

Agilent ChemStation Plus



入門ガイド



Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2004

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

G2181-96011

エディション

03/2004

Printed in Germany

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

Microsoft® - Microsoft は米国 Microsoft Corporation の登録商標です。

ソフトウェアリビジョン

本ガイドは Agilent ChemStation Plus ソフトウェアの A.01.xx リビジョンに対して有効です。xx はソフトウェアのマイナーリビジョンを表す数字であり、本マニュアルの技術的な正確さに影響を与えないものではありません。

保証

本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、本マニュアルおよびそれに含まれる情報の商品性および特定の目的に対する適合性に関する黙示の保証を含めて（ただしそれだけには限定されない）、いかなる明示または黙示の保証も行いません。Agilent は、本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ます。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、本マニュアルの内容に対する保証条項が同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、ChemStation Plus のワークフローに関する詳しい説明と練習を扱います。本書では、特に ChemStore が ChemStation に統合されたことによって利用できるようになった新しい機能について説明します。本書は次のような構成になっています。

1 はじめに

この章では、ChemStation Plus の概念について紹介します。ここでは、本ソフトウェアスイートのワークフローを視覚化して説明します。さらに ChemStation Plus を起動して操作の準備をする方法についても学びます。

2 シーケンスの設定

この章では、シーケンスの設定と実行の方法について説明します。さらに、シーケンスにスタディを割り当てる方法や、カスタムフィールドデータの処理方法についても学びます。

3 ChemStation Plus から結果を探す

この章では、クエリーを設定し、ChemStore レビュークライアントでデータを取得する方法について学びます。

4 ChemStore レビュークライアントの結果レビュー

この章では、ChemStore レビュークライアントのユーザーインターフェイスをカスタマイズする方法について学びます。さらに、結果の表示や評価の方法についても説明します。

5 結果のレポートを作成する

この章では、データの取得やフィルタ処理を行う方法、および ChemStore レビュークライアントで結果のレポートを作成する方法について学びます。

6 バッチの再解析

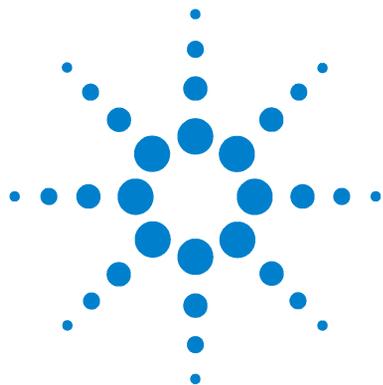
この章では、バッチレビュー用の転送プロセスを選択する方法、選択したバッチを ChemStation Plus に転送する方法、およびその結果を ChemStation Plus で編集する方法について学びます。

目次

1	はじめに	7
	ChemStation Plus の概念	8
	ChemStation Plus のワークフロー	10
	ChemStation Plus の起動	12
	ChemStation へのログオン	12
2	シーケンスの設定	15
	シーケンスの選択	16
	スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て	17
	シーケンスの実行	23
3	ChemStation Plus から結果を探す	25
	クエリーの作成	26
4	ChemStore レビュークライアントの結果レビュー	35
	ユーザーインターフェイスのレイアウト	36
	ユーザーインターフェイスのレイアウトを編集する	38
	レイアウトオプション	38
5	結果のレポートを作成する	43
	レポート作成のワークフロー	44
	データフィルタ処理の方法	46
	レポートの作成	53

目次

6	バッチの再解析	55	
	バッチの作成と読み込み		56
	マニュアル積分	61	



1 はじめに

ChemStation Plus の概念	8
ChemStation Plus のワークフロー	10
ChemStation Plus の起動	12

この章では、ChemStation Plus の概念について紹介します。ここでは、本ソフトウェアスイートのワークフローを視覚化して説明します。さらに ChemStation Plus を起動して操作の準備をする方法についても学びます。



ChemStation Plus の概念

ChemStation Plus は、統合ネットワークデータシステム (NDS) です。ChemStation Plus はクライアント / サーバー環境で動作します。このソフトウェアの主な目的は、米国食品医薬品局 (FDA) の電子記録および電子署名に対する規制 (21 CFR Part 11) にラボが準拠できるようサポートすることにあります。ChemStation Plus には、いくつかのパッケージが用意されており、インストール時にも複数の構成オプションを選択することができます。

ChemStation Plus は、メソッドの開発から始まって、データ取込、データ処理、データ保存、データレビュー、そしてレポート作成に至るまでの、化学ラボのワークフローを反映しています。

ChemStation Plus は、複数のプログラムから構成されたスイートです。スイートの各プログラムは、それぞれ固有の機能を持っています。

ChemStation

ChemStation は、Agilent のさまざまな分析装置を制御するものです。ChemStation は、2D もしくは 3D のクロマトグラフデータを取り込み、定性的および定量的なデータ分析を行うための、包括的なソフトウェアツールを提供します。

ChemStore

ChemStore は、ChemStation の結果を管理します。データベースを使うことにより、関連するあらゆるデータの取込、表示、レポート作成などを行います。

Security Pack

Security Pack は、規制へのコンプライアンスや安全な記録保存のために必要なセキュリティやトレーサビリティを提供します。

Method Validation Pack

Method Validation Pack は、ChemStore を拡張して、メソッドバリデーションスタディの整理、自動化、文書化などに必要なツールを提供します。

ChemAccess

ChemAccess は、ネットワーク経由でサーバーに接続された、複数の ChemStations で作業できるように設計されたソフトウェアです。ChemAccess は、ChemStation および ChemStation がリモートアクセスで操作している装置の制御や監視を行います。

ChemStation Plus のワークフロー

ChemStation Plus は、分析ラボのワークフローを反映しています。ChemStation と ChemStore は、互いに連携して必要な操作タスクを行います。データ取込や結果の計算などのタスクは ChemStation で行います。サマリデータのレビューや評価などのタスクは、ChemStore で行います。

一般的なワークフロー

ChemStation Plus の初期設定

- a 必要なカスタムフィールドを設定します。
- b スタディを作成します。スタディというのは、ラン後のデータを保存するフォルダです。
- 1 分析を実行し、ChemStation の **[Method and Run Control (メソッド & ランコントロール)]** ビューでデータを取り込みます。
 - a シーケンスの設定を行います。
 - b スタディおよびカスタムフィールドデータを割り当てます。
 - c シーケンスを実行します。
- 2 ChemStore でクエリーを設定します。
- 3 ChemStore レビュークライアントのデータをレビューします。
 - a ランを却下、承認する、または再解析のマークを付けます。
 - b バッチファイルを作成します。
- 4 ChemStation の **[Data Analyses (データ解析)]** ビューで再解析を行います。
 - a ChemStore バッチファイルを読み込みます。
 - b バッチファイルの再解析を行います。
 - c 処理メソッドを補正します。
- 5 レポートおよびチャートの指定と印刷を行います。

次の図は、ChemStation Plus の一般的なワークフローを視覚的に表したものです。点線で囲まれたタスクは、ChemStation によって行われ、実線で囲まれた作業は、ChemStore によって行われます。

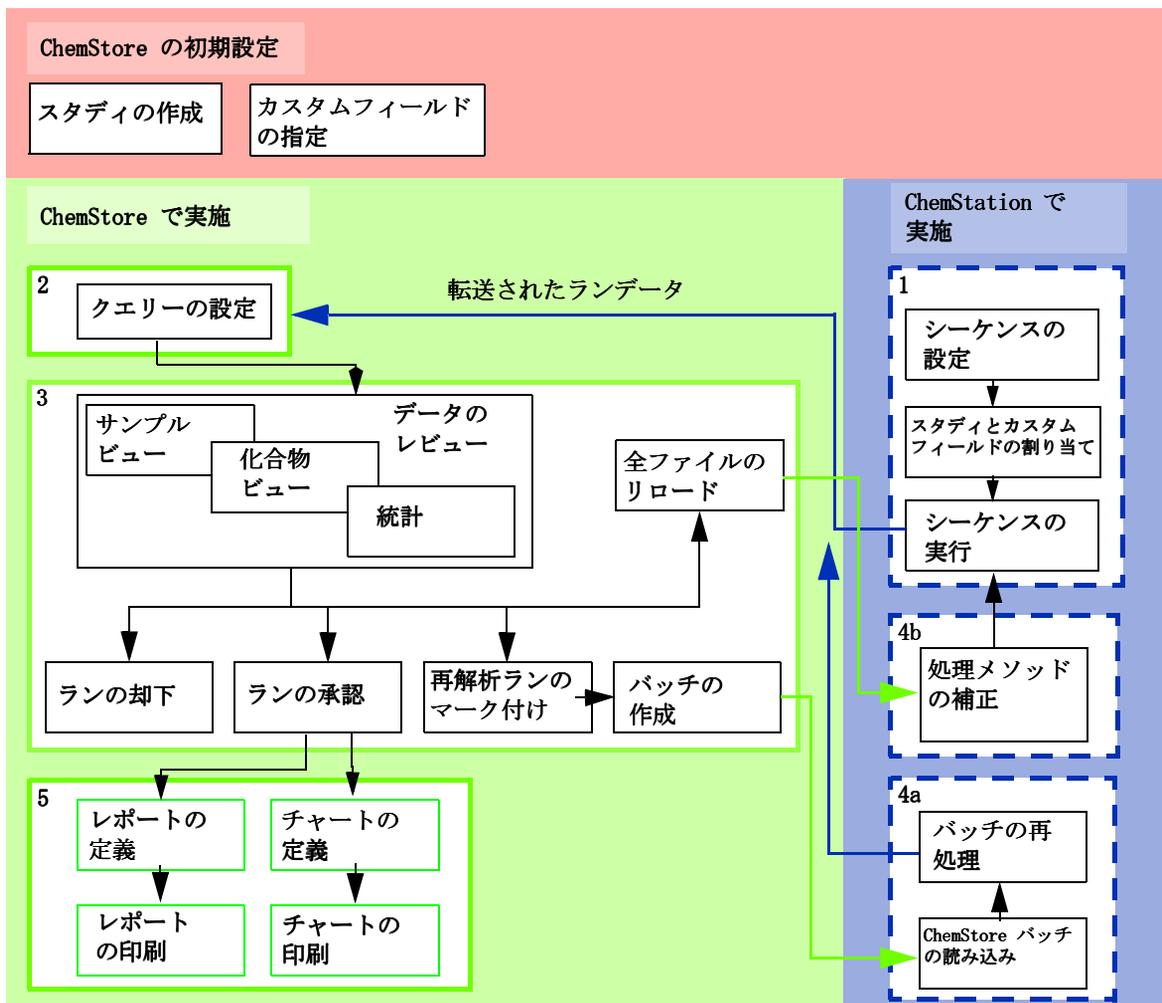


図 1 ChemStation Plus のワークフロー

ChemStation Plus の起動

始める前に

- 管理者が次の準備を行ってください。
 - ChemStation Plus に必要なソフトウェアパッケージをすべてインストールします。
 - 装置を設定します。
 - ChemStore 付属のデモ用のデータベース (ChemStoreDemo) をセットアップします。
 - スタディとカスタムフィールドを作成します。

詳しい手順については『インストールガイド』を参照してください。

ChemStation へのログオン

- 1 [Start (スタート)] > [Program (プログラム)] > [ChemStations] > [Instrument 1 Offline (装置 1 オフライン)] を選択します。

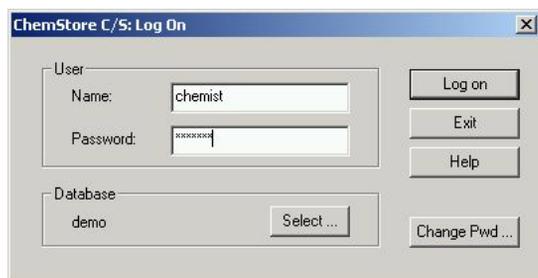


図 2 ログオン

- a [Name (名前)] フィールドに「chemist」と入力します。
- b [Password (パスワード)] フィールドに「chemist」と入力します。
- c [Log on (ログオン)] ボタンをクリックします。

- 2 パスワードの有効期限が切れたことを示すメッセージが表示されます。



図 3 パスワード有効期限切れ

- a メッセージを確認して、[OK] をクリックします。
- 3 [Change User Password (ユーザーパスワードの変更)] のダイアログボックスが開きます。

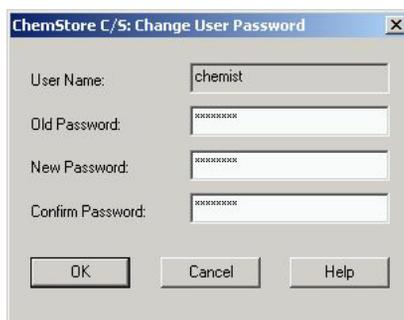


図 4 パスワードの変更

- a [Old Password (古いパスワード)] フィールドに「chemist」と入力します。
- b [New Password (新規パスワード)] フィールドに「12345678」と入力します。
- c [Confirm Password (パスワードの確認)] フィールドに「12345678」と入力します。
- d [OK] ボタンをクリックしてパスワードを変更します。

1 はじめに ChemStation Plus の起動

- 4 [Method and Run Control (メソッド & ランコントロール)] ビューに ChemStation Plus のユーザーインターフェイスが表示されます。

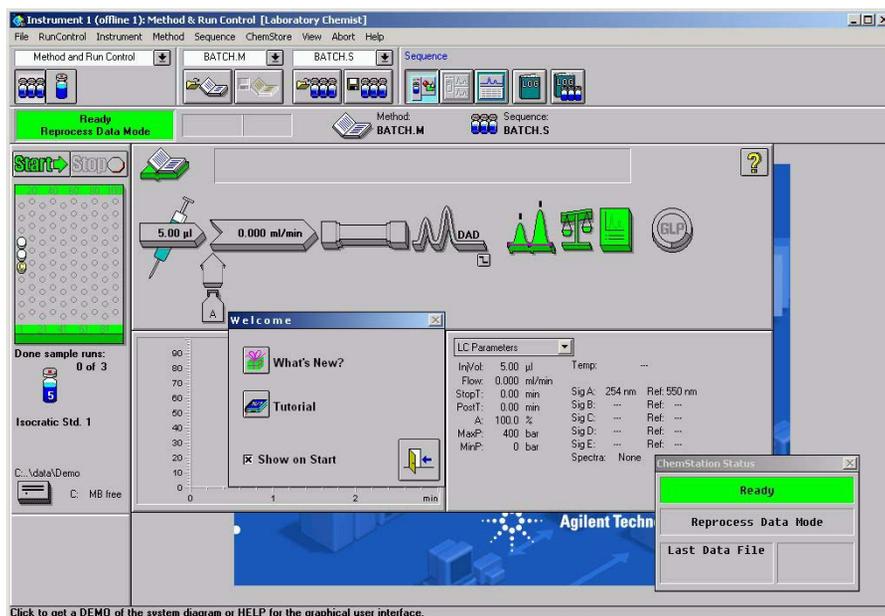
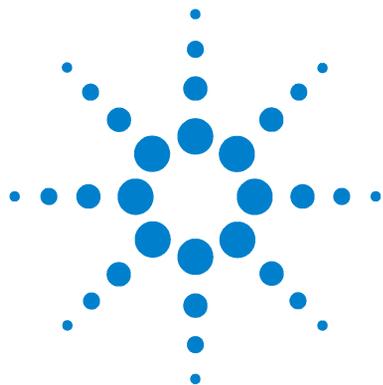


図 5 ChemStation Plus のユーザーインターフェイス

- 5 ChemStore レビュークライアントを起動するには、[View (表示)] > [Chemstore Review Client (ChemStore レビュークライアント)] を選択します。



2 シーケンスの設定

シーケンスの選択	16
スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て	17
シーケンスの実行	23

この章では、シーケンスの設定と実行の方法について説明します。さらに、シーケンスにスタディを割り当てる方法や、カスタムフィールドデータの処理方法についても学びます。



シーケンスの選択

シーケンスというのは、サンプル分析を自動化するための一連の命令のことです。シーケンスを使うと、各サンプルの注入、指定されたメソッドに基づくデータの取込と分析、各サンプルのレポート印刷を、自動的に行うことができます。また、全サンプルの統計を含むサマリーレポートを生成することもできます。シーケンスでは、サンプルごとに異なるメソッドを利用することができるので、各サンプルに異なる装置条件や評価パラメータのセットを適用することができます。

始める前に

- ChemStation へのログオン。
- ChemStation を「Instrument 1 Offline (装置 1 オフライン)」モードで動作させます。

シーケンスの読み込み

- 1 ChemStation で [Method and Run Control (メソッド & ランコントロール)] ビューを選択します。
- 2 [Sequence (シーケンス)] > [Load Sequence (シーケンスの読み込み)] を選択するか、 のアイコンをクリックします。

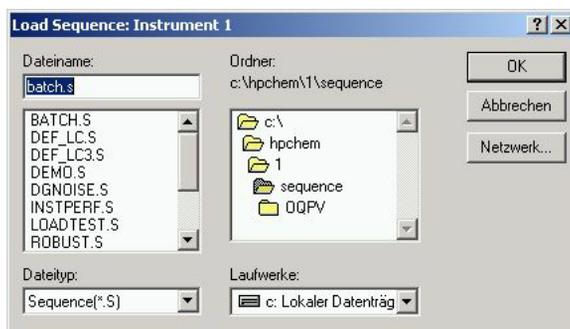


図 6 シーケンスの読み込み

- a [Load Sequence; Instrument 1 (シーケンスの読み込み、装置 1)] のダイアログボックスで、[c:\hpchem\1\sequence\ Batch.S] を選択します。
- b [OK] をクリックします。

スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て

- 1 [Method and Run Control (メソッド & ランコントロール)] ビューで、[Sequence (シーケンス)] > [ChemStore Setup (ChemStore の設定)] を選択します。

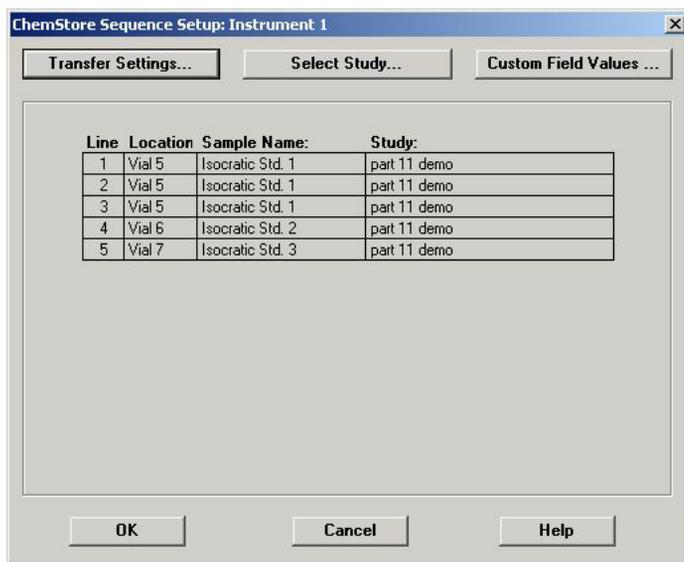


図 7 ChemStore シーケンスの設定

転送の設定

注

Security Pack がインストールされていない場合には、データ取込後の転送を行わないように選択することもできます。

2 シーケンスの設定

スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て

2 [Transfer Settings (転送の設定)] ボタンをクリックします。

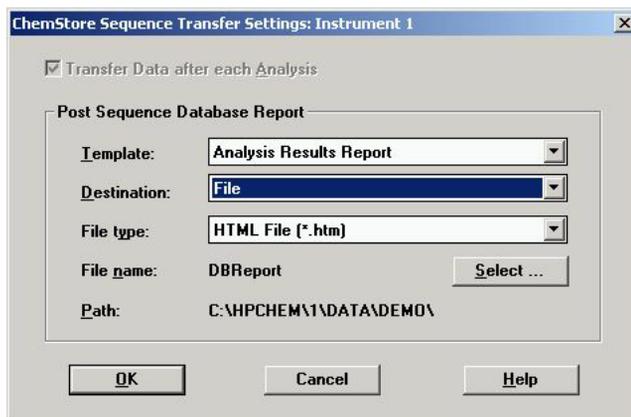


図 8 転送の設定

- a ドロップダウンリストから [Template (テンプレート)] > [Analysis Results Report (分析結果レポート)] を選択します。
- b ドロップダウンリストから [Destination (出力先)] > [File (ファイル)] を選択します。
- c ドロップダウンリストから [File type (ファイルタイプ)] > [HTML file (*.htm)] を選択します。
- d [Select (選択)] ボタンをクリックします。

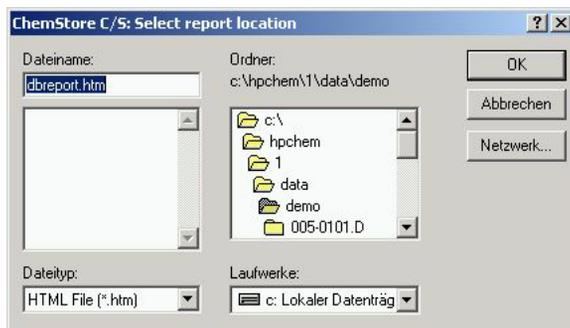


図 9 レポートの場所の選択

- e [OK] をクリックします。

- f [OK] をクリックして [Transfer Settings (転送の設定)] ダイアログボックスを終了します。

スタディの割り当て

- 3 [ChemStore Sequence Setup (ChemStore シーケンスの設定)] ダイアログボックスの、[Select Study (スタディの選択)] をクリックします。

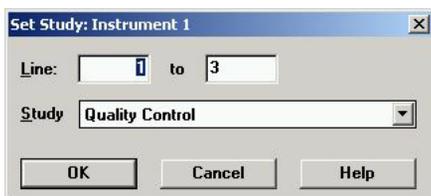
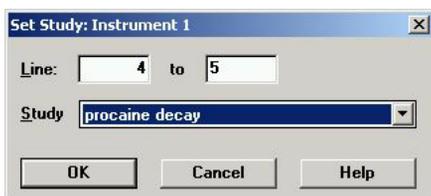


図 10 スタディの選択

- a [Study (スタディ)] ドロップダウンリストの 1～3 行について、[Quality Control] のスタディを選択します。
- b [OK] をクリックします。
- c [ChemStore Sequence Setup (ChemStore シーケンスの設定)] ダイアログボックスの [Select Study (スタディの選択)] を、再度クリックします。



- d [Study (スタディ)] ドロップダウンリストの 4～5 行について、[procaine decay] のスタディを選択します。
- e [OK] をクリックします。

2 シーケンスの設定

スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て

カスタムフィールドの割り当て

- 4 [ChemStore Sequence Setup (ChemStore シーケンスの設定)] ダイアログボックスの [Custom Field Values (カスタムフィールド値)] をクリックします。



図 11 カスタムフィールド値

- a [Calculated Peak Performance (計算されたピークパフォーマンス)] のフィールドでは、[Select all (すべてを選択)] のオプションを選択します。
- b 4 と 5 の行に、たとえば 7 と 6 のような pH 値を入力します。
- c [OK] をクリックします。



図 12 ChemStore シーケンスの設定

- 5 [ChemStore Sequence Setup (ChemStore シーケンスの設定)] ダイアログボックスで [OK] をクリックします。
- 6 シーケンスが変更されたことを示すメッセージが表示されます。

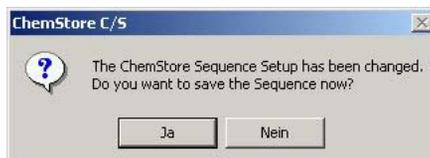
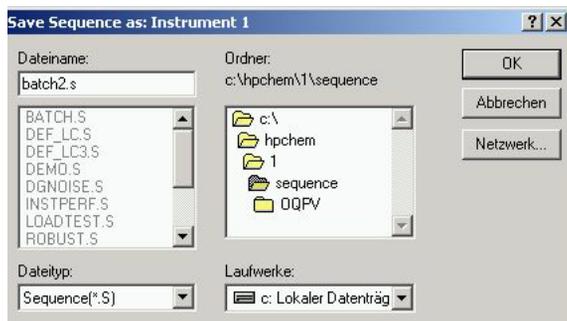


図 13 変更されたシーケンス

- a [OK] をクリックして、変更をシーケンスに保存します。

2 シーケンスの設定

スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て



- 元のシーケンス (**Batch.S**) は書き込み保護されているので、「**batch2.S**」という名前でシーケンスを保存します。
- [**OK**] をクリックします。

シーケンスの実行

- 1 [Method and Run Control (メソッド & ランコントロール)] ビューのユーザーインターフェイスにある **Start** (開始) ボタンをクリックします。

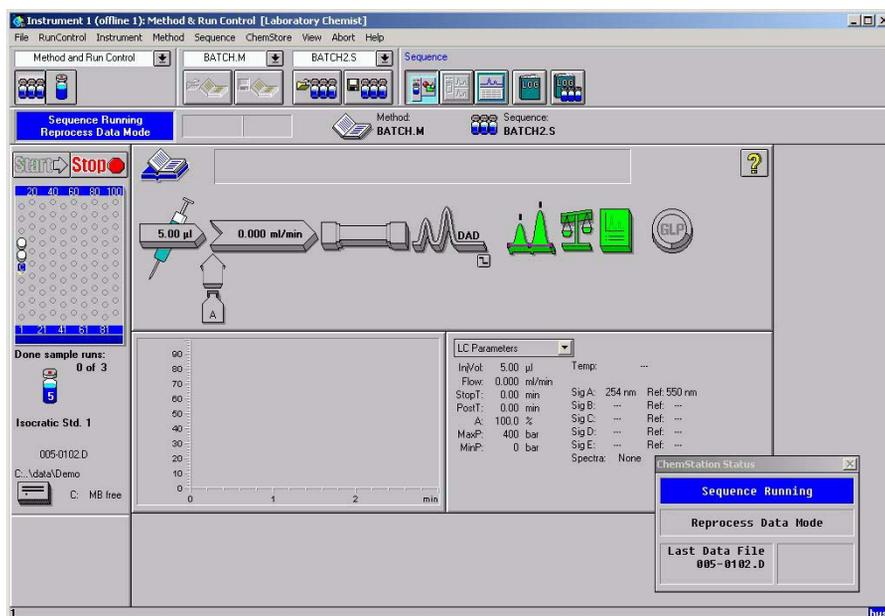
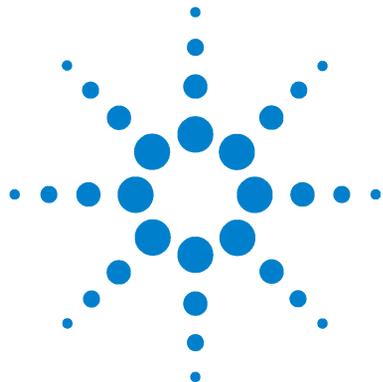


図 14 シーケンスの実行

シーケンスが選択したメソッドにしたがって実行され、指定したスタディにデータが保存されます。

2 シーケンスの設定 シーケンスの実行



3 ChemStation Plus から結果を探す

クエリーの作成 26

この章では、クエリーを設定し、ChemStore レビュークライアントでデータを取得する方法について学びます。



クエリーの作成

クエリーは、ChemStation でのデータ転送やデータ取込の後に、その結果を ChemStore から検索する手段として使用します。作成できるクエリーには、サンプルクエリーとアドバンスクエリーがあります。アドバンスクエリーでは、追加の検索条件を利用することができます。

このセクションでは、前のセクションで実行したシーケンスによって転送したデータの検索を行います。

始める前に

- ChemStore レビュークライアントにログオンします。

アドバンスクエリーの作成

- 1 [ChemStore Review (ChemStore レビュー)] で、[Client File (クライアントファイル)] > [Create Query (クエリーの作成)] > [Advanced (アドバンス)] を選択します。

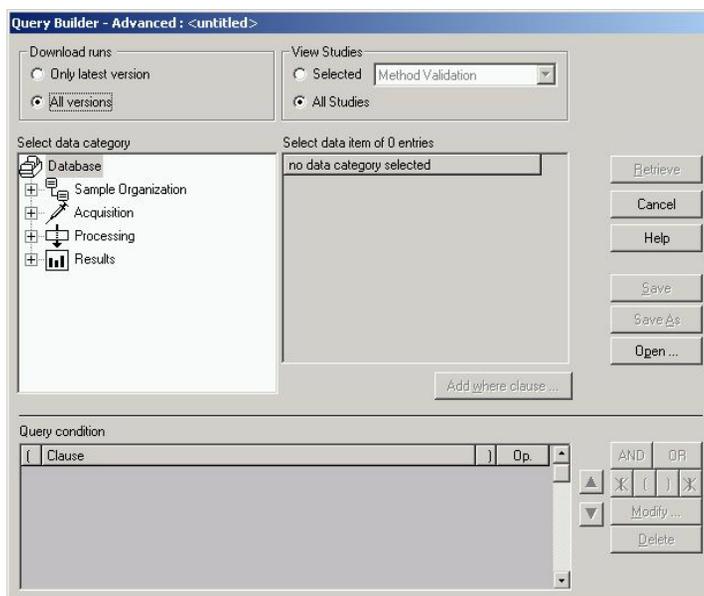


図 15 クエリーの作成

検索条件の選択

- 1 [Select data category (データカテゴリーの選択)] フィールドで、> [Database (データベース)] > [Sample Organization (サンプル構成)] > [Acquisition (取込)] > [Sequence (シーケンス)] > [Acq. Sequence Name (取込シーケンス名)] を選択します。
 - a [Acq. Sequence Name (取込シーケンス名)] フィールドの中から、「Batch. S」を選択します。

3 ChemStation Plus から結果を探す クエリーの作成

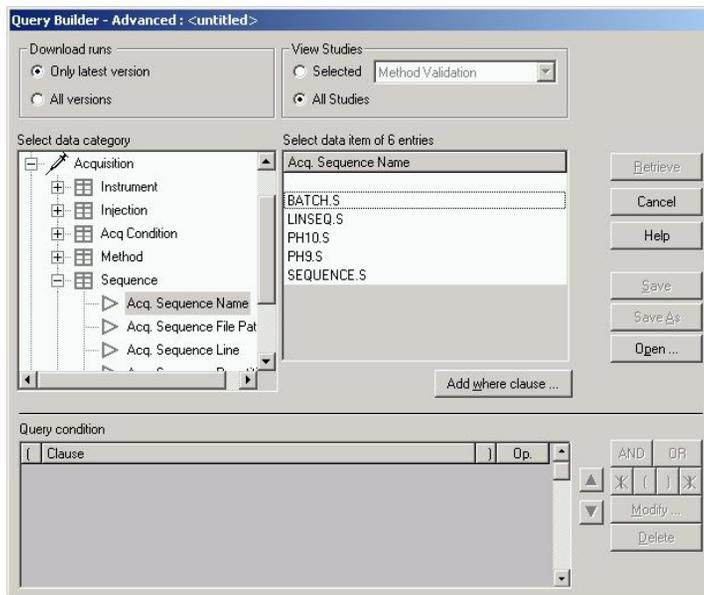


図 16 シーケンスの選択

- b [Add where clause... (WHERE 節の追加...)] ボタンをクリックして、詳細な検索条件を指定します。

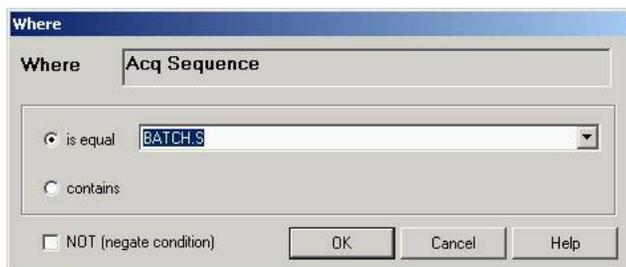


図 17 WHERE 節の追加

- c [is equal] オプションをチェックします。
d ドロップダウンリストから「BATCH.S」を選択します。
e [OK] をクリックします。
f 選択したクエリー条件が [Query condition (クエリー条件)] フィールド

ドに表示されます。

論理条件の作成

1 [Query Builder] ダイアログボックスの [Select data category (データカテゴリの選択)] フィールドで、[Database (データベース)] > [Sample Organization (サンプル構成)] > [Study (スタディ)] > [Study Name (スタディ名)] を選択します。

a [Study Name (スタディ名)] フィールドで「Quality Control」を選択します。

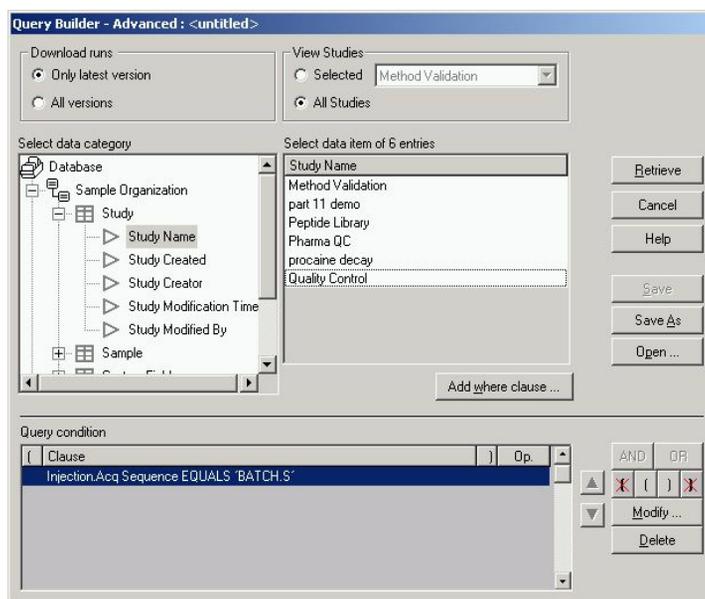


図 18 スタディの選択

b [Add where clause... (WHERE 節の追加...)] ボタンをクリックして、詳細な検索条件を指定します。

3 ChemStation Plus から結果を探す クエリーの作成



図 19 WHERE 節の追加

- c [is equal] オプションをチェックします。
- d ドロップダウンリストから「Quality Control」を選択します。
- e [OK] をクリックします。
- f 選択したクエリー条件が [Query condition (クエリー条件)] フィールドに表示されます。

- 2 [Query Builder] ダイアログボックスの [Query Condition (クエリー条件)] フィールドにある、 (左括弧) のボタンをクリックします。

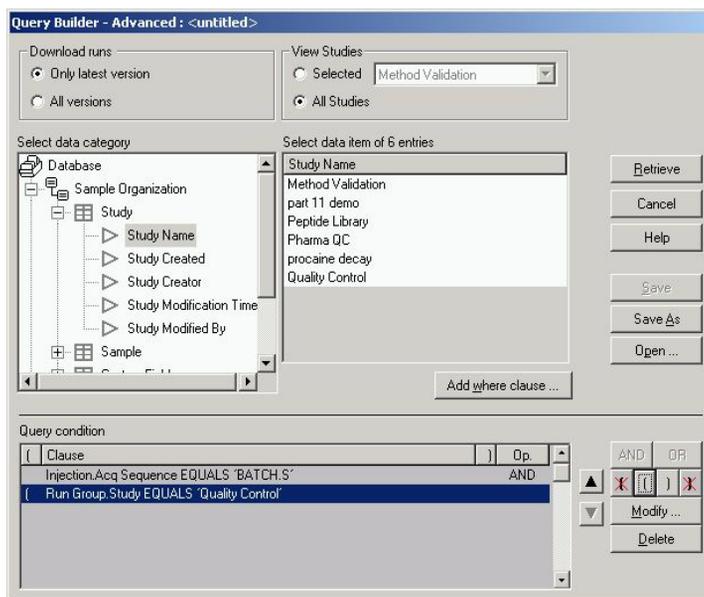


図 20 クエリー条件の追加

- 3 [Add where clause... (WHERE 節の追加...)] ボタンを再度クリックします。
- [is equal] オプションをチェックします。
 - ドロップダウンリストから「procaine decay」を選択します。
 - [OK] をクリックします。
 - 選択したクエリー条件が [Query condition (クエリー条件)] フィールドに表示されます。

3 ChemStation Plus から結果を探す クエリーの作成

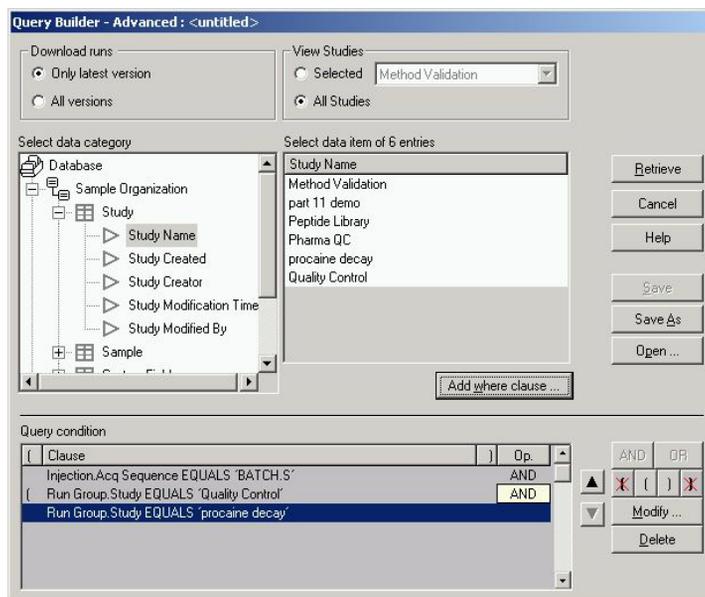


図 21 論理クエリー条件の作成

- e [Query condition (クエリー条件)] フィールドの [AND] をクリックします。
- f [AND] と [OR] の両方のボタンがアクティブになります。
- g  ボタンをクリックします。

注

シーケンスに一意の名前が付けられていれば、ここでスタディ名を追加する必要はありません。この場合、すでに「batch.s」というシーケンスがデータベースに転送されているので、ユーザー独自のデータを取得する場合のみ、2番目の「検索条件」が必要になります。

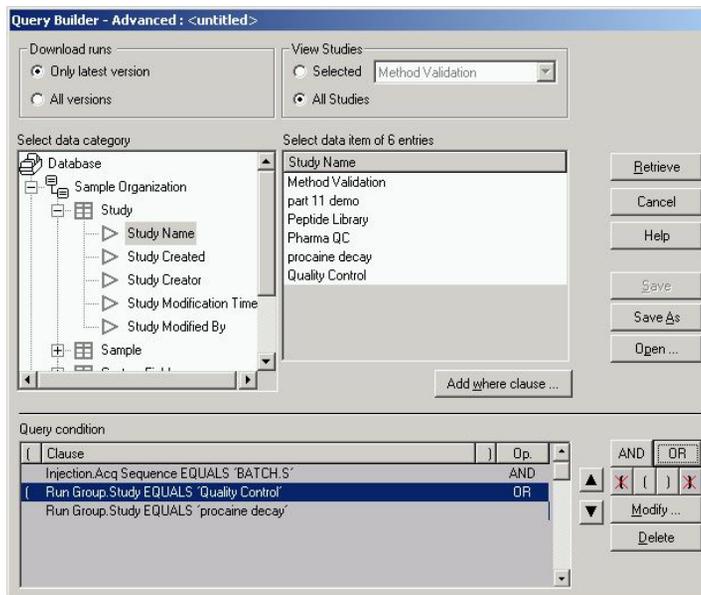


図 22 OR 条件の追加

- h 3 番目の「procaine decay」のクエリー条件をチェックします。
- i  (右括弧) ボタンをクリックします。
- j これで、論理検索条件が設定されました。

3 ChemStation Plus から結果を探す クエリーの作成

クエリーの保存

4 [Query Builder] ダイアログボックスの [Save (保存)] をクリックします。

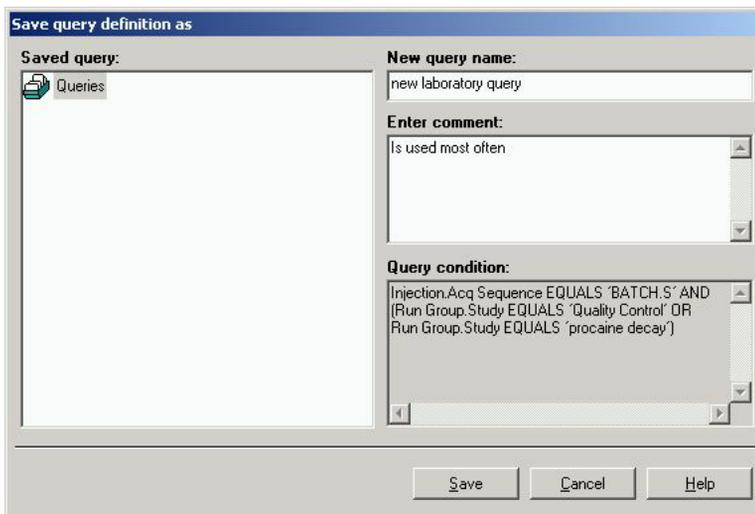
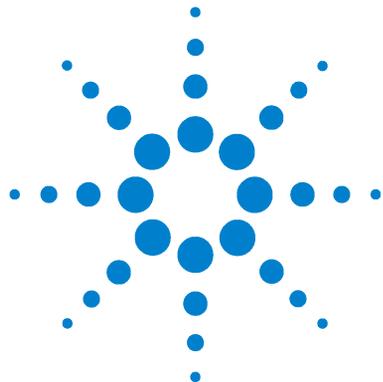


図 23 クエリーの保存

- a [New query name (新規クエリー名)] フィールドに「new laboratory query」と入力します。
- b [Enter comment (コメントの入力)] フィールドに「Is used most often」と入力します。
- c [Save query definition as (クエリー定義に名前を付けて保存)] ダイアログボックスの [Save (保存)] をクリックします。
- d クエリーが保存されます。保存されたクエリーは、[File (ファイル)] > [Run Query (クエリーの実行)] > [new laboratory (+)] から選択することができます。

クエリーの実行

- 1 上で作成した「新規ラボ」クエリーを実行するには、[Retrieve (取得)] ボタンをクリックします。



4 ChemStore レビュークライアントの 結果レビュー

ユーザーインターフェイスのレイアウト	36
ユーザーインターフェイスのレイアウトを編集する	38

この章では、ChemStore レビュークライアントのユーザーインターフェイスをカスタマイズする方法について学びます。さらに、結果の表示や評価の方法についても説明します。



4 ChemStore レビュークライアントの結果レビュー ユーザーインターフェイスのレイアウト

ユーザーインターフェイスのレイアウト

ChemStore レビュークライアントを始めて開くと、ユーザーインターフェイスが定義されていないため、画面にデータが表示されません。データ自体は存在しますが、ユーザーインターフェイスを定義して、表示する結果を選択するまで何も表示されません。

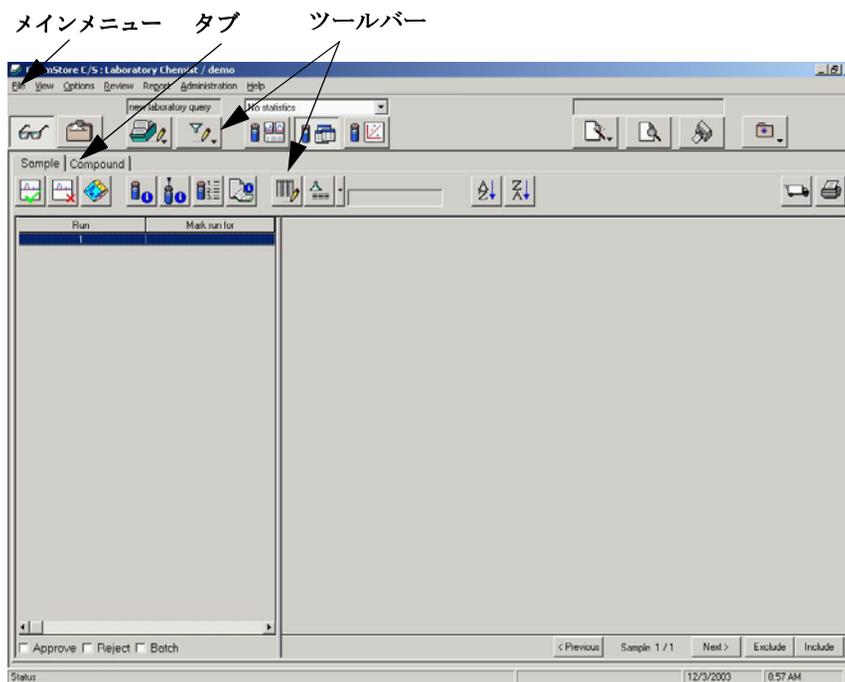


図 24 空のユーザーインターフェイス

この画面レイアウトに含まれるのは、メインメニューのメニューバー、メインツールバー、および [サンプル] と [化合物] の 2 つのタブだけです。

メインメニュー メインメニューからは、次の機能を利用することができます。

- クエリーの実行と編集
- 異なる結果表示オプションの選択

- チャートやテーブルの作成
- データフィルタの作成と編集
- ユーザーインターフェイスの作成と編集
- ChemStation 用のランのバッチを作成、レビュー、処理
- レポートの作成と編集
- パスワードの変更

- ツールバー** ツールバーには、メニューの中で最もよく使われる機能に対応するアイコンが含まれています。アイコンの上にカーソルを移動すると、そのアイコンの機能を示すポップアップヘルプが表示されます。ツールバーについての詳しい情報は、ChemStation Plus 『コンセプトガイド』の 31 ページを参照してください。
- サンプルタブ** サンプルビューは、各注入（サンプル名と注入時間）を別々に表示する際に使います。
- 化合物タブ** 化合物ビューは、ピーク情報、リテンションタイム、面積など注入に関するいくつかの値を表示する際に使います。

ユーザーインターフェイスのレイアウトを編集する

ユーザーインターフェイスは、好みに合わせて編集することができます。ユーザーインターフェイスレイアウトの編集は、表示したい結果の種類や、その視覚化の方法に応じて行います。編集したレイアウトは保存することが可能です。

始める前に

- 1 結果を表示したいクエリーを選択して実行します。
- 2 メニューから [Options (オプション)] > [Change User Interface Setting (ユーザーインターフェイス設定の変更)] > [Quality Control] を選択するか、ツールバーの  (ユーザーインターフェイスメニュー) アイコンをクリックして、[Quality Control] を選択します。
- 3 次のレイアウトオプションを選択します。

レイアウトオプション

注

ここでは、あらゆるデータを表示することができます。レイアウトオプションでは、表示したいデータの種類を選択します。

表1 サンプルタブ

アイコン	説明
	<p>レビューレイアウトで表示できる項目</p> <ul style="list-style-type: none">• サンプル情報 (画面左側)• 結果のクロマトグラフ (画面上部右半分)• 選択した種類の結果のテーブル (画面下部右半分)

表 1 サンプルタブ

アイコン	説明
	<p>テーブルレイアウトで表示できる項目</p> <ul style="list-style-type: none"> • サンプル情報 (画面左側) • 選択した種類の結果のテーブル (画面右側)
	<p>チャートレイアウトで表示できる項目</p> <ul style="list-style-type: none"> • サンプル情報 (画面左側) • 作成したチャート (画面右半分)

表 2 化合物タブ

アイコン	説明
	<p>レビューレイアウトで表示できる項目</p> <ul style="list-style-type: none"> • 化合物情報 (画面左側) • 結果のクロマトグラフとチャート (画面上部右半分) • 選択した種類の結果のテーブル (画面下部右半分)
	<p>テーブルレイアウトで表示できる項目</p> <ul style="list-style-type: none"> • 化合物情報 (画面左側) • 選択した種類の結果のテーブル (画面右側)
	<p>チャートレイアウトで表示できる項目</p> <ul style="list-style-type: none"> • 化合物情報 (画面左側) • 作成したチャート (画面右半分)

4 ChemStore レビュークライアントの結果レビュー ユーザーインターフェイスのレイアウトを編集する

表示する結果を選択する

結果テーブルに表示するデータは、さまざまな種類のデータの中から選択することができます。結果テーブルの表示を編集するには、メニューから [Options (オプション)] > [Columns (列)] > [Define... (定義...)] を選択するか、テーブルのアイコン  を選択します。

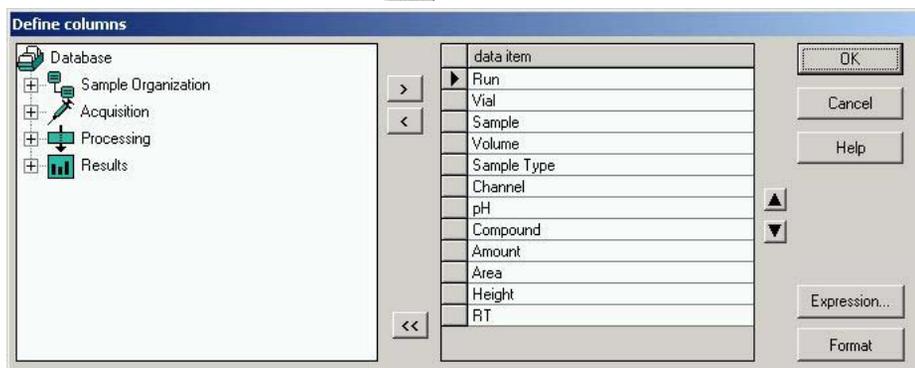


図 25 列の定義

1 ツリービューから、[Sample Organization (サンプル構成)] > [Sample (サンプル)] > [Sample Name (サンプル名)] のように、表示するデータの種類を選択します。

- a 選択したデータカテゴリを結果テーブルに追加するには、右向きの矢印をクリックします。

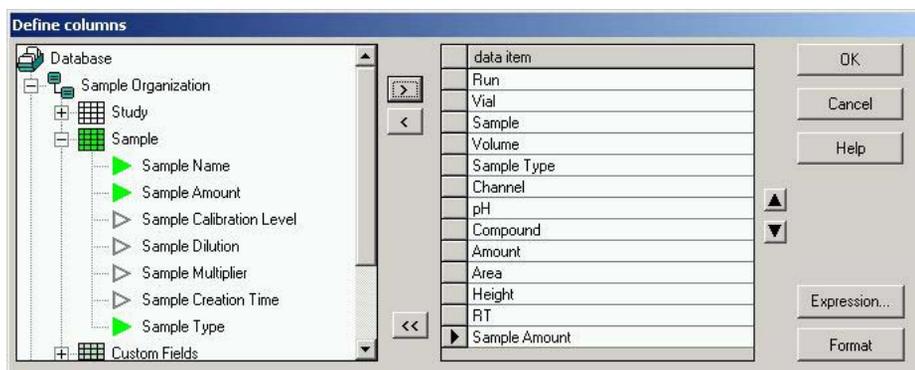


図 26 追加されたデータタイプ

- b [OK] をクリックして、選択したデータタイプを結果テーブルに追加します。

定義したユーザーインターフェイスを保存する

- 1 メニューから、[Option (オプション)] > [Save User Interface Setting... (ユーザーインターフェイス設定の保存...)] を選択します。

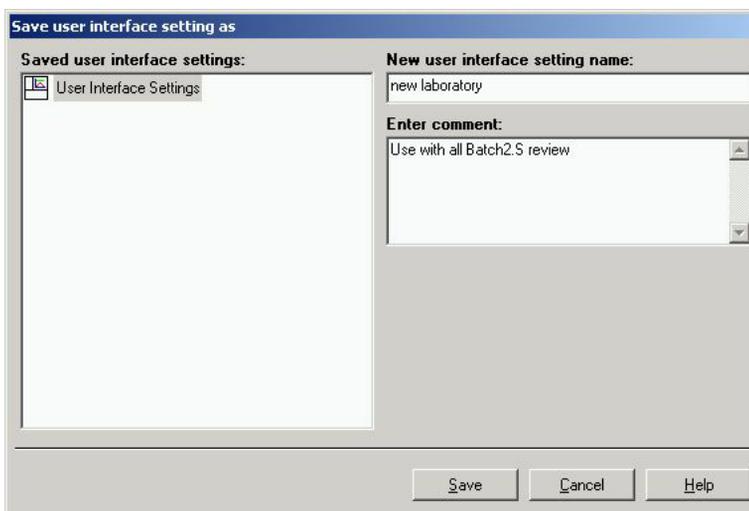


図 27 ユーザーインターフェイス設定の保存

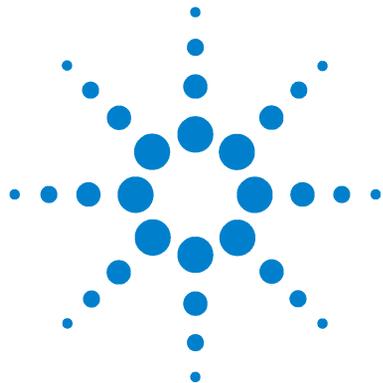
- a [New user interface setting name (新規ユーザーインターフェイス設定名)] フィールドに名前を入力します。
- b コメントを入力します (オプション)。
- c [Save (保存)] をクリックして、新たなユーザーインターフェイスを保存します。
- d 保存したユーザーインターフェイスは、[Options (オプション)] > [Change User Interface Setting (ユーザーインターフェイス設定の変更)] > [new laboratory] から選択することができます。

これで、作成したユーザーインターフェイスのレイアウトは、 アイコンから適宜選択できるようになります。

注

保存したユーザーインターフェイスを変更する、または ChemStore レビュークライアントを閉じるたびに、ユーザーインターフェイスの設定を保存するかどうかを尋ねられます。レイアウトを変更する必要がない場合は、必ず「No」を選択してください。

4 ChemStore レビュークライアントの結果レビュー ユーザーインターフェイスのレイアウトを編集する



5 結果のレポートを作成する

レポート作成のワークフロー	44
データフィルタ処理の方法	46
レポートの作成	53

この章では、データの取得やフィルタ処理を行う方法、および ChemStore レビュークライアントで結果のレポートを作成する方法について学びます。



レポート作成のワークフロー

始める前に

ChemStore に「chemist」という名前でログオンします (第 1 章「はじめに」参照)。

クエリーの実行

第 4 章で作成した「new laboratory」というクエリーを選択します。このクエリーは、「chemist」というユーザー名でログインしないと、表示することはできません。

[File (ファイル)] > [Run Query (クエリーの実行)] > [new laboratory(+)] ボタンをクリックします。

「new laboratory」クエリーを実行するには、[Execute (実行)] ボタンと [Retrieve (取得)] ボタンをクリックします。

レポートのデータフィルタ処理

- 1 メインメニューの [Table layout (テーブルレイアウト)] ボタンをクリックします。
- 2 化合物タブを選択します。
- 3 メインメニューの [View (表示)] > [Create Filter (フィルタの作成)] ボタンをクリックして、フィルタを作成します。
- 4 結果のフィールドを選択して、テーブルからデータ項目を選択します。
- 5 テーブルの [Save as (名前を付けて保存)] ボタンをクリックして、コメントを入力します。
- 6 テーブルの [Save (保存)] ボタンをクリックして、現在のフィルタを保存します。
- 7 現在のフィルタのオンとオフを切り替えるには、メニューから [View (表示)] > [Filter (フィルタ)] を選択するか、ツールバーの  ボタンをクリックします。

レポートの選択

メインメニューの **[report (レポート)]** ボタンをクリックします。

メインメニュー メインメニューからは、次のレポート機能を利用することができます。

- メニューからレポートを選択するレポート選択機能
- レポートをファイルやプリンタに印刷するレポート印刷機能

データフィルタ処理の方法

注

フィルタ条件は、テーブルビューに表示されている項目によって決まります。

フィルタの有効化

- 1 フィルタを有効にするには、メインメニューの **[View (表示)] > [Filter (フィルタ)] > [On (オン)]** ボタンをクリックします。

フィルタの選択

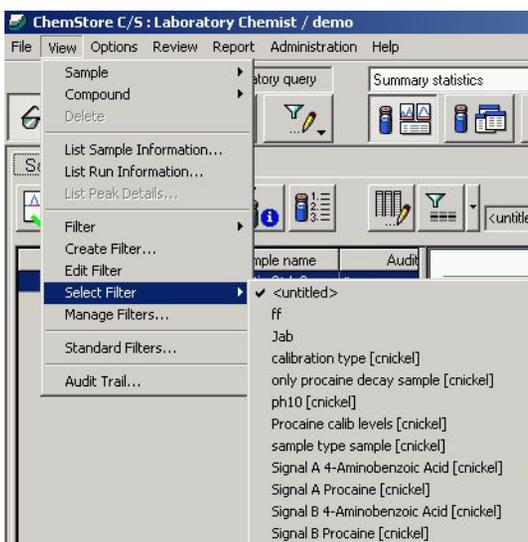


図 28 フィルタの選択

- a 既存のフィルタを選択して使用することができます。
- b フィルタを選択するには、メインメニューの **[View (表示)] > [Select Filter (フィルタの選択)] > [sample type sample (サンプルタイプ - サンプル)]** ボタンをクリックします。

ユーザーインタフェースメニューをカスタマイズする

本『入門ガイド』の、第 4 章「ユーザーインタフェースのレイアウトを編集する」(38 ページ)を参照してください。

フィルタをカスタマイズする

- 1 メインメニューの [View (表示)] > [Create Filter (フィルタの作成)] ボタンをクリックして、テーブル [Filter - Advanced (フィルタ - アドバンス)] を開きます。

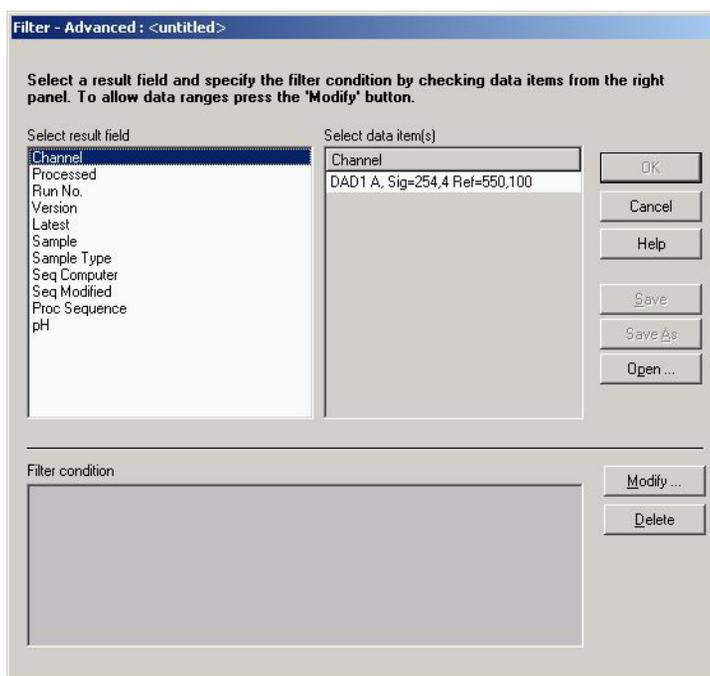


図 29 フィルタの作成

- 2 選択した結果フィールドをクリックします。
- 3 [Open (開く)] ボタンをクリックします。

5 結果のレポートを作成する データフィルタ処理の方法

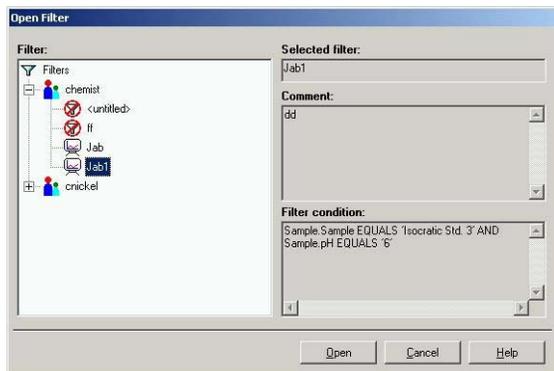


図 30 フィルタを開くメニュー

- 4 ツリービューから既存のフィルタをクリックします。

5 [Open (開く)] ボタンをクリックします。

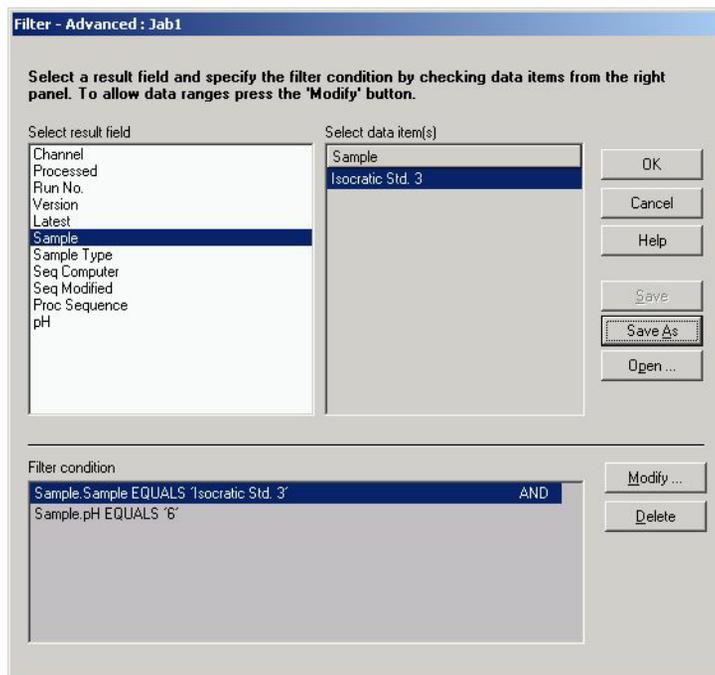


図 31 アドバンスフィルタのメニュー

6 [Save as (名前を付けて保存)] ボタンをクリックします。

5 結果のレポートを作成する データフィルタ処理の方法

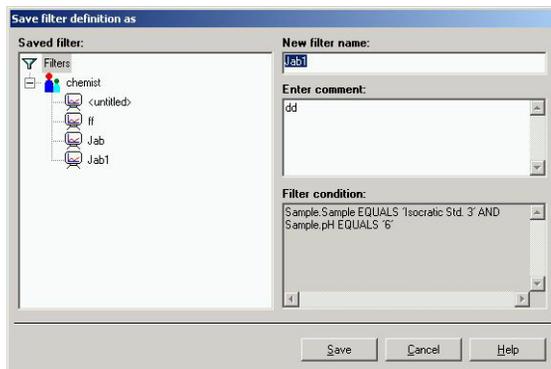


図 32 フィルタ定義の保存メニュー

- 7 新しいフィルタの名前を入力します。
- 8 コメントを入力します。
- 9 [Save (保存)] ボタンをクリックします。

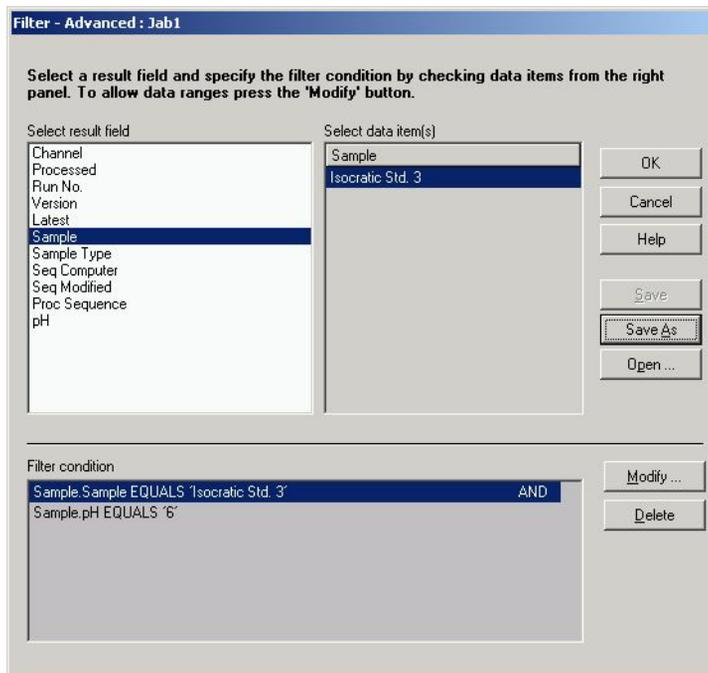


図 33 アドバンスフィルタのメニュー

10 [OK] ボタンをクリックします。

5 結果のレポートを作成する データフィルタ処理の方法

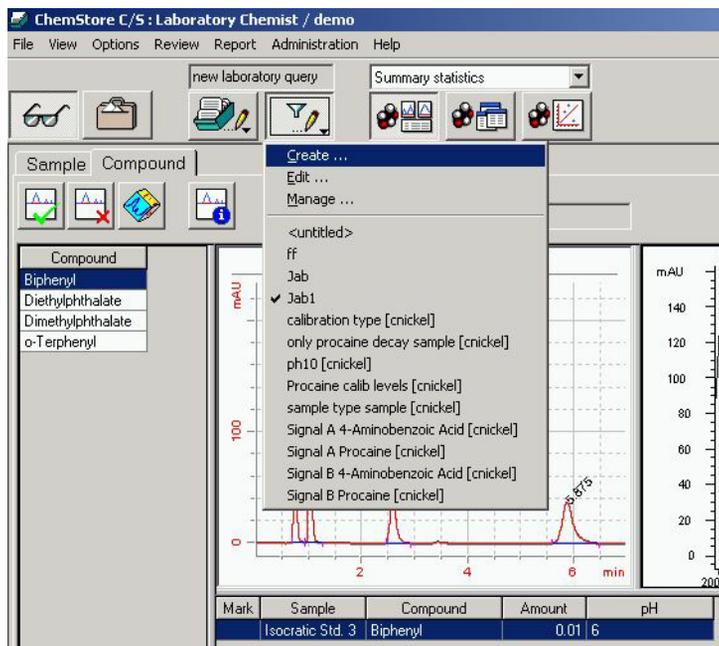


図 34 アクティブなフィルタの表示

- これで、作成したフィルタを既存のフィルタメニューから選択できるようになります。

レポートの作成

サンプルフィルタ

- 1 [View (表示)] > [Select Filter (フィルタの選択)] ボタンをクリックして、メニューからフィルタを選択します。

レポートの選択

- 2 [Report menu (レポートメニュー)] ボタンをクリックして、メニューからレポートを選択するか、レポートの作成や編集を行います。

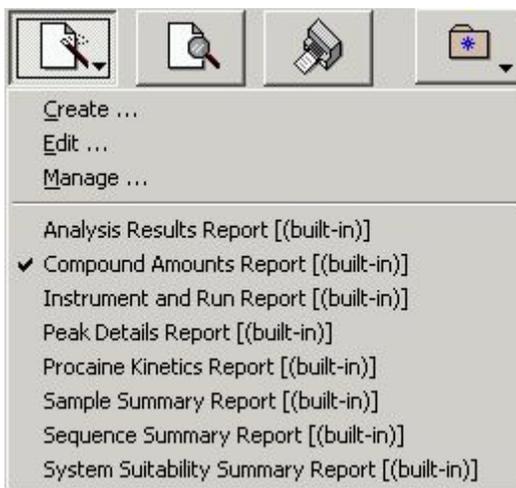


図 35 [View (表示)] > [Select filter (フィルタの選択)]

レポートの印刷

- 3 [Report preview (レポートプレビュー)] ボタンをクリックすると、選択したレポートが生成されます。

5 結果のレポートを作成する

レポートの作成

6

バッチの再解析

バッチの作成と読み込み 56

マニュアル積分 61

この章では、バッチレビュー用の転送プロセスを選択する方法、選択したバッチを ChemStation Plus に転送する方法、およびその結果を ChemStation Plus で編集する方法について学びます。

CFR 21 part 11 に準拠する環境で作業している場合には、データ再解析にバッチレビューを使うことを推奨します。バッチレビューは、全結果の自動的で完全なトレーサビリティを保証します。



バッチの作成と読み込み

クエリーの実行

- 1 メニューから [File (ファイル)] > [Run Query (クエリーの実行)] > [Part 11 demo latest versions only] を選択します。

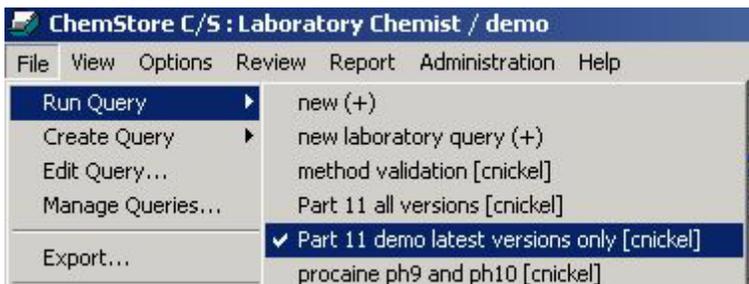


図 36 クエリーの実行

- 2 クエリーを実行するには、[Execute (実行)] ボタンと [Retrieve (取得)] ボタンをクリックします。
- 3 クエリーが実行されます。

バッチの作成

- 1 コンテキストメニューで、バッチレビュー用のサンプルを右クリックで選択します。サンプルは、1つだけ選択することも、全サンプルを選択することも可能です。

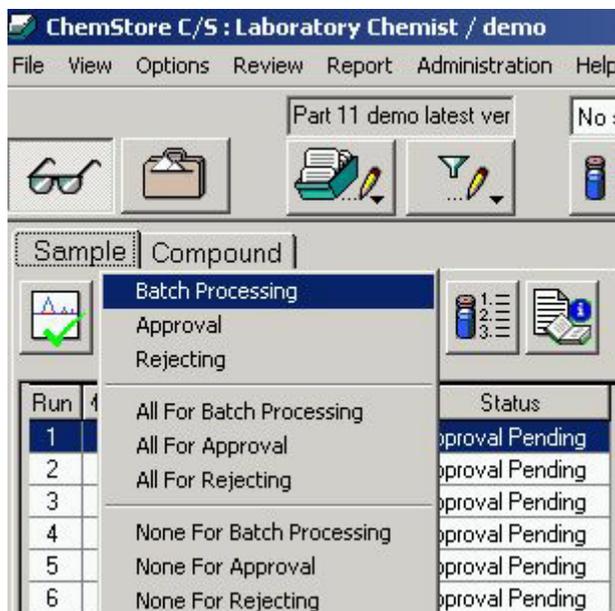


図 37 バッチ処理用サンプルの選択

6 バッチの再解析

バッチの作成と読み込み

- メニューから [Review (レビュー)] > [Create Batch (バッチの作成)] という項目を選択するか、 (バッチの作成) ボタンをクリックします。

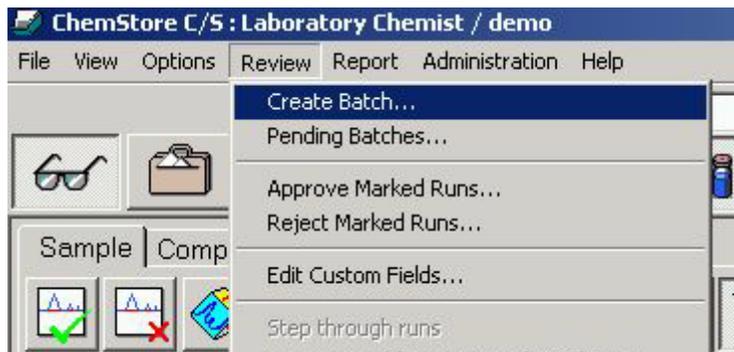


図 38 メニュー [Review (レビュー)]> [Create Batch (バッチの作成)]

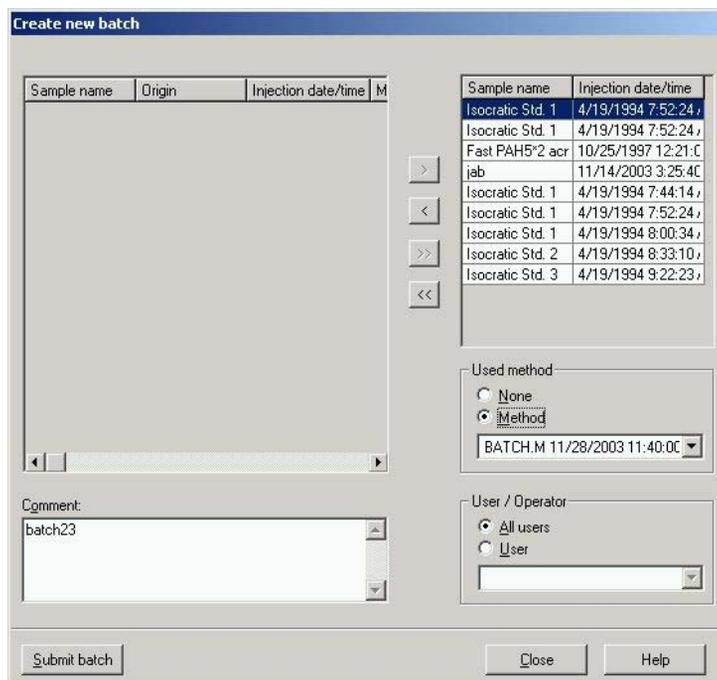


図 39 バッチの提示

- 3 サンプルを選択し、右矢印を使って右側のテーブルに移動します。
- 4 [Used Method (使用メソッド)] フィールドから、[Method (メソッド)] もしくは [None (なし)] のどちらかのオプションを選択します。
- 5 ドロップダウンリストから、バッチの再処理に使うメソッドを選択します (オプション)。
- 6 コメントを入力します (必須)。
- 7 バッチの再処理を特定のユーザーが行う場合は、そのユーザーをドロップダウンリストから選択します。
- 8 [Submit Batch (バッチの提示)] ボタンをクリックします。
- 9 ChemStation Plus [Data Analysis (データ解析)] ビューに切り替えます。

6 バッチの再解析 バッチの作成と読み込み

- 1 メニューから [Batch (バッチ)] > [Load Batch (バッチの読み込み)] > [ChemStore] を選択します。

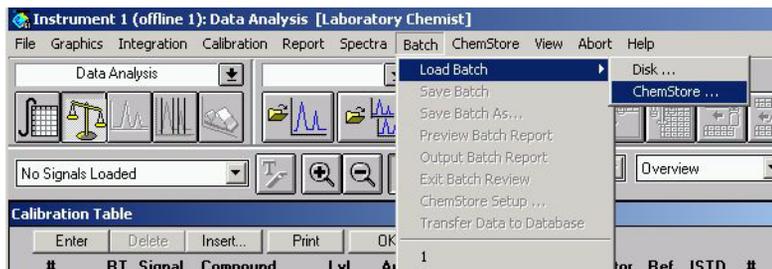


図 40 バッチの読み込み

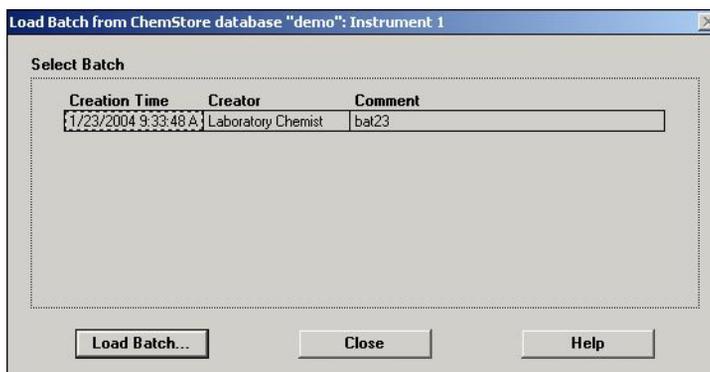


図 41 データベースで選択されたバッチ

- 2 現在のログインユーザー（もしくは全ユーザー）に割り当てられたバッチが表示されます。
- 3 バッチを選択します。
- 4 [Load Batch (バッチの読み込み)] ボタンをクリックします。
- 5 これで、バッチの再処理や編集を行うことができます。

注

バッチ再処理に関する詳しい情報については、『Security Pack ユーザーガイド』や『ChemStation の理解』などのマニュアルを参照してください。

マニュアル積分

ピーク積分

バッチレビューでは、データ解析ビューの全機能は、バッチレビューがない場合と同じように機能します。またバッチ用に選択されたデータファイルのすべてが、画面の下半分に表示されるため、選択しやすくなっています。後述するように、マニュアル積分イベントの作成も簡単に行うことができ、各クロマトグラムと共に保存することができます。

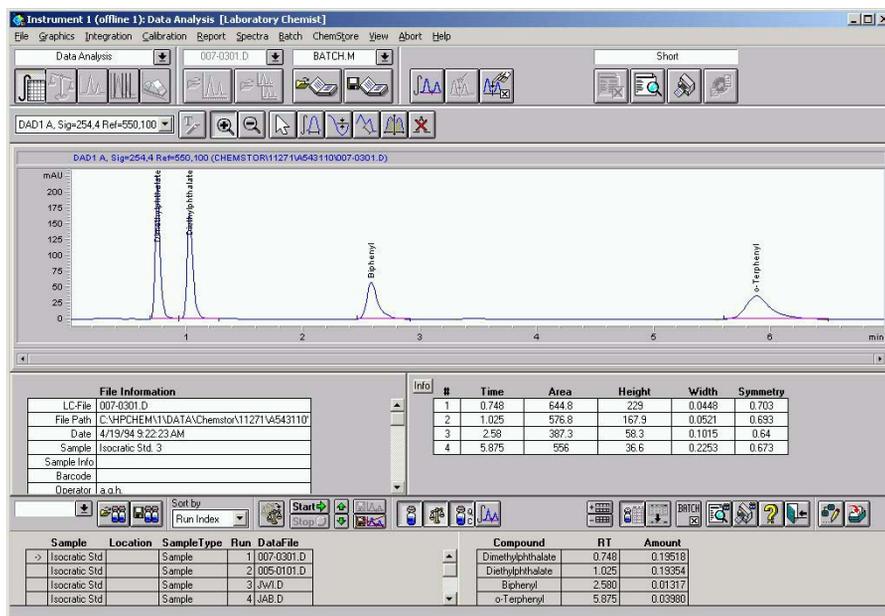


図 42 クロマトグラムとサンプル選択用のテーブル

6 バッチの再解析 マニュアル積分

- 1 手動でベースラインを引きたいピークを拡大表示します。



図 43 拡大表示されたピーク

- 2 メニューから [Integration (積分)] > [Draw Baseline (ピークのベースラインを描く)] を選択します。

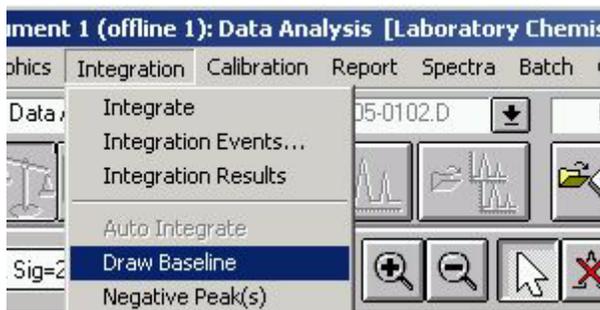


図 44 ピークのベースラインを描く

- 3 積分するピークに対して手動でベースラインを引きます。

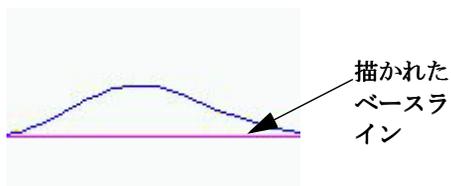


図 45 手動で描いたベースライン

4 次のサンプルを選択すると、手動で描いたベースラインが保存されます。



図 46 「結果の変更」メッセージ

5 [OK] をクリックして、変更した結果を保存します。

[Comment for Batch Processing (バッチ処理のコメント)] ウィンドウが開きます。21 CFR Part 11 に準拠して作業している場合には、変更理由を記述するコメントを入力する必要があります。

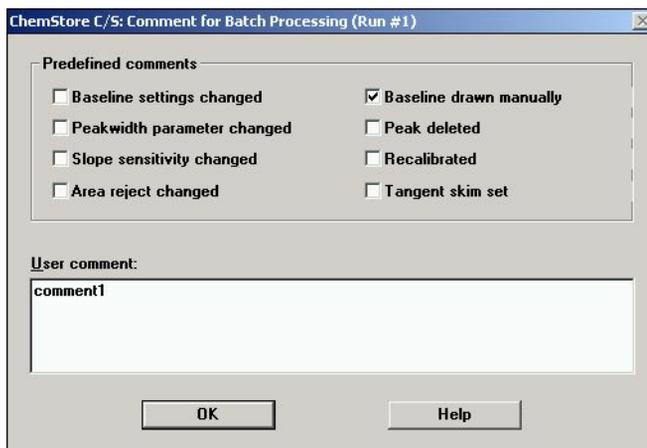


図 47 ベースラインを描く際のコメント

6 コメントを入力するか、定義済みのコメントを選択します。

7 [OK] ボタンをクリックします。

注

Security Pack をインストールしている場合、マークされたランに対する変更は、ChemStore データベースに自動的に保存されます。この場合、**[Start (開始)]** ボタンのとなりの **[Save Changes (変更を保存)]** ボタンは非アクティブのままです。Security Pack をインストールしていない場合、**[Save Changes (変更を保存)]** ボタンがアクティブになり、行われた変更は、手動で保存する必要があります。

キャリブレーションの更新

バッチレビューでは、バッチに含まれる標準のすべてを使って検量線が作成されます。バッチレビューのキャリブレーションの詳細については、マニュアル『ChemStation の理解』を参照してください。

- 1 メニューから **[Batch (バッチ)]** > **[Update Calibration (キャリブレーションの更新)]** を選択します。
- 2 検量線が再計算されます。

バッチ再処理を行う前に

- 1 すべてのランについてデータの有効性をチェックします。

- 2 ラン間の待ち時間のデフォルトは、10 秒です。メニューから [Batch (バッチ)] > [Options (オプション)] を選択して、ラン間の待ち時間を変更します。

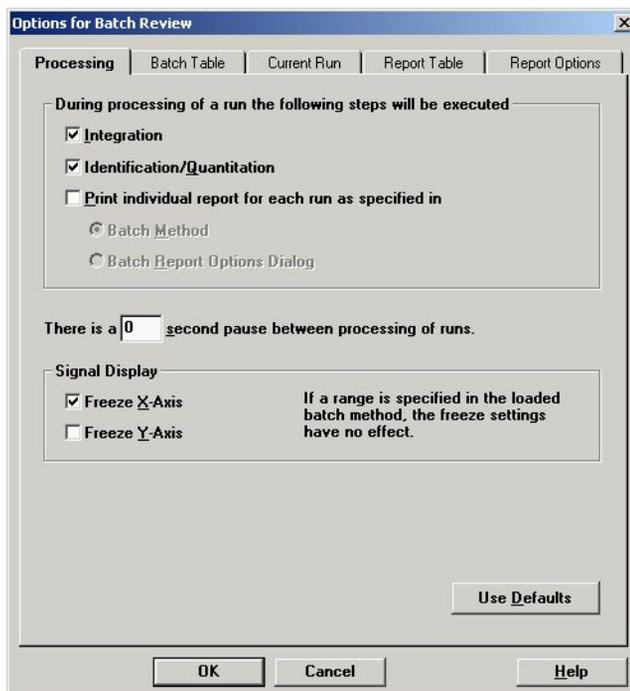


図 48 バッチレビューのオプションメニュー

- 3 待ち時間を 10 秒から 0 秒に変更して、[OK] ボタンをクリックします。

6 バッチの再解析 マニュアル積分

バッチの再処理

- 4  (開始) ボタンをクリックして、新しいキャリブレーションでバッチを再処理します。

ランの再処理が自動的に開始されます。結果は ChemStore に転送され、新たなキャリブレーションと共に保存されます。

- 5 バッチを終了するには、メニューから [Batch (バッチ)] > [Exit Batch Review (バッチレビューを終了)] を選択します。

索引

数字

21 CFR Part 11 準拠 63

C

ChemAccess 9

ChemStation Plus 8

ChemStation Plus のワークフロー
11

ChemStore 8

M

Method Validation Pack 8

S

Security Pack 8

あ

アドバンスクエリーの作成 27

か

カスタムフィールドの割り当て
20

空のユーザーインターフェイス
36

き

キャリブレーションの更新 64

く

クエリー 26

クエリーの実行 34

クエリーの保存 34

し

シーケンス 16

シーケンスの実行 23

シーケンスの読み込み 16

す

スタディの割り当て 19

つ

追加されたデータタイプ 40

て

定義したユーザーインターフェイス
を保存する 41

データフィルタ処理の方法 46

データベースで選択されたバッチ
チ 60

は

バッチの再処理 66

バッチの作成 57

バッチの作成と読み込み 56

バッチの提示 59

バッチの読み込み 60

バッチレビュー 55

ひ

ピーク積分 61

ピークのベースラインを描く 62

表示する結果を選択する 40

ふ

フィルタの選択 46

フィルタの有効化 46

フィルタをカスタマイズする 47

ま

マニュアル積分 61

め

メソッド&ランコントロール 14

ゆ

ユーザーインターフェイスのレイ
アウトを編集する 38

れ

列の定義 40

レポート作成のワークフロー 44

レポートの印刷 53

レポートの作成 53

レポートの選択 45

www.agilent.com

本書の内容

本書では、Agilent ChemStation Plus のワークフローに関する詳しい説明と練習を扱います。

本書では、特に Agilent ChemStore が Agilent ChemStation に統合されたことによって利用できるようになった新しい機能について説明します。

© Agilent Technologies 2004

Printed in Germany
03/2004



G2181-96011



Agilent Technologies