

Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition

コンセプトとワークフロー



Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2010-2012,
2013

本マニュアル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式や方法（電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む）においても、禁止されています。

マニュアル番号

M8301-96014

エディション

01/2013

Printed in Germany

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

本製品は、システムが適切な規制機関で登録を受け関連する規制に準拠している場合、ビットロ診断システムのコンポーネントとして使用できます。それ以外の場合は、一般的な実験用途でのみ使用できます。

ソフトウェアリビジョン

本書の内容は Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition のリビジョン C.01.05 に対応しています。

Microsoft ® は、Microsoft Corporation の米国の登録商標です。

保証

このマニュアルに含まれる内容は「現状のまま」提供されるもので、将来のエディションにおいて予告なく変更されることがあります。また、Agilent は、適用される法律によって最大限に許可される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報に関して、商品性および特定の目的に対する適合性の暗黙の保証を含みそれに限定されないすべての保証を明示的か暗黙的かを問わず一切いたしません。Agilent は、このマニュアルまたはそれに含まれる情報の所有、使用、または実行に付随する過誤、または偶然的または間接的な損害に対する責任を一切負わないものとし、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の文書の条項と矛盾する場合は、別の契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

このマニュアルで説明され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いて提供され、そのライセンスの条項に従って使用またはコピーできます。

安全に関する注意

注意

注意は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、製品の損害または重要なデータの損失にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。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、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、人身への傷害または死亡にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。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

本書では、Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition の概念を説明します。以下では、「ChemStation」という用語は常に Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition を意味します。

このマニュアルでは、ラボの生産性を高めるための OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.05 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を説明します。

1 基本概念 OpenLAB CDS ChemStation Edition

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 ChemStation の重要な部分であり、この章ではそのコンセプトについて詳細に説明します。

3 データ取り込み

この章では、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 ランキューとキュープラン

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、または一時停止をランキューに追加する方法について説明します。

6 データ解析とレビューの概念

この章では、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。OpenLAB CDS ChemStation Edition では、これらのオプションは 2 つの異なるビューとして使用できます。

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 レポート作成

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。

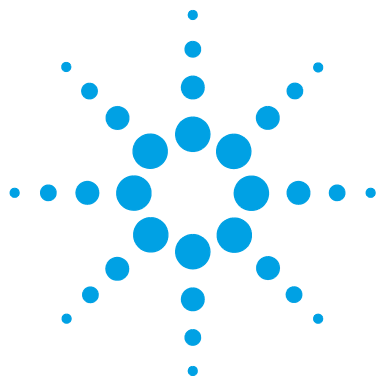
9 CE 特有のコンセプトと機能

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	基本概念 OpenLAB CDS ChemStation Edition	7
	用語と略語	8
	はじめに	9
	リモート機器コントロール	10
	ChemStation ソフトウェアについて	13
	ChemStation データ構造	34
2	メソッドの使用	39
	メソッドの詳細	41
	メソッドの各部分	42
	メソッドのタイプ	44
	メソッドの作成	46
	メソッドの編集	47
	メソッド管理	51
	メソッドの実行時に起こる事柄	60
3	データ取り込み	67
	データ取り込みとは	68
	オンラインモニタ	71
	ログブック	72
	ステータス情報	73
4	自動化 / シーケンス	75
	自動化とは	77
	シーケンスおよびシーケンステンプレートとは	78
	シーケンスパラメータ	79
	シーケンステーブル	80
	シーケンスの作成 (シーケンスとシーケンステンプレート)	81
	イージューシーケンス	83
	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)	88
	シーケンスログファイル	99
	シーケンスの実行時に起こる事柄	100

シーケンスデータファイルの構造	102
ポストシーケンス処理	112
自動リキャリブレーション	114
リキャリブレーションの指定	115
シーケンスの種類	118
5 ランキューとキュープラン	133
サポートされているワークフロー	134
ランキューの使用	136
キュープランの使用	139
6 データ解析とレビューの概念	141
データ解析	142
レビュー	157
7 キャリブレーション	161
用語の定義	162
キャリブレーションの種類	163
キャリブレーションテーブル	170
ピーク和	171
未知サンプル	172
リキャリブレーション	173
8 レポート作成	177
レポートとは	178
クラシックおよびインテリジェントレポート	179
インテリジェントレポート	180
クラシックレポート	189
9 CE 特有のコンセプトと機能	201
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	202
ピークトップタイプ	205
キャリブレーションタイプ	206
CE-MSD	209
CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ	210



1

基本概念 OpenLAB CDS ChemStation Edition

用語と略語	8
はじめに	9
リモート機器コントロール	10
ChemStation ソフトウェアについて	13
オペレーティングシステム	13
中央データ記憶領域	13
メソッドおよびシーケンス	14
システムコンフィグレーション	14
取込メソッドビューアー	14
メソッドのダウンロードオプション	15
データモデル	16
ファイルの命名規則	16
ソフトウェアユーザーインターフェイス	20
データ取込	23
データ解析	24
レポート作成	27
ユーティリティと互換性	27
カスタマイズ	28
自動化	28
ランキューとキュープラン	30
GLP	30
ChemStation データ構造	34
ChemStation データ構造	34

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。



用語と略語

表 1 この文書で使用される用語と略語

用語	説明
ChemStation	OpenLAB CDS ChemStation エディション
EZChrom	OpenLAB CDS EZChrom エディション
Data Store	OpenLAB Data Store
ECM	OpenLAB Enterprise Content Manager
RC .Net	RapidControl .Net インターフェース

はじめに

Agilent OpenLAB は、オープンアーキテクチャと再利用可能な標準化されたインタフェースを提供する、ラボソフトウェアのポートフォリオです。科学的データのライフサイクルの各ステップについて、多様な OpenLAB ソリューションを用意しています。

- クロマトグラフデータシステム (CDS)

OpenLAB CDS は EZChrom エディションまたは ChemStation エディションとして使用できます。本書では ChemStation エディションについて説明します。

- エンタープライズコンテンツマネージャー (ECM)

- Electronic Lab Notebook (ELN)

OpenLAB CDS には、Agilent の LC、GC、CE、CE-MS、および LC-MSD 機器のすべての機器コントロールが用意されています。OpenLAB CDS には、マルチテクニク、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、解析を行うツールが装備されています。OpenLAB Shared Services で提供されるすべての機能にアクセスする OpenLAB コントロールパネルからクロマトグラフィソフトウェアを開始します。

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る任意の OpenLAB コントロールパネルから ChemStation 機器を設定および起動することが可能です。

機器の起動

機器を設定または起動するには、OpenLAB コントロールパネルで **【機器コンフィグレーション】**、**【オンライン起動】**、および **【オフライン起動】** ボタンを使用することができます。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のように、**【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、分散システムコンフィグレーションでは、ChemStation アプリケーション自体は Agilent Instrument Control (AIC) マシンで実行します。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 コントロールパネル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、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して、同じクライアントで OpenLAB コントロールパネルの複数のインスタンスを実行できます。さまざまな認証は、対応する OpenLAB コントロールパネルから起動する機器に影響します。

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から独立しています。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する場合は、機器で実行中のシーケンスは続けて影響を受けることはありません。ネットワークがいったん回復して機器を再び制御できるようにするには、**【オンライン起動】** または **【オフライン起動】** ボタンを再びクリックするだけです。

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] ダイアログでは、追加の [切断] ボタンが提供されます。切断して、機器を実行したままリモートデスクトップ接続をオフにします。

注記

シーケンス実行中は、リモートデスクトップ接続を切断することができます。

この機器に再接続するには、OpenLAB コントロールパネルで [オンライン起動] または [オフライン起動] ボタンをクリックするだけです。再接続は、OpenLAB Shared Services サーバーに接続される任意の OpenLAB コントロールパネルから行うことができます。

[オフライン起動] をクリックしてオンライン機器に再接続する場合、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。

セッション引き継ぎ

既存のセッションは、異なる PC の OpenLAB コントロールパネルで [起動] または [オフライン起動] ボタンをクリックして、引き継ぐことができます。

- PC 1 の OpenLAB コントロールパネルから機器を起動し、同じユーザー認証を使用して PC 2 の Open LAB コントロールパネルにログオンし、そこで同じ機器を起動する場合は、既存のセッションを引き継ぐだけで、PC 1 で開始した内容を PC 2 で継続します。

注記

新ユーザーと前のユーザーが同じ認証を持っている場合は、警告は表示されません。

- 別のユーザーが異なる PC で OpenLAB コントロールパネルから機器を起動し、元のユーザーが必要とされる権限を持っている場合、元のユーザーはそのセッションも引き継ぐことができます。元のユーザーは、[ChemStation リモートセッションの引き継ぎ] 特権を持っていないければならず、もう一方のユーザーが私的に ChemStation をロックした場合、元のユーザーは [セッションロックを解除] 特権も持っていません。

1 基本概念 OpenLAB CDS ChemStation Edition

リモート機器コントロール

元のユーザがそのセッションを引き継ぐ場合、もう一方のユーザーには、元のユーザーがそのセッションを引き継ぐ旨のメッセージが通知されます。その一方のユーザーがこのメッセージに気付いたらすぐに、この機器ウィンドウは、このユーザーの PC で閉じられ、元のユーザーの PC で開きます。もう一方のユーザーは、そのセッションを引き継いだユーザーを通知するメッセージを受け取ります。

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ているため、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がすでにセッションで起動している場合、**【起動】** または **【オフライン起動】** ボタンをクリックしたかどうかに関わらず、この引き継ぎで双方の機器のコントロールが転送されます。**【オフライン起動】** をクリックし、そのセッションにオンライン機器のみが含まれている場合、またはその逆の場合は、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。

ChemStation ソフトウェアについて

オペレーティングシステム

ChemStation C.01.05 は、Microsoft Windows XP Professional SP3、Windows Vista Business SP2 または Windows 7 を必要とします。

ChemStation のコントロールチャート機能は Microsoft Excel を必要とします。

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のために 2 つのシステムを提供しています。

- **OpenLAB Data Store** は、OpenLAB CD と共に、オールインワンインストールとしてご使用いただけます。これは、最大 15 台の機器のある小規模なラボラトリー用に設計されたものです。
- **OpenLAB ECM** は、スタンドアロン製品としてご使用いただけます。これは、15 台を超えた機器のあるラボラトリー用に設計されたものです。

中央データ記憶領域のコンセプトについて詳しくは、「OpenLAB CDS ChemStation エディション（中央データ記憶領域付き）コンセプトガイド」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、個別のサンプル情報、適切なメソッドの参照、および自動的なリキャリブレーションの条件が含まれます。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」 [75 ページ](#)』と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 コントロールパネルから行います。これを使えば、機器の GPIB または 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 ソフトウェアの色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

取込メソッドビューアーを使用することで、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対して解消するかを選択することができます。

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。

注記

このダイアログでは、RC.Net ドライバの機器設定のみを比較します。クラシックドライバの機器設定は比較されません。

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。

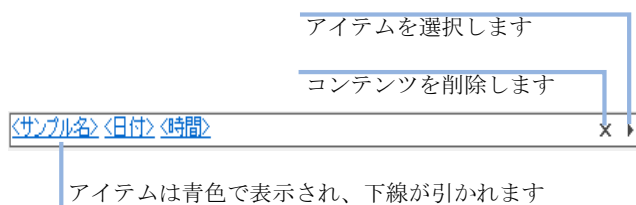
ChemStation は、レジスタの構築、拡張、抽出、および主要なデータを変更しない場合に編集を行うためのコマンドと機能を提供します。詳細は、[ヘルプ] > [コマンド] から、ChemStation のオンラインリファレンスを参照してください。

ファイルの命名規則

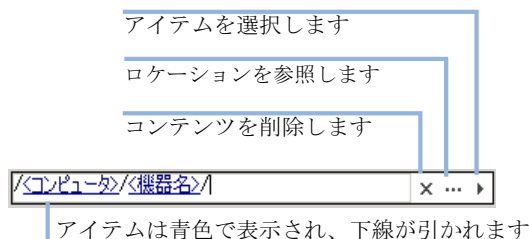
ファイル名および指定アイテム

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、指定アイテム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、異なったアイテムを使用できます。次の画面では、いくつかのアイテムを例に挙げています。

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、リストからアイテムを選択します。
下矢印キーを押し、リストからアイテムを選択します。
- 既に使用されているアイテムを一つ右クリックして、リストの別のアイテムに置換できます。
- 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

以下の規則によって、ChemStation ではファイルとディレクトリで有効な名前前の作成と処理が行えます。

以下の文字はファイルまたはディレクトリ名には使えません。

< > : " / ¥ | @ % * ? '

これらの文字をファイルまたはディレクトリ名に使用すると、ChemStation にファイルをロードする際にエラーが発生する原因となることがあります。さらに、これらの文字がインストールフォルダに使用されている場合、解析画面が起動しません。% の文字がインストールフォルダに使用されている場合、一部の ChemStation のショートカットは適切に動作しません。

以下の規則が追加で適用されます。

表 2 制限される文字

ChemStation パラメータ	文字
メソッドファイル名：	% および . (小数点) は使用できません
データサブディレクトリおよびシーケンスサブディレクトリ：	[] + = ; , . (小数点)、スペースは使用できません
シーケンスのデータファイルの命名	空白にすることはできません

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。

- 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)

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)。

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の最大の長さ

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

表 3 ChemStation ファイル名とサブディレクトリの最大の長さ

データファイル / サブディレクトリ / パス	最大長	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 / カウンタを使用する、シーケンス内のデータファイル名	15	. D	longname000001. d
メソッド、シーケンス、ハイパーシーケンス、ライブラリ、カスタマイズされたレポートテンプレート	40	. M . S . HYP . UVL . FRP	def_lc. m def_lc. s def_lc. hyp demodad. uvl areapct. frp
データファイルサブディレクトリ	40		demo (サンプル情報で入力)
データシーケンスサブディレクトリ	40		demo (シーケンスパラメータで入力)
結果セット名	40		test_date_time (シーケンスプレファレンスを使用して作成)
データパス メソッドパス シーケンスパス ハイパーシーケンスパス 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	100	100	c:¥chem32¥1¥data c:¥chem32¥1¥ methods c:¥chem32¥1¥ sequence c:¥chem32¥1¥hyper c:¥chem32¥speclib c:¥chem32¥repstyle

ChemStation のすべてのログブックはシステムメッセージを拡張フォーマットでレポートし、情報文字列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。

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、ビュー分けのデザインになっており、ソフトウェアの機能を代表的な分析タスクに従ってグループ化されています。以下の標準的なビューは、すべてのソフトウェアコンフィグレーションに存在します。

- [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り込み
- [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再確認
- [レポートレイアウト]：レポートレイアウトの設計

追加データ解析モジュール、または機器の診断およびベリフィケーションをサポートする機器コンフィグレーションを注文した場合には、追加のビューが存在します。機器オペレータが、構成済みの使いやすいテーブルからサンプルを分析するほうが望ましい場合には、[ChemStation コンパニオン] ビューが利用可能です。

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、およびツリーベースの 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、異なる 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。標準ツールバーを使えば、メソッドやシーケンスなど、共通のシステム仕様情報に素早くアクセスすることができます。[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、シングルの分析または自動分析を構成できるサンプル情報エリア、および GC、CE および LC コンフィグレーションの視覚的な機器インタフェースダイアグラムが組み込まれています。視覚的な機器インタフェースダイアグラムはホットスポットを使用しており、機器パラメー

タや、各分析の進行に伴いステータスをアニメーション化したグラフィカルな概要に素早くアクセスすることができます。視覚的な機器インタフェースダイアグラムは必要でないときにはオフにすることができ、メモリや Windows の他のリソースを節約できます。

[データ解析] ビューでは、データ解析モードに応じて標準的な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、および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が含まれます。これら個別のデータ解析モジュールはそれぞれ、モード固有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、その機器でインテリジェントレポートの使用が選択されている場合に利用可能です。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。あらゆるデータファイルを組合わせてレビューのベースとして使用可能です。また、既存のレポートテンプレートに選択したデータを適用できます。選択したレポートテンプレートにより、データの表示方法および生成レポートに含まれる情報タイプが決定されます。ツールバーを利用して、生成レポートを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のタイプは、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利用可能です (『「レポート作成」 177 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、ビューを素早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
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 および 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依拠して決まります。

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、そこから開始されます。詳細情報は、『「サポートされているワークフロー」 [134 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。

データ取り込みについての詳細は、『「データ取り込み」 [67 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。

データ解析

データ解析 - 表示

[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書き
- 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 (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、重ね書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 のインテグレートアルゴリズムは、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」 [161 ページ](#)』を参照してください。

データ解析 - バッチレビュー

データ解析ビューでは、次の 2 つの追加ツールセットを使用できます。

- ナビゲーションテーブル
- バッチレビュー

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が可能です。

- 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、重ね書き、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、以下の主要なグラフィカル操作が可能になります。

- (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

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

インテリジェントレポートが選択されている場合、[レビュー] ビューが有効になり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[レポートレイアウト] ビューに表示されます。

インテリジェントレポートを有効化すると、インテリジェントレポートテンプレートとクラシックレポートテンプレートのどちらかを使用して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作成することができます。権限がある場合には、インテリジェントレポート用にレポートテンプレートを作成することができます。

インテリジェントレポートを無効にすると、クラシックレポートテンプレートのみを使用して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作成することができます。権限がある場合には、クラシックレポート用にレポートテンプレートを作成することができます。

ユーティリティと互換性

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。

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。

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、自分独自の変数の定義、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 MS-DOS または Microsoft Windows アプリケーションとのデータ交換を行えます。

カスタマイズについての詳細は、[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。

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、自動生成されたファイル、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、またはデータ再解析だけのシーケンスを実行するかを選択できます。また、エラーまたはすべての分析が完了した後のシーケンスの終了時に、一連の固有シャットダウンコマンド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ます。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、分析メソッド、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の指定、データ交換パラメータ LIMSID 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可能です。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、「**Fract. Start**」カラム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は、ユーザーが構成できます。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。

サンプルは、シーケンステーブルで未知、キャリブレーション、ブランク、またはコントロールサンプルタイプとして識別できます。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、後述するように、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、European Pharmacopeia 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範囲外になった場合には、シーケンスの実行は停止されます。

キャリブレーションサンプルは、シンプル、周期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すると、2 つのキャリブレーションセットが分析されます。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。

部分シーケンス機能を使えば、ユーザーは、シーケンスの実行の順序を確認できます。また、個々のサンプルエントリを選択して、再分析または再解析することができます。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優先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。

シーケンスと部分シーケンステーブルは、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」 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。

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。キューが一時的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、イーザ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的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。

詳細情報は、『「サポートされているワークフロー」 [134 ページ](#)』を参照してください。

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、自動的に、メソッドの一部としてバイナリ形式で保存されます。レコードが許可されていない方法でアクセスされるのを防ぐため、レコードは後述の方法で、ユーザーアクセススキーム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単位で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」 179 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傾向チャートとしてレポートされ、実際の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、下限ライン付きの傾向チャートを含む、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。

データの追跡可能性、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（page x of y の番号付けスタイル）が付けられます。ユーザーは、レポートごとに詳細さのレベルを、簡単なサマリレポートから完全なシステムの詳細にいたるまで選択することができます。

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。

ChemStation データ構造

ユニークなフォルダ作成を利用しない

このデータ構造は、ChemStation リビジョン B.01.03 以前に使用されるデータ構造に対応しています。シーケンス、メソッド、および作成したデータファイルと結果は、指定による固定された別々の場所に保存されます。たとえば、メソッドはシーケンス内にて名前で参照され、メソッド、シーケンス、データファイルの一貫性を維持するのはユーザーの責任です。このため、データの長期アーカイブと結果の複製は面倒な仕事です。規制対象ラボだけでなく、非規制対象ラボ（環境分析ラボなど）の一部においても、ユーザーがクロマトグラム、結果、関連メソッドを文書に記録する必要があります。結果セットを作成せずにこれを行うには、すべてをレポートに印刷するしかありません。

ただし、ユーザーが ChemStation B.01.03 以前の形式でデータを保存し、それに対応するワークフローに従って作業をするような状況が発生する可能性があります。

- メソッドの開発中は、取り込みとデータ解析両方に対応する 1 つのメソッドを使用し、次の取り込みとすでに取り込んだデータの再解析のための変更が自動的に利用できるようにしたほうが便利であると考えられます。
- ChemStation システムの古いリビジョン用に設計されている、カスタマイズされたマクロソリューションでは、古いデータ構成スキームに従ってデータ、メソッド、またはシーケンスを保存する必要がある可能性があります。
- ChemStation リビジョン B.01.03 以前でまだ動作しているシステムがあるラボで ChemStation C.01.05 を動作させる場合は、すべてのシステムで同じデータ編成モードを使用するほうが便利です。

ユニークなフォルダ作成を利用する

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）。中央データ記憶領域システム（OpenLAB ECM または OpenLAB Data Store）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一つのエンティティとして転送されます。

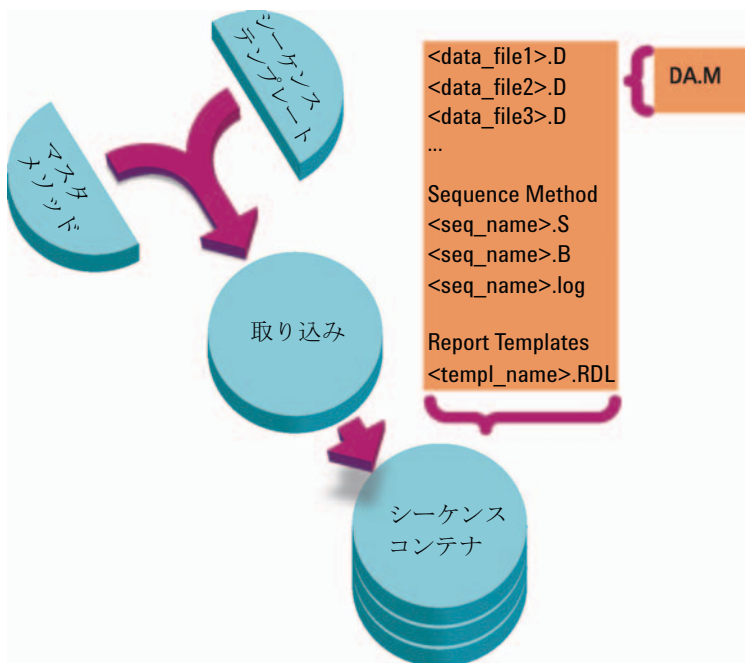


図 1 シーケンスによるデータ収集（ユニークなフォルダ作成オン）

フォルダ **Chem32¥1¥methods** にあるメソッドはマスターメソッドの役割をします。これらのメソッドは取り込みとデータ解析中に変更されません。

同様に、フォルダ **Chem32¥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。

フォルダ **Chem32¥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ための開始点の役割を果たします。

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（**[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。単一のサンプルが分析される場合、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は次のシーケンスを実行しても変更されません。

シーケンステーブルへの行の追加など、取り込みシーケンスへのすべての変更は、結果セット内のシーケンスファイルのコピーに対して行われます。シーケンステンプレートは変更されません。

同様に、メソッドに変更がある場合（つまり、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、シーケンスメソッドには反映されますが、マスターメソッドには反映されません。

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に保存されます。

- 3 各データファイルには、分析で使用す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。
 - ・ 取り込みパラメータは ACQ.TXT として保存され、特定のデータファイルごとにオリジナルのメソッドパラメータを保管します。このパラメータは、**[メソッド] > [メソッドの表示]** コマンドを使用して表示、印刷できます。
 - ・ データ解析パラメータを含む完全なメソッドは、データ解析部分の完了後に DA.M として保存されます。

結果セット利用の利点は以下の通りです。

- 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。
- 結果セットの概念では、データと共に以下のデータ分析に必要な全情報を保存します。シーケンスファイルのコピー、すべてのメソッドのコピー、(インテリジェントレポート利用の場合) シーケンスで使用するレポートテンプレートのコピー。これらのシーケンスメソッドをシーケンス固有に入力、変更して、元のマスターメソッドには影響を及ぼさないようにすることが可能です。このような理由から、結果セットの概念は、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グループを構成していることの意義を深めています。
- データ再計算と再解析は、ナビゲーションテーブルによって [データ解析] ビューで両方使用できます。
- 結果セットのコンセプトでは、中央データ記憶領域システムを使用したデータ交換で最適な前提条件が提供します。

ユニークなフォルダ作成をオン / オフにする

B.02.01 より前のリビジョンの ChemStation で使用されていたようなデータ保存概念で作業できるようにするため、[プレファレンス] ダイアログボックスの [シーケンス] タブにある [データ保存] セクションで、以下のことを実行できます。[ユニークなフォルダ作成オン] と [ユニークなフォルダ作成オフ] のいずれかを選択できます (『「プレファレンス - シーケンスタブ」 102 ページ』を参照)。デフォルトでは、[ユニークなフォルダ作成オン] が選択されています。[ユニークなフォルダ作成オン] により、前の章で述べたようなデータ保存概念が可能になります。

1 基本概念 OpenLAB CDS ChemStation Edition

ChemStation データ構造

2

メソッドの使用

メソッドの詳細	41
メソッドの各部分	42
メソッドのタイプ	44
マスターメソッド	44
シーケンスメソッド	44
データファイルメソッド	45
メソッドの作成	46
メソッドの編集	47
メソッドの編集可能な部分	48
メソッドディレクトリ構造	49
オンラインモードでのメソッドの編集	50
オフラインモードでのメソッドの編集	50
メソッド管理	51
ChemStation エクスプローラのメソッドツリー	51
取込メソッドの表示	52
マスターメソッド内の DA パラメータの更新	55
メソッドの更新	56
メソッドを新しいマスターメソッドとして保存	59
メソッドの実行時に起こる事柄	60
メソッド操作のまとめ	61
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）	63
データ取り込み（ランタイムチェックリスト）	63
データ解析（ランタイムチェックリスト）	63
カスタマイズデータ解析	65
GLP データ保存	65
ポスランコマンドまたはマクロ	65
データファイルにメソッドのコピーを保存	66



2 メソッドの使用

ChemStation データ構造

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) [66](#)

メソッドは ChemStation の重要な部分であり、この章ではそのコンセプトについて詳細に説明します。

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。

- データを取り込み、保存、処理して、レポートを生成する
- メソッドの一部だけを実行する
- データを取り込み、保存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ラン処理のために自身で作成したマクロを使用する
- 解析の結果を、GLP の目的でレジスタに保存する

メソッドのタイプ

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」 68 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

(オプション [ユニークなフォルダ作成オン] を用いて) シーケンスを実行する場合、シーケンスで使用するすべてのマスターメソッドのコピーを、シーケンスデータファイルと共に結果セットに保存します。(『「プレファレンス - シーケンスタブ」 102 ページ』参照) 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自動的に影響はしません。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」 147 ページ』を参照）。

ランタイムチェックリストの [データファイルにメソッドを保存] オプションを使用すると、メソッドが追加的にデータファイルに 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。

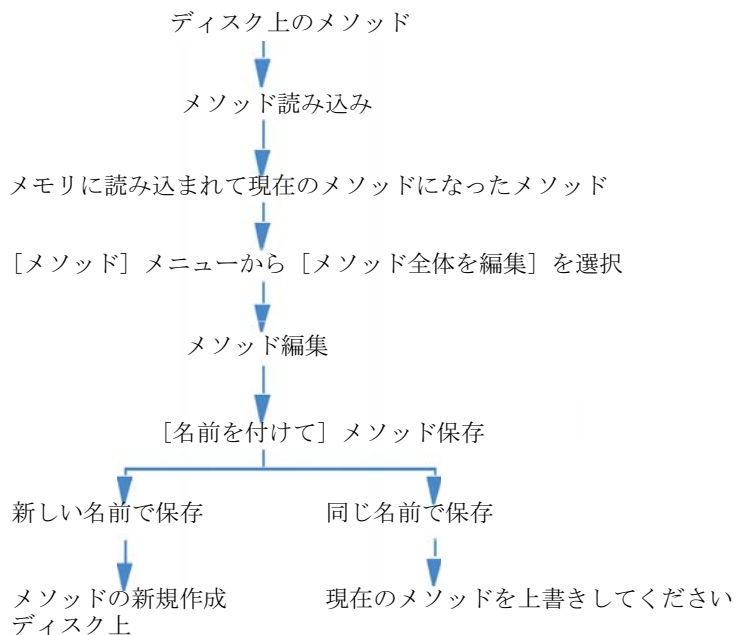


図 2 メソッドの編集

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：
 - オープンパラメータ
 - 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 **Chem32¥1¥METHODS** に保存されます。マスターメソッドの追加のパスは、プレファレンス設定を用いて追加できます。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 DA.M としてデータファイル サブディレクトリに保存されます。

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。
AgilentSampler Driver1.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すべてを編集できます。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

同じメソッドがオンラインとオフライン ChemStation で読み込まれる場合、シーケンスの実行中はオフラインのメソッドのみを編集できます。オフライン ChemStation のメソッドは、オンライン ChemStation がアイドルの場合は編集できません。

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。



図 3 メソッドナビゲーションツリー

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クエ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〕＞〔取込メソッドビューアー〕を経由して、取込メソッドビューアーにアクセスすることができます。取込メソッドビューアーは、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。

取込メソッドビューアーを使用することで、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。取込メソッドビューアーでは、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。

取込メソッドビューアーには、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。

注記

このダイアログには、RC.Net ドライバのみの機器またはモジュールのメソッド設定が表示されます。クラシックドライバから得たメソッド設定は表示されません。

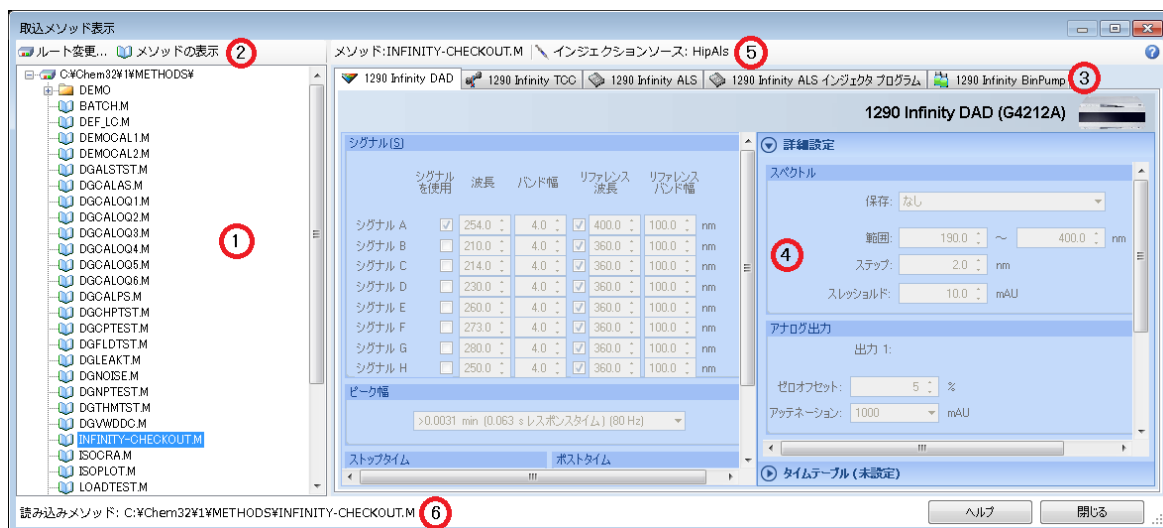


図 4 [取込メソッドビューアー] ダイアログ

- 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、好ましい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。

2 メソッドの使用 メソッド管理

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のみに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、【変換設定】をクリックして、【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。

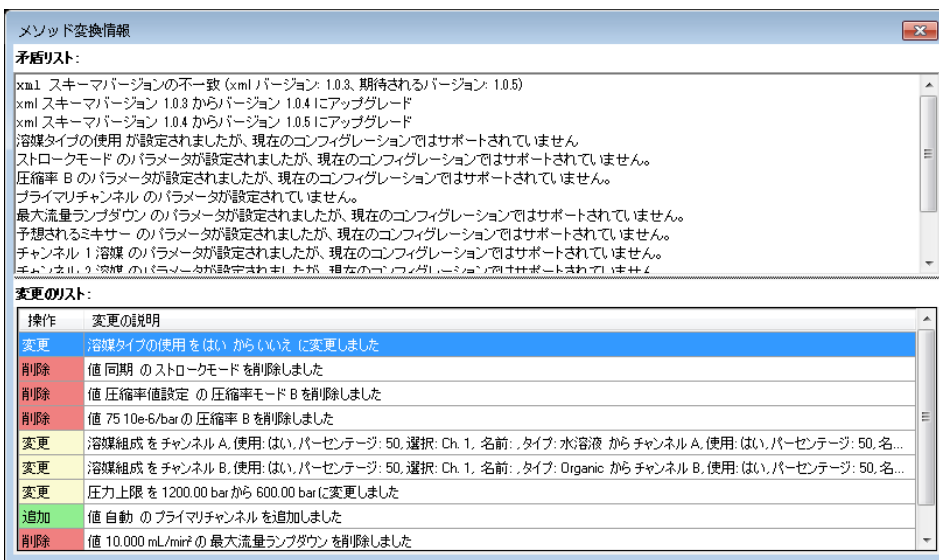


図 5 【メソッド変換情報】ダイアログ

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。この機能の正確な動作は、現在選択されているモードによって異なります。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」 51 ページ』を参照してください。

前回の結果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、シーケンスとシングルサンプルの両方に【マスターメソッドの更新】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** > **マスターメソッドの更新** 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。

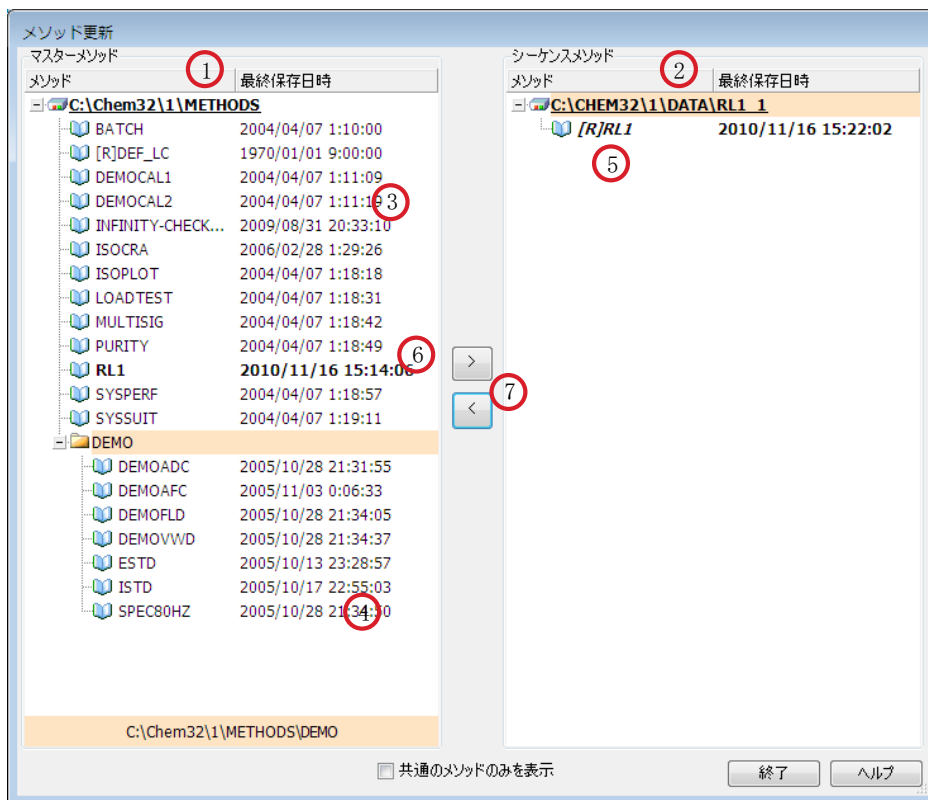


図 6 [メソッドの更新] ダイアログ

- 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。

2 メソッドの使用

メソッド管理

- 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。

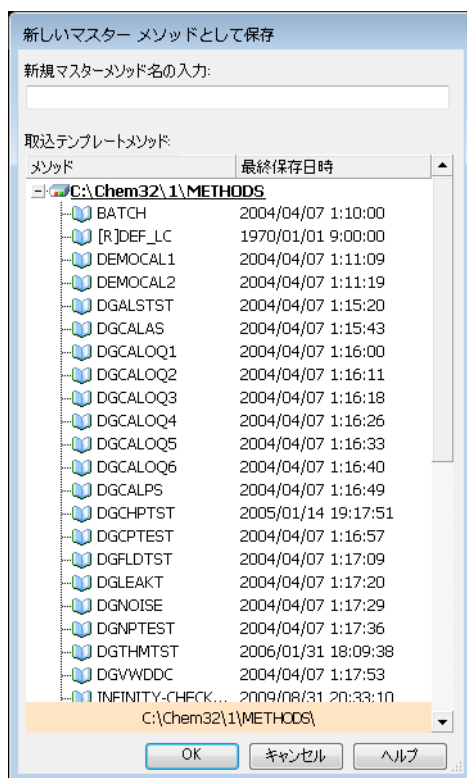


図 7 [新しいマスターメソッドとして保存] ダイアログ

2 メソッドの使用

メソッドの実行時に起こる事柄

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 8 つの部分があります。

- プレランコマンドまたはマクロ
- 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)
- カスタマイズデータ解析
- GLP データ保存
- ポストランコマンドまたはマクロ
- データファイルと一緒にメソッドのコピーを保存 (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 データ取り込み

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。

3 データファイルと一緒にメソッドのコピーを保存 (RUN.M) - ランタイムチェックリストのオプションです

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、レポートを印刷します。

5 カスタマイズデータ解析

ユーザーのマクロを実行します。

6 GLP データ保存

バイナリレジスタ GLPSave.Reg を保存します。

7 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、カスタマイズレポートを生成します。

2 メソッドの使用

メソッドの実行時に起こる事柄

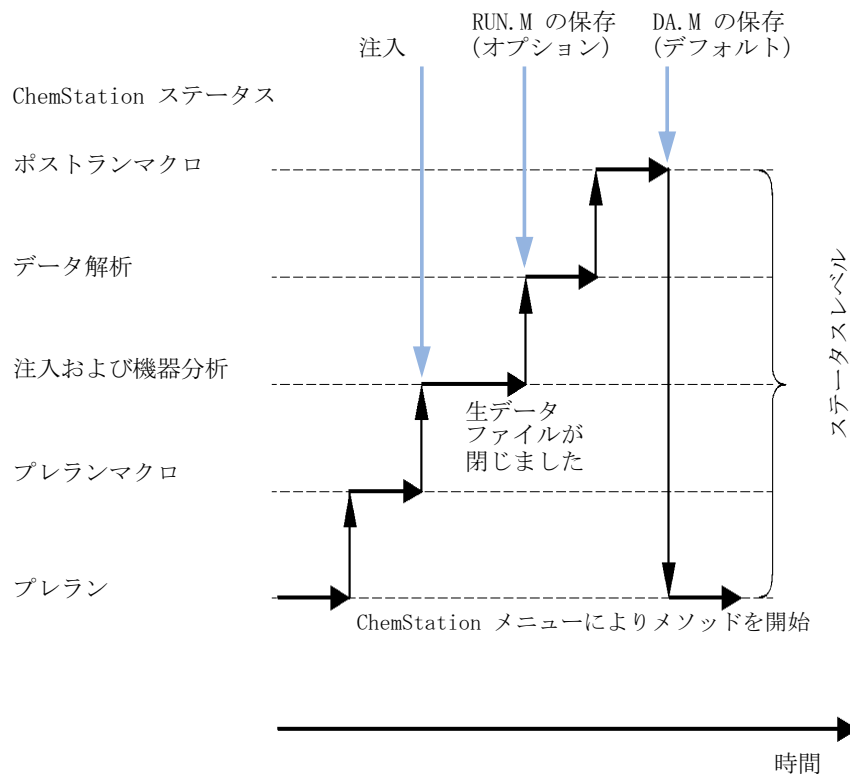


図 8 メソッド操作

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。

注記

[ユニークなフォルダ作成オフ] モードである場合には、DA. M は生成されません。詳細は、『「プレファレンス - シーケンスタブ」 102 ページ』を参照してください。

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。

データ取り込み（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。

2 メソッドの使用

メソッドの実行時に起こる事柄

- 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オリファイアを使い、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

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。

カスタマイズデータ解析

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。

GLP データ保存

バイナリレジスタ GLPSave.Reg を、デフォルトのデータファイルサブディレクトリに、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「データファイルにメソッドを保存」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 データ取り込み

データ取り込みとは	68
オンラインモニタ	71
オンラインシグナルモニタ	71
オンラインスペクトルモニタ	71
ログブック	72
ステータス情報	73
ChemStation ステータス	73
ステータスバー	73
システムダイアグラム	74

この章では、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

ChemStation B.02.01 から、シングルランやシーケンスに対する柔軟性の高いデータ保存により、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] タブにより、デフォルトパスの C:\chem32\¥x¥DATA（ここで x は機器番号）に加えて複数のパスを追加することができます。[追加] や [消去] ボタンを使用して、既存のパスを簡単に消去したり、選択した新しいロケーションのパスを [プレファレンス] に追加したりできます。デフォルトパスはリストから削除できませんが、[コンフィグレーションエディタ] で変更できます。

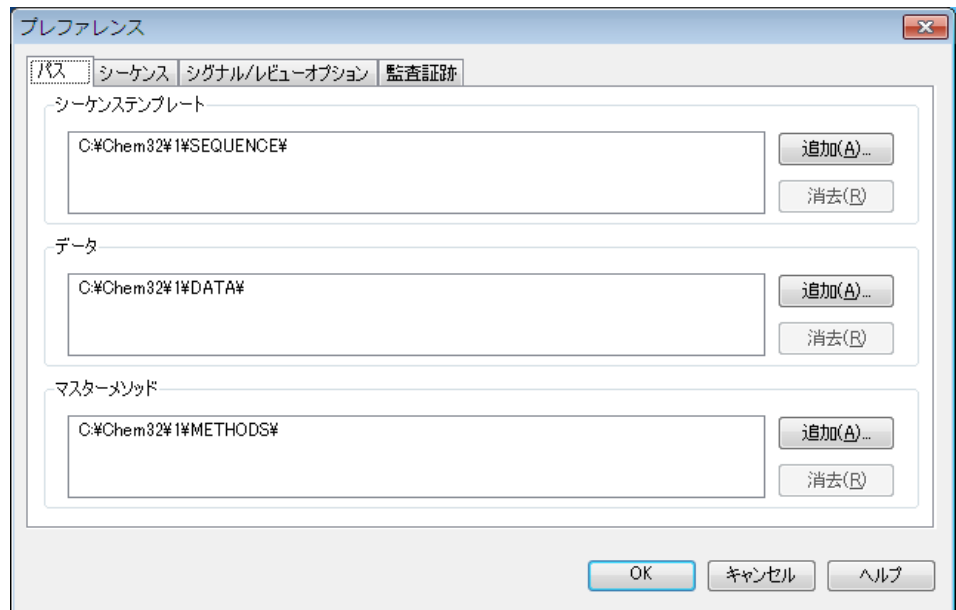


図 9 [プレファレンス] ダイアログ内の [パス] タブ

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。

3 データ取り込み

データ取り込みとは

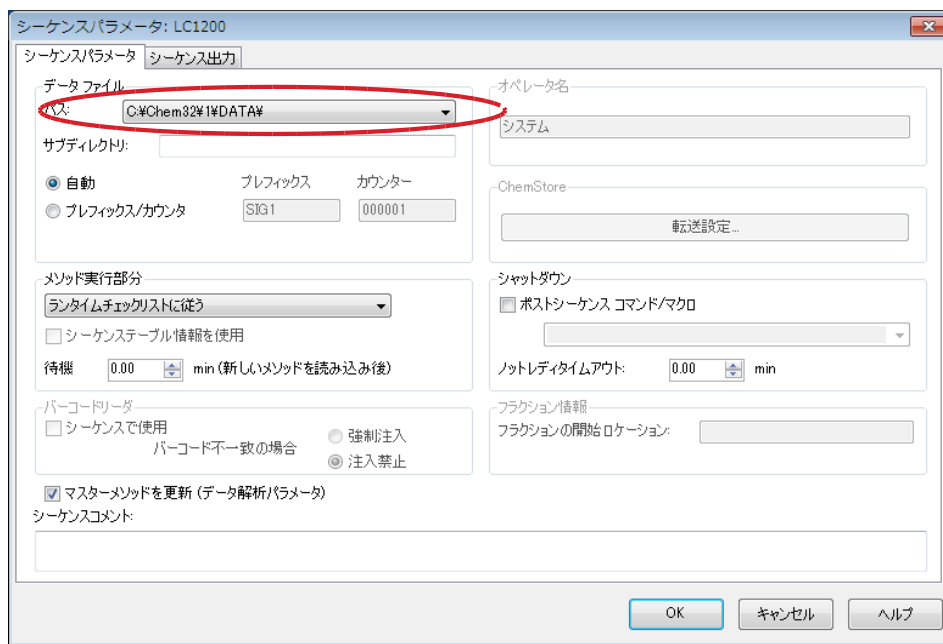


図 10 [シーケンスパラメータ] ダイアログ内のデータパス選択

オンラインモニタ

2 種類のオンラインモニタ、オンラインシグナルモニタとオンラインスペクトルモニタがあります。

オンラインシグナルモニタ

オンラインシグナルモニタを使えば、複数のシグナルを、そして関連機器がサポートしている場合には機器パフォーマンスプロットを、同じウィンドウでモニタできます。表示するシグナルを選択し、時間と吸光度軸を調整できます。この機能をサポートしている検出器の場合には、バランスボタンが使用できます。

ディスプレイ内で十字線のカーソルを移動すれば、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になります。ログブックは、これらのメッセージを、表示されるかどうかにはかかわりなく記録します。ログブックのイベントに関する詳しい情報を入手するには、適切な行をダブルクリックして、説明となるヘルプテキストを表示します。

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。
- 生データファイル名は、分単位の実分析時間と一緒に 3 行目表示されます (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。これらは、個別のコンポーネントのステータスと、適切な場合には、圧力、グラジェント、流量データなど、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。読み込み後に修正された場合は、黄色の歯車でマークされます。Agilent 1100/1200 シリーズ LC モジュールの場合は、黄色い EMF 記号によって、ユーザーは、消耗品 (ランプなど) に設定された使用期限が切れたことがわかります。

システムダイアグラム

設定された分析機器によってサポートされている場合（Agilent 1200 Infinity シリーズ LC モジュールまたは Agilent 6890 シリーズ GC 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。各コンポーネントはアイコンによって表されます。以下に示すカラーコーディングによって、現在のステータスが表示されます。

表 6 モジュールまたは機器のステータスを示すために使用される色

色	ステータス
暗灰色	オフライン
薄灰色	スタンバイ（ランプ消灯など）
黄色	ノットレディ
緑色	レディ
紫色	プレラン、ポストラン
青色	分析
赤色	エラー

加えて、実際のパラメータ設定のリストを表示することができます。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、オンラインヘルプシステムの機器の部分を参照してください。

4

自動化 / シーケンス

自動化とは	77
シーケンスおよびシーケンステンプレートとは	78
シーケンスパラメータ	79
シーケンステーブル	80
シーケンスの作成（シーケンスとシーケンステンプレート）	81
シーケンステーブルエディタの使用	81
バイアル範囲の挿入ボタンの使用	81
行追加ボタンの使用	82
カスタムフィールドボタンの使用	82
イージーシーケンス	83
概要	83
[イージーシーケンス] タブ（シーケンス）の使用法	84
[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	86
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）	88
シーケンスでのデータ取り込み	88
シングルランのデータ取り込み	90
マスターメソッドの自動更新	91
優先サンプル	92
コントロールサンプルを使用したシーケンス	92
ブランクサンプルを使用したシーケンス	92
シーケンスの一時停止	93
シーケンスの停止	94
シーケンスの中断	94
シーケンスの選択分析	94



4 自動化 / シーケンス ステータス情報

新規結果セットの作成	97
シーケンスログファイル	99
シーケンスの実行時に起こる事柄	100
シーケンスデータファイルの構造	102
プレファレンス - シーケンスタブ	102
データファイル構造 (ユニークなフォルダ作成オン)	107
シーケンスデータファイルの命名	108
シーケンスのデータファイルの命名	108
データファイル名のマニュアル入力	109
結果セットのマイグレーション	110
ポストシーケンス処理	112
ノットレディータイムアウト (LC および CE のみ)	112
待機時間 (LC および CE のみ)	113
自動リキャリブレーション	114
リキャリブレーションの指定	115
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	115
シーケンスの種類	118
明示的キャリブレーションシーケンス	118
周期的シングルレベルキャリブレーションシーケンス	118
周期的マルチレベルキャリブレーション シーケンス	119
明示的および周期的キャリブレーション両方	123
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	125
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	129

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。

ChemStation では、ワークフローに合ったデータ保存モデルを選択できるように、2 つのデータ保存モードを導入しています。このモードは以下のシーケンスの使用法に影響します。

- [ユニークなフォルダ作成] オン
- [ユニークなフォルダ作成] オフ

サンプルデータの一貫性を保つための [ユニークなフォルダ作成] オンでは、シーケンスはシーケンステンプレートとして複数回取り込みを実行するために使用しますが、このテンプレートは [データ解析] での再解析には使用されません。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利用すると、再利用ごとに新しい結果セットを作成します。

[ユニークなフォルダ作成] オフではすべてのデータを 1 つのディレクトリに保存します。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は使用されません。そのためユーザーがデータディレクトリを変更しない場合、シーケンスを再実行することで現在のデータを上書きする恐れがあります。

利用可能なシーケンス / シーケンステンプレート (*.s) 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、追加のシーケンス / シーケンステンプレートの場所を ChemStation エクスプローラの選択ツリーに追加できます。

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。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] コンボボックスを使用して、データディレクトリを選択します。
- [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します。

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
- データ取込のみ実行
- 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] 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] 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。

- [シャットダウン] パラメータを使用して、シーケンスが終了時の動作を指定
- 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

シーケンステーブル

シーケンステーブルは、サンプルバイアルを分析するのに使用するメソッド、およびバイアルが分析される順序を決定します。このテーブルには、名前、定量パラメータ、およびリキャリブレーションパラメータなどの各サンプルのデータを含みます。

デュアルサンプルリングをサポートする機器 (GC) には、[インジェクタ] グループボックスが表示されます。[フロント] または [バック] を選択すると、シーケンステーブル内のライン、およびそのインジェクタの現在の実行ステータスが表示されます。

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、オンラインヘルプリファレンスを参照してください。

シーケンスの作成（シーケンスと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、シーケンス内で分析されるサンプル、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では、分析される順にシーケンス中の各サンプルが一覧表示されます。このテーブルには、必要なバイアル、メソッド、各サンプル用のキャリブレーション情報が含まれます。

シーケンステーブルエディタの使用

シーケンステーブルの表示およびコンテンツを変更したい場合は、シーケンステーブルの右下隅にある **【テーブルコンフィグレーション】** をクリックして、シーケンステーブルエディタを開くことができます。シーケンステーブルエディタを開くと、シーケンステーブル内に表示させる列を指定することができます。加えて、各シーケンステーブルの列の幅を定義できます。LC/MS がインストールされると **【ターゲットマス】** フィールドなど、インストールしたソフトウェアパッケージに応じて追加の列フィールドは変更されます。

バイアル範囲の挿入ボタンの使用

サンプルメソッドを使用するサンプルをたくさん持っている場合は、**【バイアル範囲の挿入】** 機能を使用して、これらのサンプルをシーケンステーブルに素早く入力できます。この機能は、メソッド名、バイアル範囲、バイアルごとの注入回数をコピーし、サンプルアmountを指定した場合は、ISTD アmount、倍率、および希釈率もコピーされます。システムは、その後、範囲内にある各バイアルの情報をシーケンステーブルに入力します。

4 自動化 / シーケンス

シーケンスの作成（シーケンスとシーケンステンプレート）

行追加ボタンの使用

〔行追加〕 ボタンを選択すると、新しい空行がシーケンステブルの最後に追加されます。

カスタムフィールドボタンの使用

シーケンステ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。

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ースです。テンプレートでは、ユーザーが表示または編集する必要のあるパラメータを指定します。キャリブレーションセットアップは、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するために使いやすいドラッグアンドドロップインターフェースを備えています。また、シーケンスの概要を表示します。【イージーシーケンス】を使うと、データシステムで実行する複数のシーケンスをランキューに追加できます。

機器コントロール | イージーシーケンス | シーケンスキュー | イージーシーケンス セットアップ

イージーシーケンスセットアップ | シーケンス

イージーシーケンスセットアップ: C:\Chem32\2\sequence\Test Seq Temp2.est

メソッド情報
メソッド: MYDEM001.M

データ情報
データファイル: <S>

シーケンス情報
シーケンス保存ディレクトリ: ...
シーケンス名: ...

サンプル情報
フロント
開始パイアルポジション: 1
サンプル数: 6
サンプル名: AnySampleName<C>

コメント
ここにコメントを入力

サンプルのインポート... | サンプルリストの作成 | サンプルリストの消去

フロントサンプルリスト

パイアル	サンプル名
1	AnySampleName0001
2	AnySampleName0002
3	AnySampleName0003
4	AnySampleName0004
5	AnySampleName0005
6	AnySampleName0006

図 11 【イージーシーケンス】タブ

〔イージーシーケンス〕タブ（シーケンス）の使用法

〔イージーシーケンス セットアップ〕で作成したテンプレートからシーケンスを作成するには、〔イージーシーケンス〕タブを使います。CSV 形式で保存したサンプルのインポートも可能です。

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を開く〕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、〔サンプル記入〕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セットアップ開始〕ボタンをクリックし、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 「バイアル開始ロケーション」、「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mount」、「ISTD アmount」、「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 Sequence の サンプル エリアでは、サンプル数または注入回数に基づいて キャリブレーションインターバル を設定します。
- 5 サンプルタイプ エリアから Sequence Diagram セクションまでアイコンをドラッグすることにより、Sample type、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] 概要で、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。

シーケンスでのデータ取り込み

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。

すでに説明したように、シーケンステンプレート <sequence_name>.S とマスターメソッド <method_name>.M 用いてシーケンスを実行する場合、シーケンスランで生成されるすべてのファイルを格納する新しいフォルダ（「結果セット」）が作成されます。

このフォルダの場所は、[シーケンスパラメータ] ダイアログボックスで設定され、このフォルダの名前は [プレファレンス] ダイアログボックスの [シーケンス] タブにより決定されます。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、アイテムでコンフィグレーションを行ったり、任意の名前を手動で入力することができます。アイテム使用の詳細については、『「ファイル名および指定アイテム」 16 ページ』を参照してください。以下のアイテムを使用できます。

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）

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

[名前のパターン] が結果セットに対して一意の名前にならない場合、ChemStation はカウンタを付加して一意になるようにします。

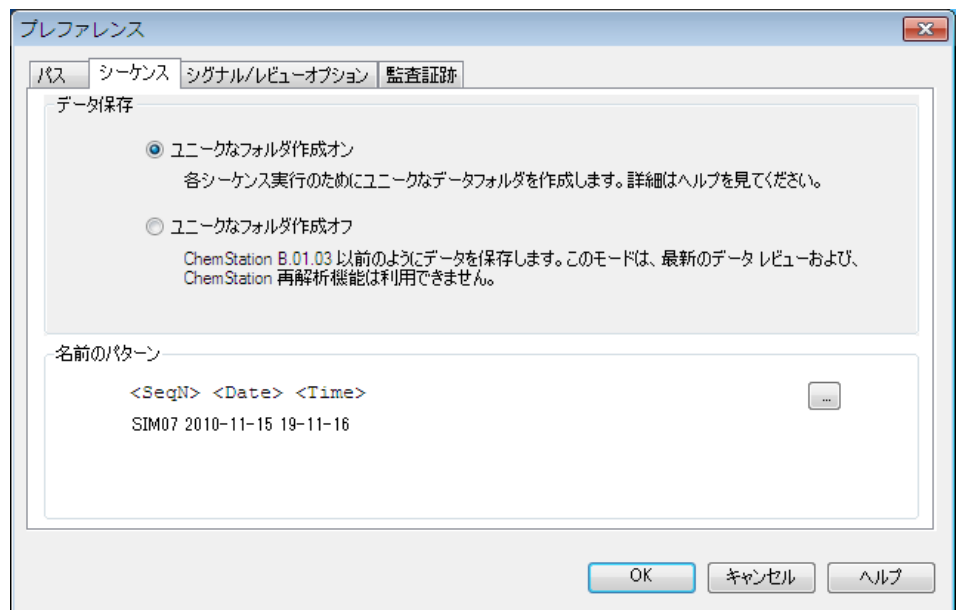


図 12 [プレファレンス] ダイアログ / [シーケンス] タブ

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

4 自動化 / シーケンス

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）

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 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には、短縮したシーケンスラインから新規結果セットを作成します（『新規結果セットの作成』 [97 ページ](#)）を参照してください。

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。

マスターメソッドの自動更新

この機能を利用すると、結果セットへとコピーしたマスターメソッドのデータ解析パラメータを ChemStation が自動的に更新します。例えば、リキャリブレーションでシーケンスを再解析した後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ために利用できます。

この機能は、[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）。取り込み中に、結果セット内のすべてのシーケンスメソッドに関するマスターメソッドのデータ解析パラメータが、ChemStation により更新されます。

マスターメソッドのデータ解析パラメータは、シーケンスの再解析後にも更新されます。対応するマスターメソッドが、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依然として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）。

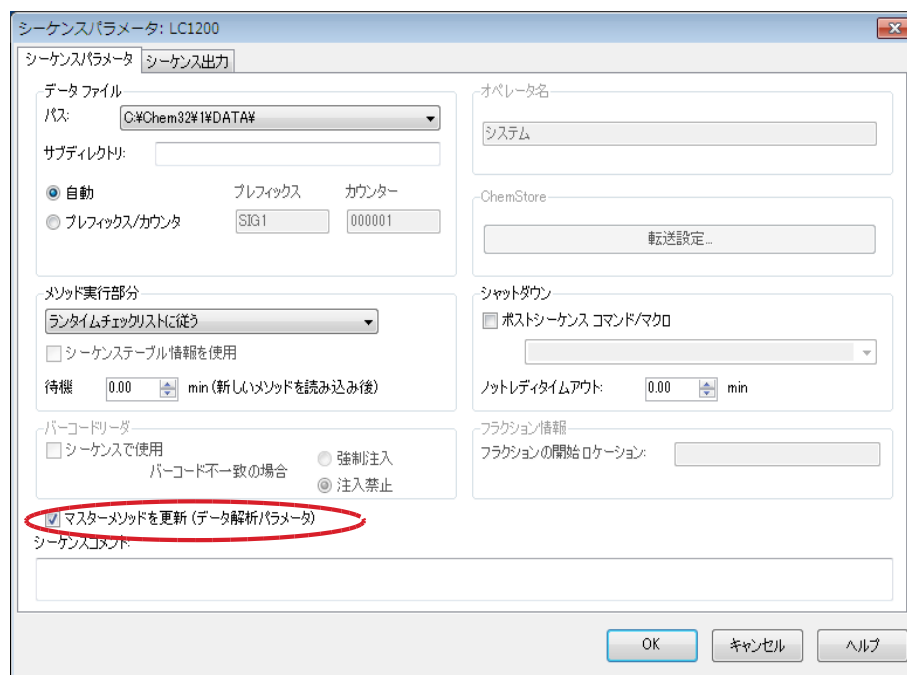


図 13 [シーケンスパラメータ] ダイアログの [マスターメソッドの更新] オプション

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「方法」の部分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、European Pharmacopeia 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。

シーケンスの選択分析

選択分析用の結果セットの選択

[ユニークなフォルダ作成] オンを利用する場合（『「プレファレンス - シーケンスタブ」 [102 ページ](#)』を参照）、一部のシーケンスを取り込むためのオプションを以下から選ぶことができます。

- 新しい結果セットに部分シーケンスを取り込む

または

- 既存の結果セットに部分シーケンスを取り込む

データファイルを、部分シーケンス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いるので、部分シーケンスを実行して不明な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。
- 既存の行を取り込んだ後に、シーケンステンプレートに行が追加された場合。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。

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）

そのため、ユーザーが [シーケンス] メニューから [部分シーケンス] を選択すると、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のオプションを選択するダイアログが表示されます。

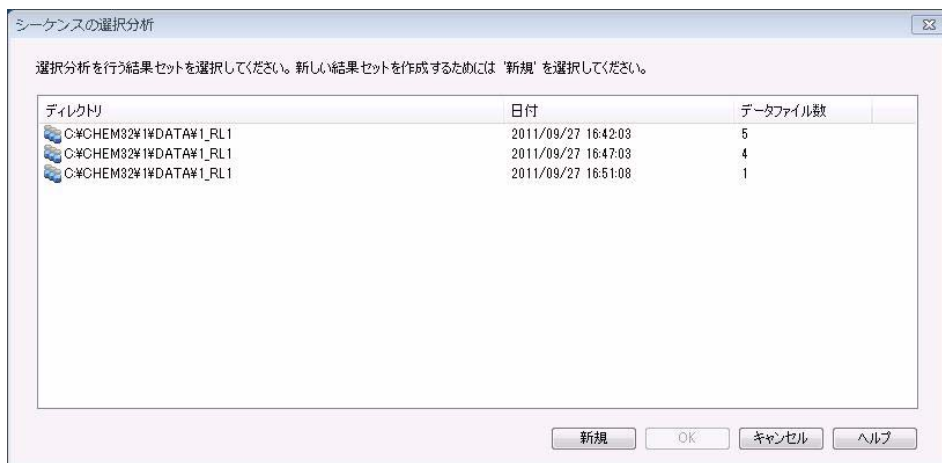


図 14 [シーケンスの選択分析] ダイアログ

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に、以下の特定の条件を満たす結果セットのみが部分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行数が、ターゲットシーケンスのシーケンス行数以上である。
- ・ ターゲットシーケンスの各行で、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行の値と同一である。
- ・ 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、部分シーケンスを実行するシーケンスラインを選択できます。

4 自動化 / シーケンス

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）

部分シーケンス取り込み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。このダイアログは〔ユニークなフォルダ作成〕の設定に関係なく開きます。

〔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。

〔印刷〕ボタンを選択すると、シーケンスの選択分析を紙に印刷できます。

〔マニュアル更新...〕では、〔メソッド更新〕ダイアログボックスを開きます。これにより、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。〔選択した分析用に自動更新〕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する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。固有のサンプルを処理用にマークすることが可能です。

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）

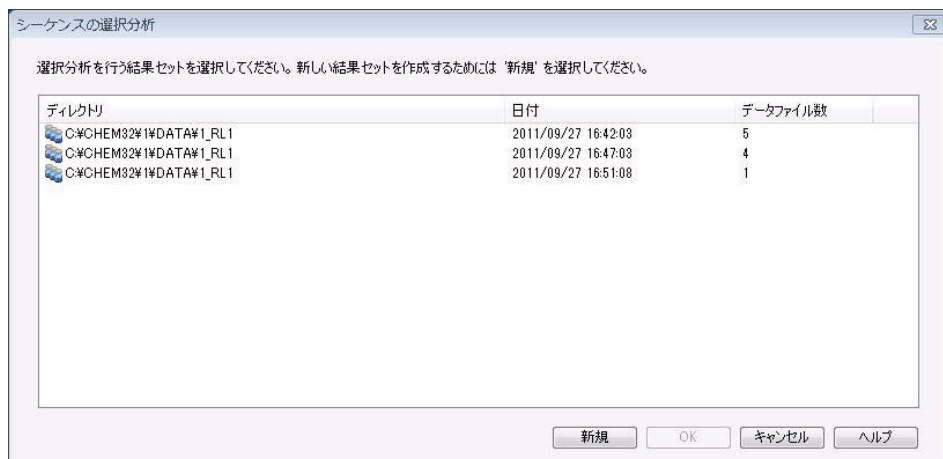


図 15 【シーケンスの選択分析】ダイアログボックス

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。

4 自動化 / シーケンス

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）

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、European Pharmacopeia 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」 [92 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

〔ユニークなフォルダ作成〕オンを使用したシーケンスの開始

シーケンスパラメータ内のパス定義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 *.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（拡張子 .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て作動し続けます。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。

〔ユニークなフォルダ作成〕オフを使用したシーケンスの開始

シーケンスを開始すると、システムはシーケンスファイル *.s を読み込み、シーケンステーブルのエントリに基づき、シーケンス行の対応するメソッドを ChemStation に読み込みます。2 番目のデータ保存モード〔ユニークなフォルダ作成〕オンと対照的に、結果セットは作成されません。シーケンスとメソッドはマスターディレクトリに残ります。

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。モード〔ユニーク

なフォルダ作成] オンを利用している場合、分析中に追加のメソッドが保存されます。

- 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。

ChemStation ステータス

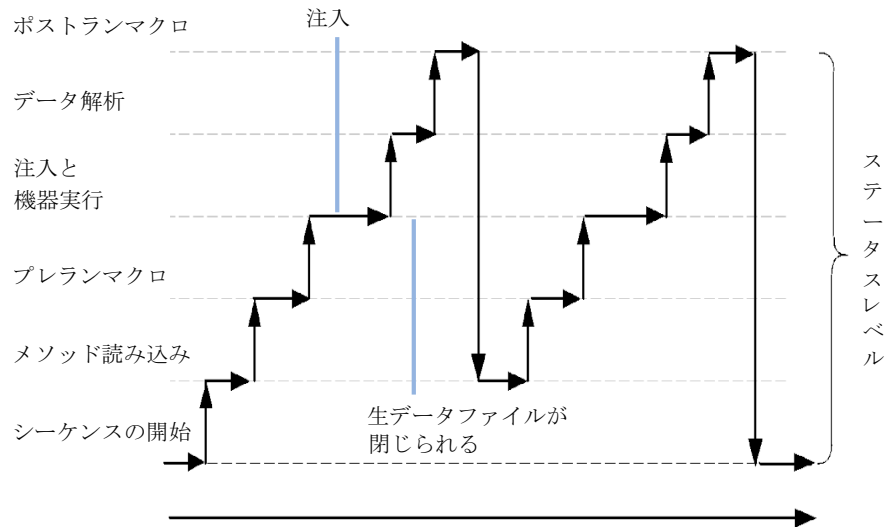


図 16 シーケンスステータス

シーケンスデータファイルの構造

プレファレンス - シーケンスタブ

オンラインセッションの「シーケンス」タブで、ユーザーは 2 つの異なるデータ保存モデルを選ぶことができます。これらのモードでは、ChemStation でシーケンスデータがどのように保存されるかが定義されます。

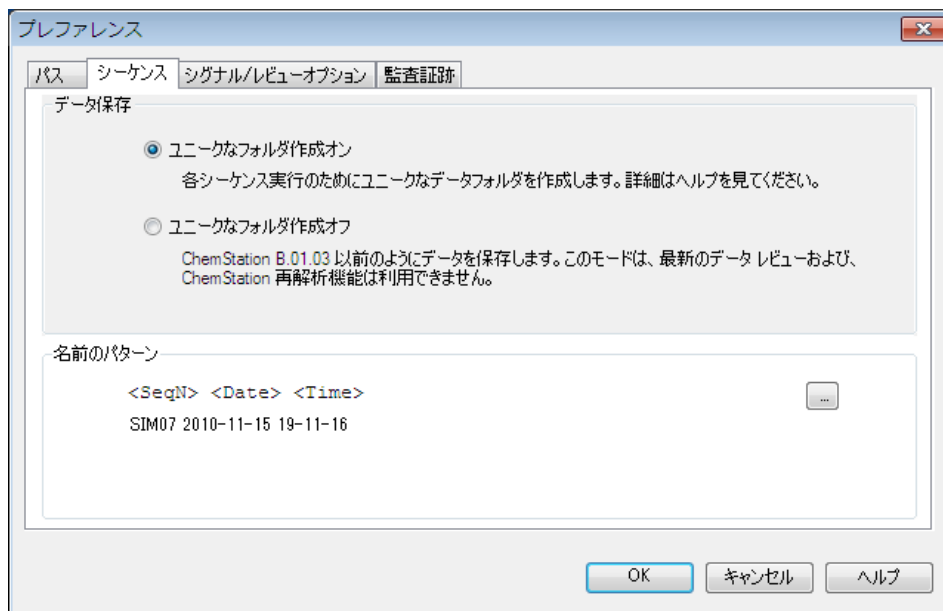


図 17 「プレファレンス」ダイアログ / 「シーケンス」タブ

注記

「ユニークなフォルダ作成」をオンまたはオフに切り換えると、後の取り込みに影響を及ぼしますが、既に取り込んだデータのデータ構成は変更されません。

注記

作業開始時に 2 つのモードのいずれかに決定し、以後は切り替えないことを強くお勧めします。

ChemStation が中央データ記憶領域システムに接続されている場合、[ユニークなフォルダ作成オフ] の切り替えはサポートされていません。

ユニークなフォルダ作成オン

このモードのデータ保存では、生データとメソッドの間に堅牢で永続的なリンクが存在します。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。

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のみに使用されるので、オンラインシステムのみ存在します。

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、シーケンスが開始した際に作成されます。

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。

ユニークなフォルダ作成オフ

このデータ保存モードでは、取り込みと解析に使用されたメソッドとデータファイルの間で、唯一メソッド名がリンクします。メソッドのコピーはいずれもシーケンスまたはデータファイルと共に保存されません。メ

4 自動化 / シーケンス

シーケンスデータファイルの構造

ソッドが変更された場合、またはその名前を持つ新しいメソッドが作成された場合、シーケンスを正確に再現することができません。シーケンスデータファイルは、[シーケンスパラメータ] ダイアログボックスの [データファイル] グループで指定されたパラメータに従って保存され、[プレファレンス] ダイアログボックスの [シーケンス] タブにあるシーケンス命名機能は、このモードでは無効になります。このモードのデータ保存は B.02.01 より前の ChemStation リビジョンと同一であるために、ChemStation の [データ解析] 画面の最新のデータレビュー / 再解析機能の利点をフルに活用できません。

注記

[ユニークなフォルダ作成オフ] オプションを使用して取り込まれたシーケンスデータは、[メソッド&ランコントロール] ビュー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。

注記

中央データ記憶領域の ChemStation を使用する場合は、[ユニークなフォルダ作成] をオンにする必要があります。中央データ記憶領域では、[ユニークなフォルダ作成] をオフにするオプションは無効になっています。

[ユニークなフォルダ作成] をオフに切り替えると、データ保存に以下の影響が出ます。

- ・ シーケンスデータは結果セットに取り込まれませんが、[シーケンスパラメータ] で指定したサブディレクトリに直接取り込まれます (『「シーケンスパラメータ」 79 ページ』を参照)。そのため、シーケンス名のパターンは [プレファレンス] ダイアログの [シーケンス] タブで灰色で表示されます
- ・ これは、2 回以上のシーケンスの取り込みに関して、同じサブディレクトリにデータが取り込まれる可能性があるということです。
- ・ シーケンスメソッド (.M) またはシーケンスファイルのコピー (.S) はデータとともに保存されず、シーケンスログファイルとバッチファイル (.B) のみが保存されます。つまり、[プレファレンス] ダイアログで指定されたパスにあるメソッドとシーケンス (『「パスの選択」 68 ページ』を参照) のみを使用できます。これらのファイルは、取り込みの他、データレビューや再解析にも使用する必要があります。シーケンスまたはデータファイル固有の変更をメソッドに保存したい場合は、異なる名前でメソッドを保存するしかありません。あるいは、そのような変更を取り込みメソッドにも適用するしかありません。

- [ユニークなフォルダ作成] オフを利用して取り込んだシーケンスがナビゲーションテーブルへと読み込まれると、[データ解析] ビュー内の再解析モードは利用できなくなります (『105 ページ 図 18』)。[ユニークなフォルダ作成オフ] で取り込まれたシーケンスは、[シーケンスパラメータ] の [再解析のみ] オプションを使用し、[メソッド & ランコントロール] ビューでのみ再解析ができます (『106 ページ 図 19』)。



図 18 [ユニークなフォルダ作成] がオフのときに取り込まれたシーケンスのナビゲーションテーブル

シーケンスデータファイルの構造

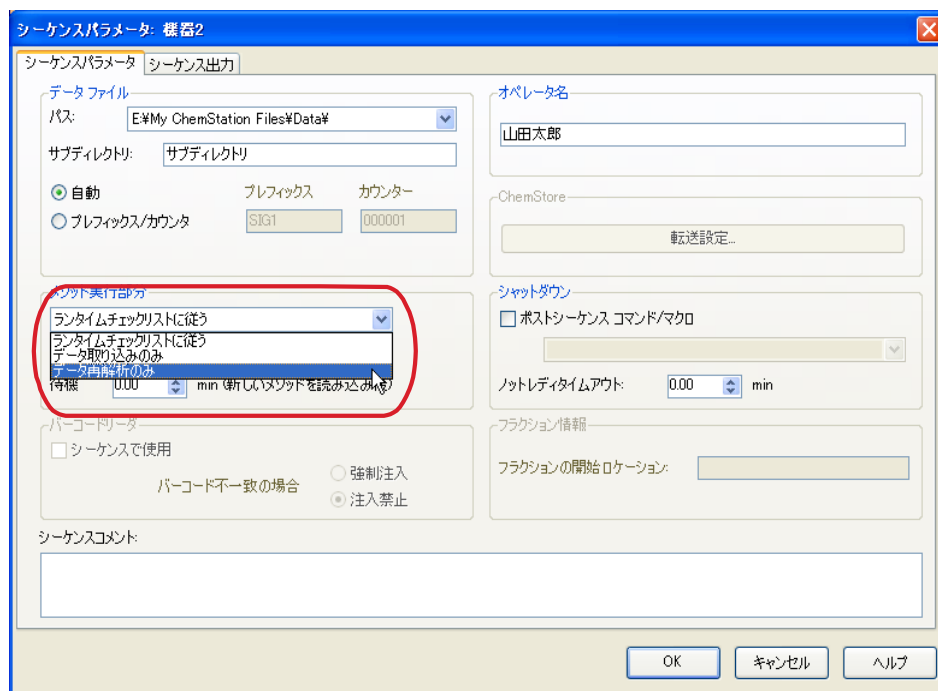


図 19 「ユニークなフォルダ作成」がオフのときに取り込まれたシーケンスデータの再解析

データファイル構造（ユニークなフォルダ作成オン）

下図で示されている通り、生データとメソッドの間には強い関連性があります。

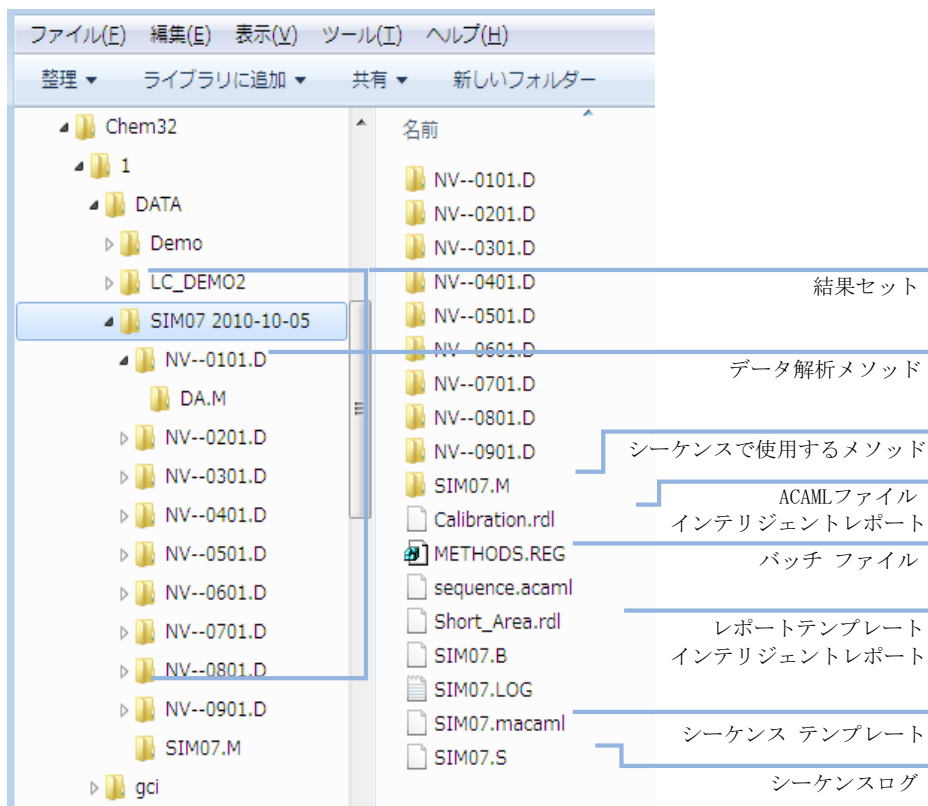


図 20 シーケンスデータファイル構造（ユニークなフォルダ作成オン）

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には、短縮したシーケンスラインから新規結果セットを作成します（『新規結果セットの作成』 97 ページ』を参照してください）。

シーケンスデータファイルの命名

シーケンス内のデータファイルの命名は、次の方法で行われます。

- 自動
- マニュアル
- プレフィックス / カウンタ

シーケンスのデータファイルの命名

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 桁はバイアル番号。たとえば、017。
- 液体クロマトグラフィおよびキャピラリー電気泳動において、第 4 番目の桁は分離のためのハイフン (-) です。ガスクロマトグラフにおいては、この桁はフロント (F) か、バック (B) のどちらかです。
- 第 5 番目と 6 番目の桁は、使用されるメソッドを定義するシーケンス行です。たとえば、最初のシーケンス行は 01 で表されます。
- 第 7 番目と 8 番目の桁は、メソッドによるこのバイアルに対する注入番号です。

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、非バイアル (no vial) を表します。
- - は、分離のためのハイフンです。
- 0499 は、シーケンスの第 4 行の 99 回目のブランクランを意味します。

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の列の 1 つに、[データファイル] 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（自動またはプレフィックスカウンタ）を使用してデータファイル名を作成します。[データファイル] 列に任意のテキストが入力されると、ChemStation ではそのテキストが分析用のデータファイル名として使用されます。

バイアル別に複数回の注入が、マニュアルデータファイル名のあるラインで指定されると、ChemStation では、ユーザーが入力した名前の最後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、同じデータファイル名が複数回の注入に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 / カウンタを使用

[プレフィックス / カウンタ] 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の場合は、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 / カウンタのフィールドには、次のルールが適用されます。

- ・ カウンタは、最大 6 文字まで使用可能
- ・ プレフィックスに使用されている文字が 9 文字に満たない場合、カウンタが自動的に 6 桁に拡張される
- ・ カウンタ内で指定されている番号は、増加する値の開始番号

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

結果セットのマイグレーション

ChemStation では、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を用意しています。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。このファイルは、シーケンスのすべてのデータファイルを再解析するために必要なすべてのシーケンスラインを含み、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、以下の手順に従います。

[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。

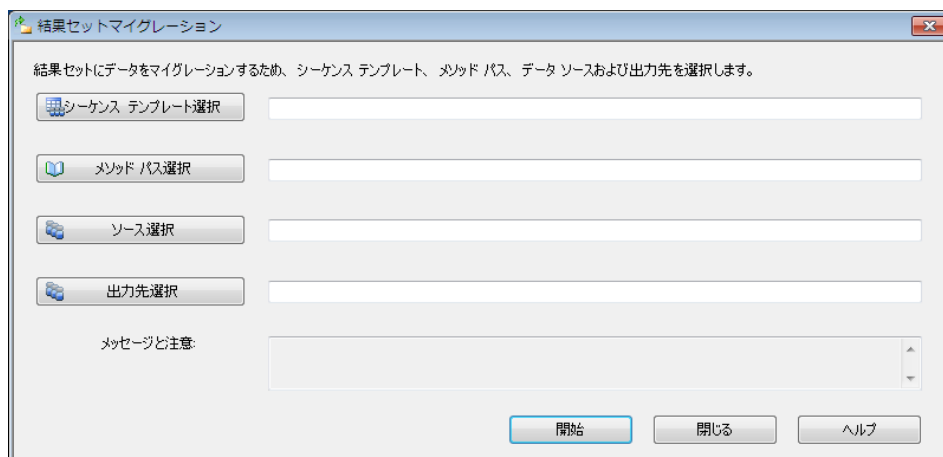


図 21 結果セットのマイグレーション

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マッチさせ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。既存のフォルダを選択するか、新しいフォルダを作成します。

すべてのフィールドへの入力完了したら、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解析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、指定したパスから結果セットフォルダへコピーされます。
- 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

通常実行中に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。LC の処理には、シーケンスパラメータの [ポストシーケンスコマンド / マクロ] チェックボックスをオンにすることでこれを指定できます。次の選択が可能です。

- システムを、ポンプとランプがオフになる STANDBY の状態に設定する
- システムを、すべてのランプがオフになる LAMPOFF 状態に設定する (LC および CE のみ)
- システムを、すべてのポンプがオフになる PUMPOFF 状態に設定する (LC および CE のみ)
- 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。

シーケンスパラメータ内では、[ポストシーケンスコマンド / マクロ] フィールドにマクロの名前を含めて、ボックスをオンにすることで、任意のカスタムマクロを実行するように指定します。

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、装置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。

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

プレファレンスモード [ユニークなフォルダ作成オン] 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。データ保存モード [ユニークなフォルダ作成オン] を使用すると、リキャリブレーションメソッドは結果セット内で利用可能となります。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。

プレファレンスモード [ユニークなフォルダ作成オフ] 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。データ保存モード [ユニークなフォルダ作成オフ] を使用すると、リキャリブレーション中に、マスターメソッドのキャリブレーションテーブルが更新されます。

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内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およびリテンション / マイグレーションタイムは、次に挙げる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更新、およびリテンション / マイグレーションタイム更新は、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データ解析で使用される命令です。

サンプルテーブルの [サンプルタイプ] の列にキャリブレーションと入力した場合、次に挙げる列が有効になり、編集できます。

- Cal レベル
- RT 更新
- RF 更新
- 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	

4 自動化 / シーケンス

リキャリブレーションの指定

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
ブラケット			
F %			

この表では、シーケンステーブル内の列が表示されており、リキャリブレーションパラメータ、およびそこに入力できる値が含まれています。

更新せず

レスポンスファクタまたはリテンション / マイグレーションタイムを変更しません。

置換

以前のリテンション / マイグレーションタイムおよびレスポンス（面積または高さ）を、現在の分析のみのものと置き換えます。このリキャリブレーション分析の中に見つからないピークに対しては、レスポンスは変更されません。

平均

各ピークのリテンション / マイグレーションタイムおよびレスポンス（面積または高さ）を、元のキャリブレーションランと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に基づいて平均化します。リキャリブレーションの中に、ピーク 1 つが欠けている場合でも、ピークの平均レスポンスには大きな影響はありません。

ブラケット

サンプルは、プレサンプルおよびポストサンプルキャリブレーションに挟み込まれます。閉じているブラケットの最後のキャリブレーションサンプルが分析されると、解析が実行されます。既存のキャリブレーションデータは、開いているブラケットのキャリブレーションランの結果データに置き換わります。閉じているブラケットキャリブレーションとそのキャリブレーションテーブルとの平均を計算します。

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セットが実行される前に行われるサンプル注入回数に対応します。分析の開始時にキャリブレーションが行われ、その結果（レスポンスファクタなど）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、二次的な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分析され、その結果はキャリブレーションテーブルに入力されます。このとき、前のキャリブレーション分析結果は上書きされます。

F %

デルタ % 計算により、解析からのレスポンスファクタと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の比較が可能になります。デルタ % は、テーブル内のすべてのキャリブレーションピークに適用されます。複数の内部標準を同定でき、次にその測定レスポンスファクタはその他のピークの新しいレスポンスファクタの計算に使用されます。どの内部標準が、キャリブレーションテーブルの各ピークのデルタ % 計算に使用されるか同定します。

シーケンスの種類

シーケンスには、次のような種類があります。

- 明示的キャリブレーションシーケンス
- 明示的シングルレベルキャリブレーションシーケンス
- 周期的マルチレベルキャリブレーションシーケンス
- シーケンス内での明示的および周期的キャリブレーション両方
- ブラケットキャリブレーションを含む周期的キャリブレーションシーケンス

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リ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。

4 自動化 / シーケンス

シーケンスの種類

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	パイアル	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	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

シーケンスの選択分析を使用すると、『121 ページ 表 11』や『122 ページ 表 12』に示したような結果を表示でき、シーケンステーブルの設定後に分析順序をプレビューして確認することができます。

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	バイアル	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	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					

4 自動化 / シーケンス
シーケンスの種類

表 13 SIMPREG 用のシーケンステーブル

ライン	バイアル	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	インターバル
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り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ことにより、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。

4 自動化 / シーケンス

シーケンスの種類

- 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。

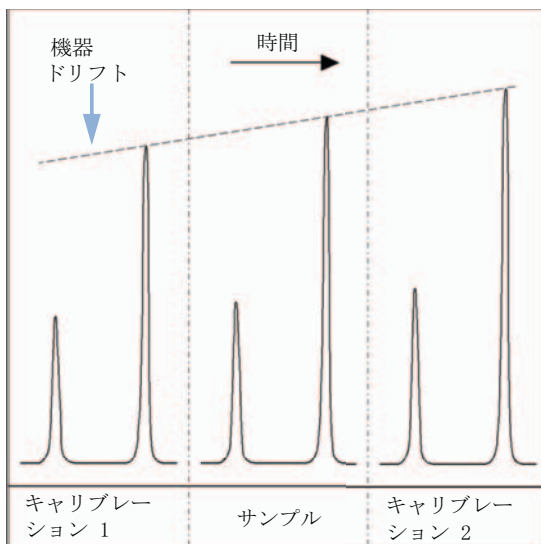


図 22 ブラケット

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	バイアル	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	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					

4 自動化 / シーケンス

シーケンスの種類

Run No.	Method Name	Vial No.	Inj No.	DataFile Name	Lvl No.	Upd RF	Upd Ret	Operation
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 23 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风险があります。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リ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リブレーションする必要がある場合、リキャリブレーションインターバルを 6 に設定します。

4 自動化 / シーケンス

シーケンスの種類

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 (Ca11b)
- バイアル 6 (Ca12b)
- 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われるか、1 回のシングル注入のみに使われるかは、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、リキャリ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。

4 自動化 / シーケンス

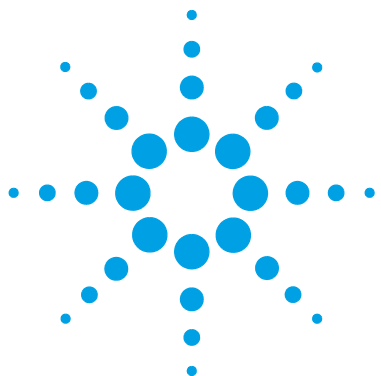
シーケンスの種類

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

ランキューとキュープラン

サポートされているワークフロー	134
ランキューの使用	136
ランキューのシングルサンプル	137
ランキューのシーケンス	137
ランキューの一時停止	138
キュープランの使用	139

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、または一時停止をランキューに追加する方法について説明します。



サポートされているワークフロー

ランキューコントロールはすべて、ChemStation で実行されます。

- [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] コマンドを使ってメソッドまたはシーケンスを実行する場合に、アイテムがまずランキューに追加され、その後自動的に開始されます。ランキューが現在一時停止になっている場合には、アイテムがキューの先頭に追加され、その次にキューの一時停止が入ります。このようにすると、機器は分析が終了したときに一時停止状態に戻ります。
- ランキューでは、追加のパラメータと共に一連のサンプルおよびシーケンスをスケジュールすることが可能です。[ランコントロール > キューメソッド...] または [ランコントロール > [キューシーケンス...]] コマンドでキューにサンプルまたはシーケンスを追加できます。ランキューによって、夜間または週末の分析などの長期にわたる操作を自動化することができます。サンプルおよびシーケンスに加え、一時停止をスケジュールすることもできます。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。

キュープランでは、キュープランを事前に準備しておき、後からこのプランをランキューに追加することができます。

以下のワークフローがサポートされています。

- シングルサンプルを分析する
- シングルシーケンスを分析する
- シングルサンプルのキュー
- シングルシーケンスのキュー
 - a 従来の 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の選択
 - b シーケンステーブルの編集とレビュー
 - c シーケンスパラメータの編集とレビュー
 - d 設定の保存

- e シーケンスをキューに追加
- ランキューの変更
- キュープランの準備
- 事前定義したシーケンスセットをランキューへ追加
 - a キュープランの選択
 - b プランをランキューへ追加

ヒストリキューでは、現在の機器でどのランが実行されたかを表示することができます。

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

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] タブの両方にあります。[機器コントロール] タブでは、[ビュー > 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。

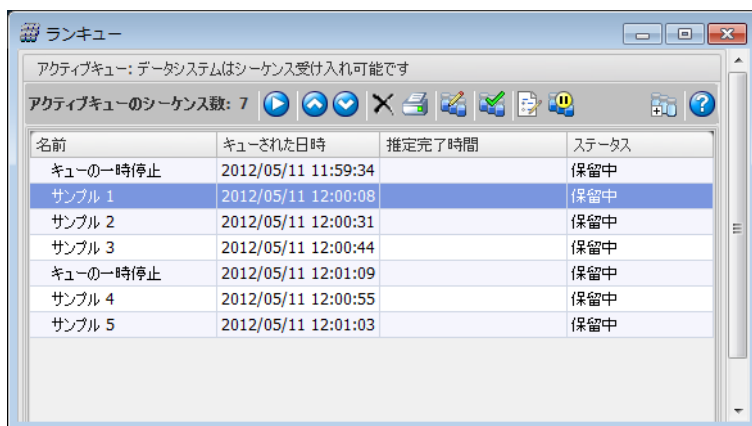


図 24 [ランキュー] ダイアログ

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」である限り、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] オプションによっては、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、部分シーケンス、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

キューにシングルサンプルを追加するには、[ランコントロール > キューメソッド...] メニューを使用します。[キューメソッド] ダイアログですべてのパラメータを変更できます。

ランキューのシーケンス

シーケンスをキューに追加するには、メニュー [ランコントロール] > [キューシーケンス...] を使用します。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。最後にこのシーケンスをキューに追加する前に、シーケンスをそのままキューに追加するか、シーケンスを新たなシーケンステンプレートとして保存してからキューするかのどちらかを選択するダイアログが表示されます。

[キューシーケンスの完了] ダイアログには、チェックボックス [完了後、一時シーケンステンプレートを削除] もあります。ChemStation では、キュー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。このチェックボックスは、[ユニークなフォルダ作成] の設定によって、オンまたはオフになります（『「プレファレンス - シーケンスタブ」102 ページ』を参照）。

- [ユニークなフォルダ作成オフ] の場合：

[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フです。

データを再解析する場合、シーケンステンプレートが必要です。そのため、テンプレートファイルのコピーを保持しておくことをお勧めします。デフォルトではファイルは、Chem32¥< 機器 >¥SEQUENCE に保存されます。

- [ユニークなフォルダ作成オン] の場合：

5 ランキューとキュープラン

ランキューの使用

[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 Chem32¥< 機器 >¥TEMP¥AESEQ に保存されます。

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する] 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。

キュープランの使用

キュープランでは、シーケンス（イージーシーケンステンプレート *.es または従来の ChemStation シーケンステンプレート *.s）または一時停止のセットを順序を含め定義することができます。ランキューの先頭または最後に、キュープラン全体を追加することができます。

キュープランは *.qpl ファイルとして保存されます。[メソッド&ランコントロール] ビューの [ランコントロール] > [キュープラン...] メニューから、キュープランを開きます。



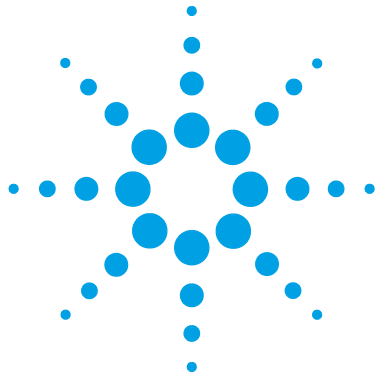
図 25 キュープラン

ランキューと同様に、一時停止を追加するときに、独自のメッセージを [詳細] 欄に入力できます。シーケンス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を画面に表示します。キューを続行するためには、ユーザーがメッセージを確認し OK する必要があります。

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。

5 ランキューとキュープラン

キュープランの使用



6 データ解析とレビューの概念

データ解析	142
データ解析モード	144
再計算モード	145
前回の結果モード	147
再解析モード	148
メソッドの更新	153
データ解析のレポートビューア	153
レビュー	157
インテリジェントレポート要件	157
データファイル選択	158
レポートテンプレート選択	159
レポートプレビュー	159
レビューワークフローの例	159

この章では、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。OpenLAB CDS ChemStation Edition では、これらのオプションは 2 つの異なるビューとして使用できます。



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みます。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 26 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書き、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 [取込メソッド] 列に表示されます。

〔シングルラン〕は、〔プリファレンス〕＞〔シグナル/レビューオプション〕での設定に応じて、以下に示すいずれかのメソッドと共に読み込むことができます（下図を参照）。

- チェックボックス（1）が選択され、現在定義されているマスターメソッドパスのいずれかに存在するメソッドと共にシングルランが最後に解析または報告されていると、シングルランと共にこのマスターメソッドで読み込まれます。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。
- チェックボックス（1）がクリアされると、シングルランは、ChemStation に最後に読み込まれたマスターメソッドと共に読み込まれます。

取込メソッドの名前は〔取込メソッド〕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、または各シングル注入のレポートの印刷するなどの解析タスクが含まれます（下図を参照）。

6 データ解析とレビューの概念

データ解析

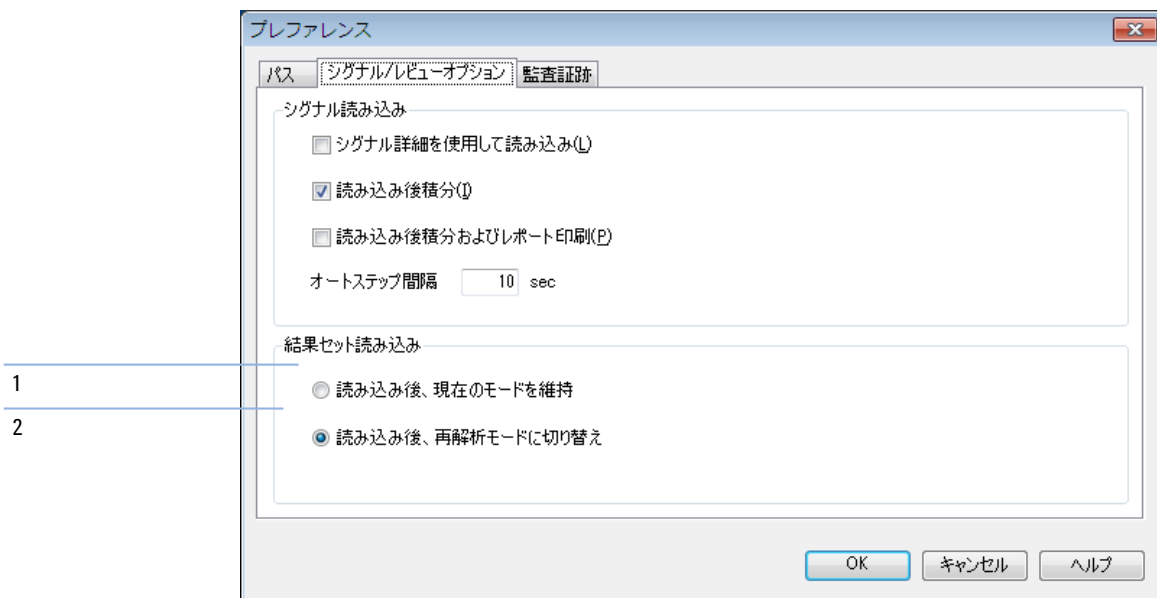


図 27 [プレファレンス] ダイアログの [シグナル / レビュー] オプションタブ

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 28 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 (『144 ページ 図 27』、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 29 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。

- ・ ワークフローで個別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マスターメソッドなどの結果セット内に存在しない、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。

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（『144 ページ 図 27』、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（『「レポート作成」 177 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。

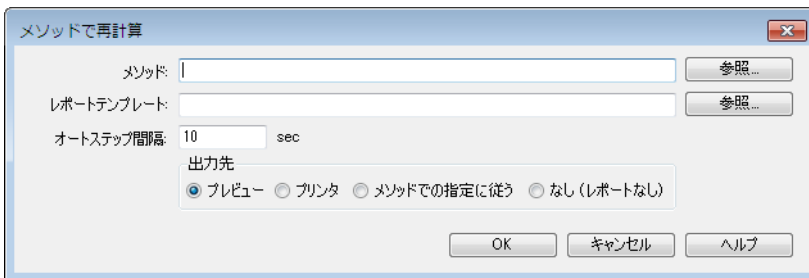


図 30 [メソッドで再計算] ダイアログ

[マスターパスのメソッドの参照] ダイアログと [マスターパスのテンプレートの参照] 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 の以前のリリースでは、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、European Pharmacopeia 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 31 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。メソッドの編集と変更を行っている場合、これ以上レポートを生成することはできません。これは、DA.M メソッドが保存されることを意味し、システムの中に不整合が起きる可能性があります。

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ます。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」 51 ページ』を参照してください。

再解析モード

データを解析する別の方法に、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。具体的には 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。

今後の分析のための入力として、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、【**マスターメソッドの更新**】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」 55 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。

再解析のため、ナビゲーションテーブルは以下のツールセットを提供します。



図 32 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、シーケンスの停止、またはシーケンスの一時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。シングルランデータ、B. 02. 01 以前で作成されたデータ、および「**ユニークなフォルダを作成** オフ」で取り込まれたデータ（『**プレファレンス - シーケンスタブ**」102 ページ』を参照）については、[**データ解析**] で再解析できません。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 [**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**」152 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。

6 データ解析とレビューの概念

データ解析

- 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。

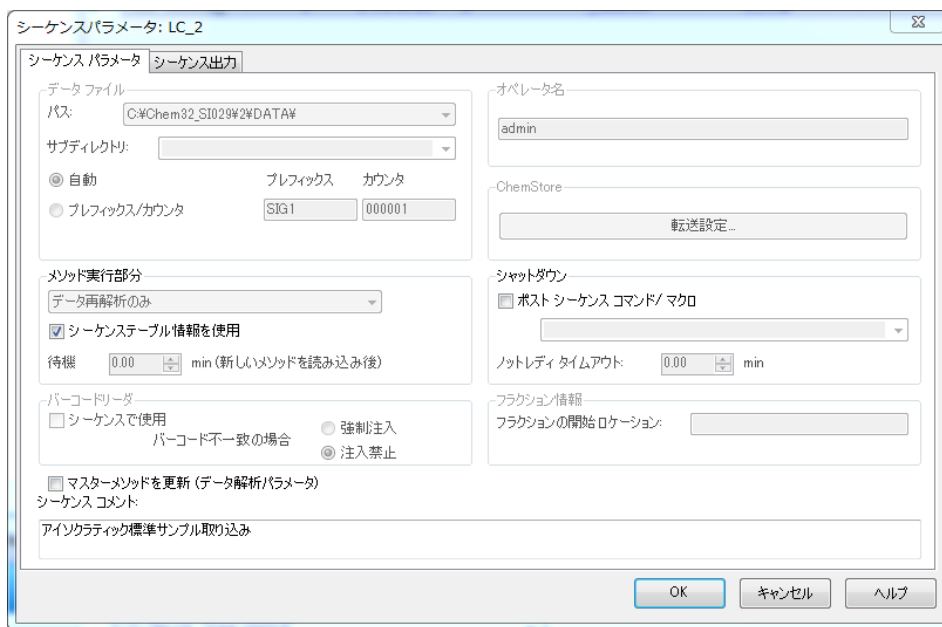


図 33 データ解析のシーケンスパラメータ

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】>【新しい結果セットの作成】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』[98 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 / 重ね書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」51 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。

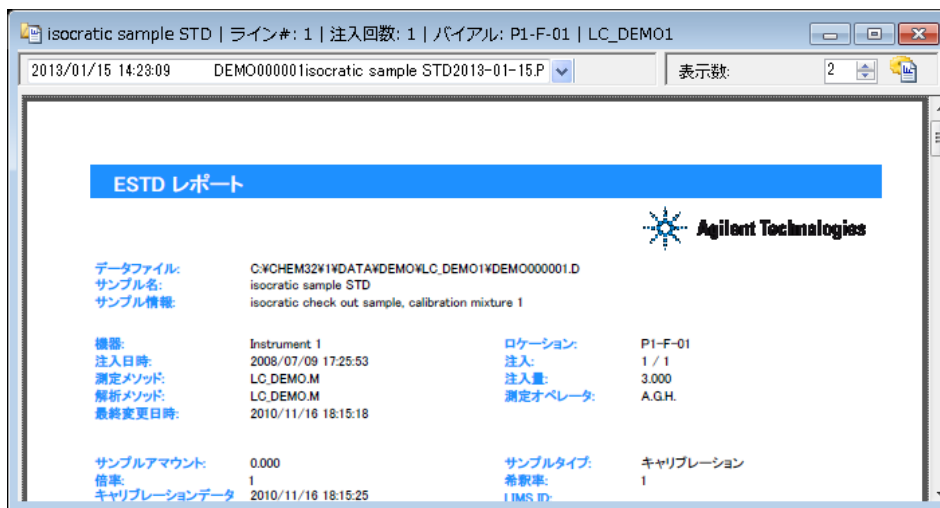


図 34 レポートビューア

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、**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の表示**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ある場合は、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。

6 データ解析とレビューの概念

データ解析

- 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。

レビュー

Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition では、データ解析の純粋にデータレビューのワークフローを対象とする新しいビューを使用できます。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生成することができます。

【レビュー】ビューではメソッドの読み込みはできません。また、再計算または再解析のとおりにより新規結果を作成することもできません。【レビュー】ビューで生成するレポートは、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、特定のデータファイル選択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、生成レポートの出力内容が決定されます。

注記

【レビュー】ビューは、OpenLAB コントロールパネル上で【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 C.01.05 はインテリジェントレポートで使用するフォーマット (*.ACAML) で結果データを生成します。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 ChemStation C.01.05 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。

データファイルを読み込むと、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、chem32/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。

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。

レポートをプリンタに送信することができ、またファイル (PDF、XLS、DOC または TXT) 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。

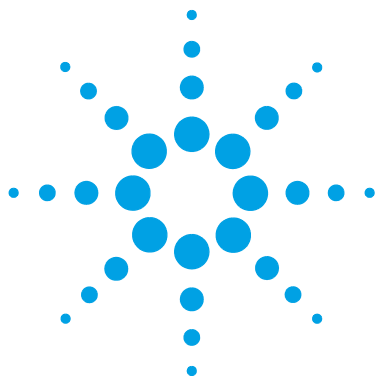
レビューワークフローの例

[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。

6 データ解析とレビューの概念

レビュー



7 キャリブレーション

用語の定義	162
キャリブレーションの種類	163
シングルレベルキャリブレーション	163
マルチレベルキャリブレーション	164
キャリブレーション範囲	166
検量線の近似	166
原点処理	167
キャリブレーションテーブル	170
ピーク和	171
未知サンプル	172
リキャリブレーション	173
リキャリブレーションとは	173
なぜリキャリブレーションするのか?	173
マニュアルリキャリブレーション	174
ピーク和を使用したリキャリブレーション	174
リキャリブレーション方法	175
未確認のピークのリキャリブレーション	175

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、いくつかのシグナルにわたってキャリブレーションポイントを区別できます。
- 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mount / 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mount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mountは、一般的に $\text{ng}/\mu\text{l}$ 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

『163 ページ 図 35』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。

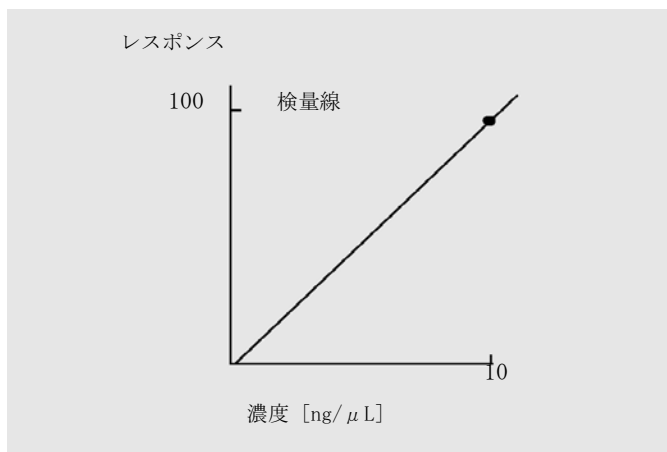


図 35 シングルレベル検量線

7 キャリブレーション

キャリブレーションの種類

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りと予想されるアmountを含んでいる必要があります。

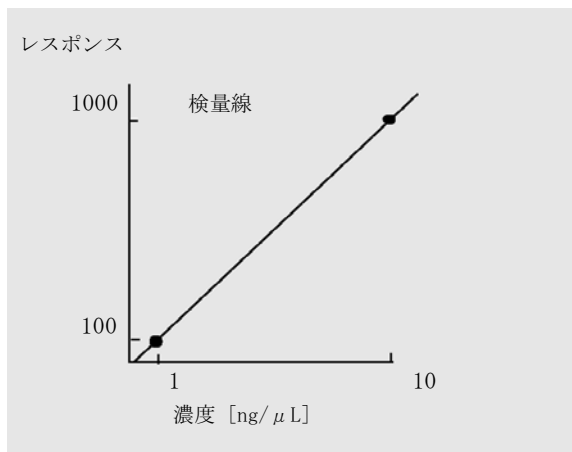


図 36 2 レベル検量線

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『[164 ページ 図 36](#)』のように少なくとも 2 レベルを持つ必要があります。

アmountの限界

ChemStation では、各コンポーネントに対する絶対アmount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、各成分濃度が増加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。

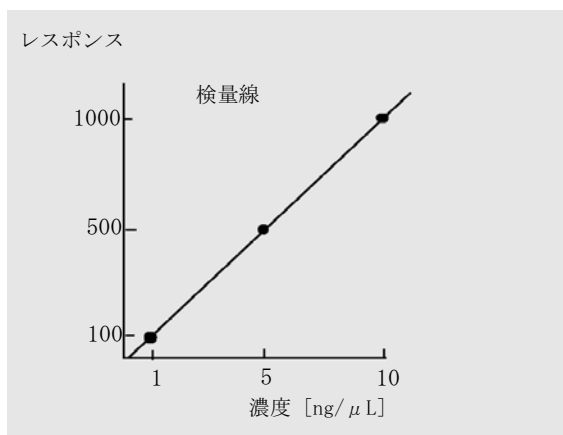


図 37 3 レベルのマルチレベル検量線

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、『165 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mount (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わ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
- 累乗
- 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。

- 原点を無視
- 原点を含める
- 原点を強制する
- 原点をつなぐ

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、『167 ページ 図 38』でも説明されます。

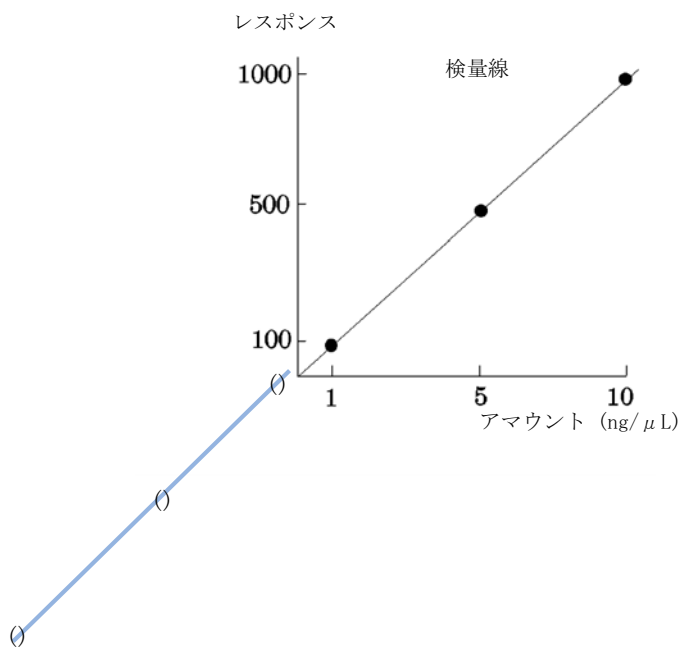


図 38 原点を含むよう強制

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 $(1/x) \times a$ 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、 $(1/y) \times b$ 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mountは、レポート用に選択された計算手順用のアmount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mount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mount (一貫した単位で表したもの)

ピーク和

このピーク和テーブルは、以下の機能でより効率的に実行される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ます。

- ユーザーが指定した範囲内にあるピーク面積を合計する
- ピークの範囲内にある面積を合計し、乗数を1つ使用して計算を実行する
- 同じ名前を持つすべてのピークの面積を合計する

ピーク和テーブルは同様ですが、標準キャリブレーション テーブルと異なります。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。

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。

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、『[172 ページ 図 39](#)』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 $\text{ng}/\mu\text{L}$ と決定できます。

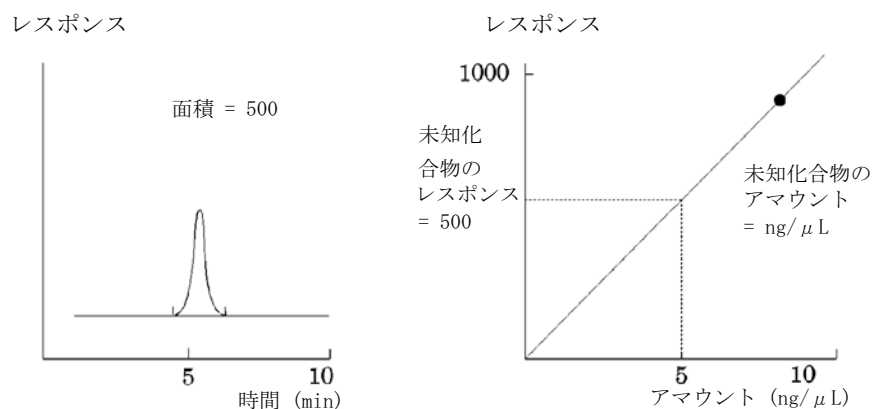


図 39 未知サンプルからのシグナルおよび検量線

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。しかし、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は非効率です。

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ができます。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、ChemStation 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」 [114 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」の部分参照してください。

未確認のピーク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のピークが、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を中断します。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

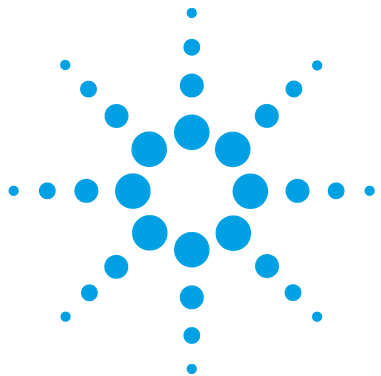
この機能は、同定されたピークのみでのリキャリブレーションが可能です。ピークが見つからないときにキャリブレーションは中断はされませんが、ピークが見つからないというレポートが注釈として付けられます。

リテンション / マイグレーションタイムのリキャリブレーション

この機能により、同定されたピークおよび同定されてい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、同定されたピークのリテンション / 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。

7 キャリブレーション

リキャリブレーション



8 レポート作成

レポートとは	178
クラシックおよびインテリジェントレポート	179
インテリジェントレポート	180
インテリジェントレポートの利点	180
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)	181
レポートテンプレートの保存	185
生成レポートの保存	187
中央データ記憶領域のレポートテンプレート	188
クラシックレポート	189
結果のレポート	189
定量結果	190
カスタムフィールド値のレポート	191
レポートスタイル	192
他のレポートスタイルパラメータ	194
シーケンスサマリレポート	195
レポートファイルフォーマット	199

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」181 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。

クラシックおよびインテリジェントレポート

クラシックおよびインテリジェントレポート

Agilent OpenLAB CDS では使用するレポートのタイプを選ぶことができます。具体的には以前の ChemStation バージョンで使用していたものと同じクラシックレポートと、高性能の標準レポート定義言語と改善されたレビュー機能を備えるインテリジェントレポートです。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 コントロールパネルで [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。
- [レビュー] ビューが表示されます。
- [シーケンスパラメータ] ダイアログで、クラシックレポートまたはインテリジェントレポートを選択可能になります。
- [レポート条件] ダイアログで、クラシックレポートまたはインテリジェントレポートを選択可能になります。

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。
- European Pharmacopeia 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。

レポートテンプレートを作成するためには、レポートテンプレートエディタ (RTE) または Microsoft SQL Server Business Intelligence Development Studio (BI Studio) のいずれかを使用することが可能です。

- RTE は、ステップを踏ん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フェースを採用しています。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。

RTE では、BI Studio を利用して作成したテンプレートを編集することはできません。そのようなテンプレートを RTE で編集する必要がある場合には、アジレントカスタマサービスまでお問い合わせください。

- BI Studio には、あらゆる機能が装備されています。しかし BI Studio を操作するには、テンプレート開発の高度な知識が必要です。詳細については、G4635-96007 レポートテンプレートデザイナーマニュアルを参照してください。このマニュアルは OpenLAB ECM インテリジェントレポートに付属しています。このマニュアルのコピーを入手するには、Agilent までお問い合わせください。このマニュアルには、OpenLAB ECM インテリジェントレポートと一緒に提供される Agilent レポートテンプレートの詳細な説明も記載されています。これらのテンプレートは BI Studio の利用に特化して設計されており、RTE では利用できない最も高度な機能が含まれています。

BI Studio では、BI Studio で作成したものはもちろん、RTE で作成したレポートテンプレートも編集が可能です。

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
- キャリブレーションカーブ
- 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項目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。以下のレポート項目が利用可能です。

- 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

8 レポート作成

インテリジェントレポート

- 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提供されます。これらのデフォルトテンプレートは、ディレクトリ `chem32\repstyle` に保存されています。

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。

シングルサンプルについては、データファイル内にレポートテンプレートが保存されています。

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。

8 レポート作成 インテリジェントレポート

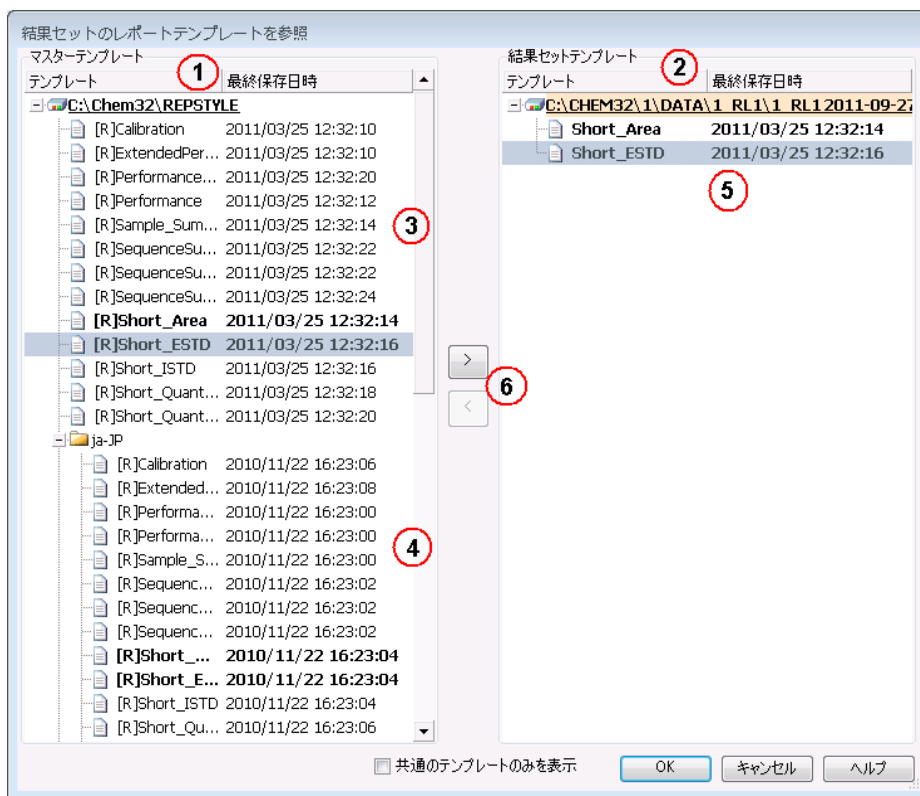


図 40 [結果セット] ダイアログでのレポートテンプレートの参照

- 1 左側に、デフォルトテンプレートディレクトリ (chem32/repstyle) 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 テンプレートは chem32/repstyle のサブフォルダにも保存することができます。

- 5 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。
- 6 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。

データファイル管理（ユニークなフォルダ作成オフ）

[ユニークなフォルダ作成] オフオプションを利用して、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のテンプレートを、デフォルトテンプレートディレクトリ (chem32¥repstyle) からいつでも参照できます

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
- <SeqN> 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）
- <Cont> 結果セット名（シングルサンプル用は “_” となります）
- <SamN> サンプル名
- <Lims> LimsID
- <InjD> 注入日時
- <File> データファイル名
- <SLoc> 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
- <SeqN> シーケンスファイル名
- <Cont> 結果セット名

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

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mount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。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。

定量結果

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。各レポート用の計算方法については、『[「定量結果」 190 ページ](#)』に記載されています。

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、各成分が存在するすべての成分の割合として報告されるレポートです。ピークは、各割合の計算前に検出器のレスポンスに対して修正されます。

ESTD は、選択した単位にかかわらず、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。

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、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]** - テキスト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]** - [シグナル詳細] ダイアログボックス (LC のみ) または [シグナル] ダイアログボックス (GC のみ) で設定したすべての積分シグナルの定量結果のテキストが含まれます。簡易レポートでは、ピーク幅はインテグレータに使用される次のような複雑な式で計算されます。 $PW = 0.3(IPRight - IPLLeft) + 0.7(Area/Height)$ この式で、IPRight および IPLLeft は変曲点です。
- **[詳細]** - ヘッダー、定量結果、および検量線が含まれます。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]** - ヘッダーおよび定量結果テキストが含まれます。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、機器条件、ログブック、シグナル、定量結果が含まれます。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、検量線が含まれます。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、定量結果が含まれます。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。

- ・ **[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「パフォーマンスパラメータのリミット編集」ダイアログボックスで指定したリミット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、ピーク面積、ピーク高さ、シグナル情報、半値幅（リファレンスガイドの「真のピーク幅 W_x [min]」を参照）、対称度、 k' 、カラム効率（理論段数）、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mount、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す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 / キャピラリー、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「ノイズ測定範囲の編集」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たものです。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。
- ・ **[拡張パフォーマンス]** - すべてのピークパフォーマンスの計算結果や各ピークの個別プロットを含んだ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に印刷されたパラメータに加え、以下のようにさらに多くのピークパフォーマンスパラメータが決定されます。各ピークのピーク開始および終了時間、歪度（Skew）、尖度（Excess）、ピーク幅、USP テーリングファクタ、データポイント間の時間間隔、データポイント数、統計モーメント、理論段数、メートルあたりの理論段数、選択性、分離度が印刷されます。ピーク幅、理論段数、メートルあたりの理論段数、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の定義」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の定義」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]、[パフォーマンス + ライブラリサーチ]）の詳細については、『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

この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、以下の機能でより効果的に実行できます。

- ユーザーが指定した範囲内にあるピーク面積を合計する
- ピークの範囲内にある面積を合計し、乗数を 1 つ使用して計算を実行する
- 同じ名前を持つすべてのピークの面積を合計する

レポートが作成されると、ChemStation は、ピーク和レポートによって置き換えられる Norm% 例外として、ピーク和テーブルを使用して標準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に] 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設定する際、次に挙げる 9 個のカテゴリから、適切なチェックボックスをチェックして有効化し、必要に応じてテンプレートセクションからレポートスタイルを選択することにより、好きな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における特定のセクションの内容とレイアウトを指定します。

次に挙げるシーケンスサマリレポートのスタイルのいずれかを選択できます。

ヘッダページ

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。

設定

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 / キャピラリの仕様を含めたい場合は、[**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

レポート内のサンプルのリスト、サンプル定量パラメータ、およびメソッド名を含むには、[**シーケンステーブル**] を選択します。このリストは、システムが何を分析したかを表示します。

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む、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

一連の自動分析の中で使用された、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基づい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内で指定されたレポートセクションに加えて、問題になっているメソッドに指定されたレポートスタイルに基づいて、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。

SUILabel タイプ = アプリケーション > キャリブレーションランおよびサンプルラン用の統計

[キャリブ試料分析の統計] 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。[未知試料分析の統計] 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。両方の選択で、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き、『「レポートスタイル」 192 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異なるキャリブレーションレベルは区別されません。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 ボックスを参照してください）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、[**キャリブ試料分析の統計**] 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。次に挙げる 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実行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位置を定義することもできます。

[**ファイルへのレポート**] を選択して、指定したファイルにレポートを印刷するファイル名を入力します。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 GLPrprtF.txt および GLPrprtB.txt に保存されます。

[**PDF へのレポート**] を選択し、PDF 文書としてレポートを保存します。レポートは、CLPrprt.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、**シーケンスパラメータ**で指定したデータディレクトリの HTM ディレクトリに保存されます。HTM レポートには、インデックスファイル（index.htm）以外に、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、システム上のプリンタにレポートが印刷されます。[各装置レポートを印刷] を選択すると、各分析後にサンプルレポートを印刷する機能が有効になります。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シーケンスサマリレポートとして指定したレポートに加えて印刷されます。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、さまざまな形式で保存できます。各フォーマットには個別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 レポートのテキストは、UNICODE テキストファイルとして出力されます。
- .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。生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したがいます。これらのファイルは、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。
- .CSV このレポートは、CSV（値がコンマで区切られた）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。

8 レポート作成

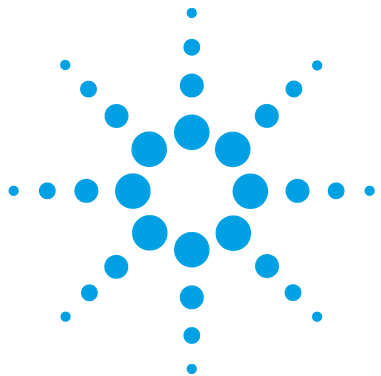
クラシックレポート

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ソートされている場合、全体のテーブルに、たとえば REPORT01.CSV のようなファイル 1 個のみ必要です。

結果がシグナルによってソートされる場合、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。

- .XLS** レポートは、Microsoft Excel スプレッドシートに XLS フォーマットでエクスポートされます。データは一般的に処理を加える必要があります。
- .PDF** レポートは .pdf ファイルに印刷されます。ChemStation セットアップにより、「PDF-XChange 4.0」という PDF プリンタがインストールされます。コンピュータが再起動されるまで、このプリンタは [**スタート**] **メニュー** / [**設定**] / [**プリンタと FAX**] にのみ表示されます。ChemStation が起動されると、PDF-XChange に基づき「ChemStation PDF」という名前の他の一時プリンタが作成されます。ChemStation セッションを実行中は、ChemStation PDF は [**スタート**] **メニュー** / [**設定**] / [**プリンタと FAX**] 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 202

バイアルテーブル 202

メソッド競合テーブル 203

シーケンス競合テーブル 204

メソッドシミュレーション 204

ピークトップタイプ 205

キャリブレーションタイプ 206

マイグレーションタイムベースキャリブレーション 207

移動度補正を使用したキャリブレーション 207

CE-MSD 209

バックグラウンド減算 209

CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ 210

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、バイアルトレイ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。

メソッドシミュレーション

シミュレーション機能を使用してメソッドをチェックできます。シミュレーション中に、ダイアグラムはメソッド中に実行される動作を表示します。たとえば、メソッドで指定されたバイアルはリフトに表示され、印加される電圧と電力は実際の分析中と同じように表示されます。シミュレーションは、分析を実行するよりも速く、各ステップには約 3 秒かかります。ステップは、CE ダイアグラムでの変更によって定義されます。

シミュレーションを開始するには、シミュレーションしたいメソッドをロードし、【機器】メニューから【シミュレーション】を選択します。

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] の選択時は、[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] の選択が解除されている場合、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] を選択することは、キャリブレーションテーブル内のシグナルでソートするための必須条件です。

[補正された面積で計算] を選択して、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います。このモードでは、面積は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、マイグレーションタイムベースの 1 シグナルのキャピラリー電気泳動に固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からは、以下のキャリブレーションタイプが利用可能です。

- 標準キャリブレーション
- タンパク質分子量キャリブレーション
- DNA 塩基対キャリブレーション
- キャピタリ等電点 キャリブレーション

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 CDS ChemStation エディション - 基本操作のリファレンス』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見つけます

9 CE 特有のコンセプトと機能

キャリブレーションタイプ

- 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-MSD

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、直前に選択されたマススペクトルが、現在のエレクトロフェログラムの各ポイントから減算されます。結果のデータは、オリジナルのデータファイルと同じ名前前で、同じディレクトリに保存されます。ただし、ファイル拡張子は .BSB に変更されます。

この新しいデータファイルが現在のデータファイルとなり、バックグラウンドが減算されたエレクトロフェログラムが表示されます。実行されたバックグラウンド減算の回数の記録は、データファイルヘッダの〔オペレータ〕項目に保持されます。

BSB データのテーブル形式のリストを表示する場合は、データ表示の精度による違いを観察できます。

注記

LC/MSD 内にある HELP テキストファイルは、LC パラメータのみ参照し、CE は参照しません。いくつかの LC/MSD ソフトウェアで利用可能な機能は、CE/MSD アプリケーションでは利用不可能または適用外ですが、LC アプリケーションでは使用が可能です。〔ピークマッチング〕機能は CE-MS には適用外なので、有効ではありません。CE-MS では、ひとつの分離キャピラリで UV および MS 検出が行われる有効長が異なります。有効長が違うため分離度が異なるので、ピークマッチングは行えません。

9 CE 特有のコンセプトと機能

CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ

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

索引

A

ACAML 157
ACQ. TXT 36

B

BI Studio 182
Business Intelligence
Development Studio 182

C

CDS 9
ChemStation 8
 エクスプローラ 51
 カスタマイズ 28

D

DA. M 36, 66, 147
Data Store 8, 13
DOC 159

E

ECM 8, 13
ELN 9
European
Pharmacopeia 29, 92,
98, 146, 180
EZChrom 8

G

GLP セーブ Reg 65
 メソッドと保存 65

GLP データの保存 65
GLP 30

P

PDF 159, 159

R

RDL 182
RTE 182

T

TXT 159

V

Visual Basic 180, 184

X

XLS 159, 159

あ

アナログシグナル 68
アマウントの限界 164

い

イージーシーケンス 83
一時停止
 シーケンス 93
インテリジェントレポー
ト 27
データファイル 158
プレビュー 159

有効化 179
要件 157
利点 180

か

外挿 166
化合物 162
カスタマイズ
 データ解析 65
カスタム計算 184
カスタムフィールド 43,
180
カラーコード 74

き

機器コントロール 42
機器
 ステータス 74
キャリブレーションカー
ブ
 種類 163
 シングルレベル 163
キャリブレーション 43
 化合物 162
 サンプル 162
 周期的マルチレベ
 ル 119
 範囲 166
 ポイント 162
 レベル 162
キャリブレーションテーブ
ル

- とは? 170
- く
 - クラシックレポート 27
 - クロスシーケンスレポート 181
- け
 - 結果セット 37
 - 自己編集 152
 - マイグレーション 110
 - 結果フラグ付け 180
 - 検出器レスポンス 163
- こ
 - 更新
 - マスターメソッド 55
 - メソッド 91, 56
 - コンフィグレーション 14
- さ
 - 再解析 26, 37, 105, 148
 - 再計算 26, 37, 145
 - 前回の結果 147
 - 再接続 11
 - サンプル
 - キャリブレーション 162
- し
 - シーケンス 75, 78
 - 一時停止 93
 - 再解析 148
 - 周期的キャリブレーション 119
 - セットアップ 83
 - 中断 94
 - 停止 94
 - テーブル 80
 - 取り込み 88
 - 読み込み 142
 - シーケンステンプレート 78
 - シーケンスの選択分析
 - 結果セット選択 94
 - シーケンスライン 96
 - シーケンスパラメータ 69, 79, 150
 - 式 180, 184
 - シグナル/ノイズ比 92, 98, 146
 - シグナル 68
 - 詳細 42
 - 自己編集した結果セット 152
 - システム
 - シャットダウン 112
 - 自動化 28, 75
 - とは? 77
 - 自動
 - シャットダウン 112
 - ライブラリサーチ 64
 - リキャリブレーション 114
 - シャットダウン
 - システム 112
 - 自動 112
 - マクロ 112
 - 出力先
 - レポート 178
 - 条件付フォーマット 184
 - シングルシーケンスレポート 181
 - シングル注入レポート 181
- す
 - スタンバイ状態 112
 - ステータス
 - 機器 74
 - スニペット 180, 184
- せ
 - 積分 63
 - イベント 42
 - 結果テーブル 63
 - セッション切断 10
 - セッション引き継ぎ 11
 - 切断 10
 - 前回の結果モード 147
- そ
 - ソフトウェアの概要
 - オペレーティングシステム 13
 - システムコンフィグレーション 14
 - データモデル 16
 - メソッドおよびシーケンス 14
- ち
 - 中央データ記憶領域 13
 - 中断
 - シーケンス 94
- て
 - 停止
 - シーケンス 94

- ディレクトリ
 - 結果セット 107
 - メソッド 49
- データ解析 42, 142
 - カスタマイズ 65
 - 再解析 26
 - 再計算 26
 - 定量 25
 - パッチレビュー 25
 - メソッド 45
- データ取り込み 68
- データ取込 23
- データバス 69
- データファイルと保存
 - メソッドのコピー 66
- データフィールド 183
- データ保存 104
- デジタルシグナル 68
- デモデータ 185
- と
- 取り込みパラメータ 36
- 取込メソッドビューア 52
- な
- ナビゲーションテーブル 142
 - データセットの解放 152
 - データファイルの削除 152
- 名前のパターン 89
- は
- パス 68
- 範囲
- キャリブレーション 166
- ひ
- ピーク
 - 定量 43, 64
 - 認識 43, 64
- ピーク和テーブル 194
- ふ
- ファイル
 - メソッド 49
- ファイル名
 - シーケンスサマリレポート 188
 - シングル注入 187
 - プレフィックス 109
- フォーマット
 - レポートテンプレート 184
- 部分リキャリブレーション 175
 - 部分 175
- ブランクサンプル 92
- プレファレンス 68, 89, 102
- プレフィックス 109
- ほ
- ポストシーケンス処理 112
- ポストラン
 - コマンド 65
 - マクロ 65
- ま
- マイグレーション
- 結果セット 110
- マクロ
 - シャットダウン 112
- マルチレベル
 - 周期的シーケンス 119
- み
- 未確認のピーク
 - リキャリブレーション 175
- め
- メソッド情報 42
- メソッドタイプ
 - シーケンス 44
 - データ解析 45
 - データファイル 45
 - マスター 44
- メソッドツリー 51
- メソッドファイル
 - 機器パラメータ 49
- メソッド
 - GLP セーブ Reg 65
 - オフラインモード 50
 - オンラインモード 50
 - 各部分 42
 - 作成 46
 - 指定を利用 146
 - 自動更新 96, 91
 - 修正 46
 - 手動更新 96, 56, 55
 - ステータス 74
 - 積分 63
 - 操作のまとめ 61
 - ディレクトリ 49

- 取込パラメータの表示 52
- ライブラリサーチ 64
- も
- モニタリング
 - 機器ステータス 74
- ゆ
- ユニークなフォルダ作成 34, 100, 103
 - オン/オフ切り替え 103
- ら
- ライブラリサーチ 64
- ランタイムチェックリスト
 - GLP データの保存 65
 - データ解析 63
 - データ取り込み 63
 - ポストランコマンド 65
 - ポストランマクロ 65
 - メソッドのコピーを保存 66
- り
- リキャブレーション
 - 完了 175
 - リテンションタイム 175
- リキャリブレーション
 - 自動 114
 - 未確認のピーク 175
- リテンションタイム
- リキャブレーション 175
- リファレンスシグナル 29
- リファレンスデータファイル 92, 146
- リモートコントロール 10
- リモートセッション引き継ぎ 11
- リモートデスクトップ接続 12
- れ
- レスポンス
 - 検出器 163
- レビュー 157
- レポート項目 183
- レポート作成 27, 157
- レポートタイプ
 - クロスシーケンス 181
 - シングルシーケンス 181
 - シングル注入 181
- レポートテンプレートエディタ 182
- レポートテンプレート
 - エクスポートフォーマット 159
 - カスタム計算 184
 - 参照 185
 - 条件付フォーマット 184
 - スニペット 180, 184
 - デフォルト 159
 - フォーマット 182
 - 保存 185
 - レポート項目 183
 - レポートビューア 153
- レポートプレビュー 159
- レポート 43
 - カスタムフィールド 180
 - クラシックまたはインテリジェント? 179
 - 結果フラグ付け 180
 - シーケンスサマリ 178
 - 出力先 178
 - シングル注入 178
 - スタイル 192
 - とは? 178
 - ファイル名 187
- わ
- ワークフロー
 - レビュー 159

本書の内容

このガイドでは、Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition のさまざまな概念を説明します。ChemStation がどのように動作するかを理解を高めることを目的としています。ここには、以下の題目についての情報が含まれています。

- 基本概念
- データ取込
- 自動化 / シーケンス
- ランキューとキュープラン
- 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

© Agilent Technologies 2010-2012, 2013

Printed in Germany
01/2013



M8301-96014



Agilent Technologies