアログボックスが表示されます。データベースに追加するデータファイルを選択し、OK をクリックします。
- 4 [名前を付けて保存 (Save As)] ダイアログボックスが表示されたら、ファイル名を入力して [保存 (Save)] をクリックします。



- 5 [メソッドとのリンク (Link With Method)] ダイアログボックスが表示されたら、適切なチェックボックスを選択 / 選択

3 Custom Reports を使用する

解除して **OK** をクリックします。これでデータベースが更新されました。

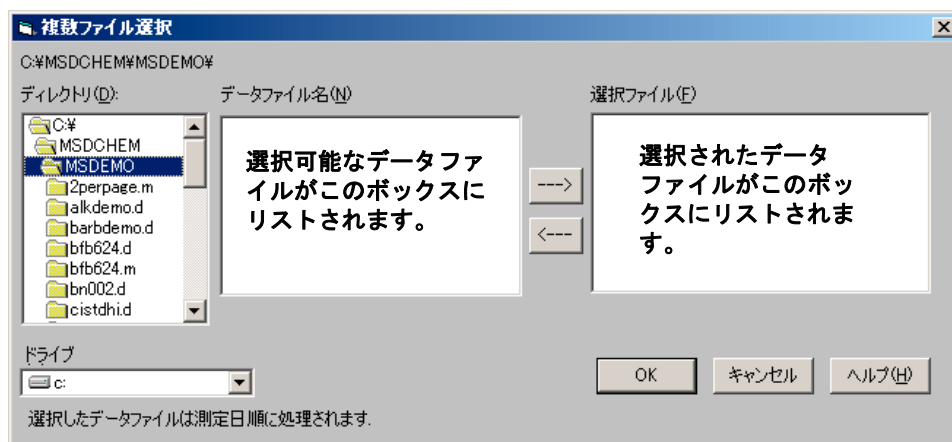


複数のデータファイルの選択

複数のレポートを印刷したり、これ以前に取得した複数のデータファイルをデータベースにロードしたりする場合、このダイアログボックスを使用します。

このダイアログボックスにアクセスするには、[ファイル (File)/ 複数ファイル選択 (Multiple File Select)] を選択します。

- 1 データファイルのあるディレクトリを選択します。
- 2 [データファイル名 (Data File Name)] ボックスで使用するデータファイルを選択するか、右向き矢印をクリックします (またはファイル名をダブルクリックします)。
- 3 OK をクリックして選択したデータファイル进行处理します。



連続する複数ファイルの選択

選択対象の最初のファイルをクリックし、グループの最後のファイルまでマウスをドラッグします。

または

選択対象の最初のファイルをクリックします。[Shift] を押したまま、グループの最後のファイルをクリックします。

連続していない複数ファイルの選択

[Ctrl] を押したまま、各ファイルをクリックします。

選択の取り消し

[Ctrl] を押したまま、選択されたファイルをクリックします。

レポートでは

選択されたデータファイルは、現在のレポートテンプレートを
使用して印刷されます。レポートはリストされたファイルの順
序で印刷されます。

データベースでは

選択されたデータファイルは、現在のデータベースにロードさ
れます。ファイルは、データベースに追加されたときに取り込
まれた日付の時系列で自動的にソートされます。

グラフの表示と印刷

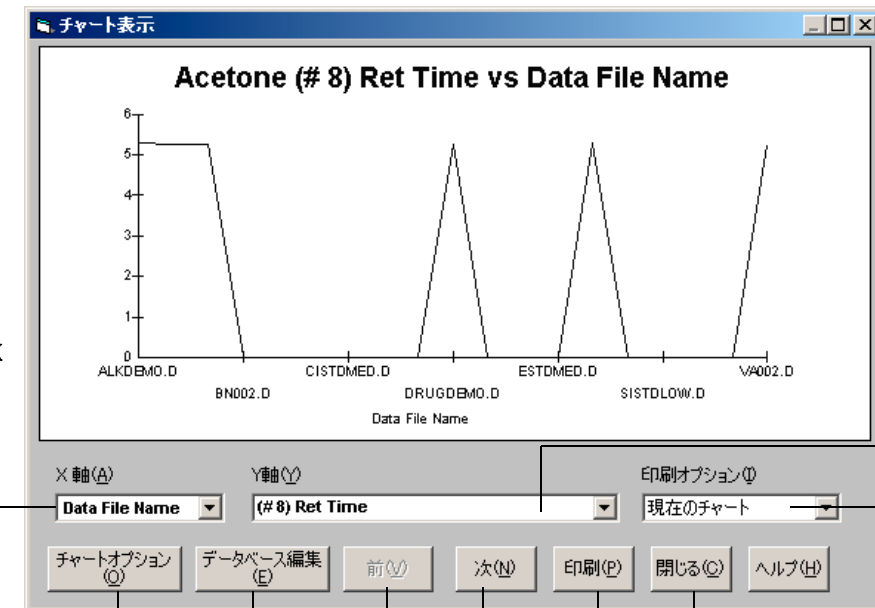
Control Panel で [チャート / メソッドデータベース編集 (Charts/Edit Method Database)] を選択すると、以下のダイアログボックスが表示されます。カスタムレポートのツールバーから [チャート (Charts)] をクリックするか、[チャート (Charts) / チャート表示 (View Charts)] を選択します。このダイアログボックスを使用して、データベースにあるデータのグラフを表示および印刷します。

注

[個別チャートオプション (Individual Chart Options)] ダイアログボックスを表示するには、グラフをクリックします。

3 Custom Reports を使用する

グラフの X 軸にする項目を選択します。デフォルトはデータファイル名とデータ測定日です。



[チャートオプション] ダイアログボックスを表示します。

Y 軸選択ボックスにリストされている前または次のグラフに移動します。

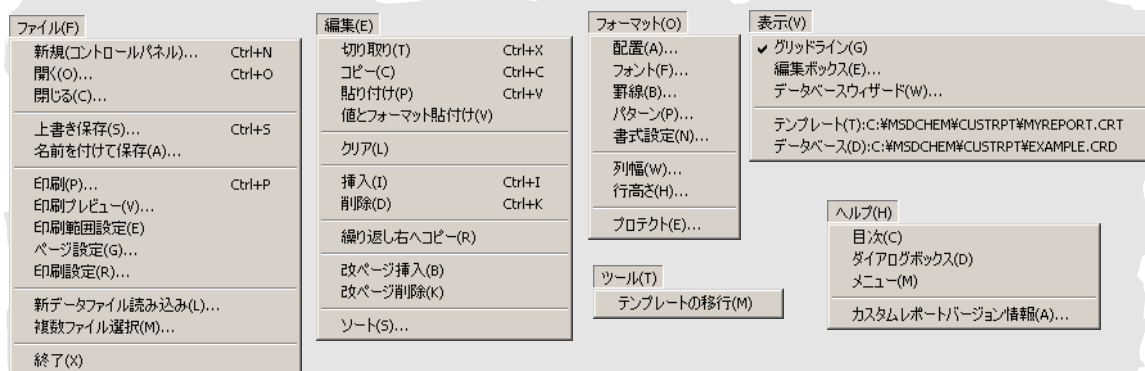
[チャート表示] ダイアログボックスを終了し、現在のデータベースを編集できます。

現在のグループまたは印刷オプションで指定されたすべてのグラフを印刷します。

グラフの Y 軸にする項目を選択します (数値項目のみ使用できます)。

現在のグラフ、またはデータベース内のすべてのグラフを印刷できます。

Custom Reports メニュー



Custom Reports ツールバーボタン



コントロールパネルを表示します。



カスタムレポートテンプレートファイル (.crt) またはデータベースファイル (.crd) を開きます。



レポートまたはデータベースを保存し、[メソッドとのリンク (Link With Method)] ダイアログボックスを表示します。



レポートまたはデータベースを印刷します。



選択されたテキストに対して太字書式を適用します (または除去します)。



選択されたテキストに対して斜体書式を適用します (または除去します)。



選択されたテキストに対して下線書式を適用します (または除去します)。



選択されたセルの内容を左揃えにします。



選択されたセルの内容を中央揃えにします。



選択されたセルの内容を右揃えにします。



選択されたセルに、それより上のセルの合計を計算する式を挿入します。



[カスタムフォーマット (Custom Format)] ダイアログボックスを表示します。



[編集 (Edit)] ボックス: [ドラッグ&ドロップ (Drag & Drop)] ダイアログボックスを表示します。



[チャート表示 (View Charts)] ダイアログボックスを表示します。このボタンはデータベースのみに使用できます。



オンラインヘルプの [目次 (Contents)] ページを表示します。



Agilent Technologies

© Agilent Technologies, Inc.

Printed in USA, 6 月 2005



G1701-96056