# Agilent ChemStation Plus





© 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 <sup>®</sup> - 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 を与える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 る黙示の保障を含めて(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障も行い 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、製品の損失にいたるおそれがある 損失にいたるおそれがある 操作起します。指示された系 たされるまで、全無視した たされるまで、主意を無視して たされるまでしなりません。

# 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

バッチの作成と読み込み 56

マニュアル積分 61



Agilent ChemStation Plus 入門ガイド

はじめに

1

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。

## はじめに 1

ChemStation Plus の概念

# 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。 1 はじめに

ChemStation Plus のワークフロー

# 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。
- 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、実線に囲まれた作業は、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。

| Name:     | chemist | Log or |
|-----------|---------|--------|
| riano.    |         | Exit   |
| Password: | *****   | Help   |
| atabase   |         |        |

### 🗵 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。

ChemStation Plus の起動

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。

| ChemSta | re C/5: Log On 🔀  |
|---------|---|
| ٩       | Your password has expired! Please specify a new password now. |
| -       | OK  |

## 🛛 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。

| Jser Name:        | chemist |
|-------------------|---------|
| IId Password:     | ******  |
| New Password:     | жижже   |
| Confirm Password: | *****   |

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。

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 Clien (ChemStore レビュークライアント)]を選択します。



Agilent ChemStation Plus 入門ガイド

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。



# 2 シーケンスの設定 シーケンスの選択

# 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

- 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。
- [Sequence (シーケンス)]> [Load Sequence (シーケンスの読み込み)] を 選択するか、 CONTAINT のアイコンをクリックします。

| Dateiname:<br>batch.s   | Ordner:<br>c:\hpchem\1\sequence | OK                    |
|---|---------------------------------|-----------------------|
| BATCH.S<br>DEF_LC.S<br>DEF_LC3.S<br>DEMD.S<br>DGNDISE.S<br>INSTPERF.S | ▲ C:\                           | Abbrechen<br>Netzwerk |
| ROBUST.S<br>Dateitun:   | laufwerke:                      |                       |

🛛 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。

#### シーケンスの設定 2

スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て

# スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て

[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。

| Transfer | 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 |                       |
|          |          |                  |              |                       |
|          |          |                  |              |                       |

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

| ⊢ 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\  |  |

### 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。

| Dateiname:   | Ordner:                               | OK        |
|--------------|---------------------------------------|-----------|
| dbreport.htm | c:\hpchem\]\data\demo                 | Abbrechen |
|              | C C C C C C C C C C C C C C C C C C C | Netzwerk  |
| Dateityp:    | <br>Laufwerke:                        |           |

- 🗵 9 レポートの場所の選択
  - **e [OK]** をクリックします。

### シーケンスの設定 2

スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て

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

 [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。

| Line:         | <b>1</b> to 3   |
|---------------|-----------------|
| <u>6</u> tudy | Quality Control |

# 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。

| et Study: Inst      | rument 1  | 2       |
|---------------------|-----------|---------|
| Line:               | 4 to 5    |         |
| <u>S</u> tudy proca | ine decay | <b></b> |
| ОК                  | Cancel    | Help    |

- **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。

# 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。

| Line L |         |                  |             |        |  |
|--------|---------|------------------|-------------|--------|--|
|        | ocation | Sample Name      | Performance | pH (*) |  |
| 4 V    | ial 6   | Isocratic Std. 2 | <b>V</b>    | 7      |  |
| 5 V    | ial 7   | Isocratic Std. 3 | ▼           | 6      |  |
|        |         |                  |             |        |  |

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。

## シーケンスの設定 2

スタディおよびカスタムフィールドデータの割り当て

|      | ansfer Settings |                  | t Study         | Custom Field Values |
|------|-----------------|------------------|-----------------|---------------------|
| Line | Location        | Sample Name:     | Study:          |                     |
| 1    | Vial 5          | Isocratic Std. 1 | Quality Control |                     |
| 2    | Vial 5          | Isocratic Std. 1 | Quality Control |                     |
| 3    | Vial 5          | Isocratic Std. 1 | Quality Control |                     |
| 4    | Vial 6          | Isocratic Std. 2 | procaine decay  |                     |
| 5    | Vial 7          | Isocratic Std. 3 | procaine decay  |                     |
|      |                 |                  |                 |                     |
|      |                 |                  |                 |                     |

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。

| hemSto | ore C/S                               |  | ×          |
|--------|---------------------------------------|--|------------|
| ?      | The ChemStore Se<br>Do you want to sa | quence Setup has bee<br>we the Sequence now? | n changed. |
|        | 1.                                    | 1  |            |

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

| Dateiname:  | Ordner:  | ОК        |
|---|--|-----------|
| batch2.s  | c:\hpchem\1\sequence   | Abbroohon |
| BATCH.S<br>DEF_LC.S<br>DEF_LC3.S<br>DEMO.S<br>DGNOISE.S<br>INSTPERF.S<br>LOADTEST.S<br>ROBUST.S | ► c:\ A pochem | Netzwerk  |
| Dateityp:   | Laufwerke:   |           |

- 7 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。
- **8** [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 Sent (開始) ボタンをクリックします。

| 🚱 Instrument 1 (offline   | 1): Method & Run Control [Laboratory Chemist] |  |                              |
|---|---|--|------------------------------|
| File RunControl Instrume  | nt Method Sequence ChemStore View Abort Help  |  |                              |
| Method and Run Contro   | BATCH M 😧 BATCH2S 🔮 Sequence                  |  |                              |
| Sequence Runni<br>Reprocess Data M  | ng<br>bde BATCH.M                             | BATCH2.S   |                              |
| Starte> Stop  |   |  | ?                            |
|   | 5.00 µl 0.000 ml/min                          |  |                              |
| Done sample runs:<br>0 of 3<br>5<br>Isocratic Std. 1<br>005-0102 D<br>C\data\Demo | 00<br>00<br>70<br>00<br>40<br>30<br>20<br>10  | LC Parameters         Imploid         500 µl         Temps           Tmyloid         5.00 µl         Temps         500 µl         Temps           Stop 1         0.00 m/m         Sig A: 254 m         254 m           Point         0.00 m/m         Sig B:            A: 1000 %         Sig D:         Mar£         400 bar         Sig E:           Mar£         0 bar         Sig E:         Spectra: No |                              |
| C: MB free  | 0 1 2 min                                     |  | Sequence Running             |
|   |   |  | Reprocess Data Mode          |
|   |   |  | Last Data File<br>005-0102.D |
| 1   |   |  | busy                         |

### 🛛 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。





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。



3 ChemStation Plus から結果を探す クエリーの作成

# 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、シ 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

 [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。

| Query Builder - Advanced : <untitle< th=""><th>ed&gt;</th><th></th></untitle<> | ed>                                   |                                       |
|--|---------------------------------------|---------------------------------------|
| C Only latest version     All versions   | C Selected Method Validation          |                                       |
| Select data category   | Select data item of 0 entries         |                                       |
| Database   | no data category selected             | <u>R</u> etrieve                      |
| 표·문 <sub>문</sub> Sample Organization   |                                       | Cancel                                |
|  |                                       | Help                                  |
| III ITESUIIS   |                                       | Save                                  |
|  |                                       | Save <u>A</u> s                       |
|  |                                       | Ogen                                  |
|  | Add where clause                      |                                       |
| Query condition  | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |                                       |
| ( Clause   | ) Op                                  | AND OR<br>X ( ) X<br>Modify<br>Delete |
|  | •                                     |                                       |

### 🛛 15 クエリーの作成

## 検索条件の選択

- [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)] > [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

| Download runs       | View Studies                    |                  |
|---------------------|---------------------------------|------------------|
| Only latest version | C Selected Method Validation    |                  |
| C All versions      | <ul> <li>All Studies</li> </ul> |                  |
| elect data category | Select data item of 6 entries   |                  |
| 🖻 🧪 Acquisition     | Acq. Sequence Name              | <u>R</u> etrieve |
|                     | BATCH.S                         | Cancel           |
| 🗄 - 🔠 Acq Condition | PH10.S                          | Help             |
| 🕀 🖽 Method          | PH9.S                           |                  |
| E E Sequence        | SEQUENCE.S                      | Save             |
| Acq. Sequence Nar   | ne                              | Save <u>A</u> s  |
|                     |                                 | Open             |
|                     | Add where clause                |                  |
| Juery condition     |                                 |                  |
| ( Clause            | ) Op. 🔺                         | AND OR           |
|                     |                                 | 🔺 🗶 ( ) ) 🛪      |
|                     |                                 | ▼ <u>M</u> odify |
|                     |                                 | <br>Delete       |
|                     |                                 |                  |

## 🛛 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。

| Where    | Acq Sequence |
|----------|--------------|
| 🕞 is equ | ual BATCH.S  |
|          | •            |

### 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

ドに表示されます。

# 論理条件の作成

- [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。

| Query Builder - Advanced : <untitled></untitled>       |  |                       |
|--|--|-----------------------|
| Download runs     Only latest version     All versions | View Studies C Selected Method Validation C All Studies Select data item of 6 pertines |                       |
| Database   | Study Name   | Betrieve              |
| E  | Method Validation<br>part 11 demo<br>Bastida Liburar                                   | Cancel                |
| Study Name   | Pharma QC  | Help                  |
| Study Created  | procaine decay   |                       |
| Study Creator  |  | Save                  |
| Study Modified By                                      |  | Save <u>A</u> s       |
| ⊡ ⊞ Sample   |  | Ogen                  |
|  | Add <u>w</u> here clause   |                       |
| Query condition  |  |                       |
| ( Clause   | ) Op. 🔺  | AND OR                |
| Injection.Acq Sequence EQUALS 'BATC                    | H.S´   | <b>X</b> ( ) <b>X</b> |
|  |  | Modify                |
|  |  | <u>D</u> elete        |
|  | •  |                       |
|  |  |                       |

## 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

| Where    | Study               |   |       |
|----------|---------------------|---|-------|
| 🕞 is equ | ual Quality Control |   | •     |
| C conta  | iins                |   |       |
|          | 7                   | 1 | 11212 |

### 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。

# ChemStation Plus から結果を探す 3

クエリーの作成

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、 (にた括弧)のボタンをクリックします。

| Download runs                             | View Studies                  |                  |
|---|-------------------------------|------------------|
| C All versions                            | All Studies                   |                  |
| elect data category                       | Select data item of 6 entries |                  |
| Database                                  | Study Name                    | <u>R</u> etrieve |
| 는 - 뜁_ Sample Organization<br>는 - = Study | Part 11 demo                  | Cancel           |
| Study Name<br>Study Created               | Pharma QC<br>procaine decay   | Help             |
| Study Creator                             | Quality Control               | Save             |
| Study Modified By                         |                               | Save <u>A</u> s  |
| 🕀 🔠 Sample                                |                               | Ogen             |
|   | Add <u>w</u> here clause      |                  |
| Juery condition                           |                               |                  |
| ( Clause                                  | ) Op. 📩                       | AND OR           |
| Injection.Acq Sequence EQUALS 'BA         | TCH.S' AND 🛄 🔒                | X TO )           |
| E Hun Group.Study EQUALS 'Quality Co      | introl                        | Modify           |
|   |                               | <u>D</u> elete   |
|   |                               |                  |

# 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。
  - a [is equal] オプションをチェックします。
  - **b** ドロップダウンリストから「procaine decay」を選択します。
  - **c [OK]** をクリックします。
  - d 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

| Download runs                           | View Studies                      |                  |
|---|-----------------------------------|------------------|
| <ul> <li>Only latest version</li> </ul> | C Selected Method Validation      |                  |
| O All versions                          | All Studies                       |                  |
| elect data category                     | Select data item of 6 entries     |                  |
| Database                                | Study Name                        | <u>R</u> etrieve |
| Sample Organization                     | Method Validation<br>part 11 demo | Cancel           |
| Study Name                              | Pharma QC                         | Help             |
| -> Study Created                        | procaine decay                    |                  |
| Study Creator                           | Quality Control                   | Save             |
| - Study Modification Tir                | ne                                | Save As          |
| Study Modified By                       |                                   |                  |
| ⊞ ⊟ Sample                              |                                   | U <u>p</u> en    |
|   | Add where clause                  |                  |
|   |                                   |                  |
| Lery condition                          |                                   | 410 00           |
| Injection Aca Sequence FOUALS 18        |                                   | AND UR           |
| Run Group.Study EQUALS 'Quality 0       | iontrol'                          |                  |
| Run Group.Study EQUALS 'procaine        | decay'                            | Modify           |
|   |                                   |                  |

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 OR 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。

ChemStation Plus 入門ガイド

| 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 |
| ∃                                | Method Validation<br>part 11 demo<br>Pentide Library | Cancel           |
| Study Name                       | Pharma QC<br>procaine decay                          | Help             |
| Study Creator                    | Quality Control                                      | <u>S</u> ave     |
| Study Modification Tir           | ne   | Save <u>A</u> s  |
| ⊞ E Sample                       | <b>•</b>   | 0 <u>p</u> en    |
|                                  | Add where clause                                     |                  |
| uery condition                   |  |                  |
| Clause                           | ) Op. 🔺  | AND OF           |
| Injection.Acq Sequence EQUALS 'B | ATCH.S' AND  | ▲ <u>米</u> ()    |
| Bun Group Study EQUALS Gually I  | decau  | ▼ Modify         |
|                                  |  | Delete           |
|                                  |  | Delete           |

OR 条件の追加 🛛 22

- 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。

| New query name:   |
|---|
| new laboratory query  |
| Enter comment:  |
| Is used most often  |
|   |
| Query condition:  |
| Injection.Acq Sequence EQUALS 'BATCH.S' AND<br>(Run Group.Study EQUALS 'Quality Control' OR<br>Run Group.Study EQUALS 'proceine decay') |
| N N N N N N N N N N N N N N N N N N N   |
|   |

### 🛛 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。



Agilent ChemStation Plus 入門ガイド

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。

| メインメニュー タブ   | ツールバー |                         |                         |
|--|-------|-------------------------|-------------------------|
|  | 1     |                         |                         |
| I InStore C/S: Laboratory Chemist / demo     Els View Onlines Deview Deposit Administration Help |       |                         | ×                       |
| new laboratory query   |       |                         |                         |
| 65 🖆 🥑, Yo. 🕮  |       | <u>.</u>                | ۵.                      |
| Sample Compound  |       |                         |                         |
|  |       |                         | <b>~</b> #              |
| Run Mark run for   |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
|  |       |                         |                         |
| <u> </u>   |       |                         |                         |
| Approve T Reject T Botch   |       | < Previous Sample 1 / 1 | 1 Next> Exclude Include |
| Status   |       |                         | 12/3/2003 0.57 AM       |

# 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

ユーザーインターフェイスのレイアウト

- 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。

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

# 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 ザーインタフェー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。
- 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  |
|------|---|
|      | <ul> <li>レビューレイアウトで表示できる項目</li> <li>サンプル情報(画面左側)</li> <li>結果のクロマトグラフ(画面上部右半分)</li> <li>選択した種類の結果のテーブル(画面下部右半分)</li> </ul> |

ユーザーインターフェイスのレイアウトを編集する

**表1** サンプルタブ

| アイコン | 説明   |
|------|--|
| i 💼  | <b>テーブルレイアウト</b> で表示できる項目<br>・サンプル情報(画面左側)<br>・選択した種類の結果のテーブル(画面右側)                  |
|      | <ul> <li>チャートレイアウトで表示できる項目</li> <li>サンプル情報(画面左側)</li> <li>作成したチャート(画面右半分)</li> </ul> |

**表2** 化合物タブ

| アイコン     | 説明  |
|----------|---|
|          | <ul> <li>レビューレイアウトで表示できる項目</li> <li>化合物情報(画面左側)</li> <li>結果のクロマトグラフとチャート(画面上部右半分)</li> <li>選択した種類の結果のテーブル(画面下部右半分)</li> </ul> |
| <b>8</b> | <ul> <li>テーブルレイアウトで表示できる項目</li> <li>・化合物情報(画面左側)</li> <li>・選択した種類の結果のテーブル(画面右側)</li> </ul>                                    |
|          | <ul> <li>チャートレイアウトで表示できる項目</li> <li>化合物情報(画面左側)</li> <li>作成したチャート(画面右半分)</li> </ul>   |

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 で選択します。

| Database            |   | data item   | OK         |
|---------------------|---|-------------|------------|
| Sample Organization |   | ▶ Run       |            |
|                     |   | Vial        | Cancel     |
| Acquisition         | < | Sample      |            |
|                     |   | Volume      | Help       |
| Results             |   | Sample Type |            |
|                     |   | Channel     |            |
|                     |   | pH          |            |
|                     |   | Compound    | <b>V</b>   |
|                     |   | Amount      |            |
|                     |   | Area        |            |
|                     |   | Height      | Expression |
|                     | E | BT          |            |

### 🛛 25 列の定義

- 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。

| atabase                  | <u> </u>          | data item     | ОК        |
|--------------------------|-------------------|---------------|-----------|
| Sample Organization      | $\mathbf{\Sigma}$ | Hun           |           |
| E Study                  |                   |               | Cancel    |
| L Sample                 |                   | Volume        |           |
| Sample Name              |                   | Sample Type   | Help      |
| Sample Amount            |                   | Channel       |           |
| Sample Calibration Level |                   | pH            |           |
|                          |                   | Compound      |           |
| Sample Dilution          | 10000             | Amount        |           |
| 🖂 🗁 Sample Multiplier    |                   | Area          |           |
| Sample Creation Time     |                   | Height        | Expressio |
| Samela Tupa              | 11                | BT            |           |
| Custom Fields            | <b>_</b>          | Sample Amount | Format    |
|                          |                   |               |           |

**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。

ユーザーインターフェイスのレイアウトを編集する

# 定義したユーザーインターフェイスを保存する

 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。

| Saved user interface settings: | New user interface setting name: |          |
|--------------------------------|----------------------------------|----------|
| User Interface Settings        | new laboratory                   |          |
|                                | Enter comment:                   |          |
|                                | Use with all Batch2.S review     | <u> </u> |
|                                |                                  | <b>v</b> |
|                                |                                  |          |
|                                |                                  |          |
|                                |                                  |          |
|                                |                                  |          |
|                                |                                  |          |

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



Agilent ChemStation Plus 入門ガイド

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 デボタンをク リックします。

# 結果のレポートを作成する 5

レポート作成のワークフロー

# 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



### 🗵 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 フィルタを選択にするには、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。

### 結果のレポートを作成する 5

データフィルタ処理の方法

# 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「ユーザーインターフェイ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。

| cicceresulencia      | Select data item(s)           | -               |
|----------------------|-------------------------------|-----------------|
| Channel              | Channel                       | OK              |
| riocessea<br>Run No. | DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100 |                 |
| /ersion              |                               | Cancel          |
| Latest<br>Gample     |                               | Help            |
| ample Type           |                               |                 |
| Seq Modified         |                               | Cause           |
| Proc Sequence        |                               | <u>ave</u>      |
| н                    |                               | Save <u>A</u> s |
|                      |                               | Open            |
|                      |                               |                 |
|                      |                               |                 |
|                      |                               |                 |
|                      |                               | Mark.           |
| ilter condition      |                               | DA COULU        |
| ilter condition      |                               |                 |
|                      |                               | Modi            |
| ilter condition      |                               |                 |

### 🗵 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

| ilter:      | Selected filter:  |
|-------------|---|
| 🝸 Filters   | Jab1  |
| 🖹 🎦 chemist | Comment:  |
|             | dd  |
| (Fast       | Filter condition:   |
|             | Sample.Sample EQUALS 'Isocratic Std. 3' AND Ample.pH EQUALS 'S' |
|             | 4   |

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。

# 結果のレポートを作成する 5

データフィルタ処理の方法

5 [Open (開く)] ボタンをクリックします。

|   | Select data item(s)   |                |
|---|---|----------------|
| Channel<br>Processed<br>Run No.   | Sample<br>Isocratic Std. 3  | OK             |
| /ersion   |   | Cancel         |
| Sample<br>Sample Sectors<br>Sectors Sectors |   | Help           |
| Seq Modified  |   | Save           |
| H   |   | Save As        |
|   |   | O <u>p</u> en  |
| lter condition  |   |                |
| Sample Sample FOLIALS (Isocrati   | Std 3´ AN   | <u>M</u> odify |
|   | The second se |                |

## 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

| aved filter:                                 | New filter name:  |
|--|---|
| Filters                                      | Jab1  |
| 🗄 🤚 chemist                                  | Enter comment:  |
| y <untitled><br/> y ff<br/> y Jab</untitled> | dd  |
| Luig Jab1                                    |   |
|  | Filter condition:   |
|  | Sample.Sample EQUALS 1socratic Std. 3' AND A sample.pH EQUALS 15' |
|  | × ×   |

# 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。

データフィルタ処理の方法



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。





- 図 34 アクティブなフィルタの表示
- 11 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。

|   | <u>R</u> <u>R</u> <u>M</u> <u>E</u> .          |
|---|--|
|   | <u>C</u> reate                                 |
|   | <u>E</u> dit                                   |
|   | <u>M</u> anage                                 |
|   | Analysis Results Report [(built-in)]           |
| - | Compound Amounts Report [(built-in)]           |
|   | 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)] |

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



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

# 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。



#### 🛛 36 クエリーの実行

- 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。

バッチの作成と読み込み

# バッチの作成

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。

| 🛃 Chen         | Store C/S : Labo  | ratory Che  | mist / demo     | )      |
|----------------|-------------------|-------------|-----------------|--------|
| File Viev      | v Options Revie   | w Report    | Administratio   | n Help |
|                |                   | Part 11 dem | io latest ver   | No :   |
| 65             | A                 | 21          | VO.             | 8      |
| Samp           | le Compound       | ]           |                 |        |
|                | Batch Processin   | g           | <b>0</b> 1.=  [ | Bal    |
|                | Approval          |             | 2.E             | 2      |
|                | Rejecting         |             |                 |        |
| Run 4          | All For Batch Pro | ocessina    | Status          | 8 ()   |
| 1              | All For Approval  |             | proval Pending  |        |
| All For Reject |                   | 1           | proval Pending  |        |
| 3              |                   |             | — proval Per    | nding  |
| 4              | None For Batch    | Processing  | proval Per      | nding  |
| 5              | None For Appro    | val         | proval Per      | nding  |
| 6              | None For Reject   | ting        | proval Per      | nding  |

図 37 バッチ処理用サンプルの選択

バッチの作成と読み込み

2 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。

| 🍠 ChemStore C/S   | : Laboratory Chemist / demo       |   |
|-------------------|-----------------------------------|---|
| File View Options | Review Report Administration Help |   |
|                   | Create Batch                      |   |
|                   | Pending Batches                   |   |
| 66 🗎              | Approve Marked Runs               |   |
| Semple L Cenur    | Reject Marked Runs                | F |
| Sample   Comp     | Edit Custom Fields                |   |
|                   | Step through runs                 |   |

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

| Sample name | Origin | Injection date/time M | Samp      | le name                    | Injection date/time |
|-------------|--------|-----------------------|-----------|----------------------------|---------------------|
|             | 1      |                       | Isocra    | tic Std. 1                 | 4/19/1994 7:52:24   |
|             |        |                       | Isocra    | tic Std. 1                 | 4/19/1994 7:52:24   |
|             |        |                       | Fast F    | AH5*2 acr                  | 10/25/1997 12:21:1  |
|             |        |                       | > jab     |                            | 11/14/2003 3:25:4   |
|             |        |                       | Isocra    | tic Std. 1                 | 4/19/1994 7:44:14   |
|             |        |                       | < Isocra  | tic Std. 1                 | 4/19/1994 7:52:24   |
|             |        |                       | Isocra    | tic Std. 1                 | 4/19/1994 8:00:34   |
|             |        |                       | >> Isocra | tic Std. 2                 | 4/19/1994 8:33:10   |
|             |        |                       | Isocra    | tic Std. 3                 | 4/19/1994 9:22:23   |
| •           |        | Þ                     | € Í<br>BA | <u>dethod</u><br>TCH.M 11/ | 28/2003 11:40:0C 👱  |
| omment:     |        |                       | User      | / Operator                 |                     |
| atch23      |        | -                     | • (       | <u>A</u> ll users          |                     |
|             |        |                       | 01        | <u>J</u> ser               |                     |
|             |        | -1                    |           |                            | Y                   |
|             |        |                       |           |                            | 620                 |

#### バッチの提示 図 39

- 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。

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。

| 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      |                |
|  | Output Batch Report       |                |
| No Signals Loaded 🔄 🥍 🔍 🔍                            | Exit Batch Review         |                |
| alibration Table                                     | ChemStore Setup           |                |
| andration radie                                      | Transfer Data to Database |                |
| Enter Delete Insert Print OK                         |                           | -              |
| # BT Signal Compound Lyl Au                          | 1                         | tor Bef ISTD # |

図40 バッチの読み込み

| Creation Time     | Creator              | Comment |  |
|-------------------|----------------------|---------|--|
| 1/23/2004 9:33:48 | A Laboratory Chemist | bat23   |  |
|                   |                      |         |  |
|                   |                      |         |  |
|                   |                      |         |  |
|                   |                      |         |  |
|                   |                      |         |  |
|                   |                      |         |  |
|                   |                      |         |  |
|                   |                      |         |  |

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。

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



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。



 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。



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。

| 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:<br>nment1       |                           |

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。

- 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。

|                                    | S. S     |   |
|------------------------------------|--|---|
| Processing                         | Batch Table Cur                              | rent Run   Report Table   Report Options  |
| _ During pro                       | cessing of a run the fo                      | ollowing steps will be executed   |
|                                    | ation  |   |
| 🔽 Identii                          | ication/Quantitation                         |   |
| <u>□</u> <u>P</u> rint i           | ndividual report for ea                      | ch run as specified in  |
| 🕫 Bai                              | ich <u>M</u> ethod                           |   |
| C Bai                              | ch <u>R</u> eport Options Dia                | alog  |
|                                    |  |   |
| Signal Dis                         | play<br><u>×</u> -Axis                       | If a range is specified in the loaded   |
| Signal Dis<br>▼ Freeze<br>□ Freeze | play<br>≥ <u>X</u> -Axis<br>≥ <u>Y</u> -Axis | If a range is specified in the loaded<br>batch method, the freeze settings<br>have no effect.                         |
| Signal Dis<br>▼ Freeze             | ріау<br>: <u>X</u> -Axis<br>: <u>Y</u> -Axis | If a range is specified in the loaded<br>batch method, the freeze settings<br>have no effect.<br>Use <u>D</u> efaults |

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。

- バッチの再処理
- 4 Startや (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

# Μ

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

# っ

追加されたデータタイプ 40

# τ

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 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

ChemStation Plus 入門ガイド

索引

# 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

