

# Agilent G1701DA GC/MSD ChemStation

入門





© Agilent Technologies, Inc. 2005

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

#### マニュアル製品番号

G1701-96056

#### 版

第 1 版 2005 年 6 月 Printed in USA

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

#### 保証

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

#### 安全上の注意



注意は、取り扱い上、危険が あることを示します。正しく 実行または遵守しないと、こ の製品が破損したり、重要で でのある操作手順や操作する 注意の部分でいったん作業を に理解し、すべてを満た すまでは、先に進まないでく ださい。



警告は、取り扱い上、危険が あることを示します。正しく 実行または遵守しないと、怪 我または死亡につながる可能 性のある操作手順や操作など に注意を促すマークです。警 らの部分でいったん作業をや め、記載されている条件を完 では、先に進まないでください。 目次

#### 1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス

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

#### 2 定量を理解する

#### 3 Custom Reports を使用する

Custom Reports98レポートテンプレートの作成100レポートのカスタマイズ104セル、行、列の選択110レポートの印刷112Custom Reports データベースの作成115複数のデータファイルの選択119

グラフの表示と印刷	121
Custom Reports メニュー	- 123
Custom Reports ツールル	バーボタン 12 <b>4</b>



1

Agilent G1701DA GC/MSD ChemStation 入門

# GC/MSD ChemStation クイックリ ファレンス

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



# このマニュアルの内容

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

以下のような内容があります。

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

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

ヘルプ情報





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

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

このハードウェア参照資料には、以下に関する詳細な情報が含 まれています。

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



データ分析

用語集

データの分析

・ コマンドと関数

・ マクロの使用と記述

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

#### 装置制御

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

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

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

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

# オンラインヘルプファイルの使用

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

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

🐕 MSD ChemSta	ation Help (Enhanced mode)		凶 項目	説明
Hide Back	Forward Print Options		四十 / ==	
Contents Sear 	ch	・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	隐9/衣刀	マスルファビックの リストの表示 / 非 表示を切り替えま す。
Using Me Using Se Using Se Using Ba	sthods squences ng Data atch Mode	接張 MSD 生産性ケミステーションは、GC または GC/MSD データの取り込みを制御し、ライ	戻る	前のヘルプトピッ クに戻ります。
Tuning (     Troubles     Secured     Report h     Commands	(Calibrating) the MSD shooting the MSD Control Manager s and Functions	フラレ爆帯および20歳1に交換すに、メファドネルコメンークフルによって強化されてレルボートされた します。拡張 MBO 生産性やステレーションコス(Cettic DOSCAMD ROLIST、E331(D、*) ールパーなど、デージ処理用・3%(ク生産性シールが痛け)(、さらにンステムにアクセスすると きの 2 段階のセキュリティレールが所用意れています。 分析装置はしてのソフトウェアを使って表式中ます。	□ 印刷	現在のブックまた はヘルプトピック を印刷できます。
🕀 🔶 Using an 🕀 🍫 Glossary	nd Writing Macros / of Terms		目次	ヘルプトピックの
		<ul> <li>         ・ <u>チューニングおよび真空コントロール表示</u>         ・ <u>デーシ展析表示</u> </li> </ul>		リストを表示しま す (上記を参照 )。
_		テーク解析表示 データ解析表示 デーシ解析れま、他の表示とは独立して実行されるオフラインの「表示」です。デーシ解析者開始 するにはは、装置コントロールの表示としょーから起動するか、プログラムグループからデーシ解 体を選択して認知。ます(Windows スタートボタンをプリックし、プログラムさポイントに、装置 名 化たくガは装置 1) 老林イントしてからデーシ解析をプリックします)。デーシ解析表示を使用し て、持手でのデータの植分れなび変化だないます。 デーシ解析では、次のことができます。	索引	キーワードを使用 してヘルプイン デックスに特定の トピックがあるか どうか検索できま
		<ul> <li>デージの対象方</li> </ul>	」 検索	)。 語または句を入力
- 🔶	<b>ヘルプアイ</b> 詳細なヘルフ ブックを開く	<b>コン</b> <sup>°</sup> トピックを含むブックを示します。 には、選択してダブルクリックします。		すると、オンライ ンヘルプ内のそれ らの語句を含むト ピックを表示しま
<u>(</u> )	開かれている ブックを閉じ す。	ヘルプトピックのブックを示します。 るには、選択してダブルクリックしま	オプション	<ul> <li>ヘトを表示します。</li> <li>タブの表示など、</li> <li>さまざまなヘルプ</li> </ul>
?	ヘルプトピッ ンプするには	クを示します。ヘルプトピックにジャ 、選択してダブルクリックします。		オブションを変更 します。

System Commands	_
Each ChemStation application has a set of commands:	
Instrument Control (available in the Instrument Control application)	
Tune (available in the Instrument Control application)	
Data Analysis (available in the Data Analysis application)	
Common commands and functions are available in all applications.	
You may use these commands by entering them on the command line or by incorporating them into macros. Variables are used by some of the commands.	,
See Also	
Using Help on Commands	
Entering Commands	
Using Functions	
Using Variables	



#### 1 つのヘルプトピックを印刷するには

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





#### 1 つの見出しに含まれるサブトピックを一度にすべて印刷 するには

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



 Print Topics
 X

 You can print the selected topic or all the topics in the selected heading. What would you like to do?
 Frint the selected topic

 Image: Frint the selected topic
 Frint the selected heading and all subtopics

 Image: OK
 Cancel

**Commands Quick Reference)**]の下にあるすべてのトピック(約 26 ページの情報)が印刷されます。

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

## CD-ROM のハードウェアマニュアル

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

#### CD-ROM のマニュアルを使用する

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

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

kgilent 59	75 Series MSD User Information - A	licrosoft Internet Ex	plorer				
Edit w	ev Favorites Tools Help	determine (	(A. R. R.				
*	Agilent Technologie	S	Ø. 3 m		_		1
	Agilent 597	ā Series MSD	User Informat	ion			
	Introduction						
	This CD contains the hardware manu (MSD).	als and videos for the <i>i</i>	Agilent 5975 Series Ma	iss Selective Detector			
	All of the user documentation is provid can read these files with Adobe® Rea Adobe® Reader® if you do not already	ed as Adobe® Acroba der® software. Visit wi have it on your system	B Portable Document ww.adobe.com to obtain	Format (PDF) files. Yo in a free copy of	NU .		
	Click on a link below to open a manua	l or video.					
	Manuals 🔟						
	5975 Series MSD Hardware Manual ( 5975 Series MSD Hardware Installato 5975 Series MSD Site Preparation Gu MSD Local Control Panel (LCP) Quick	ncludes videos. Look t de Reference	br the 🚅 icon.)				
	MS Fundamentals						
	Videos 🖼						
	The following is a list of videos for the	5975 Series MSD.					
start	🚯 🗇 🗱 👘 🔯 Intex-Hor	Norosoft Ac	Cripecuren	Aglent 5975	5 start. Nos - N	🔁 start.htm - N	EN C)-311974

Learning Products CD の開始メニュー例

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



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



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











- 6 クロスリファレンスの上にカーソルを移動すると、カーソル が人差し指に変わり、テキストが示されたページに電子的に リンクしていることを知らせます。示されたページにジャン プするには、クロスリファレンスをクリックします。前の ページに*戻る*には、右クリックします。
- 7 任意の 1 ページ、または複数のページを印刷できます。[印 刷(Print)]を選択し、画面最下部に表示されているページ番 号を使用して印刷するページ(複数可)を入力します。

# 今回の改訂内容

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

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

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

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

ハードウェア

5973 MSD / 6890 GC



5973N MSD / 6850 GC (G2570 MSD システム)



ハンドヘルドコントローラ(オプション)

# 5975 MSD / 6890 GC



# 6850 GC のキーパッドとディスプレイ

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

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

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



# 6890 GC 用キーパッド

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



# ChemStation の画面とメニュー

# 装置コントロール(Instrument Control)画面

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







#### 取込ステータスインジケータ

現在の分析のステータスを表示します。



#### 分析時間

分析の残り時間を表示します。



#### 分析開始

分析準備のできているサンプル名とデータファイルを表示します。



#### 停止

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



#### ログブック

ログブックポップアップメニューを表示します。

#### メンテナンス期限

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

#### 印刷

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

#### ヘルプ

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

#### シーケンスのロード

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

#### シーケンスの保存

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







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

**シーケンスの編集** [サンプルログテーブル (Sample Log Table)] ダイアログボックスを開き ます。

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



**シーケンスのシミュレーション** シーケンスをテストします。



メソッドの保存

現在のメソッドを保存します。

メソッドのロード

**メソッドの実行** [分析開始 (Start Run)] ダイアログボックスを開きます。

メソッドの編集 現在のメソッドを編集できます。



**GC パラメータ** GC パラメータと GC モニタを編集できます。

MS パラメータと MS モニタを編集できます。



チューニングパラメータ

MSD をチューニングできます。

MS パラメータ



# 装置コントロール(Instrument Control)メニュー

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



注

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

# チューニングと真空制御(Tune and Vacuum Control)メニュー – El モー ド(El mode)

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



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

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



# データ解析 (Data Analysis) 画面

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

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

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

醫 拡張データ解析 - DEFAULT.M / EVALDEMO.E	) (MS データ: 未定量)		
ファイル(F) メソッド(M) クロマトグラム(C) スペクトル(S) キ	ミャリブレーション(B) 定量(Q) ツール(T) 表示	示(V) ツールバー(O) ヘルプ(H)	
🖾 🗗 🗗 🦓 📼 👄 🕷 🌆	ā 📴   🤣 📼 📑 😤   🖻	🖭 🖾 🛣 🎢	72 73 74 75
🕄 🛝 🕀 🍱 🍱 🛄 🛞	: 🗠 🏛 🏦 🖿 🗹 🕼	⚠ 🕒 🗈 🔁 🔜 🛃	籠 😴 📱 🤶
🚮 [2] TIC: evaldemo.d\data.ms			
アバンダンス			
3500000	1		
3000000			
2500000			
2000000			
1500000	n -		
1000000	()		
500000			<u>  </u>
	Д	A	
	700	nhe nhe	
👬 [1] スキャン 176 (6.431 min): evaldemo.d\	data.ms		
1115952			164
1400000			
1200000			
1000000			
900000			
600000			
400000			
200000	76		
	<sup>63</sup> 69   85 89 98 102	111 115 128 139	150 159
lm/z> 2h ' ' 4h ' ∩h	sh''''	<u>''''</u> 14n	160

# [データ解析 (Data Analysis)] ツールバーボタン



#### データファイルの読み込み

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



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



#### メソッドの保存

現在のメソッドへの変更を保存します。



#### メソッドの実行

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

#### スナップショット

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

#### 印刷

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



AutoSIM メソッドの生成 「自動 SIM 設定 (AutoSIM Setup)] ダイアログボックスを開きます。



#### SIM パラメータの編集 SIM グループテーブル内の SIM パラメータを編集できます。



コピー 選択したウィンドウをクリップボードにコピーできます。



ウィンドウのリセット グラフィックウィンドウをデフォルトの位置に再配置します。



中止 コマンドまたはマクロを停止します。



#### コマンド行

コマンド行の表示と非表示を切り替えます。



#### 色の編集

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



グラフィックのアイコン化 / 復元 表示されているグラフィックウィンドウを最小化または最大化できます。



#### 画面レポートを閉じる

開かれている画面レポートをすべて閉じます。



#### イージー ID (EasyID)

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



#### QEdit

データファイルが定量されていれば、定量結果を確認および編集できま す。



#### ピーク純度

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



#### リテンションタイムロック

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



#### S/N 比

S/N 比チェックを実行してから、レポートを表示または印刷できます。



#### **CUSTOM TOOL 1**

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



#### **CUSTOM TOOL 2**

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



#### **CUSTOM TOOL 3**

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





#### **CUSTOM TOOL 4**

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

#### **CUSTOM TOOL 5**

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



#### ナビゲーションの表示 / 非表示

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

#### クロマトグラムの描画

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

l.£

n/e

# クロマトグラムの拡大縮小

指定した倍率で選択したクロマトグラムを拡大縮小します。

#### イオンクロマトグラム

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

#### 重ね書き表示

複数の EIC を重ね書きして表示します (GC/MS のみ)。



#### クロマトグラムの重ね書き

複数のクロマトグラムを選択し、重ね合わせて表示できます。

#### 自動積分

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

#### 積分

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



#### 積分パラメータ

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

μ. Пu

#### 減算

あるスペクトルを別のスペクトルから減算し、差を表示します。



#### ライブラリの選択

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



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

#### 定量セットアップ

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

∦.⊮

#### 自動定量

定量データベースを作成するための半自動化された方法を提供します。



#### 化合物の編集

定量データベースの情報を化合物単位で確認および編集できます。



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

**定量レポートの計算** 現在のファイルを定量し、定量レポートを生成します。

#### 定量レポートの生成

既に定量済みのファイルについて定量レポートを生成します。

#### 定量レポートの印刷

定量レポートを印刷します。





#### カスタムレポート

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



#### カスタムレポートの印刷

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



#### **データ解析オプション** [データ解析 (Data Analysis)]ダイアログボックスを開きます。



#### データ解析マウス動作の切り替え

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



#### スタックの表示 / 非表示 (変数監視)

スタック(変数監視)ウィンドウの表示/非表示を選択できます。



#### オンラインヘルプ

GC/MSD ChemStation のオンラインヘルプを表示します。

# [データ解析 (Data Analysis)] メニュー

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

ファイル(F)	JA IN RYMAN	how Kallo		7 @bl (/c)		
データファイル読み込み(L) 次のデータファイル(N) ヘッダー情報を見る(H) ファイル情報編集(F) スナップショット(T)	(メンタド(M)) メンッド実行(R) カスタム解析用マクロの実行(U) メンッド読み込み(D) メンッド保存(M)	クロマトジクム(C) クロマトズケール調整(L) クロマトグラムを描く - ラベルなし(D) クロマトグラムを描く - ラベルは(D) クロマトグル選択(H)		AへのFDAG 加算(A) 減算(5) テーブル表示(T) ライブラJの選択(E) 検索ストラテジ編集(D)		
ハッククラリント/減員(B5B)(B) シグナル選択(E)	メソッド編集(E) カスタム解析用マクロの編集(D)	イオンクロマトクラム: イオンクロマト重ね振	抽出(C) 苗き(M)	ライブラリの編集(I)		
プリンタ選択(5) プリンタ設定(5)	SIM メソッドの自動作成(G) SIMパラメータの編集(S)	SIM メソッドの自動作成(G)         積分方式の違択(E)           SIM パラメータの編集(S)         MS シグナル積分パラメータ(N)           1(1)         シグナル 2 の積分パラメータ(T)           1(2)         自動積分実行(A)		スペクトル表示変更(C) マフスペクトル表示変更(C)		
印刷(P) 中断(A)	1(1) 2(2)			YAA (71700(8#(1)		
CSV ファイルへのエクスポート(D) AIA フォーマットへのエクスポート(O)	3(3) ノッッチモード(B)	積分結果(5)				
1(1) evaldemo.d 2(2) 3(3)	定量(Q) 計算(C) レポード作成(G)		ツール(T) リスト処理(DOLIST) スキャンをリストアップ	(L) (DOSCAN)(S)		
終了(X)	標準定量レポートを使用(U)	標準定量レポートを使用(U)		スイヤンリストを2024年(F) 3-D データのエキスポート(X)		
キャックレーション(6) 定量データベース設定(5) 自動定量設定(A) 化合物編集(E) 更新(U) メンッド情報をリスト(L)	ノンターゲットピークレポート(N) メソッドで位置合わせしたGCトレース( トレースモード定量(2) Custom Reports Print Report	更用(M)	化合物を探す(C) 全ての化合物を探す(A) 重ね描きパラメーク設定(O) クロマトグラムの重ね描き(V) シバナルレノイズドチャック(G)			
/月云(C) 表示(V) イージーID(E) 定量結果の編集(Oedit )(D)	Update Database Select Template/Database	Update Database           Select Template/Database           ヘルプ(H)           ヘルプクビックス(H)           ヘルプの使い方(U)           インストールされたソフトウェアのリビジョンを表示します。		データ状態変更(N) オプション(T) レポートヘッダーのコンフィグ(H)		
ノンターゲットピーグ編集(N) パラメータ検索(R) GC 位置合わせ(A) ピーク純度レビュー(V)	ヘルプトピックス(H) ヘルプの使い方(U) インストールされたソフトウェアのリビジョ			スクリーン結果の作成(U) スクリーンレポートの作成(U) スクリーンレポートの作成と印刷(F) 複数ファイルに対してのスクリーンレポートの作成と印刷(F)		
結果スクリーナ(5) RT ロック設定(U)	Readme ファイル表示(V) バージョン情報(A) About		スクリーンデータベースの指定(M) スクリーンデータベースパラメータの変更(D) スクリーンデータベースをリスト(I) Hop Hote (マーをを)(c)			
ツールバー(O)			セロクオリファイ ハを約 ウィンドウを コピー(Y ウィンドウをリセット(F	۴۹(E) ) ۷)		
コマンドラインの表示(C) デフォルト(こりセット(R)						

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

# [イージー ID (EasyID)] メニュー

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



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

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


# [パラメータ検索 (Parametric Retrieval)] メニュー

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



# [Align GC (GC 位置合わせ)] メニュー

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

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

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

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



# 1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス

# [結果スクリーナ (Results Screener)] メニュー

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



# RTLock メニュー

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



# 一般的な ChemStation の作業

MSD の排気 (開始)

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

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

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

警告

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

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

- 8 PC との接続が確立されたら、OK をクリックします。10 分から15 分以内に、拡散ポンプが加熱するか、またはターボポンプが 80% まで加速します。ターボポンプは最終的に95%以上に達するはずです。
- 注意 これらの条件が満たされない場合、フォアラインポンプが遮 断されます。その場合は、MSD の電源をオフオンします。MSD が正しく排気しない場合、空気漏れおよびその他の真空に関 する問題のトラブルシューティングについてオンラインヘル プを参照してください。
  - 9 プロンプトが表示されたら、GC/MSD インターフェイスヒー ターと GC オーブンをオンにします。終わったら OK をク リックします。ソフトウェアがイオン源と四重極 ヒーターを オンにします。温度設定は現在のオートチューニングファイ ル (\*.u) に保管されます。
- **注意** キャリアガスを流すまで、どの GC 加熱部分もオンにしない でください。キャリアガスの流入なしにカラムを加熱する と、カラムに損傷を与えます。
  - **10** メッセージ「**OK で実行します (Ok to run)**」が表示されたら、 MSD が熱平衡状態になるまで 2 時間待ちます。



# MSD の排気 (停止)

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

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

4 [チューニングと真空制御 (Tune and Vacuum Control)] 画面 から、

[**真空 (Vacuum)メニュー / ベント (Vent)**を選択します。表示された指示に従います。



注意

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

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

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





5975 排気バルブ

5973 排気バルブ



# MSD のチューニング

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

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

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

#### MSD をチューニングするには

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

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



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

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

#### マニュアルチューニングを使用するには

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

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

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

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

データの取り込み

#### MSD と一緒に使用するために GC をセットアップするには

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

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

# オートサンプラを使用してサンプルを注入するには

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

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

注意

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

#### 手動でサンプルを注入するには

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

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

#### 1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス

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

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

# MS データの分析

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

#### データファイルをロードするには

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

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



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

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

#### クロマトグラムを積分するには

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

## スペクトルを選択するには

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

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

## ズームインするには

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

## ズームアウトするには

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

#### スペクトルを平均するには

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

## 2 つのスペクトルを加算するには

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

#### 2 つのスペクトルを減算するには

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

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

#### バックグラウンドスペクトルを減算するには

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

# スペクトルライブラリの使用

# ライブラリを選択するには

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

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

#### ピークの積分と検索を行うには

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

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

4 OK をクリックして検索を開始します。

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

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

#### 1 つのスペクトルを検索するには

- **1** [データ解析 (Data Analysis)] で、データファイルをロード します。
- 2 スペクトルを選択します。
- スペクトルを含むウィンドウ内で右マウスボタンをダブルク リックします。
- ウィンドウ [1] または [2] でマウスを右クリックするとメ ニューが表示される場合、[データ解析マウス操作の切り替え (Switch Data Analysis Mouse Actions)] を使用して右クリックモー ドを切り替えることができます。

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

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

#### 三注

GC/MSD ChemStation 入門

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

# リテンションタイムロッキングの使用

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

#### MS メソッドをロックするには

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

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

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

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

注

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

# メンテナンススケジュール

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

#### 毎日

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

#### 毎週

- フォアラインポンプのオイルレベルをチェックします。
- □ 注入ロライナーと 0- リングを交換します。

#### 毎月

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

#### 3 か月ごと

□ ガスボンベを交換します (500 psig 未満の場合)。

#### 6 か月ごと

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

#### 毎年

拡散ポンプのオイルをチェックし、必要ならば交換します。

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

# 随時

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

# 安全上の注意事項

警告

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

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

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

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

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

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

操作上のヒント

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

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

## 1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス

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

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

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

# エラーメッセージとトラブルシューティング

# エラーメッセージ

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

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

番号をエラーメッセージに解釈するには、以下の手順を実行し ます。

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

入力	
MSD よりレポートされたエラー:	ナンバ入力:
8	
OK	キャンセル

#### 1 GC/MSD ChemStation クイックリファレンス

対応するエラーメッセージ(複数の場合もあり)が表示され ます。



# トラブルシューティングのヒント

## MSD LAN エラー

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

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

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

## ベースラインの上昇

- ・ カラムブリード
- その他の汚染

#### フォアラインまたは真空マニホールドの圧力が極端に上昇

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

#### 質量スペクトルの高バックグラウンド

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

#### *m/z* 18、28、32、44 のイオン

- 検出装置が十分に排気されていない(空気と水の残留)
- 空気漏れ

## アイソトープの欠落またはアイソトープ比の不正

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

#### GC/MSD ChemStation 入門

# ピークがない

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

# ピークテーリング

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

## ピークトップが平ら

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

# ピークトップが分割

- ・ 注入方法の誤り
- 注入量が多すぎる

## ピーク幅に一貫性がない

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

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

#### 再現性が悪い

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

#### 感度が悪い

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

#### GC/MSD ChemStation 入門

# リテンションタイム (RT) のドリフト

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

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



Agilent G1701DA GC/MSD ChemStation 入門

# 定量を理解する

2

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



#### 2 定量を理解する

# 定量

# この章の内容

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

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

# はじめに

定量とは何をするものですか

定量とは、サンプルのなかに含まれる化合物の量を同定する ことです。

定量はいつ行うのですか

定量は、サンプル分析の最後の部分(化合物の同定後)に実 行します。

定量はどのように行うのですか

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

定量データベースについては、このマニュアルで後述します。

# GC/MSD ChemStation における定量の仕組み

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

## パート 1 -- データ取込

プロセスの最初の部分では、データ取込が行われます。以下に 概要を説明します。 GC/MSD で未知のサンプルを分析すると、GC 内でサンプルが加 熱され、加圧され、個々の化合物に分離されて、最後に検出器 を通過します。これらすべては、指定したメソッドに従って行 われます。

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

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

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

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

#### パート 2 -- データ定量

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

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

ここで定量データベースが必要になります。

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

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

ターゲットイオンのクオリファイアイオン

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

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

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

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

i.
# 定量データベース

はじめに

定量データベースとは何ですか

定量データベースは、探している各化合物に関連する詳細情報 をリストします。

*定量データベースに必要なデータとはどのようなものですか* 定量する各化合物について、定量データベースには以下のデー タが含まれている必要があります。

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

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

*定量データベースのサイズはどのくらいですか。* 1 つの化合物を定量するために、定量データベースには少なく とも以下の 3 つのエントリが必要です。

#### 2 定量を理解する

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

多くのユーザーが追加のオプションエントリとして内部標準を 選択しています。

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

どうすれば定量データベースを作成できますか 定量データベースに化合物を追加するには、以下の2つの方法 があります。

- ・マニュアル
- AutoQuant Setup を使用した半自動

以降に概要を説明します。

## マニュアルで定量データベースをセットアップする方法

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

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

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

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

### マニュアルで定量データベースをセットアップする方法の 概要

定量データベースをマニュアルでセットアップするには、以下 の手順に従います。

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

量データベースグローバル			
\${FJV(T)			
ビーク認識			
リファレンスウィンドウ(R)	2000 分	Ŧ	
ノンリファレンスウィンドウや	1.000 分		
リテンションタイムのずれ幅W0	0.100 分		
クーゲット、クォリファイアのずれ)			F RTEINT 使用(U
新化合物情報			
積分パラメータファイル(F)			P照 定量方法040
イオンクロマト抽出範囲(D) 0.500	min		(20) (20) (20) (20) (20) (20) (20) (20)
検量線(√) 直線	-		ISTD 濃度の
ー次回帰のデータポイント重み付(A)	均等	•	
07	- Kurden	1	A11700 1
	11756/		100240



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

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

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

	化合物の編集			X
	「インデックス」	リテンジョンタイム		
	1 2 3	<u>97793ノタイム</u> 6431 7.737 9.779	ンクナル   11日初沿 154.10 * Biphenyl 188.15 4-Chlorobiphenyl 74.10 Methyl palmitate [(七合物リストの終わり]	
	 化合物名の★  表示(V)	印は、ISTD を示します <u>上に挿入の</u>		(H)
化合物#2ページ1	X		<b>10</b> [化合物編集 (Edit	t Compounds)」画面
名前(4) (国本部の支付は70) (国本部の支付は70) (日本)の支付は新設 RT(RP) 7737 RRT 1203 総計(R) (日本)の支付していたいであった。 定量がイブのリーターグライ化 地帯(R)	合物	×	から、化合物を選 (View)]をクリッ 合物について保存	択して L <b>表示</b> クすると、その化 されているデータ
- <u>1550</u> + <u>0500</u> c 最小00 C % これは 7237 ~ 8237 min 記載法(0) <u>リテンタンタイ</u> , リファレンススペクトル名(P)	面積 ▼ 約9/7/C) T		の最初のページが 化合物について 3	表示されます。各 ページの情報があ
-定量に使用されたシグナル 減算方法(S) 拡張	面積定量	X	り、定量データベ	ースレコードの
たままの方(KU) ターカットオタン S 新容報語 N(C) m/2 ス 相対 N 単容報語 N(C) 推対 N 単容報語 N(C) 推対 N 電源 電源 電源 電源 電源 電源 電源 電	MDL 0000000 0000000		ページ 1、2、およ れています。	び 3 として保管さ
Ter(10) [18:15 1000 010) [18:10 [44:60 [55:00 20 [19:115 [22:80 [55:00 23 [16:110 [18:90 [55:00 [20 ]]] 19:90 [55:00 [20 ]] 19:90 [55:00 [20 ]] 19:90 [20 ]] 10:90 [20 ]] 10:9			3 つの画面を切り <sup>5</sup> ジボタンを使用し	替えるには、ペー ます。
<u>1000</u> <u>709+00</u> <u>4−5 200</u> <u>4−5 300</u> <u>0K</u>			スペクトル情報と 力した情報はこれ	Globals 画面で入 らのページに転送
	ッコロ/ <u>ハージ333)/OK</u> 参照		されます。	
02			処理を終了するに	は、定量データ
前(10) 次(10)	プロットQ( ページ 1(1) ページ 2(2) OK	キャンセル ヘルプ(H)	ベースの各エント	リについて、個々

の化合物画面 (ページ 1、2、3) を*マニュアル*で更新しま す。

## AutoQuant を使用して定量データベースをセットアップす る方法

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

### AutoQuant を使用して定量データベースをセットアップす る方法の概要

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

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



#### 定量を理解する 2

この画面から以下の操作を実行できます。

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

注

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

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

E	<b>と合物の編集</b> <u>インデックス り5</u> 1 2 3	ンションタイム   6.431 7.737 9.779	<u>シグナル 1</u> 154.10 188.15 74.10	化合物名 * Biphenyl 4-Chlorob Methyl pa 化合物リスト	iphenyl Imitate の終わり]	
	化合物名の * 印は、 表示(V)	ISTD を示します 上に挿入の	肖耶涂	(D)	_ 終了(E)	/レプ(H)

[化合物編集 (Edit Compounds)] 画面から、化合物を選択し

#### 2 定量を理解する

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

# AutoQuant Setup の仕組み

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

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

# チュートリアル - AutoQuant Setup の使用

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

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

このために、以下の手順を実行します。

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

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

# 手順: AutoQuant Setup を使用した定量データベースの作成

- 1 DEFAULT.M と EVALDEMO.D をチュートリアルで使用する前に、 それぞれコピーをとっておきます。
- 2 Data Analysis で、以下の 2 つのファイルをロードします。

デモ用メソッド C:¥MSDCHEM¥1¥METHODS¥DEFAULT.M

デモ用データファイル C:¥MSDCHEM¥1¥DATA¥EVALDEMO.D

これを実行して独自の定量データベースを作成すると、このデモデータファイルはキャリブレーションされます。

3 [スペクトル (Spectrum)/ライブラリ選択 (Select Library)] を選択するか、アイコンをクリックします。 DEMO.L を選択 します。



ライブラリオ	き索パラメータ	×
検索順	ライブラリ名	次のライブラリを検索する 一致率の下限
1(1)	DEMO.L	参照
2(2)		参照
3(3)		参照
	OK キャンセル	<u>ヘルプ(H)</u>

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



キャリブレーション(B)
定量データベース設定(S)
自動定量設定(A)
化合物編集(E)
更新(U)
メソッド情報をリスト(L)
消去(C)

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

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

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

定量データベースグローバル	
タイトル(T)	
- ピーク認識	
リファレンスウィンドウ(R) 2000 分	<b>•</b>
ノンリファレンスウィンドウ(N) 1.000 分	- -
リテンションタイムのずれ幅(W) 0.100 分	_
(ターゲット、クォリファイアのずれ)	□ RTEINT 使用(U)
積分パラメータファイル(ト)	定重万法(M)   面積
イオンクロマト抽出範囲(D) 0.500 min	濃度単位(O)
検量線(\/) 直線 ▼	ISTD 濃度の 0.000000
→次回帰のデータポイント重み付(A) 均等	<b>T</b>
OK キャンセル	ヘルプ(H)

**c** OK をクリックします。

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

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

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



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

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

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

	×
🥐 Ľ-Þ.	入力を続けますか?
Yes	No

#### 定量を理解する 2

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

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



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



10 メチルパルミテートが次に表示されます。

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

化合物名選択
Methyl palmitate
© 000112-39-0 Methyl palmitate
RT: 9.78; Ion: 74.10
○ ユーザ指定(U)
加算(A) スキップ(S) ISTDの ヘルプ(H)

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

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



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

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

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

**化合物濃度 (Cmpd Conc)** = 50 化合物の濃度。 **ISTD 濃度 (ISTD Conc)** = 50 内部標準の濃度。

続いて、[更新の実行 (Do Update)] をクリックします。

キャリブレーション更新	×
「キャリブレーションデータファイル(シーケンスによって選択したものは無視)――	
ファイル名:	
C:¥msdchem¥1¥DATA¥evaldemo.d	
·	
新規レベル追加 マ キャリブレーション レベル ID(L) 50 マ	
化合物濃度(C): 50.000000 ISTD 濃度(D): 50	
再転付け ちゅうだけ 人口づけ	лI

- 13 [化合物編集 (Edit Compounds)] ボックスが次に表示され、 定量データベース内にある化合物全体のリストが表示されま す。以下の点に注意してください。
  - メチルパルミテート(内部標準として同定した化合物)
     は、(グループの他の2つの化合物よりも後に溶出したにもかかわらず)リストの最上位に移動し、名前にアスタリスクがついています。
  - アスタリスク(\*)は、内部標準であることを示します。

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

化合物の編集		×
<u>インデックス リテンションタイム</u> 1 9.779 2 6.431 3 7.737	<u>シヴナル</u> 74.10 * Methyl palmitate 154.10 Biphenyl 188.15 4-Chlorobiphenyl [化合物リストの終わり]	
化合物名の * EPは、ISTD を示します 表示(V) 上に挿入の	削除(D) 終了(E) へルプ(	H)

14 これで単一レベルの定量データベースのエントリが作成され ました。

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

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

	化合物 #4 ページ 1		X		
サジウンシグレダム編集          FRT0              TRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0              FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0              FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0           FRT0	名前(A) 4-Chlorobiphenyl	濃度単位①			
If We 1/227         RET 0.791           推出幅20            1500         - 5500           7500         - 5500           1710         - 5500           1710         - 5500           1710         - 5500           1710         - 5500           1710         - 5500           1710         - 5707           1	「リテンションタイム情報	定量パラメーター			
Hum 20 - 0 500 ・ 0 500 0 0 5000000	RT(R) 7.737 RRT 0.791	定量タイプ(U) ターゲット化合物	-		
「2000 + 10:00 0 * 8 / 4/40 0 * X       「2000 + 10:00 0 * 8 / 4/40 0 * X         CTUL 1237 ~ 6237 min 177/1237 ~ 627/1237 ~ 77/1/1 176/17 ~ 623 0 000000 min 177/1237 ~ 637/1237 ~ 77/1/1 176/17 ~ 632 0 000000 min 177/1237 ~ 77/1/1 176/17 ~ 632 0 000000 min 177/17 ~ 632 0 00000 min 177/17 ~ 632 0 00000 min 177/17	抽出幅の				
11は1 727 ~ 627 min リアレンススペウドルをやり          2281(日期112:97 / 12	-  0.500 +  0.500 ● 最小(M) ● %	定量方法(Y) 面積 ▼			
177レンススペウトル& P / ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	これは 7.237 ~ 8.237 min	化合物 #4: 4-Chlorobiphenyl (ページ 2)		X	
正式に使用的にとりサナル       ター・サット・イタン       マー・サット・イタン       マー・サット・イタン       マー・サック・ケット・イタン       マー・サック・ケック・ケック・ケック・ケック・ケック・ケック・ケック・ケック・ケック・ケ	リファレンススペクトル名(P)	- スペシャル化合物			
定量シダナル10       アーゲッドオシーマー       1000000       10000000 <th>定量に使用されたシグナルー</th> <th>CAS #(#)</th> <th>化合物タイプ(C)</th> <th>Т</th> <th></th>	定量に使用されたシグナルー	CAS #(#)	化合物タイプ(C)	Т	
作音報画 MC)       作       パングリアパル 1/0.5 / 1000000       マリックス スパイク アマウントS)       D000000       D000000       D000000       D000000       D000000       D0000000	定量シグナル(T) ターゲットイオン 💌				
m/z       ジス1001       1491 •        160 + 1010 + 1000 + 1000 + 1000000 + 1000000 + 10000000 + 1000000 + 1000000 + 1000000 + 1000000 + 1000000 + 1000000 + 1000000 + 10000000 + 1000000 + 10000000 + 10000000 + 10000000 + 1000000 + 10000000	相対1/2ポ 許容範囲 %(C)	キャー ガーゲートアマウント(0) 「nnnnnn マト	ብ»ዕス スパイク アマウント(S) በ በበበበበበ	-	
Tet(d) [8815 1000]       1000       低低       高       N Dev       MDL         01/00 [5210 4450 5500       9500       900000 10000000       0000000 1000000       0000000 1000000       0000000       0000000       0000000       00000000       0000000       0000000       0000000       00000000       00000000       00000000       00000000<	m/z 以 相対 🗾				
01(0) 15210       44.60       35.00       0000000	Tet(G) 188.15 100.0	低	高 % Dev	MDL	
02 19015 3280 3500       3500       0000000       0000000       0000000       0000000       0000000         3500 3500       シグナルレベル 泉小の 000000       0000000       0000000       0000000       1074920.830       レベル D 濃度 レスポンス       レベル D 濃度 レスポンス         3600 700 700 700 700 700 700 700 700 700       マーゲー定義アイテム(0)       A1       N4 000000       10000000       1000000       1079420.830       ロー       ロー<	Q1(Q) 152.10 44.60 35.00	マトリックス A(濃度)(M) 0.000000	0.000000 0.000000 0.0	00000	
03 18310 1890 3500       シヴナルレベル 泉小の 1000000       MS テーダベース名(0)       MS テーダベースス(0)       MS テーダベースス(0)       MS テーダベースス(0)       MS テーダベースス(0)       MS Fーダベースス(0)       MS Fーダベース(0)       MS Fーダベーム(0)	Q2 190.15 32.80 35.00	マトリックス B(濃度)(T) 0.000000	0.000000 0.000000 0.0	00000	
前の// 次の// ブロットU// ページ 202 / ベ     MS テータバース名(D)     MS テータバース名(D)     レバル D) 濃度 レスポンス     レバル D) 濃度 レスポンス       1     N4 [0.000000     11774420.890     1     1     1       A1     N4 [0.000000     11774420.890     1     1       A2     N5 [0.000000     11774420.890     1     1       A3     N6 [0.000000     11774420.890     1     1       前(の) /次の)     パージ1(D) /     1     1     1       前(の) /次の)     パージ1(D) /     1     1     1       面積補正マス(M):     [0.00     14正ファ/94-(F):     [0.00000       1     N2     5     5       1     N4     [0.000000     11774920.890       1     N4     [0.000000     117974920.890       1     N4     [0.000000     117974920.890       1     N4     [0.000000     117974920.890       1     N5     [0.000000     117974920.890       1     [0.000000 <td< th=""><th>Q3 153.10 18.90 35.00</th><th>シガキルレベル 最小の 10000000</th><th>化合物 #4: 4-Chlorobiphen;</th><th>yl (ページ 3)</th><th>X</th></td<>	Q3 153.10 18.90 35.00	シガキルレベル 最小の 10000000	化合物 #4: 4-Chlorobiphen;	yl (ページ 3)	X
前い/// 次の///フロットの/////     パーサー定義アイラム(い)     A1     N4     0000000     10794020.890       A1     N4     0000000     10794020.890     IIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIII		- MSデータベー7-2(D)	レベル ID 濃度(C)	レスボンス レベル ID	濃度 レスポンス
2 - ザ-定義ア/5ム(0)     A1     A2     N5     D000000     A3     N6     D000000     が(0)     パ(0)      パ(0)	前(V) 次(4) プロット(L) ページ 2(2)	<u></u>	50 30000000	18794920.890	
A1       N4       0000000         A2       N5       0000000         A3       N6       0000000         前(\0)       次(\0)       ページ1(0)         「       「       「         前(\0)       次(\0)       ページ1(0)         「       「       「         前(\0)       次(\0)       〇00         「       「       「         「       「       「         「       「       「         「       「       「         「       「       「         「       「       「         「       「       「         「       「       「         「       「       「         「       「       ●         「       「       ●         」       「       ●         」       「       ●         」       「       ●         」       「       ●         」       「       ●         」       ●       ●         」       ●       ●         ○       ●       ●         ○       ●       ●					
A2       N5 000000         A3       N6 000000         前(い)       次(い)         前(い)       次(い)         000000       補正アックター(r):         0000000       補正アックター(r):         0000000       小道?         100       「補正アックター(r):         0000000       小道?         100       「         5       5         100       「         5       5         100       「         5       5         100       「         5       5         100       「         5       5         100       「         5       5         100       「         5       5         100       「         5       5         100       「         5       5         100       5         100       5         100       5         100       5         100       5         100       5         100       5         100       5         100       5 <th></th> <th>A1</th> <th>N4 0.000000</th> <th></th> <th></th>		A1	N4 0.000000		
A3 N6 0.00000 前(V) 次(9) ページ1(1) / 面積補正マス(M) 000 補正アヶクター(F) 0000000 加算? 積分パラス-タファイル Tet(T) 参照 Q2 「 参照		A2	N5 0.000000		(
前(V) 次(0) ページ1(1) / / / / / / / / / / / / / / / / / / /		A3	N6 [0.000000	í í	í
前(の) 次(0) ページ10) / 西様補正マス(M): 0.00 補正ファクター(F): 0.000000 加算: 積分//5メータファイル Tet(T) 参照 01(の) 「 参照 02 「 参照					
面積補正マス(M):     0.00     補正ファクター(F):     0.000000       加留?     積分//5メータファイル     番照       Tet(T)     参照     参照       01(ω)     ●     参照       02     ●     参照		前(1) 次(1)	(-910) /		
面積補正マス(M): 0.00 補正ファクター(F): 0000000 加賀? 積分パラメータファイル Tet(T)					
画積補正マス(M): 0.00 補正ファクター(F): 0.000000 加算? 積分パラメータファイル Tret(T)			J		
が頂? 積分パラメータファイル Tet(T)			面積補正マス(M):	0.00 補正	ニファクター(F):  0.000000
01(ω)        02			加算? 積分 Tet(T)	パラメータファイル	
02 □			Q1(Q)		参照
			Q2 🗆		参照
03 🗖 🖉 参照			Q3 🗆		参照
前(A) 「 ケ(A) 「 ブロット(A) 「 ベージ 2(3)」 ページ 2(3) 「 A ( へい ブ 4(4) 」			<b>前(V)</b> [ 次(N) [	ブロット(L) [ ページ 1(1)] ページ 2(2	) OK キャンヤル ヘルプ(H)

16 ここで元に戻り、ステップ 7 でスキップした化合物を追加し ます。

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



キャリブレーション(B)
定量データベース設定(5)
自動定量設定(A)
化合物編集(E)
更新(U)
メソッド情報をリスト(L)
消去(C)

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

default.m は 4 化合物があります.		
◎ データベースに化合物を追	き力D(A)	
◎ データベースに化合物を挿入①		
○ 削除/新規データベース作	ξ,(D)	
OK キャンセル	ヘルプ(H)	

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

量データベースグローバル
ቃ/ ኩ/ ጠ
ビーク認識
リファレンスウィンドウ(R) 2000 分 💌
ノンリファレンスウィンドウ(N) 1.000 分 💌
リテンションタイムのずれ幅W/ 0.100 分
(ターゲット、クォリファイアのずれ)  「 RTEINT 使用(U)
新化合物情報
イオンクロマト抽出範囲(D) 0.500 min 濃度単位(O)
検量線(V) 直線 ▼ ISTD 濃度① 0.000000
一次回帰のデータポイント重み付(A) 均等
OK \$+927211 \\\\/H)

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

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

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

化合物名選択
<ul> <li>Dodecane</li> <li>000112-40-3 Dodecane</li> </ul>
○ RT: 5.28; Ion: 57.05 ○ ユーザ指定(U)
加算(A) スキップ(S) ISTDの ヘルプ(H)

[化合物編集 (Edit Compounds)] ボックスが表示されます。

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

化合物の編集	:			×
インデックス 1 2 3	リテンションタイム 9.779 6481 7.737	シグナル 74.10 154.10 188.15	1化合物名 * Methyl palmitate Biphenyl 4-Chiorobiphenyl [化合物リストの終わり]	
化合物名の *	印は、ISTD を示します 上に挿入の		終了(E)	ヘルプ(H)

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

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



23 [キャリブレーションの更新 (Update Calibration)] ダイア ログボックスが表示されたら、Responses フィールドと Retention Times フィールドに (ドロップダウンリストから ) [再較正 (Recalibrate)]、[置換 (Replace)] を選択しま す。

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

[**更新の実行 (Do Update)**] をクリックします。

キャリブレーション更新
「キャリブレーションデータファイルシーケンスによって選択したものは無視)
ファイル名:
C:¥msdchem¥1¥DATA¥evaldemo.d
リキャリブレーション ▼ キャリブレーション レベル ID(L) 50 ▼
レスポンスリテンジョンタイム
置き探え
) ジオリンアイア イオンの相対強度の置き探える/

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

ſ	と合物の編集					×
	インデックス   1 2 3 4	リテンションタイム 9.776 5278 6.431 7.741	シグナル 74.10 57.05 154.10 188.15	化合物名 * Methyl p Dodecane Biphenyl 4-Chlorot [化合物リスト	almitate piphenyl の終わり]	
	化合物名の * I 表示(⊻)	印は、ISTD を示します 上に挿入の	肖山	狳( <u>D</u> )	終了( <u>E</u> )	ヘルプ(円)

追加したばかりのドデカンには、濃度値がないことに注意してください。

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

化合物 #2: Dodecane (ページ 3)	×
レベル ID 濃度(C) レスポンス	レベル ID 濃度 レスポンス
50 975853.000	
」 南鉄道正式2 (M)- 000	, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,
	MILLY AV DODODD
加算: 植カハフメータアゲイル Tgt(T)	参照
Q1(Q)	参照
Q2 [	参照
03 🗖	参照
	1(1) (2, 2) 0(0) OK (2, 2) (2) (2)
	T(I) (~720) OK (*7000) (AU)(H)

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

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

化合物:	#2: Dodecane (ぺー)	73)		×
レベル ID 50	) 濃度(C) 50	レスポンス 1975853.000	レベル ID 濃度	
	, 			
	面積補正マス(M):	0.00	補正ファクター(F):	0.000000
Т	加算? 積分/	パラメータファイル		-1
Q	1(0)			-
Q	2 🗆 🗌		参照	
Q	3 🗖 🗌		参照	
前	() 次() ()	プロット(1) ページ 1(1)	ページ 2(2) OK	キャンセル ヘルプ(H)

化合物 #2: Dodecane (ページ 3)		
🚺 化合物	のを更新しますか	?
Yes	No	Cancel

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

処理を終了するには、[終了 (Exit)] をクリックします。

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

化合物の編集			×
インデックス 1 2 3 4	リテンションタイム 9.776 5278 6.431 7.741	<u>シグナル</u> 74.10 * Methyl palmitate 57.05 154.10 Biphenyl 188.15 4-Chlorobiphenyl [化合物リストの終わり]	
化合物名の * 表示( <u>V</u> )	EPは、ISTD を示します 上に挿入の	削除( <u>D</u> ) 終了(E	)(H)

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

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

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

注



3

Agilent G1701DA GC/MSD ChemStation 入門

# Custom Reports を使用する

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



# **Custom Reports**

## 概要

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

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

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

カスタムレポートは定量されたデータに対してのみ使用できます。

# はじめに

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

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

# Custom Reports ソフトウェアの開始

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



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

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

# レポートテンプレートの作成

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

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

コントロールパネル	
データファイル: va002.d	
- メソッド値	
メソッドファイル: clpvoa.m	
レポート: <定義なし>	
テーダベーズ: ド定義なし>	
□ 作成レポート保存	(G)
	<u>(P)</u>
□ メソッドの中で更新	fΨ
⑥ 新規レポートテンプレート作成(N)	○ 新規データベース作成( <u>D</u> )
○ メソッドレポートテンプレート編集(E)	● チャート/メソッドデータベース編集( <u>©</u> )
○ メソッドレポートテンプレート変更( <u>B</u> )	○ メソッドデータベース変更( <u>M</u> )
OK 終了⊗	<u> へルラ伊</u>

Report ウィザードを使用して、カ
スタムレポートテンプレートを作
成できます。
カステムレポートテンプレートを
修正できます。
メソッドで使用するレポートテン
プレートを選択できます。
Database ウィザードを使用して、
カスタムレポートデータベースを
作成できます。
グラフの表示とカステムレポート
データベースの修正ができます。
メソッドで使用するデータベース
を選択できます。

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

選択内容に基づいてレポートテンプレートが作成されます。

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

## 3 Custom Reports を使用する

レポートウィザード		
レホードンイサートでは、最入4つまでセンジョンを含むレホートを作らなできます。 、データファイルや単一化合物情報防どの一般情報が一行で表示されます は、化合物固有の情報を表にします。	9. ヘッダーセッションでは ・他の3つのセクションで	
*レポート項目**リストでセクションを選択し、*レポートで利用できる項目**か 加→>*ボタンをクリックしてください、	ら項目を選択し、"追	
 レポートで利用できる項目( <u>P</u> )	レポート項目( <u>C</u> )	例
Sample Amount Expected Barcode Actual Barcode ⊕Compound Information	へ200- 全ての化合物 全ての化合物 (ISTD 以外) すべての ISTD	レポート項目(©)
		ーヘッダー Data File Name Data File Path Acca, Method File
TO (MS) All Chromatograms =Compound		Misc Info Vial Number Number of Compounds 
Target & Qualitiers Spectrum From Peak Target Ion Qualifier 1		Name Ret Time
Qualifier 2 Qualifier 3		Amount Units 全ての化合物 (STD 以外) すべての ISTD
化合物(M) 1 次の化合物(M) (#1) Bromochlorome	sthane	
ОК ++>セル	<u> ヘルプ(H)</u>	+ サブ項目リストを開くには
		フラス記号をクリックする

- サブ項目リストを閉じるには マイナス記号をクリックする

、ッガー	ファイル(F	) 編集(E)	フォーマット(O) 表示(V) ツー	ル(T) ヘルプ(H)					
Data File Name									
Data File Path					8				
Acq. Method File		_							
Misc Info	A1								
Vial Number	/	Δ	B	C	D	F	F	G	н
Number of Compounds	1 1		8	v	b	-		u	
全にの化合物	2		•	Data File Name	DLW0/002 D				
#	3			Data File Path	D:¥ENVDEMO¥VOADATA¥				
Name	4			Aca. Method File	RTE method: DANNY				
Ret Time	5			Misc Info					
Amount	6			Vial Number					
Units	7			Number of Compounds	40.				
:ての化合物 (ISTD 以外)	8								
べての ISTD	9	#	Name	Ret Time	Amount	Units			
	10	1)	Bromochloromethane	7.95	50.00	uɛ/l			
	11	2)	Chloromethane	0.94	56.44	ug/l			
	12	3)	Bromomethane	1.59	50.33	uɛ/l			
	13	4)	Vinyl Chloride	2.06	52.84	uɛ/l			
	14	5)	Chloroethane	2.80	55.83	ug/l			
	15	6)	Methylene Chloride	4.66	52.32	uɛ/l			
	16	7)	Acetone	5.28	58.84	uɛ/l			
	17	8)	Carbon Disulfide	6.05	49.70	ug/l			
	18	9)	1,1-Dichloroethene	7.41	52.35	ug/l			
	19	102	1,1-Dichloroethane	8.73	50.53	ug/l			
	20	117	1,2-Dichloroethene (total)	9.54	52.79	ug/l			
	21	12)	Chloroform	10.16	51.17	uɛ/l			
	< > \	Sheet1 /	/		4				

# レポートのカスタマイズ

レポートの編集

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



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

שו	88	BZU≣	i i	Σ #OD Ē		?					
A1											
	A	В		С			D		E	F	G
4		6410									-
5		0410									
7		6400									
		6400									-
, )		6395									ŀ
í -		6390									
		6385									
										0.50	
3	Time:	> 5.50	6.00	6.50	7.00	7.50	8.00	8.50	9.00	9.50	
L				Data File	Name E	LWV002.	D				
5				Data Fil	e Path D	:\ENVDE	MO\VOAE	ATA\			
5				Acq. Meth	od File F	RTE metho	d: DANN)	'			
7				Mi	sc Info						
•				Vial N	umber						
)			Numi	ber of Comp	ounds			40.			_
-	#	Nomo		Det Time			Amount		Unito		
	# 1)	Bromochloromothong		Ret fille	7.95		Amount	50.00	ua/l		
2	2)	Chloromethane			0.94			56.44	ug/l		
	- 2)	Bromomethane			1.59			50.33	ua/l		
5	4)	Vinvl Chloride			2.06			52.84	ua/l		-
5	5	Chloroethane			2.80			55.83	ug/l		
7	6)	Methylene Chloride			4.66			52.32	ug/l		
	haati 7	Acetone			5.28		-	58.84	ua/I		
1/ 2	meet /					1					•

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

ボックス設定:ドラッグ&ドロップ	
1 次の化合物(N) 閉じる(2)	Next Cmnd (次の化合物
(#1) Bromochloromethane	)ボタンを使用するか、 番号を入力して、他の化 合物を表示します。
Operator Date Acquired Acq. Method File Sample Name Misc Info Vial Number Instrument Name Number of Concentrate	選択された項目の説明と 現在の値が表示されま す。
Sample Amount Sample Amount	項目を選択し、その値を
Actual Barcode	スノ レットシートのセル にドラッグできます。
	ーーーー レポートにグラフィック を追加できます。

4 変更が終わったら、レポートテンプレートを保存します。

# レポートの書式設定

	-						
9	1		0	0			
-	-		U U	0			
			Data File Name Data File Path Acq. Method File Misc Into Vial Number Number of Compounds	va002.d Ci¥msdchem¥MSDemo¥ RTE method:RNCAP2 Internal standards & surrogate s	tandards in 5 mLs water 2 40.		
-	1	Name	Rel Time	Anour		Unite	
	1)	Bromochloromethane	9.61		50.00	ue/I	
_	- 21	Chloromethane	2.10		200.00		
	3)	Vinyl Chloride	2.24		200.00	ue/I	
		Chlorenthane	2.73		200.00	UE/I	
	63	11-Dchloroethene	4 59		200.00	GETT	-
	7)	Carbon Disulfide	4.92	Font			
	0.2	Acetone	5.27	Freed	Fact states from		
	9)	Methylene Chloride	6.13	POPZ.	FORESTARE SUPE		
	10)	1.2-Dichloroethene (total)	6.74	MS UI Gobie	Hegular 10		0K
	11)	1,1-Dichloroethane	7.79	MS UI Gothic	Regular 10		annal
	122	Chloroform	9.95	- MS 1999	Italic 11		and a
	14)	1.2-Dichloroethane-de	10.96	O MY Box	Bold Italic 14		
	15)	1.4-Diluorobenzene	11.79	T NSimSun	16	_	
	16)	2-Butanone	9.42	Q Palatino Linotype	18	-	
	17)	1.1.1-Trichloroethane	10.04	T PMingLU	20	-	
	18)	Carbon Tetrachloride	10.34	A COM			
	192	Benzene	10.81	Effects	Sample		
	207	Trichloroethene	12.16	E Strikeout		_	
	217	1.2-Dichloropropane	12.59	E Underford	Aaあaアァ亜宇		
	23)	Bromodichloromethane	13.24	1 Underane			
	24)	cis-1.3-Dichloropropene	14.18	Color			
	25)	trans-1,3-Dichloropropene	15.45	Black.	Script		
	26)	1,1,2-Trichloroethane	15.78		Japanese	*	
	27)	Dibromochloromethane	16.55		States.	1000	
	28)	Bromoform	19.66				
	292	Chorobenzene-d5	17.70				
	30/	4-Methyl-2-Pentanone	14.67		200.00	ue/1	
	32)	Tokene	14.74		200.00	ue/I	
	33)	Tetrachloroethene	15.86		200.00	ue/I	
	34)	2-Hexanone	16.47		200.00	ue/I	
	35)	Chlorobenzene	17.76		200.00	ue/I	
	36)	Ethylbenzene	18.09		200.00	ue/I	
	37)	Xylene (total)	19.23		200.00	ue/I	
	387	Styrene	19.28		200.00	UE/I	
	403	1122-Tetrachbroethane	20.42		200.00	110/1	
	407	1,1,s,s-retrachibroethane	20.97		200.00	06/1	

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

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

## 行の高さまたは列の幅の調整

#### 行の高さを調整する

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

#### 列の幅を調節する

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

#### 複数の行を同じ高さにする

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

#### 複数の列を同じ幅にする

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

## レポートの保存

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



## セル、行、列の選択

### セルのグループを選択する

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

### 行または列を選択する

行番号または列文字をクリックします。

#### 複数の行または列を選択する

行番号または列文字をクリックアンドドラッグします。

#### 複数の連続していない単体セルを選択する

[Ctrl] を押したまま、セルをクリックします。

### 複数の連続していない行または列を選択する

[Ctrl] を押したまま、行番号または列文字をクリックします。

### 複数の連続する項目を選択する

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

	2 525224 CHISOLEHROLER/FILE/POLORI						<u></u>					
_	77407 1110 27-7540 1120 12-00 14304 1227 g 0/19 119 119 119 11 12 19											
列文字												
/	A1											
スプレッドシート ――	-	A B	0	D	E	F	G	н	I	J	r	1 .
	1 2		Data File Nome	va012.4								-
全体を選択するに	3	6.2 A	Data File Path	C ¥modchem¥HSDemo¥								
1チアア ち カ 11 い カ	5		Mac Info	internal standards & surrogate standards in 5 mLs water								
ねここをクリック	6		Vial Number Number of Compounds	2 40								
します	8		0.18									
	10	1) Bromochibromethane	Pet lime 9.61	Pergunt 50.00	up/l							
仁亚日	11	2) Chloromethane	2.10	200.00	up/I							
「「「「「」」「「」」「「」」」	12	37 Veyl Chloride	2.24	200.00	ug/l							
	14	5) Chlorpethane	2,99	200.00	ug/l							
	15	6) 1,1-Dchloroethene	4.59	200.00	ug/l							
スプレッドシート ――	16	7) Carbon Disulfide	4.92	200.22	ug/l							
	19	E7 Acetone E7 Mathulana Chinoida	611	200.00	00/1		1	11.			1. J	
セル	19	100 1 2-Dichlorgethese Botal	6.74	200.00	ug/1							
E/17	20	11) 1.1-Dichlorpethane	7.79	200.00	ug/l							
	21	12) Chiloroform	9.95	i 200.00	ug/l							1.00
	22	130 1.4-Dichlorgethane-d4	10.99	50.00	ug/l		1					
	24	15) 1 4-Diffuornhennene	11.29	50.00	ut/l		1				13 1	
	25	160 2-Butanone	9.42	200.00	ug/l							
	26	17) 1,1,1=Trichloroethane	10.04	200.00	ug/l							
	27	187 Carbon Tetrachibride	10.34	199.85	ut/l							
	29	200 Trichbroathana	12.16	200.00	ug/1		1 1					
	30	21) 1.2-Dichloropropane	12.59	200.00	ug/l							1
	31	22) Viryl Acetate	13.06	200.00	ug/l							2
	32	239 Bromodichioromethane	13.24	200.00	ug/l							
	33	247 c.c=1,3-Dichloropropene 25) trans-1 3-Dichloropropene	14.18	200.00	ug/1							
	35	26/1.1.2-Trichkroethane	15.78	200.00	ug/l							
	36	277 Dibromochioromethane	16.55	200.00	ug/l							
	37	282 Bromotorm	19.66	200.00	ug/l							
	20	200 TolyapardR	14.61	50.00	up/i							
	40	31) 4-Methyl-2-Pentanone	14.67	200.00	ug/l							
	41	327 Toluene	14.74	200.00	ug/l							
	42	220 Tetrachloroethene	15.86	200.00	up/l							
	44	347 2 - Hexanone 353 Chiveheotena	10.4/	200.00	ug/1							
	45	36) Ethybenzene	18.09	200.00	us/l							
	46	37) Xylene (total)	19.23	200.00	us/l							
	47	30) Styrene	19.20	200.00	up/l							
	40	397 Bromofluorobenzene	20.42	50.00	up/1							
	50	40/1,1,2,2 · renderstendre	49.77	200.00	warr							
	51			C 2 2								
	52											
	53											
	54											
	55											
	56											
	1 1 1	Peetl			1				-			
	100											

### レポートの印刷

### レポートテンプレートの作成(またはロード)

### 印刷する前にレポートをプレビューする

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

#### レポートを印刷する

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

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

ページ設定		
マ (A)	₽ <mark>799</mark> -	ED陷川道
○ 用紙 (A4)	● 用紙(レター)	● 上から下へ(M)
	左(1)	<ul> <li></li></ul>
1	.75	- 中央
下®	右(R)	□ 中央(水平)( <u>C</u> )
1	.75	□ 中央(垂直)公
<sub>ー</sub> スケール ———		- 印刷オブション
□ ページ調整	Ø	ヷリッドライン(G)
ページ幅(W)	1	■ モノクロ(公)
ページ長さ( <u>P</u> )	1	□ 行タイトル(型)
スケール( <u>S</u> )	100 %	□ 列タイトル(11)
ОК	*+1)	セル ヘルプ(円)

### レポートを自動的に印刷する

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

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

#### 複数のレポートを自動的に印刷する

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

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

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

### Custom Reports データベースの作成

始める前に

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

コントロールパネル							
データファイル: va002.d							
- メンッド値							
メソッドファイル: jolpvoa.m							
レポート: MYREPORT.CRT							
データベース: (定義なし)							
<ul> <li>□ 作成レポート保存(③)</li> <li>□ メソッドの中で印刷(₽)</li> <li>□ メソッドの中で更新(<u>U</u>)</li> </ul>							
○新規レポートテンプレート作成(1) ● 新規データベース作成(0)							
○ メソッドレポートテンプレート編集(E) ○ チャート/ダソッドデータベース編集(C)							
◎ メソッドレポートテンプレート変更(R)     ◎ メソッドデータベース変更(M)							
OK キャンセル ヘルブ(H)							

### データベースの作成手順

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

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



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

データベースウィザードで OK をクリックすると、次のプロン

プトが表示されます。



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

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

名前を付けて保有	z i i i i i i i i i i i				? ×
Save in:	Custrpt		•	+ 🗈 💣 🎟 -	
My Recent Documents Desktop My Documents My Computer	i metafile				
My Network	File name:	example		<b>_</b>	Save
- Haces	Save as type:	カスタムレポート (*.CRD)		•	Cancel

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

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

<u>አህንቶとወፓン</u> ታ
マ メリットデータベースとして使用する心、データベース EXAMPLEORD : メリッド clovoam マ <sub>(</sub> SUS)ド実行の中でデーダベースに自動の(A)

## 複数のデータファイルの選択

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

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

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

🖷 複数ファイル選択				×		
C:¥MSDCHEM¥MSDEMO¥						
ディレクトリ(回):	データファイル名(N)	選択ファイル( <u>F</u> )				
C¥ MSDCHEM 2perpage.m alkdemo.d barbdemo.d bfb624.d bfb624.m bfb624.m	選択可能なデータファ イルがこのボックスに リストされます。	> <	選択されたデータ ファイルがこのボッ クスにリストされま す。			
cistdhi.d ドライブ		Γ	0K	1		
== c: 選択したデータファイルは測	▼ 定日順に処理されます.		UK 445211 A167(H)			

### 連続する複数ファイルの選択

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

または

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

### 連続していない複数ファイルの選択

[Ctrl] を押したまま、各ファイルをクリックします。

### 選択の取り消し

[Ctrl] を押したまま、選択されたファイルをクリックします。

### レポートでは

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

### データベースでは

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

### グラフの表示と印刷

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



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

す。



のグラフを印刷します。

# Custom Reports $\checkmark = \_ \_ \_$

				7	==-(n)
ファイル(F)		編集(E)		フォーマット(0)	30/1(V)
新規(コントロールパネル) 開く(0) 閉じる(C)	Ctrl+N Ctrl+O	切り取り(T) コピー(C) 貼り付け(P)	Ctrl+X Ctrl+C Ctrl+V	配置(A) フォント(F) 罫線(B)	✓ グリッドライン(G) 編集ボックス(E) データベースウィザード(W)
上書き保存(5) 名前を付けて保存(A)	Ctrl+S	値とフォーマット貼付け(V) クリア(L)		パターン(P) 書式設定(N)	テンプレート(T):C:¥MSDCHEM¥CUSTRPT¥MYREPORT.CRT データベース(D):C:¥MSDCHEM¥CUSTRPT¥EXAMPLE.CRD
ED刷(P) ED刷プレビュー(V)	Ctrl+P	挿入(I) 削除(D)	Ctrl+I Ctrl+K	列幅(W) 行高さ(H)	ヘルプ(H)
印刷範囲設定(E) ページ設定(G)		繰り返し右へコピー(R)		ノロナクト(E)	目次(C)
印刷設定(R)		改ページ挿入(B) さかページ挿服金(K)		ツール(T)	タイアロクホックス(D) メニュー(M)
新データファイル読み込み(L) 複数ファイル選択(M)		ソート(5)		テンプレートの移行(№	1) カスタムレポートバージョン情報(A)
終了(X)					

### Custom Reports ツールバーボタン



コントロールパネルを表示します。



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



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



選択されたテキストに対して太字書式を適 B 用します(または除去します)。



選択されたテキストに対して下線書式を適 <u>u</u> 用します(または除去します)。











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

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



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



オンラインヘルプの [目次 (Contents)] ページを表示します。



© Agilent Technologies, Inc. Printed in USA, 6 月 2005



G1701-96056