Agilent ChemStation Plus



Avertissements

© Agilent Technologies, Inc. 2004

Conformément aux lois nationales et internationales relatives à la propriété intellectuelle, toute reproduction totale ou partielle de ce manuel sous quelque forme que ce soit, par quelque moyen que ce soit, voie électronique ou traduction, est interdite sans le consentement écrit préalable de la société Agilent Technologies, Inc.

Référence du manuel

G2181-93011

Edition

03/2004

Imprimé en Allemagne

Agilent Technologies Hewlett-Packard-Strasse 8 76337 Waldbronn

Microsoft[®] est une marque déposée de Microsoft Corporation aux Etats-Unis.

Révision du logiciel

Ce guide correspond aux révisions A.01.xx du logiciel Agilent ChemStation Plus, où xx désigne les révisions mineures du logiciel sans influence sur l'exactitude technique de ce guide.

Garantie

Les informations contenues dans ce document sont fournies « en l'état » et pourront faire l'obiet de modifications sans préavis dans les éditions ultérieures. Dans les limites de la législation en vigueur, Agilent exclut en outre toute garantie, expresse ou implicite, quant à ce manuel et aux informations contenues dans ce dernier. notamment, mais sans s'v restreindre, toute garantie marchande et aptitude à un but particulier. En aucun cas, Agilent ne peut être tenu responsable des éventuelles erreurs contenues dans ce document, ni des dommages directs ou indirects pouvant découler des informations contenues dans ce document, de la fourniture, de l'usage ou de la qualité de ce document. Si Agilent et l'utilisateur ont souscrit un contrat écrit distinct dont les conditions de garantie relatives au produit couvert par ce document entrent en conflit avec les présentes conditions. les conditions de garantie du contrat distinct se substituent aux conditions stipulées dans le présent document.

Licences technologiques

Le matériel et le logiciel décrits dans ce document sont protégés par un accord de licence et leur utilisation ou reproduction sont soumises aux termes et conditions de ladite licence.

Limitation des droits

L'utilisation du logiciel dans le cadre d'un contrat principal ou de sous-traitance avec le Gouvernement américain est soumise à la réglementation fédérale des Etats-Unis régissant les logiciels informatiques commerciaux (DFAR 252.227-7014, juin 1995) ou les produits commerciaux (FAR 2.101(a)) ou les logiciels informatiques sous licences (FAR 52.227-19, juin 1987) ou toute réglementation ou clause de contrat équivalente. L'utilisation, la duplication ou la publication de ce logiciel est soumise aux termes de la licence commerciale standard délivrée par Agilent Technologies. Conformément à la directive FAR 52.227-19(c)(1-2) (juin 1987), les droits d'utilisation accordés aux départements et agences rattachés au Gouvernement américain sont limités aux termes de la présente limitation des droits. Les droits d'utilisation accordés au Gouvernement américain dans le cadre des données techniques sont limités conformément aux directives FAR 52.227-14 (juin 1987) ou DFAR 252.227-7015 (b)(2) (novembre 1995).

Mentions de sécurité

ATTENTION

Une mention **ATTENTION** signale un danger. Si la procédure, le procédé ou les consignes ne sont pas exécutés correctement, le produit risque d'être endommagé ou les données d'être perdues. En présence d'une mention **ATTENTION**, vous devez continuer votre opération uniquement si vous avez totalement assimilé et respecté les conditions mentionnées.

AVERTISSEMENT

Une mention AVERTISSEMENT signale un danger. Si la procédure, le procédé ou les consignes ne sont pas exécutés correctement, les personnes risquent de s'exposer à des lésions graves. En présence d'une mention AVERTISSEMENT, vous devez continuer votre opération uniquement si vous avez totalement assimilé et respecté les conditions mentionnées.

Dans ce guide...

Ce guide fournit des instructions et exercices détaillés sur la façon de travailler avec votre ChemStation Plus. Ce guide décrit en particulier les nouvelles fonctions accessibles par l'intégration de ChemStore dans ChemStation. Le guide est divisé comme suit :

1 Introduction

Ce chapitre présente les bases de ChemStation Plus. Il détaille et explique les étapes de travail avec cette suite logicielle. Vous y apprendrez aussi à démarrer et préparer ChemStation Plus à l'utilisation.

2 Définition d'une séquence

Ce chapitre vous explique comment définir et analyser une séquence. Vous y apprendrez aussi à attribuer une étude à votre séquence et à travailler sur les données des champs personnalisés.

3 Recherche de résultats dans ChemStation Plus

Ce chapitre vous apprend à définir une requête et à rechercher des données dans le client de revue ChemStore.

4 Révision de résultats avec le client de revue ChemStore

Ce chapitre explique comment personnaliser l'interface utilisateur du client de revue ChemStore. Vous y apprendrez aussi à consulter et évaluer les résultats.

5 Edition des résultats

Ce chapitre explique comment obtenir et filtrer les données et comment créer des rapports de ces résultats dans le client de revue ChemStore.

6 Retraitement par lots

Ce chapitre explique comment sélectionner une procédure de transmission pour revue de lots, comment transmettre le lot à ChemStation Plus et comment modifier les résultats dans ChemStation Plus.

Table des matières

1	Introduction 7
	Principe de ChemStation Plus 8
	Méthode de travail avec ChemStation Plus 10
	Démarrage de ChemStation Plus 12 Ouverture de session ChemStation 12
2	Définition d'une séquence 15
	Sélection d'une séquence 16
	Attribution d'une étude et de champs personnalisés 17
	Analyse d'une séquence 23
3	Recherche de résultats dans ChemStation Plus 25
	Construction d'une requête 26
4	Révision de résultats avec le client de revue ChemStore 35
	Présentation de l'interface utilisateur 36
	Modification de la présentation de l'interface utilisateur 38
	Options de présentation 38
5	Edition des résultats 43
	Méthode de travail pour création de rapport 44
	Comment filtrer les données 46

Création de rapport 53

Table des matières

6 Retraitement par lots 55

Création et chargement de lots 56

Intégration manuelle 60



Agilent ChemStation Plus Guide de mise en route

Introduction

1

Principe de ChemStation Plus 8 Méthode de travail avec ChemStation Plus 10 Démarrage de ChemStation Plus 12

Ce chapitre présente les bases de ChemStation Plus. Il détaille et explique les étapes de travail avec cette suite logicielle. Vous y apprendrez aussi à démarrer et préparer ChemStation Plus à l'utilisation.



Introduction Principe de ChemStation Plus

1

Principe de ChemStation Plus

ChemStation Plus est un système de données en réseau (NDS) intégré. ChemStation Plus fonctionne en mode client/serveur. L'objectif essentiel du logiciel est de permettre à un laboratoire de répondre aux exigences de la FDA concernant les enregistrements et signatures électroniques décrits dans le document 21 CFR Part 11. ChemStation Plus est proposé en différentes versions et peut être installé avec plusieurs options de configuration.

ChemStation Plus s'adapte aux méthodes de travail d'un laboratoire d'analyse chimique pour le développement de méthodes, l'acquisition de données, le traitement de ces données, leur stockage, leur révision et la création des rapports correspondants.

ChemStation Plus est une suite de programmes. Chaque programme de la suite a des fonctions spécifiques.

ChemStation

ChemStation commande une large gamme d'instruments d'analyse Agilent. ChemStation est conçu pour l'acquisition de données chromatographiques 2 et 3D et dispose d'un ensemble très complet d'outils logiciels pour l'analyse qualitative et quantitative des données.

ChemStore

ChemStore gère les résultats de ChemStation. Une base de données permet de rechercher, de réviser et de mettre en forme dans des rapports toutes les données correspondantes.

Pack de sécurité

Le Pack de sécurité assure les fonctions de sécurité et de traçabilité imposées par la conformité réglementaire et pour assurer la conservation sécurisée des enregistrements.

1

Pack de validation de méthodes

Le Pack de validation de méthodes est une option de ChemStore qui fournit les outils nécessaires à l'organisation, l'automatisation et la documentation des études de validation de méthodes.

ChemAccess

ChemAccess est un logiciel conçu pour travailler avec plusieurs ChemStations reliés à un serveur par un réseau. ChemAccess contrôle et surveille les ChemStations et leurs instruments commandés par accès à distance.

Méthode de travail avec ChemStation Plus

Méthode de travail avec ChemStation Plus

ChemStation Plus organise les travaux d'un laboratoire d'analyse. ChemStation et ChemStore s'associent pour couvrir toutes les tâches d'exploitation. Certaines tâches telles que l'acquisition de données ou le calcul de résultats sont effectuées dans ChemStation. Les tâches de révision et d'évaluation des récapitulatifs de données sont assurées par ChemStore.

Organisation courante du travail

Configurez ChemStation Plus au départ.

- a Définissez les champs personnalisés nécessaires.
- **b** Créez une étude. Une étude est un dossier qui recevra les données après une analyse.
- 1 Effectuez les analyses et l'acquisition des données dans la vue de ChemStation Method and Run Control (Commande de méthode et d'analyse).
 - a Définissez une séquence.
 - b Attribuez une étude et des données de champs personnalisés.
 - c Analysez la séquence.
- 2 Définissez une requête dans ChemStore.
- 3 Révisez les données dans le client de revue ChemStore.
 - a Rejetez, approuvez ou marquez des analyses pour retraitement.
 - **b** Créez un lot d'analyses.
- 4 Retraitez les analyses dans la vue de ChemStation Data Analyses (Traitement de données).
 - a Chargez le lot d'analyses Chemstore.
 - **b** Retraitez le lot d'analyses.
 - c Corrigez la méthode de traitement.
- **5** Définissez et imprimez des rapports et graphiques.

Le schéma ci-dessous présente la méthode de travail courante avec ChemStation Plus. Les tâches encadrées en pointillés s'effectuent dans ChemStation, celles qui sont encadrées en traits pleins s'effectuent dans ChemStore.

Méthode de travail avec ChemStation Plus



Figure 1 Organisation du travail dans ChemStation Plus

Démarrage de ChemStation Plus

Démarrage de ChemStation Plus

Avant de commencer

- Votre administrateur a :
 - installé tous les logiciels nécessaires pour ChemStation Plus.
 - configuré les instruments.
 - défini la base de données à utiliser pour démonstration et livrée avec ChemStore (ChemStoreDemo).
 - créé les études et champs personnalisés.

Consultez le Guide d'installation pour plus de détails sur les procédures correspondantes.

Ouverture de session ChemStation

1 Sélectionnez Start (Démarrer) > Program (Programmes) > ChemStations > Instrument 1 Offline (Instrument 1 hors ligne).

Name:	chemist	- Log or
Password:	******	Exit
1 doomoid.	J	Help
Database —		

Figure 2 Ouverture de session

- a Entrez dans le champ Name (Nom) chemist.
- **b** Entrez dans le champ **Password (Mot de passe)** chemist.
- c Cliquez sur le bouton Log on (Ouvrir une session).

1

2 Un message vous signale que votre mot de passe est périmé.

ChemSto	bre C/S: Log On 🔀
•	Your password has expired! Please specify a new password now.
	ОК



- a Accusez réception du message en cliquant sur OK.
- **3** La boîte de dialogue **Change User Password (Changement de mot de passe de** l'utilisateur) apparaît.

Jser Name:	chemist	
Old Password:	*****	
New Password:	*****	
Confirm Password:	*****	

Figure 4 Changement de mot de passe

- a Entrez dans le champ Old Password (Ancien mot de passe) Chemist.
- **b** Entrez dans le champ **New Password (Nouveau mot de passe)** par exemple 12345678.
- c Entrez dans le champ Confirm Password (Confirmation de mot de passe) par exemple 12345678.
- d Cliquez sur le bouton **OK** pour modifier le mot de passe.

Démarrage de ChemStation Plus

4 L'interface utilisateur de ChemStation Plus s'ouvre en vue Method and Run Control (Commande de méthode et d'analyse).



Figure 5 Interface utilisateur de ChemStation Plus

5 Pour démarrer le client de revue ChemStore sélectionnez View (Vue) > Chemstore Review Client (Client de revue ChemStore).



Agilent ChemStation Plus Guide de mise en route

2

Définition d'une séquence

Sélection d'une séquence16Attribution d'une étude et de champs personnalisés17Analyse d'une séquence23

Ce chapitre vous explique comment définir et analyser une séquence. Vous y apprendrez aussi à attribuer une étude à votre séquence et à travailler sur les données des champs personnalisés.



Sélection d'une séquence

Une séquence est une série d'instructions d'automatisation des analyses d'échantillons. Une séquence peut effectuer automatiquement l'injection de chaque échantillon, l'acquisition et le traitement des données correspondant à une méthode spécifique, puis imprimer un rapport pour chaque échantillon. Il est possible de créer un rapport récapitulatif de tous les échantillons avec des statistiques. Chaque échantillon peut utiliser une méthode différente, il est donc possible d'appliquer des ensembles de conditions d'instrument et de paramètres d'évaluation différents pour chaque échantillon.

Avant de commencer

- · Ouvrez une session sur ChemStation.
- Utilisez ChemStation en mode Instrument 1 Offline (Instrument 1 hors ligne).

Chargement d'une séquence

- 1 Sélectionnez la vue Method and Run Control (Commande de méthode et d'analyse) de ChemStation.
- 2 Sélectionnez Sequence (Séquence) > Load Sequence (Charger une séquence) ou cliquez sur l'icône 2888.

)ateiname:	Ordner:	OK
BATCH.S DEF_LC.S DEF_LC3.S DEMO.S DGNOISE.S INSTPERF.S LOADTEST.S	C Appendix to equal	Abbrechen Netzwerk
ROBUST.S	Laufwerke:	

Figure 6 Chargement d'une séquence

- a Sélectionnez dans la boîte de dialogue Load Sequence; Instrument 1 (Chargement de séquence ; Instrument 1) c:\hpchem\1\sequence\ Batch.S.
- **b** Cliquez sur **OK**.

Attribution d'une étude et de champs personnalisés

1 Sélectionnez dans la vue Method and Run Control (Commande de méthode et d'analyse) Sequence (Séquence) > ChemStore Setup (Configuration de ChemStore).

	nsfer Settings Select Study		Custom Field Values	
Line	Location	Sample Name:	Study:	
1	Vial 5	Isocratic Std. 1	part 11 demo	
2	Vial 5	Isocratic Std. 1	part 11 demo	
3	Vial 5	Isocratic Std. 1	part 11 demo	
4	Vial 6	Isocratic Std. 2	part 11 demo	
5	Vial 7	Isocratic Std. 3	part 11 demo	

Figure 7 Configuration de séquence ChemStore

Paramètres de transmission

REMARQUE

Si le Pack de sécurité n'est pas installé, vous pouvez choisir de ne pas transmettre les données après leur acquisition.

2 Définition d'une séquence

Attribution d'une étude et de champs personnalisés

2 Cliquez sur le bouton Transfer Settings (Paramètres de transmission).

Post Sequence D	atabase Report	
<u>T</u> emplate:	Analysis Results Report	•
Destination:	File	
File type:	HTML File (*.htm)	•
File <u>n</u> ame:	DBReport	<u>S</u> elect
<u>P</u> ath:	C:\HPCHEM\1\DATA\DEMO\	

Figure 8 Paramètres de transmission

- a Sélectionnez dans la liste déroulante Template (Modèle) > Analysis Results Report (Rapport de résultats d'analyse).
- **b** Sélectionnez dans la liste déroulante **Destination > File (Fichier)**.
- c Sélectionnez dans la liste déroulante File type (Type de fichier) > HTML file (*htm) [Fichier HTML (*.htm)].
- d Cliquez sur le bouton Select (Sélectionner).

Dateiname:	Ordner:	OK
dbrenort htm	c:\hpchem\1\data\demo	
		Abbrechen
		Netzwerk
	data	
	005-0101.D	
ateityp:	 Laufwerke:	
HTML File (*.htm)	▼	

Figure 9 Sélection de l'emplacement de rapport

- e Cliquez sur OK.
- f Quittez la boîte de dialogue Transfer Settings (Paramètres de transmission) par OK.

Attribution d'étude

3 Cliquez dans la boîte de dialogue ChemStore Sequence Setup (Configuration de séquence ChemStore) sur le bouton Select Study (Sélectionner une étude).

<u>L</u> ine:	1 to 3	
<u>S</u> tudy	Quality Control	•
	1K Cancel	Help



- a Sélectionnez pour les lignes 1 à 3 de la liste déroulante **Study (Etude)** l'étude **Quality Contrôl (Contrôle qualité)**.
- **b** Cliquez sur **OK**.
- c Cliquez à nouveau dans la boîte de dialogue ChemStore Sequence Setup (Configuration de séquence ChemStore) sur le bouton Select Study (Sélectionner une étude).

Set Stud	ly: Instrume	ent 1	×
Line:	4	to 5	
<u>S</u> tudy	procaine	decay	<u> </u>
	эк	Cancel	Help

- d Sélectionnez pour les lignes 4 à 5 de la liste déroulante **Study (Etude)** l'étude **procaine decay (Disparition de la procaïne)**.
- e Cliquez sur **OK**.

Attribution d'une étude et de champs personnalisés

Attribution de champs personnalisés

4 Cliquez dans la boîte de dialogue ChemStore Sequence Setup (Configuration de séquence ChemStore) sur le bouton Custom Field Values (Valeurs de champs personnalisés).

w sequ ocaine	decay		Use Defaul	alues It Values	Filldo w n	Select all
Line	Location	Sample Name	Performance	pH (*)		
4	Vial 6	Isocratic Std. 2		7		
5	Vial 7	Isocratic Std. 3		6		

Figure 11 Valeurs de champs personnalisés

- a Sélectionnez l'option Select all (Tout sélectionner) dans le champ Calculated Peak Performance (Performance de pic calculé).
- **b** Entrez la valeur de pH pour les lignes **4** et **5**, c'est-à-dire 7 et 6.
- c Cliquez sur **OK**.

Définition d'une séquence 2

Attribution d'une étude et de champs personnalisés

	ettings	Select	Study	Custom Field Value
Line	Location	Sample Name:	Study:	
1	Vial 5	Isocratic Std. 1	Quality Control	j.
2	Vial 5	Isocratic Std. 1	Quality Control	i.
3	Vial 5	Isocratic Std. 1	Quality Control	
4	Vial 6	Isocratic Std. 2	procaine decay	i i
5	Vial 7	Isocratic Std. 3	procaine decay	

Figure 12 Configuration de séquence ChemStore

- 5 Cliquez sur OK dans la boîte de dialogue ChemStore Sequence Setup (Configuration de séquence ChemSotre).
- 6 Un message vous signale que la séquence a été modifiée.



Figure 13 Séquence modifiée

a Cliquez sur **OK** pour enregistrer les modifications de la séquence.

2 Définition d'une séquence

Attribution d'une étude et de champs personnalisés

Dateiname:	Ordner:	ПК
batch2.s	c:\hpchem\1\sequence	Abbrooken
BATCH.S DEF_LC.S DEF_LC3.S DEMO.S DGN0ISE.S INSTPERF.S LOADTEST.S BOBUIST.S	C:\ Phpchem Phi + pchem Phi + pchi Phi + pchi+ pchem Phi + pchem	Netzwerk
Dateityp:	Laufwerke:	

- 7 Enregistrez la séquence sous le nom **batch2.S**, parce que la séquence d'origine **Batch.S** est protégée contre l'écriture.
- 8 Cliquez sur **OK**.

Analyse d'une séquence

1 Cliquez sur le bouton Start (Démarrer) Series de l'interface utilisateur de la vue Method and Run Control (Commande de méthode et d'analyse).

File RupControl Jostrum	1): Method & Run Control [Laboratory Chemist]		_ D X
Method and Run Contro	BATCH & BATCH2S & Sequence		
Sequence Runni Reprocess Data M	ng ode Method BATCH.M	BATCH2.S	
Start C> Stop			2
	5.00 µl 0.000 ml/min	<u>نذ</u> ۳ <mark>ـ</mark>	
Done sample runs: 0 of 3 5 Isocratic Std. 1 005-0102.D C:.\data\Demo	00 60 70 60 40 20 10	LC Parameters Import Invloid 500 µl Tempo Flow 0.000 m/min 50g År 254,7 Stop To 0.00 min 50g År 254,7 A 100.0 %r 50g År - MapP 400 bar 50g År - MapP 0 bar 50g År - MapP 0 bar Sig Ær -	 m Ref. 550 nm Ref Ref Ref Pef ChemStation Status
C: MB free	0 1 2 min		Sequence Running
			Last Data File 005-0102.D
1			busy



ChemStation Plus analyse la séquence en fonction de la méthode sélectionnée et enregistre les données dans les études définies.

2 Définition d'une séquence

Analyse d'une séquence



Agilent ChemStation Plus Guide de mise en route

3

Recherche de résultats dans ChemStation Plus

Construction d'une requête 26

Ce chapitre vous apprend à définir une requête et à rechercher des données dans le client de revue ChemStore.



Agilent Technologies

3 Recherche de résultats dans ChemStation Plus Construction d'une requête

Construction d'une requête

Une requête est un moyen de trouver les résultats dans ChemStore après l'achèvement de l'acquisition et du transfert de données dans ChemStation. Vous pouvez construire des requêtes simples ou évoluées. Les requêtes évoluées disposent de critères de recherche supplémentaires.

Dans cette section, nous allons rechercher les données transmises par la séquence que vous venez d'analyser dans la section précédente.

Avant de commencer

• Ouvrez une session sur le client de revue ChemStore.

Création d'une requête évoluée

1 Sélectionnez dans le client de revue ChemStore File (Fichier) > Create Query (Créer une requête) > Advanced (Evoluée).

Query Builder - Advanced : <untitle< th=""><th>ed></th><th></th></untitle<>	ed>	
Download runs Only latest version All versions	C Selected Method Validation	
Select data category	Select data item of 0 entries	
Database	no data category selected	Betrieve
E Cample Organization		Cancel
		Help
		Save
		Save <u>A</u> s
		Ogen
	Add <u>w</u> here clause	
Query condition		
(Clause) Op. 🔺	AND OR
		X () X
		Modify
		Delete



Sélection des critères de recherche

- Sélectionnez dans le champ Select data category (Sélection de catégorie de données) > Database (Base de données) > Sample Organization (Société d'exemple) > Acquisition > Sequence (Séquence) > Acq. Sequence Name (Nom de sequence d'acquisition).
 - a Sélectionnez dans le champ Acq. Sequence Name (Nom de séquence d'acquisition) > Batch.S.

3 Recherche de résultats dans ChemStation Plus

Construction d'une requête

Download runs	View Studies	
 Only latest version 	C Selected Method Validation	
C All versions	 All Studies 	
elect data category	Select data item of 6 entries	
🖻 🥂 Acquisition	Acq. Sequence Name	Betrieve
⊞-	BATCH.S	Cancel
😟 🔠 Acq Condition	PH10.S	Help
🕂 🔠 Method	PH9.S	
E E Sequence	SEQUENCE.S	Save
Acq. Sequence Na		Save <u>A</u> s
Acq. Sequence Lin		Open
<u> </u>	Add where clause	
Juery condition		
(Clause) Op. 🔺	AND OR
		Modifu
		Delete
		Poiere
	-	

Figure 16 Sélection de séquence

b Cliquez sur le bouton **Add where clause... (Ajouter une clause where...)** pour définir les critères de recherche détaillée.

Where	Acq Sequenc	e		
	ial BATCH.S			_
C conta	ins			
	(negate condition)	OK	Cancel	Help

Figure 17 Ajout de clause where

- c Cochez l'option is equal (égal).
- d Sélectionnez **BATCH.S** sur la liste déroulante.
- e Cliquez sur OK.
- f La condition de requête sélectionnée est cochée dans le champ **Query con**dition (Condition de requête).

Construction d'une condition logique

- 1 Sélectionnez dans la boîte de dialogue Query Builder (Constructeur de requête) dans le champ Select data category (Sélection de catégorie de données) > Database (Base de données) > Sample Organization (Société exemple) > Study (Etude) > Study Name (Nom d'étude).
 - a Sélectionnez dans le champ Study Name (Nom d'étude) > Quality Control (Contrôle qualité).

Download runs C Only latest version C All versions	View Studies Selected Method Validation All Studies	
elect data category	Select data item of 6 entries	
Database Database	Study Name	<u>R</u> etrieve
드 - 틴ə Sample Organization 	part 11 demo Pentide Library	Cancel
Study Name	Pharma QC proceine decay	Help
Study Creator	Quality Control	Save
		Save <u>A</u> s
⊞	_	Ogen
<u>∢ </u> }	Add where clause	
Luery condition) Op. •	AND OR
Injection.Acq Sequence EQUALS 'BA	тсн.s	
		Modify
	-	 Delete

Figure 18 Sélection d'étude

b Cliquez sur le bouton **Add where clause... (Ajouter une clause where...)** pour définir les critères de recherche détaillée.

3 Recherche de résultats dans ChemStation Plus

Construction d'une requête

vnere			
Where	Study		
G is eq	ual Quality Control		-
10.00			1
C cont	ains		
20070200000000			
		 n	

Figure 19 Ajout de clause where

- c Cochez l'option is equal (égal).
- d Sélectionnez l'étude Quality Control (Contrôle qualité) sur la liste déroulante.
- e Cliquez sur OK.
- f La condition de requête sélectionnée est cochée dans le champ Query condition (Condition de requête).
- 2 Cliquez dans la boîte de dialogue Query Builder (Constructeur de requête) dans le champ Query Condition (Condition de requête) sur le bouton Open Bracket (Crochet ouvrant) .

Construction d'une requête

Download runs	View Studies	
Only latest version	C Selected Method Validation	
C All versions	G All Studies	
elect data category	Select data item of 6 entries	
Database Database	Study Name	<u>R</u> etrieve
EE_ Sample Organization E ☷ Study	Method Validation part 11 demo Bentida Library	Cancel
Study Name Study Created	Pharma QC procaine decay	Help
Study Creator	Quality Control	Save
Study Modification I	me	Save <u>A</u> s
E Sample		Ogen
	Add where clause	
luery condition		
(Clause) Op. 📩	AND OR
Injection.Acq Sequence EQUALS 1 Bun Group Study EQUALS (Quality	Gantral AND	X (()) >
		Modify
		<u>D</u> elete
		14

Figure 20 Ajout de conditions de requête

- 3 Cliquez à nouveau sur le bouton Add where clause... (Ajouter une clause where...).
 - a Cochez l'option is equal (égal).
 - **b** Sélectionnez l'étude **procaine decay (Disparition de la procaïne)** sur la liste déroulante.
 - c Cliquez sur OK.
 - d La condition de requête sélectionnée est cochée dans le champ **Query con**dition (Condition de requête).

3 Recherche de résultats dans ChemStation Plus

Construction d'une requête

Download runs	View Studies	
 Only latest version 	C Selected Method Validation	
C All versions	All Studies	
elect data category	Select data item of 6 entries	
Database	Study Name	<u>R</u> etrieve
⊡¶_ Sample Organization ⊡ ☷ Study	Part 11 demo	Cancel
🕞 Study Name	Pharma QC	Help
- 🕞 Study Created	procaine decay	
- Study Creator	Quality Control	Save
Study Modification Time		Save <u>A</u> s
E B Sample		
<u>, </u>	Add where clause j	
Juery condition		
(Clause) Op. 📩	AND OR
Injection.Acq Sequence EQUALS 'BA	TCH.S AND	
Run Group Study EQUALS 'Quality Co Bun Group Study EQUALS 'proceine r	ecaví	Modify
		 Delete
		La ballante

Figure 21 Construction d'une condition de requête logique

- e Cliquez sur la condition AND dans le champ Query condition (Condition de requête).
- f Les boutons AND et OR sont actifs.
- g Cliquez sur le bouton **OR** OR.

REMARQUE

Vous n'avez à ajouter le nom de l'étude ici que si votre nom de séquence n'est pas unique. Dans ce cas la séquence batch.s a déjà été transmise vers la base de données, donc un deuxième « critère de recherche » est nécessaire pour n'accéder qu'à « vos » données.

Construction d'une requête

Download runs	View Studies	
 Only latest version 	C Selected Method Validation	
C All versions	All Studies	
elect data category	Select data item of 6 entries	
Database	Study Name	<u>R</u> etrieve
白 틴_ Sample Organization 白 ☷ Study	Method Validation part 11 demo	Cancel
	Pharma QC procaine decay	Help
	Quality Control	Save
Study Modification Time		Save <u>A</u> s
⊕-⊞ Sample	J	Ogen
	Add <u>w</u> here clause	
Query condition		
(Clause) Op. 🔺	AND
Injection.Acq Sequence EQUALS 'BATCH	H.S' AND 🛄 🔺	X () X
Run Group.Study EQUALS 'grading Control Run Group.Study EQUALS 'procaine dec	ay'	Modify
	<u>•</u>	

Figure 22 Ajout de la condition OR

- h Cochez la troisième condition de requête pour la disparition de la procaïne.
- i Cliquez sur le bouton Close Bracket (Crochet fermant)
- j Les conditions logiques de recherche sont définies.

Enregistrement d'une requête

4 Cliquez sur le bouton Save (Enregistrer) dans la boîte de dialogue Query Builder (Constructeur de requête).



Figure 23 Enregistrement de requête

- a Entrez dans le champ New query name (Nouveau nom de requête) nouvelle requête de laboratoire.
- b Entrez dans le champ Enter comment (Commentaire) par exemple Couramment utilisée.
- c Cliquez sur le bouton Save (Enregistrer) dans la boîte de dialogue Save query definition as (Enregistrement de définition de requête sous).
- d La requête est maintenant enregistrée et peut être sélectionnée par File (Fichier) > Run Query (Exécuter une requête) > new laboratory (+) [nouveau laboratoire (+)].

Exécution d'une requête

1 Pour exécuter la requête **nouveau laboratoire** qui vient d'être créée, cliquez sur le bouton **Retrieve (Rechercher)**.



Agilent ChemStation Plus Guide de mise en route

4

Révision de résultats avec le client de revue ChemStore

Présentation de l'interface utilisateur 36 Modification de la présentation de l'interface utilisateur 38

Ce chapitre explique comment personnaliser l'interface utilisateur du client de revue ChemStore. Vous y apprendrez aussi à consulter et évaluer les résultats.



Agilent Technologies

Présentation de l'interface utilisateur

A la première ouverture du client de revue ChemStore, aucune interface utilisateur n'est définie et l'écran ne présente aucune donnée. Bien que toutes les données soient disponibles, aucune n'est affichée tant que vous n'avez pas défini une interface utilisateur et sélectionné des résultats à afficher.



Figure 24 Interface utilisateur vide

L'écran contient une barre de menu principal, une barre d'outils et les deux onglets **Sample (Echantillon)** et **Compound (Composé)**.

Menu principal Le menu principal permet d'effectuer les fonctions suivantes :

- exécution et modification de requêtes
- · choix des différentes options de consultation des résultats

	création de graphiques et de tableaux
	création et modification de filtres de données
	création et modification de l'interface utilisateur
	création, révision et traitement d'un lot d'analyses pour ChemStation
	création et modification d'un rapport
	changement de mot de passe
Barre d'outils	La barre d'outils contient des icônes correspondant aux fonctions les plus cou- rantes du menu. Pour connaître la fonction d'une icône, passez le pointeur dessus, une bulle d'aide affiche le nom de la fonction. Consultez la page 31 du Guide des concepts de ChemStation Plus pour plus d'informations sur les barres d'outils.
Onglet Sample (Echantillon)	La vue Echantillon permet de consulter chaque échantillon (nom d'échantillon et temps d'injection) séparément.
Onglet Com- pound (Composé)	La vue Composé permet d'afficher plusieurs valeurs de l'injection, par exemple : les informations correspondant au pic, au temps de rétention ou à l'aire.

Modification de la présentation de l'interface utilisateur

Vous pouvez modifier l'interface utilisateur en fonction de vos préférences. Modifiez la présentation en fonction du type de résultats à consulter et de la façon dont vous souhaitez les visualiser. Vous pouvez enregistrer votre présentation préférée.

Avant de commencer

- 1 Sélectionnez et exécutez une requête correspondant aux résultats à afficher.
- 2 Sélectionnez dans le menu Options > Change User Interface Setting (Modifier les paramètres d'interface utilisateur) > Quality Control (Contrôle qualité) ou cliquez dans la barre d'outils sur l'icône User Interface Menu (Menu Interface utilisateur) et sélectionnez Quality Control (Contrôle qualité).
- **3** Essayez les différentes options de présentation ci-dessous.

Options de présentation

REMARQUE

Toutes les données sont accessibles en consultation. L'option de présentation permet de sélectionner le type de données à consulter.

lcône	Description
	 Dans Review Layout (Présentation de revue), vous pouvez afficher : les informations d'échantillon à gauche de l'écran le chromatographe correspondant aux résultats en haut à droite de l'écran le type de table de résultats sélectionnée en bas à droite de l'écran

Tableau 1	Onglet Sample	(Echantillon)
Tableau 1	Onglet Sample	(Echantillon)

Tableau 1 Onglet Sample (Echantillo	n)
-------------------------------------	----

lcône	Description
1	 Dans Table Layout (Présentation de tableau), vous pouvez consulter : les informations d'échantillon à gauche de l'écran le type de table de résultats sélectionnée à droite de l'écran
	 Dans Chart Layout (Présentation de graphique), vous pouvez consulter : les informations d'échantillon à gauche de l'écran un graphique créé à droite de l'écran

Tableau 2 Onglet Compound (Composé)

lcône	Description
	 Dans Review Layout (Présentation de revue), vous pouvez afficher : les informations de composé à gauche de l'écran le chromatographe et le graphique correspondant aux résultats en haut à droite de l'écran le type de table de résultats sélectionnée en bas à droite de l'écran
•	 Dans Table Layout (Présentation de tableau), vous pouvez consulter : les informations de composé à gauche de l'écran le type de table de résultats sélectionnée à droite de l'écran
	Dans Chart Layout (Présentation de graphique) , vous pouvez consulter : • les informations de composé à gauche de l'écran • un graphique créé à droite de l'écran

Sélection des résultats à consulter

Vous pouvez sélectionner une large gamme de types de résultats à consulter dans la table de résultats. Pour modifier la vue de la table de résultats, sélectionnez dans le menu **Options > Columns (Colonnes) > Define... (Définir...)** ou cliquez sur l'icône

efine columns		-	
Database		data item	OK
		🕨 Run	
		Vial	Cancel
+ Acquisition	<	Sample	
🛨 💶 Processing		Volume	Help
🛨 📊 Results		Sample Type	
		Channel	
		pH	
		Compound	V
		Amount	
		Area	
		Height	Evoression
		BT	
	~~~		Format

Figure 25 Définition de colonnes

- 1 Sélectionnez dans la vue arborescente le type de données à consulter, par exemple Sample Organization (Société d'exemple) > Sample (Echantillon) > Sample Name (Nom d'échantillon).
  - a Cliquez sur la flèche vers la droite pour ajouter cette catégorie de données à votre table de résultats.

Database	<b>_</b>	data item	ОК
Sample Organization		Run	
una studu		Vial	Cancel
	<	Sample	
Sample		Volume	Help
		Sample Type	
Sample Amount		Channel	
Complete Median		pH	
		Compound	
Sample Dilution		Amount	
Sample Multiplier	-	Area	
Sample Creation Time		Height	Expression
		BT	

Figure 26 Type de données à ajouter

b Cliquez sur **OK** pour ajouter ce type de données à votre table de résultats.

# Enregistrement de l'interface utilisateur définie

1 Sélectionnez dans le menu Option > Save User Interface Setting... (Enregistrer les paramètres d'interface utilisateur...).



Figure 27 Enregistrement des paramètres d'interface utilisateur

- a Entrez un nom dans le champ New user interface setting name (Nouveau nom de paramètre d'interface utilisateur).
- **b** Entrez un commentaire (facultatif).
- c Cliquez sur **Save (Enregistrer)** pour enregistrer la nouvelle interface utilisateur.
- d Vous pouvez sélectionner la nouvelle interface utilisateur sous Options > Change User Interface Setting (Modifier les paramètres d'interface utilisateur) > nouveau laboratoire.

Votre nouvelle présentation d'interface utilisateur peut toujours être sélectionnée par l'icône

## REMARQUE

A chaque modification d'une interface utilisateur nouvelle ou fermeture du client de revue ChemStore, le programme vous propose d'enregistrer les paramètres d'interface utilisateur. Quand vous disposez d'une présentation qui vous convient, vous pouvez répondre « Non » à cette question.

#### 4 Révision de résultats avec le client de revue ChemStore

Modification de la présentation de l'interface utilisateur



Agilent ChemStation Plus Guide de mise en route

# **Edition des résultats**

Méthode de travail pour création de rapport 44 Comment filtrer les données 46 Création de rapport 53

Ce chapitre explique comment obtenir et filtrer les données et comment créer des rapports de ces résultats dans le client de revue ChemStore.



**Agilent Technologies** 

5

# Méthode de travail pour création de rapport

#### Avant de commencer

Ouvrez une session sur ChemStore en tant que chemist, consultez le Chapitre 1, « Introduction ».

#### Exécution d'une requête

Sélectionnez la requête **nouveau laboratoire** créée dans le Chapitre 4. Cette requête n'est visible que si vous avez ouvert une session en tant qu'utilisateur « chemist ».

Cliquez sur le bouton File (Fichier) > Run Query (Exécuter une requête) > nouveau laboratoire(+).

Pour exécuter la requête nouveau laboratoire, cliquez sur les boutons Execute (Exécuter) et Retrieve (Rechercher).

#### Filtre de données pour rapport

- 1 Cliquez sur le bouton Table layout (Présentation de table) du menu principal.
- 2 Sélectionnez l'onglet Compound (Composé).
- 3 Cliquez sur le bouton View (Vue) > Create Filter (Créer un filtre) du menu principal pour créer un filtre.
- 4 Sélectionnez le champ de résultat et choisissez une donnée dans la table.
- 5 Cliquez sur le bouton **Save as (Enregistrer sous)** dans la table et entrez un commentaire.
- 6 Cliquez sur le bouton **Save (Enregistrer)** dans la table pour enregistrer le filtre en cours.
- 7 Vous pouvez activer ou désactiver le filtre en cours dans le menu View (Vue)
   > Filter (Filtre) ou en cliquant sur le bouton de la barre d'outils.

#### Sélection de rapport

Cliquez sur le bouton Report (Rapport) du menu principal.

Méthode de travail pour création de rapport

- **Menu principal** Le menu principal propose les fonctions suivantes pour la création de rapport :
  - sélection de rapport pour choisir un rapport sur le menu
  - impression de rapport pour imprimer le rapport dans un fichier ou sur une imprimante

# **Comment filtrer les données**

## REMARQUE

Les critères de filtre sont déterminés par les données visibles en vue table.

#### Activation de filtre

1 Cliquez sur le bouton View (Vue) > Filter (Filtre)> On (Activer) du menu principal pour activer le filtre.

#### Sélection de filtre





- a Vous pouvez sélectionner un filtre existant pour l'utiliser.
- b Cliquez sur le bouton View (Vue) > Select Filter (Sélectionnez un filtre) > sample type sample (type d'échantillon échantillon) du menu principal pour sélectionner le filtre.

#### Création de votre menu d'interface personnalisé

Consultez le Chapitre 4, « Modification de la présentation de l'interface utilisateur », commençant à la page 38 dans ce Guide de prise en main.

#### Création de vos propres filtres

1 Cliquez sur le bouton View (Vue) > Create Filter (Créer un filtre) du menu principal pour ouvrir la table Filter – Advanced (Filtre – Evolué).

nannel	Channel	1
rocessed un No	DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100	
ersion		Cancel
anest ample ample Type eq Computer		Help
eq Modified oc Seauence		Save
1		Save <u>A</u> s
		0gen
er condition		<u>M</u> odify
		Delete



- 2 Cliquez sur un champ de résultat sélectionné.
- **3** Cliquez sur le bouton **Open (Ouvrir)**.

#### 5 Edition des résultats

**Comment filtrer les données** 

lter:	Selected filter:
🖌 Filters	Jab1
🗄 🤷 chemist	Comment:
···· W (untitled) ····· W ff ····· ↓ Jab ····· ↓ Jab ····· ↓ Jab ····· ↓ Jab ····· ↓ Jab	dd
	Filter condition:
	Sample.Sample EQUALS 1socratic Std. 3' AND Sample.pH EQUALS '6'

Figure 30 Menu Ouverture de filtre

4 Cliquez sur un filtre existant dans la vue arborescente.

	product and a second and a second and a second a	
lannel	Sample	ОК
in No.	Isocratic Std. 3	
rsion		Cancel
test mole		Holo
mple Type		
eq Computer		
oc Sequence		<u>S</u> ave
		Save As
		<u></u>
		0 <u>p</u> en
er condition		Modify
ample.Sample EQUALS Tsocratic St	1.3´ i	AND
ample.pH EQUALS '6'		<u>D</u> elete
er condition		
Sample EQUALS 1socratic St	i. 3'	AND Modify
ample.pH EQUALS '6'		<u>D</u> elete
		Delete

## **5** Cliquez sur le bouton **Open (Ouvrir)**.



6 Cliquez sur le bouton Save As (Enregistrer sous).

#### 5 Edition des résultats

**Comment filtrer les données** 

aved filter:	New filter name:
Filters	Jab1
🗄 🎦 chemist	Enter comment:
······ y <untitled> ····· y ff ····· y Jab</untitled>	dd 🖉
⊔li⊒i Jab1	×
	Filter condition:
	Sample Sample EQUALS 1socratic Std. 3' AND A Sample pH EQUALS 16'
	× ×

Figure 32 Menu Enregistrement de définition de filtre

- 7 Entrez un nom pour le nouveau filtre.
- 8 Entrez un commentaire.
- 9 Cliquez sur le bouton Save (Enregistrer).

ect result rield	Select data item(s)	
hannel rocessed un No. ersion	Sample Isocratic Std. 3	OK Cancel
atest ample ample Type eg Computer	-	Help
eq Modified roc Sequence H		Save Save As
		<u>Op</u> en
er condition	ic Std 3'	AND Modify.
ample.pH EQUALS '6'		Delete



**10** Cliquez sur le bouton **OK**.

#### 5 Edition des résultats

**Comment filtrer les données** 



Figure 34 Le filtre actif est affiché

11 Vous pouvez maintenant sélectionner ce filtre dans le menu de filtres existants.

# **Création de rapport**

#### Filtrage d'échantillon

1 Cliquez sur le bouton View (Vue) > Select Filter (Sélectionner un filtre), sélectionnez un filtre sur le menu.

#### Sélection de rapport

2 Cliquez sur le bouton **Report menu (Menu Rapport)**, sélectionnez un rapport sur le menu pour créer, modifier ou administrer un rapport.

	•
<u>⊂</u> reate Edit Manage	
Analysis Results Report [(built-in)]	-
<ul> <li>Compound Amounts Report [(built-in)]</li> </ul>	
Instrument and Run Report [(built-in)]	
Peak Details Report [(built-in)]	
Procaine Kinetics Report [(built-in)]	
Sample Summary Report [(built-in)]	
Sequence Summary Report [(built-in)]	
System Suitability Summary Report [(built-in)]	



#### Impression de rapport

3 Cliquez sur le bouton **Report preview (Aperçu de rapport)**, le rapport sélectionné est généré.

# 5 Edition des résultats

Création de rapport



Ce chapitre explique comment sélectionner une procédure de transmission pour revue de lots, comment transmettre le lot à ChemStation Plus et comment

modifier les résultats dans ChemStation Plus.

Si vous travaillez dans un environnement réglementé conforme au document CFR 21 part 11, Agilent recommande d'utiliser la revue de lots pour le retraitement de données. La revue de lots assure une traçabilité complète et automatique de tous les résultats.



**Agilent Technologies** 

# Création et chargement de lots

#### Exécution d'une requête

1 Sélectionnez sur le menu File (Fichier) > Run Query (Exécuter une requête) > Part 11 demo latest versions only (Part 11 démo dernière version seulement).



Figure 36 Exécution de requête

- 2 Pour exécuter la requête, cliquez sur les boutons **Execute (Exécuter)** et **Retrie**ve (Rechercher).
- 3 La requête est exécutée.

#### **Création de lots**

1 Sélectionnez un échantillon pour revue de lots par un clic droit sur le menu contextuel. Vous pouvez sélectionner un ou tous les échantillons.

🍠 Cher	mStore C/S	: Labora	tory Che	mist / der	mo	
File Vie	w Options	Review	Report	Administra	tion Help	
		Pa	art 11 dem	io latest ver	No s	
60			20	70.	8	
Sam	ole Comp	ound				
	Batch Pro	ocessing		@1.=		
	Approval			2.= 3.=		
	Rejecting	)				
Run 4	All For Ba	atch Proce	essina	Stat	us	
1	All For At	All For Approval		proval P	proval Pending	
2	All For Rejecting		Pending			
3				—pproval P	Pending	
4	None For	None For Batch Processing		proval F	proval Pending	
5	None For	Approva		proval P	Pending	
6	None For	None For Rejecting		proval F	Pending	

- Figure 37 Sélection d'échantillon pour le traitement par lots
- 2 Sélectionnez sur le menu Review (Révision) > Create Batch (Créer un lot) ou cliquez sur le bouton Create Batch (Créer un lot)



Figure 38 Menu Review (Revue) > Create Batch (Créer un lot)

#### **6** Retraitement par lots

Création et chargement de lots

Sample name	Origin	Injection date/time M	Sample name	Injection date/time
	1		Isocratic Std. 1	4/19/1994 7:52:24 /
			Isocratic Std. 1	4/19/1994 7:52:24)
			Fast PAH5*2 acr	10/25/1997 12:21:0
		>	jab	11/14/2003 3:25:40
			Isocratic Std. 1	4/19/1994 7:44:147
		<	Isocratic Std. 1	4/19/1994 7:52:24)
			Isocratic Std. 1	4/19/1994 8:00:34 /
		>>	Isocratic Std. 2	4/19/1994 8:33:107
			Isocratic Std. 3	4/19/1994 9:22:23 /
<b>•</b> []		×	Method   BATCH.M 11/	28/2003 11:40:00 💌
omment:			User / Operator	
atch23		*	All users	
			C <u>U</u> ser	
				-
		-		



- 3 Sélectionnez et déplacez les échantillons avec les flèches vers le tableau de droite.
- 4 Sélectionnez dans le champ Used Method (Méthode utilisée) une des options Method (Méthode) ou None (Aucune).
- 5 Sélectionnez dans la liste déroulante la méthode à utiliser pour retraiter le lot (facultatif).
- 6 Entrez un commentaire (obligatoire).
- 7 Pour faire retraiter le lot par un utilisateur particulier, sélectionnez l'utilisateur dans la liste déroulante.
- 8 Cliquez sur le bouton Submit Batch (Envoyer le lot).
- 9 Passez en vue ChemStation Plus Data Analysis (Traitement de données).

File Graphics Integration Calibration Report Spectra	Batch ChemStore View Abo	rt Help
Data Analysis	Load Batch 🔹 🕨	Disk
	Save Batch	ChemStore
▝▋▞▙▐▓▌▝▀▓▖	Save Batch As	
	Preview Batch Report	
No Signals Loaded	Output Batch Report	Overview
	ChamStore Setup	
alibration Table	Transfer Data to Database	
Enter Delete Insert Print OK	Transier Data to Database	-
# BT Signal Compound Lyl Au	1	tor Bef ISTD #

#### 1 Sélectionnez sur le menu Batch (Lot) > Load Batch (Charger un lot) > ChemStore.

Figure 40 Chargement d'un lot

Creation Lime	Creator	Comment	
1/23/2004 9:33:48/	A Laboratory Chemist	bat23	

Figure 41Lot sélectionné dans la base de données

- 2 Les lots attribués à l'utilisateur qui a ouvert une session (ou à tous les utilisateurs) s'affichent.
- 3 Sélectionnez un lot.
- 4 Cliquez sur le bouton Load Batch (Charger un lot).
- **5** Le lot est prêt pour retraitement et modification.

**REMARQUE** Consultez le guide d'utilisation du pack de sécurité et le manuel Comprendre votre ChemStation pour plus d'informations sur le retraitement par lots.

# Intégration manuelle

#### Intégration de pics

En revue de lots, toutes les fonctions de la vue de traitement de données fonctionnent comme en dehors de la revue de lots. En revue de lots, tous les fichiers de données sélectionnés pour ce lot apparaissent en bas de l'écran et peuvent être sélectionnés facilement. Les événements d'intégration manuelle peuvent être créés et enregistrés facilement avec chaque chromatogramme individuel, comme indiqué dans cette section.



Figure 42 Chromatogramme et tables pour sélection d'échantillon

- 1 Zoom sur un pic pour tracer manuellement une ligne de base.



2 Sélectionnez sur le menu Integration (Intégration) > Draw Baseline (Tracer une ligne de base).





3 Tracez manuellement une ligne de base pour le pic à intégrer.



Figure 45 Tracé manuel de ligne de base

4 Pour enregistrer la ligne de base manuelle, il suffit de sélectionner l'échantillon suivant.



5 Cliquez sur **OK** pour enregistrer les résultats modifiés.

La fenêtre **Comment for Batch Processing (Commentaire de traitement de lots)** s'ouvre. Pour assurer la conformité au document 21 CFR Part 11, il est obligatoire d'entrer un motif de modification.

redefined comments	
🗖 Baseline settings changed	🔽 Baseline drawn manually
Peakwidth parameter changed	🗖 Peak deleted
Slope sensitivity changed	🗖 Recalibrated
Area reject changed	Tangent skim set
er comment:	
er comment:	
ser comment: )mment1	
ser comment:	

Figure 47 Commentaire pour le tracé de ligne de base

- 6 Entrez un commentaire ou sélectionnez un motif prédéfini.
- 7 Cliquez sur le bouton **OK**.

## REMARQUE

Si le pack de sécurité est installé, les modifications dans l'analyse marquée sont enregistrées automatiquement dans la base de données ChemStore. Le bouton **Save Changes** (Enregistrer les modifications) près du bouton **Start (Démarrer)** est inactif. Si le pack de sécurité n'est pas installé, le bouton **Save Changes (Enregistrer les modifications)** est actif et l'utilisateur doit enregistrer manuellement les modifications effectuées.

#### Mise à jour d'étalonnage

En revue de lots, la courbe d'étalonnage est créée à partir de tous les étalons du lot. Vous trouverez plus de détails sur l'étalonnage en revue de lots dans le manuel « Comprendre votre ChemStation ».

- Sélectionnez sur le menu Batch (Lot) > Update Calibration (Mettre à jour l'étalonnage).
- 2 Le programme recalcule la courbe d'étalonnage.

#### Avant retraitement du lot

- 1 Vérifiez la validité des données de toutes les analyses.
- 2 La valeur par défaut du temps d'attente entre les analyses est de 10 secondes. Sélectionnez sur le menu Batch (Lot) > Options pour modifier le temps d'attente entre les analyses.

otions for Batch Review			
Processing   Batch Table	Current Run Report Table Report Options		
During processing of a run	the following steps will be executed		
✓ Integration			
✓ Identification/Quantita	tion		
<u> </u>	for each run as specified in		
© Batch <u>M</u> ethod			
C Batch <u>R</u> eport Optio	ns Dialog		
There is a 0 second pau	use between processing of runs.		
Signal Display			
Freeze X-Axis	If a range is specified in the loaded batch method, the freeze settings		
Freeze <u>Y</u> -Axis	have no effect.		
	Use <u>D</u> efaults		

Figure 48 Menu Options de revue de lots

3 Modifiez la pause de 10 à 0 secondes et cliquez sur le bouton **OK**.

#### **Retraitement du lot**

4 Cliquez sur le bouton **Start (Démarrer) start** pour retraiter le lot avec le nouvel étalonnage.

Le programme commence automatiquement le retraitement des analyses. Les résultats sont transmis et enregistrés dans ChemStore avec le nouvel étalonnage.

5 Sélectionnez l'option de menu Batch (Lot) > Exit Batch Review (Quitter la revue de lots) pour quitter le lot.

# Indice

## A

Activation de filtre, 46 Analyse d'une séquence, 23 Attribution d'étude, 19 Attribution de champs personnalisés, 20

## C

Chargement d'un lot, 59 Chargement d'une séquence, 16 ChemAccess, 9 ChemStation Plus, 8 ChemStore, 8 Commande de méthode et d'analyse, 14 Comment filtrer les données, 46 conformité 21 CFR Part 11, 62 Création d'une requête évoluée, 27 Création de lots, 57 Création de lots, 57 Création de vos propres filtres, 47 Création et chargement de lots, 56

## D

Définition de colonnes, 40

## E

Enregistrement d'une requête, 34 Enregistrement de l'interface utilisateur définie, 41 Envoi de lot, 58 Exécution d'une requête, 34

## 

Impression de rapport, 53 Intégration de pics, 60 Intégration manuelle, 60 Interface utilisateur vide, 36

#### L

Lot sélectionné dans la base de données, 59

#### Μ

Méthode de travail pour création de rapport, 44 Mise à jour d'étalonnage, 63 Modification de la présentation de l'interface utilisateur, 38

## 0

Organisation du travail dans ChemStation Plus, 11

## Ρ

Pack de sécurité, 8 Pack de validation de méthodes, 9

#### R

requête, 26 Retraitement du lot, 64 Revue de lots, 55

## S

Sélection de filtre, 46 Sélection de rapport, 44 Sélection des résultats à consulter, 40 séquence, 16

#### T

Tracé de ligne de base, **61** Type de données à ajouter, **40**  Indice

## www.agilent.com

## Dans ce manuel

Ce guide fournit des instructions et exercices détaillés sur la façon de travailler avec votre Agilent ChemStation Plus.

Ce guide décrit en particulier les nouvelles fonctions accessibles par l'intégration de Agilent ChemStore dans Agilent ChemStation.

© Agilent Technologies 2004

Imprimé en Allemagne 03/2004





**Agilent Technologies**