

取扱説明書

ASpect PQ



製造元

Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 イエナ / ドイツ
電話: +49 3641 77 70
ファックス: +49 3641 77 9279
メール: info@analytik-jena.com

テクニカルサービス

Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 イエナ / ドイツ
電話: +49 3641 77 7407
ファックス: +49 3641 77 9279
メール: service@analytik-jena.com



適正かつ安全な使用のためにこの説明書に従ってください。後のためのガイドとして保存してください。

一般情報

<http://www.analytik-jena.com>

ドキュメンテーションナンバ
ー

版

C (04/2025)

技術ドキュメンテーション

Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2026, Analytik Jena GmbH+Co. KG

目次

1	ASpect PQソフトウェア	7
1.1	データ保護情報	7
1.2	ASpect PQの開始	7
1.2.1	クイックスタート画面	8
1.2.2	ワークシートで開始する	9
1.2.3	ワークシートなしで開始する	10
1.2.4	ASpect PQの2番目のインスタンスを開く	11
1.2.5	ASpect PQのロック	11
1.3	ASpect PQの終了	11
1.4	操作上の一般情報	11
1.4.1	ワークスペース	11
1.4.2	ヘルプ機能	12
1.4.3	メニューバー、ツールバー、アイコンバーの概要	13
1.4.4	よく使用されるコントロール機能	15
2	ワークシート	18
2.1	新しいワークシートの作成	19
2.2	ワークシートの編集	21
2.3	ワークシートの読み込み	21
2.4	ワークシートの削除	21
3	メソッド	22
3.1	メソッドの作成、保存、読み込み	22
3.1.1	新しいメソッドの作成	22
3.1.2	メソッドの保存	23
3.1.3	メソッドの読み込み	24
3.2	メソッドパラメータの指定	25
3.2.1	分析ラインの指定 (メソッド 波長画面)	25
3.2.2	プラズマと転送光学系のパラメータを設定する (メソッド プラズマ画面)	32
3.2.3	サンプル導入用の設定 (メソッド サンプルリハリアー画面)	33
3.2.4	ピークの評価 (メソッド 評価画面)	35
3.2.5	校正パラメータの入力 (メソッド 検量線画面)	39
3.2.6	統計解析の指定 (メソッド 統計画面)	43
3.2.7	品質管理の指定 (メソッド QCS画面)	45
3.2.8	品質管理の指定 (メソッド QCC画面)	48
3.2.9	結果の出力形式の指定 (メソッド 出力画面)	50
4	シーケンス	52
4.1	シーケンスの作成・保存・読み込み	52
4.1.1	新しいシーケンスの作成	52
4.1.2	シーケンスの保存	52
4.1.3	シーケンスの読み込み	53
4.2	シーケンス画面	54
4.3	シーケンス内の測定とアクションの指定	55
4.4	サンプル分析/アクションに対する元素/ラインの選択	58
5	サンプル情報データ (サンプルID)	59
5.1	サンプル情報データを作成する、保存する、開く	59

5.2	サンプルID サンプル情報画面.....	59
5.3	サンプル情報の指定	61
6	分析の実行と結果の計算.....	63
6.1	メイン画面で分析を開始するためのメニューコマンドとボタンの概要.....	63
6.2	分光計をオンにしてプラズマ点火.....	63
6.3	プラズマを消火して分光計をオフにする	65
6.4	測定ルーチンの開始	66
6.5	分析実行中の結果の表示と保存.....	67
6.6	分析シーケンスの中断と再開.....	68
6.7	シーケンスのアクションの繰り返し	69
6.8	分析結果の再処理	69
6.9	分析の実行と並行して測定結果を評価する（オフラインモード）	72
6.10	結果および分析進行状況をメイン画面に表示する.....	72
6.10.1	シーケンス/結果タブ	73
6.10.2	シーケスタブ	73
6.10.3	結果タブ.....	73
6.10.4	概要タブ	77
6.11	サンプル単一値の表示と編集.....	77
6.12	強度スペクトルの表示と編集.....	79
6.12.1	ピークの表示 - スペクトルの編集 / 表示画面	79
6.12.2	ピークの評価とバックグラウンド補正の決定 - スペクトルの編集 処理画面	82
6.12.3	スペクトル干渉の除去 - スペクトルの編集 スペクトル補正画面	84
6.13	概要スペクトルを記録する.....	87
7	検量線.....	89
7.1	検量曲線のグラフィック表示.....	90
7.2	検量線結果の表示	91
7.2.1	検量線 - 表タブ	91
7.2.2	検量線 - 残差タブ.....	91
7.2.3	検量線 - LOD/LOQタブ	91
7.2.4	検量線 - LOD/LOQタブ	92
7.3	検量曲線の編集	93
8	品質管理	94
8.1	QCチャートのパラメータ	94
8.2	QCチャートの項目と限界値.....	95
8.3	QCチャートの表示.....	96
9	分光器とアクセサリーのコントロールとモニター	98
9.1	分光器.....	98
9.1.1	分光器のパラメータ設定および機能テスト	98
9.1.2	装置パラメータの診断.....	99
9.1.3	連続ピーク測定の実行.....	99
9.1.4	信号推移の記録	101
9.2	プラズマ	101
9.2.1	プラズマの点火とプラズマ条件の設定	102
9.2.2	サンプル導入とポンプのチェック	104
9.2.3	プラズマの調整と最適化.....	105

9.3	オートサンプラー	107
9.3.1	接続されているオートサンプラーの表示	108
9.3.2	オートサンプラーロックの設定	108
9.3.3	オートサンプラーの技術パラメータ	109
9.3.4	オートサンプラー機能のテスト	110
9.3.5	オートサンプラー上のサンプル位置の表示	111
9.3.6	希釈機能	111
9.4	循環式チラー	113
10	データ管理	114
10.1	ASpect PQの印刷機能	114
10.1.1	分析結果の印刷	114
10.1.2	追加の分析パラメータおよび設定の印刷	117
10.1.3	レポートテンプレート	117
10.2	ASpect PQにおけるすべてのデータタイプの管理	119
10.2.1	メソッドとシーケンスの管理	120
10.2.2	結果ファイルの管理	122
10.2.3	ライン/波長ファイルのエクスポート	123
10.2.4	補正モデルの管理	123
10.2.5	補正スペクトルの削除	124
10.2.6	レポートテンプレートのインポート	124
10.2.7	ラインのお気に入りの管理	125
10.2.8	ワークシートのインポート、エクスポート、削除	125
10.3	結果のASCII/CSV形式での保存	126
10.4	測定単位の指定	127
10.5	原液およびQCサンプル用データベースの管理	127
10.6	定義済みコメントの作成	128
10.7	Windowsクリップボードの使用	128
11	ASpect PQのカスタマイズ	130
11.1	表示オプション	130
11.2	保存パス	131
11.3	エクスポートオプション	132
11.4	連続ASCIIエクスポートのオプション	132
11.5	分析シーケンスのオプション	133
11.6	検量線とブランク補正の一般設定	134
12	外部ジョブ管理システムとのデータ交換の設定	136
12.1	測定結果のエクスポート	136
12.2	サンプル情報ファイルのインポート	138
12.3	結果エクスポートフィールド	138
12.4	サンプル情報ファイルのフィールド	140
13	オプションFDA 21 CFR パート 11 コンプライアンスモジュール	142
13.1	ユーザー管理	142
13.1.1	ユーザー管理 - 表示および設定	142
13.1.2	ユーザーレベルの設定	143
13.1.3	ユーザー管理の一般設定の構成	144
13.1.4	新しいユーザーアカウントの作成	147
13.1.5	既存のユーザーアカウントの変更	148

13.2	パスワードの変更	148
13.3	監査証拠の表示、印刷、エクスポート	148
13.4	電子署名	149
13.4.1	測定結果の署名	150
13.4.2	署名の表示	150
13.5	AJ ファイル保護	151
14	付録	152
14.1	値の表示に使用される記号の概要	152

1 ASpect PQソフトウェア

ASpect PQは、以下のICP-OES装置用の制御および分析を行うためのソフトウェアです：

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100
- PlasmaQuant 9200

測定手順のメソッドパラメータはサンプルに応じて最適化することができます。得られた結果データは、再計算したり、さまざまなファイル形式でエクスポートしたり、印刷したりできます。

本マニュアルには、ソフトウェアの説明に加え、ICP-OES装置のメンテナンスと手入れに関する情報が記載されています。メンテナンス手順の多くは、アニメーションや動画で詳しく説明されています。

本書はASpect PQ 1.4バージョンに基づいています。

記載されている
ソフトウェアのバージョン
意図された用途

ASpect PQソフトウェアは、上記の装置を操作し、これらの装置で取り込まれたデータを測定するために使用されます。

ASpect PQの目的以外の使用が原因で発生した問題や損害に関しては、一切の責任を負いかねますのでご注意ください。

適切な資格や知識のある方、トレーニングを受けた方のみASpect PQと分析装置を操作してください。ユーザーは、この文書および装置のユーザーマニュアルで提供される情報に精通している必要があります。

1.1 データ保護情報

このソフトウェアでは、サンプル名を使用し、オプションとしてサンプルに関する情報(備考)を使用できます。サンプル名は、特定のサンプルの検査結果を識別するために使用できます。特に臨床の場では、検査対象の自然人とテスト結果を結ぶために、サンプル名を使用できます。個人情報はできるだけ最低限に絞り、サンプル名やオプションの備考から個人情報が抽出されることがないようにする必要があります。氏名、社会保障番号、国民識別番号、生年月日、その他の個人属性のように直接的に識別する名称を使用しないでください。該当するデータ保護法および義務を遵守することは、研究所のデータ管理者の責任です。

Analytik Jena は、カスタマーサポート、トラブルシューティング、苦情調査などのサービス関連業務の一環として、サンプル名やメモを含む測定結果を記録したファイルの共有を要請することがあります。

1.2 ASpect PQの開始

- ▶ 装置とオートサンプラーをオンにします。
- ▶ WindowsデスクトップでASpect PQアイコンをクリックします。
 - ✓ ASpect PQが起動します。
- ▶ ユーザー管理オプションをインストールしている場合は、ユーザー名とパスワードの入力を要求してきます。ASpect PQプログラムを使用するには、このデータを正しく入力する必要があります。

ソフトウェアの起動後に、クイックスタートが開きます。ここでは、事前に設定されたメソッドとシーケンスを含むワークシートを選択して迅速に測定を開始するか、またはASpect PQインターフェースに直接切り替えるオプションがあります。

1.2.1 クイックスタート画面

ソフトウェアが起動し、ユーザーがログインすると（ユーザー管理がインストールされている場合のみ）、クイックスタート画面が表示されます。ここからワークシートを読み込んだり、追加の設定なしでASpect PQに切り替えたりできます。また、ASpect PQ内で、メニューコマンドファイル|クイックスタートを使用してクイックスタート画面を開くこともできます。

クイックスタート画面の設定


以下のオプションとボタンがクイックスタート画面に表示されます。

オプション／ボタン	説明
オペレーター	オプションでインストールできるユーザー管理を使用する場合は、この入力フィールドに現在ログインしているユーザーが表示されます。ユーザー管理を使用しない場合は、ユーザー名をマニュアルで入力できます。
ラボ	30文字まで入力できます。最後に入力した名前が保存されて、結果レポートに出力されます。
ルーチン	ルーチン操作のためのプログラムを開始します。ルーチン操作では、ルーチン操作用に有効化されているメソッドのみが表示されます。 オプションの「21 CFRパート11コンプライアンスASpect PQ」モジュールがインストールされている場合、ルーチンオプションがあらかじめ設定されています。ルーチンとメソッド開発の間で選択することはできません。
メソッド開発	フルプログラムを開始します。メソッド開発におけるすべての設定が公開されています。
トーチの材質	使用するトーチ材料（石英またはセラミック）を選択して、光学式プラズマセンサーの感度を調整します。
シミュレーション	トレーニングおよびデモンストレーション目的の場合は、分析装置を接続しないでASpect PQを操作できます。

オプション/ ボタン	説明
	有効になっている場合は、すべてのデバイス機能（データ測定と測定を含む）がシミュレーションモードで実行されます。
クイックスタートをスキップ	ワークシート選択なしでASpect PQインターフェースに切り替えます。
ポートの構成：AX/SDX	Teledyne Cetac SDXHPLD希釈システムがASX-560オートサンプラーに接続されている場合に限り、ボタンをクリックすると、オートサンプラーと希釈システムが使用するUSBポートが自動的に構成されます。オプションの「21 CFRパート11コンプライアンスASpect PQ」モジュール（ユーザー管理）がインストールされている場合、この機能は管理者権限を持つユーザーのみが実行できます。
終了	クイックスタート画面を閉じて ASpect PQ を終了します。
OK	ワークシートを選択したら、ASpect PQ インターフェースに切り替えます。

ワークシートテーブル

ワークシートテーブルには現在利用できるワークシートが表示されます。4つのタブでワークシートを簡単に見つけることができます：

タブ	内容
お気に入り	としてマークされたワークシート お気に入り
最近	最近使用されたワークシート
定義済み	アナリティック・イェナからのワークシート。ASpect PQ のインストール時にインストールされます
all	すべてのワークシート
	虫眼鏡アイコンを使用すると、ワークシートが元素で絞り込まれます。アイコンをクリックすると元素リストが表示され、元素を選択できます。複数の元素を検索したい場合は、選択を繰り返すことができます。複数の元素を選択した場合は、保存されたメソッド内にそれらの元素の少なくとも1つを含むすべてのワークシートが表示されます（OR ロジック）。これにより、ワークシートに直接リンクされたメソッドおよびリンクされたシーケンス内に読み込まれたメソッドの両方が検索されます。

1.2.2 ワークシートで開始する

ワークシートは、メソッドとシーケンスを含むフォルダです。オプションで、サンプル ID の設定および結果ファイルを保存するための設定をワークシートに含めることもできます。ワークシートを選択した状態で、測定をすぐに開始できます。メソッドとシーケンスにいくつかのバージョンがある場合は、常に最新（現在）のバージョンが測定に使用されます。

- ▶ 分析装置にアクセサリーをインストールしてから、アクセサリーと装置をオンにします。
- ▶ ソフトウェアを起動します。
 - ✓ クイックスタート画面が表示されます。
- ▶ ホルダー およびサンプル フィールドに必要な情報を入力します。
- ▶ トリガーの材質で、石英ガラスまたはセラミックを選択します。
- ▶ ワークシートテーブルで必要なワークシートを選択します。

- ▶ **OK**をクリックします。

✓ ASpect PQ インターフェースが表示されます。メソッドとシーケンスがすでに読み込まれています。

ワークシート設定に応じて、ワークシートと一緒に読み込まれたメソッドとシーケンスをサンプルIDファイルにリンクしたり、測定を直接開始したりできます。

1.2.3 ワークシートなしで開始する

準備されたワークシートがない場合は、測定用のメソッド、シーケンス、サンプルIDを読み込むか、それらを設定する必要があります。

- ▶ 分析装置にアクセサリーをインストールしてから、アクセサリーと装置をオンにします。
- ▶ ソフトウェアを起動します。
 - ✓ **クイックスタート**画面が表示されます。
- ▶ **パレーター** および **ホブ** フィールドに必要な情報を入力します。
- ▶ **ホブの材質**で、石英ガラスまたはセラミックを選択します。
- ▶ **クイックスタートをスキップ**をクリックします。
 - ✓ ASpect PQインターフェースが表示されます。

測定ルーチンの一般
シーケンス

測定タスク用のメソッドとシーケンスを指定し、測定ルーチンを開始します。手動または自動の測定手順には、以下のアクションが必要です：

- ▶ **メソッド**（メソッド開発）内でメソッドパラメータを指定します。メソッドを読み込みます。
- ▶ **シーケンス**を作成します。シーケンスには、サンプルとアクションに関する情報が、それらの処理順序で含まれています。サンプルを説明するデータ、たとえばサンプル名やそのサンプルのオートサンプラーの位置は、直接入力してもかまいません。それらはシーケンスと一緒に保存されます。
- ▶ **ルーチン測定**の場合は、サンプル情報ファイル（サンプルID）を作成すると便利です。このファイルにはサンプル名、希釈倍率、オートサンプラー位置などのサンプル関連データが含まれます。このデータは、濃度が元のサンプルに逆算する場合に必要になります。サンプル情報ファイルはテキストファイルで、外部アプリケーションで作成できます。
- ▶ **測定を開始**します。

結果は、測定中に結果データベースにすぐ書き込まれます。この中央結果ファイルは、統合データ管理機能（エクスポート、印刷など）からアクセスされます。

測定開始後、結果データは結果リストに入力されます。対応するサンプル行を選択することで、詳細表示にアクセスできます（個々の値、ピークなど）。最後に取り込まれた結果は、常にテーブルの最後に追加されます。結果の上書きはできません。

再処理機能によって、データをさらに測定することができます。測定データをレポートの印刷やエクスポートのために準備することもできます。

1.2.4 ASpect PQの2番目のインスタンスを開く

アプリケーションがすでに実行中の場合は、このアプリケーションの別のプログラムインスタンスがオフラインモードで開きます。このモードでは、装置との通信は行われません。1つめのソフトウェアがサンプル測定をしている最中に測定以外のすべての機能、たとえばメソッドの読み込みや作成、結果を読み込むことなどを使用することができません。

- ▶ **ファイル | オフラインプログラム開始**のメニュー項目を使って2番目のインスタンスでプログラムを起動します。

1.2.5 ASpect PQのロック

アプリケーションの操作をロックできますが、ロック中でも測定は継続されます。オプションで利用可能なユーザー管理と組み合わせる場合、画面のロックを解除するにはパスワードの確認が必要になります。

- ▶ **その他 | ロック**メニュー項目を選択します。
- ▶ アプリケーションのロックを解除するには、画面上の錠前アイコンをクリックします。

1.3 ASpect PQの終了

- ▶ プラズマを消火します。
- ▶ **ファイル | 終了**メニュー項目を選択してプログラムを終了します。
- ▶ この時点で、まだ保存されていないメソッド、シーケンス、またはサンプル情報のデータファイルが開いている場合は、その旨が通知されます。ファイルを保存する場合は、**はい**をクリックします。
- ▶ プラズマを停止した後も、ICP-OES装置はシステム冷却のために時間が必要です。目標温度にまだ到達していない場合、装置を安全に停止する方法についてのメッセージとともに進捗画面が表示されます。ASpect PQを終了するまで、ICP-OES装置の電源を切らないでください。



注記

プラズマの点火中にASpect PQを終了すると、確認メッセージが表示された後にプラズマは自動的に消火されます！

これについては次のリンクも参照してください：

- [分光計をオンにしてプラズマ点火](#) [▶ 63]

1.4 操作上の一般情報


1.4.1 ワークスペース

ASpect PQプログラムを起動すると、最初に**クイックスタート**画面が開きます。ここから、ワークスペースにアクセスできます。



ワークスペースの主要
コンポーネント

The screenshot shows the ASpect PQ software interface. The main window displays a table with columns: No., Sample type, Name, Line, Type, Ints., SD(Ints.), RSD%, Date, Time, and Single values(Ints.). The table contains 38 rows of data. Seven numbered callouts are present:

- 1: Title bar (Title: ASpect PQ 1.3.2.013 Tech: ICP-OES - Worksheet: Elemental In... SP 232/233 - [Routine])
- 2: Menu bar (File, Edit, View, Method Development, Routine, Extras)
- 3: Toolbar (Buttons for Run, Stop, Refresh, etc.)
- 4: Icon toolbar (Icons for Plasma, Spectrometer, Method, Autosampler, Sample ID, Sequence, Calibration, Data, Worksheet)
- 5: Main data table
- 6: Sub-tab area (Buttons for Ints./Time, Conc.1, Conc.2, Error, Single val., Sample ID, User defined)
- 7: Status bar (PQ 5200, Tester, Simulation, Software_validation_140)

No.	説明
1	タイトルバーには、ソフトウェアのバージョン、接続されている装置、技術、ワークシート（読み込まれている場合）に関する情報が表示されます。
2	メニューバーは、ソフトウェアのすべてのプログラム機能にアクセスするために使用されます。
3	ツールバーには、測定シーケンスを開始/一時停止するボタンが含まれ、現在読み込まれているメソッド、シーケンス、サンプルIDファイルが表示されます。フィールドの背後の  ボタンをクリックすると、データレコードが読み込まれます。また、ここには新しいワークシートを作成するためのボタンもあります。
4	このアイコンツールバーから、ソフトウェアの最も重要な画面（機能）にアクセスできます。いずれかの画面が開くと、対応するアイコンが赤くなります。複数の画面が開いている場合は、アイコンを再度クリックするとその画面が前面に表示されます。
5	メイン画面にシーケンスおよび測定結果が表示されます。
6	一部のメインタブの画面下部領域にサブタブが追加されます。
7	下部のステータスバーには、接続された装置、ログインユーザー、現在表示されている結果データベースの名前に関する情報が表示されます。

これについては次のリンクも参照してください：

-  結果および分析進行状況をメイン画面に表示する [▶ 72](#)
-  クイックスタート画面 [▶ 8](#)

1.4.2 ヘルプ機能

ASpect PQの使用に関するヘルプは、**? | ヘルプ | ヒックス F1**メニュー項目から利用できます。ASpect PQ画面の操作中に**F1**機能キーを押すことで、その状況に応じたヘルプを参照できます。

メソッド、シーケンス、サンプルID画面内ツールバーやアイコンバーのボタン、その他のアイコンボタン、およびカラムタイトルにマウスポインタを置くと、ツールチップ（簡潔な情報）が表示されます。

1.4.3 メニューバー、ツールバー、アイコンバーの概要



メニューバーの機能

メニューバーはASpect PQインターフェースの上部にあり、これを使ってすべてのソフトウェア操作を開始できます。メニューやボタン類はそれがグレーになっている間は操作ができません。印刷機能など、一部のメニュー項目は、他の画面が開いているかどうかに応じて表示されます。

メニュー項目	説明
ファイル	<ul style="list-style-type: none"> メソッド、シーケンスおよびサンプル情報データを作成し、開き、保存します 結果データを開きます メソッドとシーケンスを削除します ピークデータをエクスポートします アクティブ画面またはレポートを印刷します レポート設計モードを開きます オフラインまたはオンラインプログラムインスタンスを開始します クイックスタート画面を開きます アプリケーションを終了します 最後に開いたメソッドとシーケンスを直接開きます
編集	<ul style="list-style-type: none"> テキストおよび入力フィールドの内容をコピーして挿入します 選択した結果リストをクリップボードにコピーします 結果リストの内容を削除します
ビュー	<ul style="list-style-type: none"> 分析シーケンス中に、信号曲線などのグラフや情報を表示する画面を開いたり閉じたりします グラフ表示のスケールを選択します
メソッド開発	<ul style="list-style-type: none"> メソッド開発のための画面を開きます 概要スペクトルを記録します
ルーチン	<ul style="list-style-type: none"> 測定を開始、一時停止、およびキャンセルします 結果を再処理します 検量線を削除します プラズマを消火します システムを洗浄します
システム	<p>オプションの「21 CFRパート11コンプライアンスASpect PQ」モジュールがインストールされている場合に利用可能</p> <ul style="list-style-type: none"> ユーザー管理を構成します パスワードの変更 監査証跡を表示します 結果に署名します
その他	<ul style="list-style-type: none"> データおよびオプション画面を開きます ラインリストを開きます サンプルを検索します 現在の画面表示を印刷します メンテナンス（循環式チャラー）を確認・実行します ワークステーションをロックします
?	<ul style="list-style-type: none"> ヘルプおよびバージョン情報を表示します

ツールバー








ツールバーのボタンは主に、シーケンス測定を開始／一時停止、および継続するために使用されます。ツールバーのフィールドには、現在読み込まれているメソッド、シーケンス、およびサンプルIDが表示されます。

工具	説明
	測定ルーチンを開始します
	シーケンスの選択した行を測定します

工具	説明
	測定ルーチンの実行を一時停止します
	一時停止中のシーケンス測定を継続します
	結果を再処理します
	ICP-OES 装置のポンプを始動/停止します
	ポンプを高速化します (サンプル経路のフラッシュ)
	プラズマを消火します (クイックシャットダウン)
	ファイルを開きます 保存済みメソッド、シーケンス、またはサンプルIDは、プログラムに読み込んで現在の測定のために使用できます。
	新しいワークシートを作成します
プラズマを フィク	プラズマカメラをアクティブにします ソフトウェアは、プラズマを記録したカメラ画像を継続的に表示します。点火プロセス中のリングプラズマの形成など、可能性のある異常は迅速に検出されます。 カメラ画像は、カメラ画面の設定 カメラ画像を切り抜くメニューコマンドを使って切り抜くことができます。

アイコンバー

アイコンバーから、ASpect PQの主要機能にすばやくアクセスできます。アイコンをクリックすると、対応するプログラム機能の画面が開きます。インストール後、アイコンバーは画面の左側に配置されますが、マウスボタンを押したままにすることで必要に応じて移動できます。

アイコン	説明
	原子化を確認します : <ul style="list-style-type: none"> ■ プラズマの点火/消火 ■ ガス流量の設定 ■ ネブライザーへのサンプル搬送用ポンプのチェック ■ 転送光学系の調整 ■ プラズマ出力とネブライザーガスの最適化
	分光計機能をチェックします : <ul style="list-style-type: none"> ■ 装置データ ■ 波長補正のテスト ■ テスト波長での測定のスタート ■ 装置最適化のための、連続測定のスタート
	メソッド画面を開きます
	オートサンプラーを指定します
	サンプル情報データ画面を開きます
	シーケンス画面を開きます
	検量線を含む画面を開きます

アイコン	説明
	品質管理データを含む画面を開きます
	データ管理を開きます
	ワークシートを管理、保存済みワークシートを開きます

1.4.4 よく使用されるコントロール機能

ASpect PQでは、さまざまなボタン、マウス、キーボード機能が使用されます。これらの機能の意味は常に同じか、非常に似通っています。

これらのコントロール機能を説明します。詳細な情報は必要に応じてそれぞれの画面で説明されています。

一般ボタン

アイコンボタンの機能はボタンの上にマウスを持っていくと、内容が表示されます。

ボタン	説明
OK	画面を閉じて設定を適用します
キャンセル	画面を閉じて変更を破棄します
承認	画面を閉じずに設定を適用します
閉じる	設定を保存せずに画面を閉じます
開く	ファイルやデータレコードを読み込むために選択画面を開きます
保存	ファイルやデータレコードを保存するために選択画面を開きます
	選択画面を開きます（パス選択ダイアログボックスなど）
	印刷画面を開きます。この画面から、アクティブ文書画面の内容を印刷したり、ファイルにエクスポートしたりできます

テーブル

No.	Line	Calib. func.	Intercept	Weighting	Check	Unit
1	AB396.152	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
2	As188.979	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
3	As193.698	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
4	Cd214.441	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
5	Cd226.502	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
6	Cr267.716	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
7	Cu324.754	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
8	Fe259.940	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
9	Mn257.610	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
10	Ni231.604	linear	calculate	1/conc	none	µg/L

Stocks... Calibration Table

一部の画面では、値がテーブルに直接入力されます。項目の種類に応じて、テーブルセルは入力フィールド、選択リスト、または矢印キーで数値範囲を制限する入力フィールドとして動作します。




- ▶ テーブル行を選択するには、灰色で強調表示された最初の表カラム内で、対応する行をクリックします。それから、キーボードの矢印ボタンを使って選択バーを移動できます。

- ▶ カラム幅を変更するには、マウスを2つのカラム間の境界線に二重矢印が表示されるまで置きます。それから、左マウスボタンを押してカラム幅を調整します。

入力フィールドでは、以下の追加機能を利用できます：





- ▶ F2キーを押すと編集モードがアクティブになります。このモードでは、キーボードの矢印キーを使って文字単位の編集を行います。もう一度F2を押すと、カーソルキーをセル間を移動するために使用する標準モードに戻ります。
- ▶ テキストは、**編集|コピー**と**編集|挿入**メニューまたはCtrl+CとCtrl+Vキーの組み合わせを使って、Windowsのクリップボードにコピーし、再度貼り付けることができます。

テーブルで使用できるボタン

ボタン	機能
追加	リストの最後に新しいテーブル行を増やします。
挿入	選択したラインの前に新しいテーブル行を挿入します。
削除	選択したテーブル行を削除します。
	選択したテーブル行を1つ上の位置に移動します。 注記：テーブル行を移動するには、完全に選択する必要があります。そのためには、テーブルの最初の列内で該当する行の番号をクリックします。
	選択したテーブル行を1つ下の位置に移動します。
	選択したセルの値を同じサンプル種類（サンプル、標準、QCなど）である後続のすべてのテーブル行に転送します。inc.チェックボックスがオンの場合（inc.は増分を表す）、この値は自動的に増分されます（例：Sample001、Sample002...）。

グラフ

グラフで右マウスボタンをクリックすることで、コンテキストメニューを開くことができます。このメニューには、グラフまたは画面全体をWindowsクリップボードにコピーするためのオプションが表示されます。いくつかのグラフ画面では、追加のアイコンボタンが表示されます：

アイコン	機能
	ズームモードをアクティブにします ボタンをアクティブにした後、左マウスボタンを押したまま拡大したいグラフ領域の周囲のフレームをドラッグしてから、マウスボタンを放します。
	ズームモードを解除してグラフを元のスケールに戻します
	テキストモードをアクティブにします ボタンをアクティブにした後、左マウスボタンを押したままグラフ内でフレームをドラッグしてから、テキストを入力します。既存のテキストをダブルクリックすると、テキストを編集または削除できる画面が開きます。Ctrlと右マウスボタンを押したままにすると、既存のテキストが移動します。
	シグナルまたはピークモードで選択モードをアクティブにします 左マウスボタンをクリックすると、ラベルが測定ポイントに追加されます。

ファンクションキー

アイコン	機能
F1	状況に応じたヘルプを開きます
F2	テーブルセルの編集
F5	スクリーン画像の印刷を開始します

アイコン	機能
F6	シーケンスの選択された行を測定します（メニュー項目 シーケンス行の実行... F6 ）
F7	追加のグラフ画面（例：信号曲線）を表示します
F8	追加のグラフ画面を閉じます
F10	キーボードの操作対象をワークスペースのメニューバーと結果画面との間で切り替えます
F11	以前に停止した測定を続行します（メニュー項目 シーケンス継続 ）
F12	測定プロセスを開始または停止します（メニュー項目 シーケンス開始... F12 および シーケンス停止 F12 ）

プリンターの使用

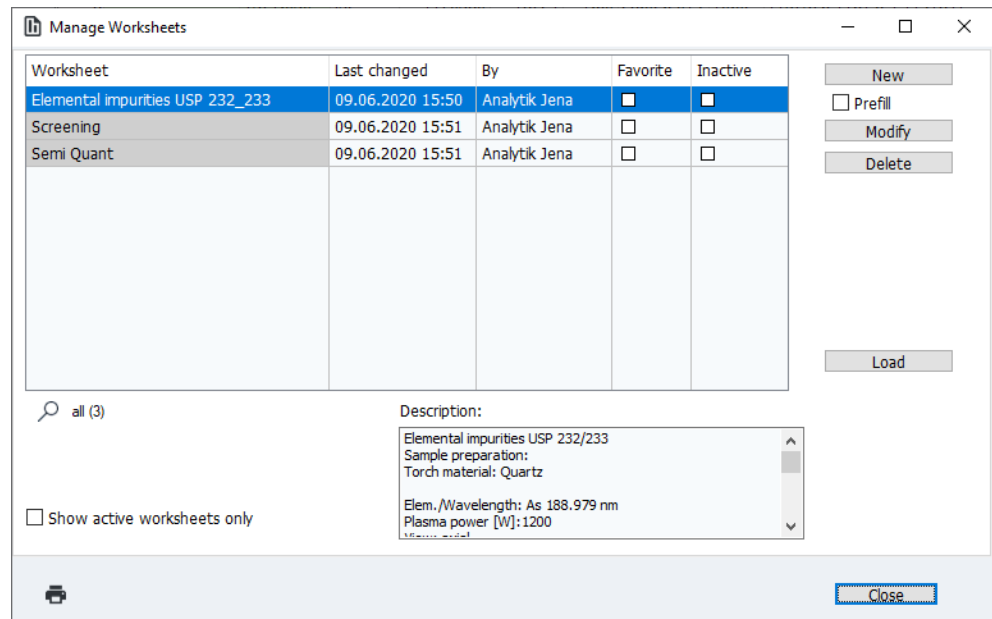
Windowsのデフォルトプリンタがすでに設定されている場合、そのプリンタがASpect PQで使用されます。

2 ワークシート

ワークシートは、メソッドとシーケンスがまとめられたフォルダです。また、サンプルIDファイルや結果データの設定をワークシートに保存できます。ワークシートが読み込まれていれば、測定ルーチンを直ちに開始できます。ワークシートを作成したり、変更したり、削除したり、アクティブ解除したり、読み込んだりできます。このための機能はワークシートの管理画面にあります。

ワークシートの管理画面は、アイコンバーの  をクリックすると開きます。

ワークシートの管理画面の要素




ボタン/オプション	説明
新規	新しいワークシートを作成します
プリフィル	すでに読み込まれているシーケンスとメソッドがワークシートに転送されます。
変更	選択したワークシートを編集します
削除	選択したワークシートを削除します
読み込み	測定用に選択したワークシートを読み込みます
アクティブなワークシートのみを表示	テーブル内で非アクティブとマークされているすべてのワークシートを非表示にします。
説明	選択したワークシートの説明 この情報はワークシート作成時に保存されます。

テーブルにはワークシートに関する以下の情報が表示されます：

テーブル列	説明
ワークシート	ワークシートの名前
最終変更日	ワークシートの最終変更日
～によって	このオペレーターが最終変更を加えました。オペレーターの名前はクイックスタートから取得されます。
お気に入り	アクティブになっている場合、ワークシートをクイックスタート画面のお気に入りタブに表示します。
非アクティブ	アクティブになっている場合、このワークシートはクイックスタートに表示されません。

テーブル列	説明
	ただし、非アクティブとマークされたワークシートはワークシートの管理画面から読み込めます。

これについては次のリンクも参照してください：



 ワークシートで開始する [▶ 9]

2.1 新しいワークシートの作成


ワークシートは新しいワークシート画面で作成できます。

New Worksheet


Name: ★ Favorite
 Inactive


Method:  


08.06.2020 15:10


Sequence: 

09.06.2020 7:45

Sample ID: 

Folder: 

Results file: 

Folder: 

Name:

C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectPQ\ICP\RESULTS\Ground



Elements:

Last changed: 19.08.2020 12:57

Description:

Sample preparation:
 Torch material: Quartz
 Elem./Wavelength: Al 396.152 nm
 Plasma power [W]:1200
 View: axial
 Plasma gas[L/min]: 12
 Neb. gas[L/min]: 0.6
 Calibration range: 0 - 200 µg/l

新しいワークシート画面の要素

フィールド / オプション	説明
名前	ワークシートの名前を入力します
メソッド	ワークシートに保存されるメソッド  をクリックしてデータベース画面を開き、メソッドを選択します。
シーケンス	ワークシートに保存されるシーケンス  をクリックしてデータベース画面を開き、シーケンスを選択します。
サンプルID	オプションで、サンプルIDファイルを読み込むための設定を定義できます： (なし)：サンプルIDファイルの設定は保存されません。

フィールド / オプション	説明
	<p>サンプルIDファイルを含むフォルダを開く：ワークシートを読み込んだ後、サンプルIDファイルを含むフォルダが開きます。📁をクリックしてフォルダを選択します。</p> <p>サンプルIDファイルを読み込む：ワークシートが読み込まれると、サンプルIDファイルが自動的に読み込まれます。📁をクリックしてファイルを選択します。「*」および「?」ワイルドカードを使ってファイルマスクを定義することもできます。</p>
結果ファイル	<p>オプションで、結果を保存するための設定を定義できます：</p> <p>(なし) 測定は開始画面で始まります。ここで結果ファイルの名前と保存場所を割り当てます。</p> <p>常に新規ファイルを作成（タイムアップを追加） シーケンスの結果ファイルは毎回新しいファイルに保存されます。ファイル名は、指定したコンポーネント（名）と測定のタイムスタンプで構成されます。ファイルが保存されるフォルダを選択して名前を入力します。</p> <p>作成してファイルに追加 結果ファイルはシーケンスの初回開始時に作成されます。その後、シーケンスが開始されるたびに、結果はこのファイルに追記されます。</p>
説明	<p>説明フィールドには、最初はメソッドから抽出された測定パラメータの一部が初期設定で表示されます。ワークシートの使用方法に関する具体的な情報を記載するために、これらの項目を自由に編集できます。これらの項目は、クイックスタートおよび選択したワークシートのワークシートの管理画面に表示されます。</p>
お気に入り	<p>星をクリックすると、ワークシートがお気に入りとしてマークされます：</p> <p>黄色の星：お気に入り 灰色の星：お気に入りではない</p>
非アクティブ	<p>アクティブになっている場合、このワークシートはクイックスタートに表示されません。</p> <p>非アクティブとマークされたワークシートはワークシートの管理画面から読み込めます。</p>

ワークシートの指定


- ▶ 新しいワークシートを作成するにはアイコンバーで📄をクリックして**ワークシートの管理画面**を開いてから、**新規**をクリックします。
または、ツールバーの📄をクリックしても作成できます。
✓ 新しいワークシート画面が表示されます。
- ▶ メソッドとシーケンスを選択します。
注記：シーケンスでは、さらにメソッドをアクションとして読み込むことができます。
- ▶ オプションで、結果ファイルの保存に関する仕様、サンプルIDファイルの使用に関する仕様を入力して、説明を編集できます（下記参照）。
- ▶ **OK**をクリックして画面を閉じます。
✓ 新しいワークシートが**ワークシートの管理画面**に表示され、これを読み込むことができます。

これについては次のリンクも参照してください：

📄 測定ルーチンの開始 [▶ 66]


2.2 ワークシートの編集

既存のワークシートのすべての設定を編集できます。

- ▶ アイコンバーで  をクリックするとワークシートの管理画面が開きます。
- ▶ ワークシートを選択して変更をクリックします。
ワークシートを編集画面が表示されます。
- ▶ 新しいワークシートを作成するときと同じ方法で変更を加えます。

2.3 ワークシートの読み込み

ワークシートはクlickスタートで選択したり、ワークシートの管理画面で読み込んだりできます：

- ▶ ワークシートの管理画面は、アイコンバーの  をクリックすると開きます。
- ▶ テーブル内のワークシートをクリックして選択してから、読み込みをクリックします。
 - ✓ ワークシートが読み込まれ、シーケンスがメイン画面に表示されます。

ワークシート設定に応じて、ワークシートと一緒に読み込まれたメソッドとシーケンスをサンプルIDファイルにリンクしたり、測定を直接開始したりできます。




注記

ワークシートを読み込むときは、現在のバージョンのメソッドとシーケンスが常に使用されます。

ワークシートと異なるメソッドまたはシーケンスを読み込んだ場合は、結果ファイルの設定およびワークシート内のサンプルIDがリセットされます。

2.4 ワークシートの削除

必要ないワークシートは削除できます。


- ▶ アイコンバーで  をクリックするとワークシートの管理画面が開きます。
- ▶ ワークシートを選択して削除をクリックします。
 - ✓ ワークシートは削除確認の確定後に削除されます。

3 メソッド

メソッドには測定に必要なパラメータが保存されます。

- 分析ラインの選択
- ライン分析用のパラメータ
- プラズマと分光計の設定
- サンプル供給の種類
- 検量線パラメータ
- 統計分析
- 品質管理および保証の設定
- 測定出力の設定

測定シーケンスは、メソッドに基づいて作成できます。シーケンスは、測定ルーチン内でサンプルとアクションが処理される順序を定義します。したがって、保存済みメソッドはシーケンスが異なる分析に使用できます。

メソッド画面は、アイコンバーの  をクリックすると開きます。最後のアクティブメソッドが表示されます。ASpect PQを起動した後にメソッドを読み込んでいない場合、画面にはデフォルトの設定が表示されるか、何も表示されません。

3.1 メソッドの作成、保存、読み込み

メソッドはデータベースに保存されます。既存のメソッドを変更し、変更したメソッドを同じ名前で保存すると、ソフトウェアはそのメソッドの新しいバージョンを作成します。したがって、既存のメソッドは上書きできず、この方法で誤って削除される可能性はありません。


メソッドをエクスポート、インポート、削除するためのその他の機能は、データ管理画面にあります。

これについては次のリンクも参照してください：

- [メソッドとシーケンスの管理](#) [▶ 120]


3.1.1 新しいメソッドの作成

新しいメソッドを作成するときに、デフォルト設定、保存済みメソッドのパラメータ、または現在のメソッドパラメータを利用できます。

- ▶ **ファイル | 新規メソッド** を作成メニュー項目を選択します。
まだメソッドをアクティブにしていない場合は、 をクリックすることもできます。
- ▶ **新規メソッド** 画面で3つのオプションのいずれかを有効にします：
 - **デフォルトのパラメータ** から：検量線および統計用のデフォルト設定でメソッド画面を開きます。
 - **現在のパラメータ** から：現在設定されているメソッドパラメータでメソッド画面を開きます。
 - **保存したメソッド** から：メソッド読み込みデータベース画面でメソッドを選択します。
- ▶ **OK** で選択を確定します。
 - ✓ 選択したデフォルト設定でメソッド画面が表示されます。

- ▶ さまざまなタブでメソッドを指定し、必要な最適化を行います。
- ▶ 設定したメソッドパラメータをOKまたは承認ボタンで有効にします。
 - ✓ メソッドは、保存したり、次の分析で使用したりできます。分析のために、メソッドに基づいてシーケンスを作成し、オプションでサンプルIDテーブルを入力します。測定を開始します。

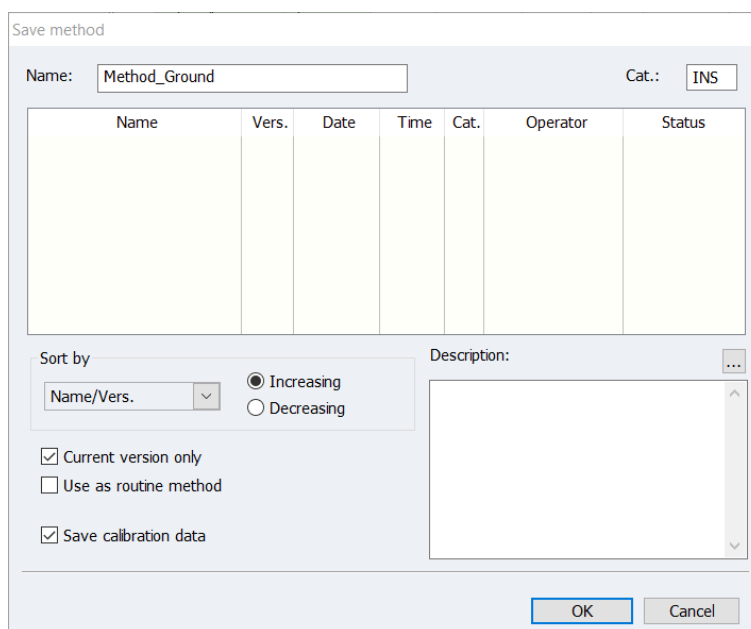
これについては次のリンクも参照してください：

 [メソッドパラメータの指定 \[▶ 25\]](#)

3.1.2 メソッドの保存

メソッドパラメータを入力したら、メソッドをデータベースに保存します。これによって、このメソッドを後で今後の測定のために読み込んだり、ワークシート内で取り込んだりできます。メソッドはメソッド保存画面でデータベースに保存されます。追加データを入力して、メソッドを分類して見つけやすくなります。

メソッド保存画面の要素



オプション	説明
名前	メソッド名
Cat.	メソッドを詳細に識別し、並べ替えるためのカテゴリ（3文字） この項目の入力は任意です。FDA 21 CFRパート11コンプライアンスモジュールがインストールされている場合、選択したカテゴリを使ってメソッドに承認済みのマークを付けることができます。承認されたメソッドのカテゴリは、ユーザー管理設定で定義します。
表	既存のメソッドの概要
並び替え	このグループ内のオプションでメソッドリストを並べ替えることができます。現在のバージョンのみオプションが有効になっている場合は、同じ名前のメソッドのうち、最新バージョンのみが表示されます。
ルーチンメソッドとして使用	有効になっている場合、そのメソッドはルーチンプログラムモードで利用可能になります。このプログラムモードは、クイックスタート画面で選択できます。

オプション	説明
	オプションの「21 CFRパート11コンプライアンスASpect PQ」モジュールがインストールされている場合、このオプションは選択できません。
定義されたメソッド	利用可能な検量曲線をメソッドと一緒に保存します この検量曲線は以降の分析に使用できます。
説明	オプションで、メソッドの追加説明を入力します ...をクリックすると、事前定義したコメントのリストが開きます。これらのコメントはデータファイルの説明画面で管理します。

メソッドの保存

- ▶ **メソッド**画面で、**保存**をクリックするか、**ファイル|保存|メソッド**メニュー項目を選択します。
 - ✓ **メソッド**保存画面が表示されます。
- ▶ メソッド名を入力し、さらにパラメータを選択します。
 - ✓ メソッドはデータベースに保存されます。既存のメソッドと同じ名前を使用する場合は、新しいバージョンのメソッドがデータベース内に作成されます。



注記

メソッドは測定の結果ファイルにも保存されます。結果ファイルを開いた後、結果ファイルからメソッドを復元できます。メソッドのその他の管理機能はデータ管理画面で利用できます。


これについては次のリンクも参照してください：

- ユーザー管理の一般設定の構成 [▶ 144]
- クイックスタート画面 [▶ 8]
- メソッドとシーケンスの管理 [▶ 120]


3.1.3 メソッドの読み込み

保存済みメソッドを読み込んで、シーケンスと一緒に測定ルーチンを開始できます。メソッドパラメータは、メソッドデータベースまたは既存の結果ファイルから読み込むことができます。

データベースからの読み込み


- ▶ データベース画面を以下の方法のいずれかで開きます：
 - ツールバーで、**メソッド**フィールドの横にある  フォルダアイコンをクリックします。
 - **ファイル|メソッド**読み込みメニュー項目を選択します。
 - **メソッド**画面で、**開く**をクリックします。
- ▶ リストから希望の方法を選択します。
- ▶ **Cat.**フィールドでカテゴリーを選択することで、表示されるメソッドを絞り込むことができます。すべてのメソッドを表示したい場合は、**Cat.**フィールドの入力内容を削除します。
- ▶ 同名のメソッドのうち、最新バージョンのメソッドのみを表示したい場合は、**現在のバージョンのみ**チェックボックスをオンにします。
- ▶ **メソッド**画面を**OK**で終了します。

✓ 目的のメソッドが読み込まれました。メソッドはツールバーのメソッド^①に表示されます。



- 結果ファイルからの読み込み メイン画面に表示された結果ファイルからメソッドを抽出できます。
- ▶ 任意のサンプルを右クリックします。
 - ▶ コンテキストメニューで結果からメソッド^①読み込み項目を選択します。
 - ▶ 現在のメソッドパラメータを上書きするかどうかの問い合わせの後、をクリックするとメソッドを表示できます。

3.2 メソッドパラメータの指定

分析のための測定パラメータおよび結果評価のためのパラメータは、メソッド^①画面で指定できます。

をクリックしてメソッド^①画面を開きます。

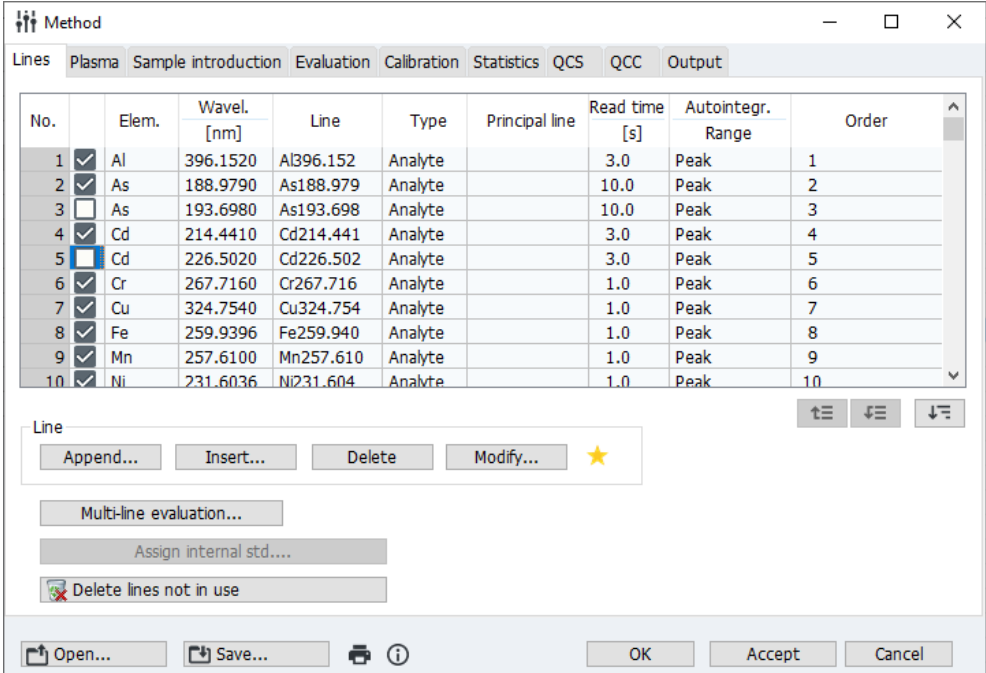
画面内のボタン  画面の下部には、使用できるボタンが常に含まれています。

ボタン	説明
開く	保存済みのメソッドを開きます
保存	現在のメソッドパラメータを保存します
	メソッドパラメータを印刷します
	メソッドの属性を表示します
OK	画面内のパラメータを受け入れて画面を閉じます
承認	画面内のパラメータを受け入れますが画面を開いたままにします
キャンセル	変更したパラメータを受け入れずに画面を閉じます

3.2.1 分析ラインの指定 (メソッド^① | 波長画面)





メソッド^① | 波長画面で、測定に仕様する分析ラインを選択します。

メソッド^① | 波長画面



No.	Elem.	Wavel. [nm]	Line	Type	Principal line	Read time [s]	Autointegr. Range	Order
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Al	396.1520	Al396.152	Analyte	3.0	Peak	1
2	<input checked="" type="checkbox"/>	As	188.9790	As188.979	Analyte	10.0	Peak	2
3	<input type="checkbox"/>	As	193.6980	As193.698	Analyte	10.0	Peak	3
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Cd	214.4410	Cd214.441	Analyte	3.0	Peak	4
5	<input checked="" type="checkbox"/>	Cd	226.5020	Cd226.502	Analyte	3.0	Peak	5
6	<input checked="" type="checkbox"/>	Cr	267.7160	Cr267.716	Analyte	1.0	Peak	6
7	<input checked="" type="checkbox"/>	Cu	324.7540	Cu324.754	Analyte	1.0	Peak	7
8	<input checked="" type="checkbox"/>	Fe	259.9396	Fe259.940	Analyte	1.0	Peak	8
9	<input checked="" type="checkbox"/>	Mn	257.6100	Mn257.610	Analyte	1.0	Peak	9
10	<input checked="" type="checkbox"/>	Ni	231.6036	Ni231.604	Analyte	1.0	Peak	10

ラインテーブルのパラメータ

テーブル列	説明
No.	テーブル内の選択済みラインのシーケンス
<input type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/>	<p>メソッド開発モードでのみ使用可能 (「21 CFRパート 11コンプライアンスASpect PQ」モジュールでは使用不可)</p> <p>複数のラインを最初に測定してから適切な線を選択するというメソッド開発の過程において、マーキングを行うことで作業が容易になります。元素ラインにチェックマークが付いていると、その線が分析対象として選択され、測定に使用されます。無効化されたラインは、以降の分析から除外され、測定されません。無効化されたラインは、まだラインテーブルから明示的に削除されていません。</p>
元素	分析対象元素の元素アイコン
波長	分析ラインの波長 (nm)
波長	<p>分析ラインの名称</p> <p>メイン設定では、ラインの名称は元素記号と波長で構成されます。名前は自由に編集でき、一意である必要があります。</p>
種類	分析物 (分析対象線) と内標 (内部参照線) の選択。
主波長	<p>現在の分析ラインと同時に測定される分析ラインの選択と表示 (同時測定)</p> <p>互いに近接したラインを同一の分光器設定で測定することで、測定時間を短縮できます。複数波長の評価をクリックすると、可能な組み合わせが表示されます。</p>
読み取り時間	分析ラインの総測定時間
自動積分範囲	<p>CCD検出器の最適な露光を達成し、過剰露光を避けるために、積分時間が自動的に選択されます</p> <p>過剰露光が発生すると、ピクセルに吸収された電荷が隣接するピクセルに溢れ出し、測定誤差を引き起こします (ブルーミング効果)。積分時間を決定するためには、対象となる領域を選択する必要があります :</p> <p>スペクトル ラインのスペクトル範囲内で最も高いピークに対して、積分時間が最適化されます。これは既定のオプションで、安全な結果につながります。</p> <p>ピーク 積分時間は測定ピークに合わせて最適化されます。このオプションを選択すると、CCD検出器のダイナミックレンジが測定に最適利用されます。ただし、分析ピクセルのすぐ近くに高いピークが存在しないことを確認する必要があります。この場合、測定結果はブルーミング効果によって歪められる可能性があります。</p> <p>検出器 積分時間は、検出器上の最高ピークに合わせて調整されます。このオプションでは、検出器のどの領域も過剰露光されることはありませんが、分析ピークのピクセルが最適に露光されない可能性があります。</p>
順序	<p>分析順序</p> <p>測定順序は自由に定義できます。</p> <p>注記 :</p> <p>番号をハイライトした後、をクリックすると、昇順で後続のラインに番号が割り当てられます。選択したライン (元素ライン) は、とを使ってテーブル内で希望する測定順に並べ替えることができます。最初の行の「順序」に「1」を入力し、を使って他のすべての分析ラインに測定順を割り当てます。</p>

波長グループ内のボタン

追加、挿入、変更の各ボタンを使用して、ラインテーブルに分析ラインを追加したり、選択したラインを編集したりします。これらのボタンのいずれかをクリックした後に**元素/波長の選択画面**が表示され、そこでさらに入力を行うことができます。メソッドから1つまたは複数の分析ラインを選択して削除するには、削除ボタンを使用します。

追加のボタンと
チェックボックス

ボタン	説明
複数波長の評価	1つの分光器設定で一緒に測定できる分析ラインの組み合わせを見つけます これらの分析ラインは同時に測定できます。
標準を割り当てる	内部標準を使用して、分析ラインを結合および補正します
使用していない波長を削除	メソッド開発プログラムモードでのみ使用できます（「21 CFRパート11コンプライアンスASpect PQ」モジュールでは使用不可） メソッドリストから無効にされた行をすべて削除します。 注記： メソッドは、ラインテーブルのすべての波長が使用されている場合にのみ、ルーチンメソッドとして保存および使用できます。
最適な測定順序	分析ラインを波長と測定条件に基づいて自動的に並べ替え、総測定時間を短縮します このチェックボックスをオンにすると、分析ラインの手動並び替えはできなくなります。 注記： 測定時間は、分析ラインの数や並び替え、測定条件によって異なります。そのため、多くの分析ラインでプラズマと転送光学系に同様のパラメータを選択することで、測定時間を短縮することもできます。

これについては次のリンクも参照してください：

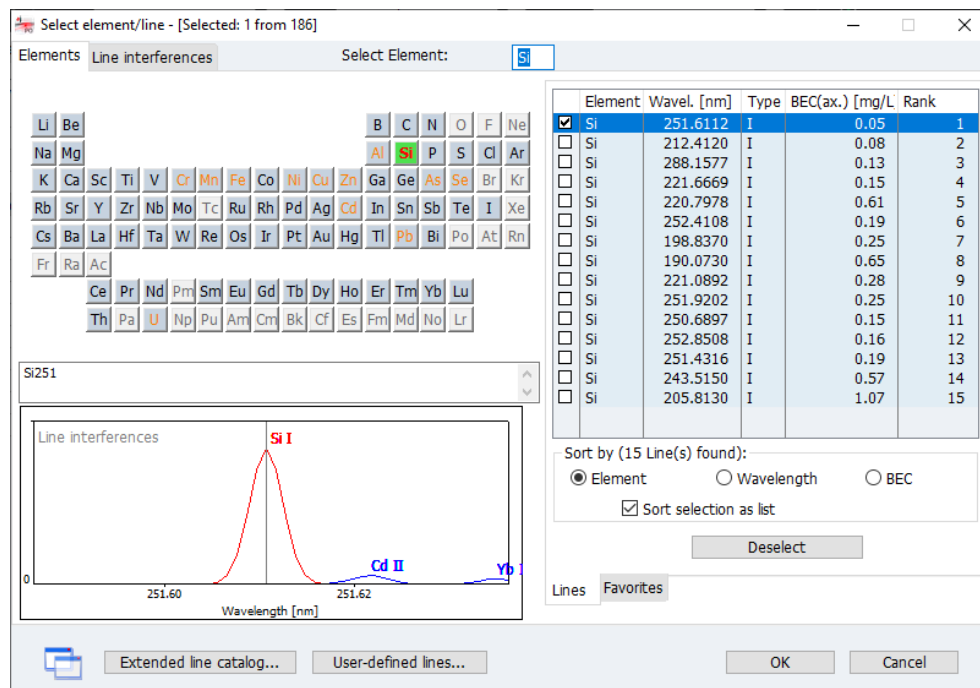
- 📖 複数のラインを同時に測定する [▶ 30]
- 📖 よく使用されるコントロール機能 [▶ 15]
- 📖 内部基準の定義 [▶ 31]

3.2.1.1 ラインテーブルへの分析ラインの挿入

分析ラインは、**元素/波長の選択画面**で選択します。

元素/波長の選択画面の要素

元素タブには、ICP-OES技術で分析可能なすべての元素を含む周期表があります（濃いグレーのボタンと黒い元素記号）。「グレー表示」されている元素は使用できません。干渉波長タブには、選択した波長に対する既知の干渉の可能性が相対感度とともに表示されます。



お気に入りスプレッドシートには、推奨される用途（キーワード）が付いた波長が事前選択されています。これらの波長を選択すると、最適化されたメソッドパラメータがメソッドに同時転送されます。また、これらのお気に入りに独自の波長を追加することもできます。

波長スプレッドシートには選択可能なすべての波長と以下の情報が含まれます：

テーブル列	説明
元素	元素
波長	分析波長 (nm)
種類	原子化タイプの表示： I：原子線 II：イオン線
バックグラウンド補正	分析対象波長の典型的なBEC値 BEC値（バックグラウンド等価濃度）は、バックグラウンドと同等の強度を生成する分析対象の濃度です。値が低いほど、感度は高くなります。 BEC値は次の条件で決定されました： 軸方向モニタリング、出力1200W、プラズマガス流量12L/分、補助ガス流量0.5L/分、ネブライザーガスフロー0.6L/分。
ランク	分析ラインの推奨順位 分析ラインの推奨は、感度と、隣接する他元素の線からの干渉可能性の両方に依存します。順位が上位であるほど、その分析ラインで良好な結果が得られる可能性が高くなります。

元素、波長またはバックグラウンド補正オプションを使用すると、化学記号、波長、またはBECでラインテーブルを昇順で並べ替えることができます。

リストとして並べ替えオプションが有効な場合、ラインはリストのソート順（並び替え）でメソッドのラインテーブルに挿入されます。オプションが無効になっている場合、ラインは選択された順に挿入されます。

ラインの選択

- ▶ **メソッド | 波長画面で、追加または挿入をクリックします。**
 - ✓ **元素/波長の選択画面が表示されます。**

- ▶ 周期表の濃い灰色の元素記号のいずれかをクリックすると、波長とお気に入りテーブルに選択した元素のラインのみが表示されます。
あるいは、元素の選択フィールドに元素記号を入力することもできます。
元素の選択フィールドをクリアすると、ラインテーブルに全元素のリストが表示されます。
- ▶ お気に入りスプレッドシートで、用途に応じたラインを選択するか、波長テーブルで目的のラインのチェックボックスをオンにします。
- ▶ 干渉波長タブに切り替えて、選択したラインに既知の干渉がないか確認します。
- ▶ すべての分析対象に対してラインを選択し終えるまで、操作を続けます。
OKで画面を終了します。
✓ 選択したラインは、メソッド | 波長画面に転送されます。

注記：

メソッドを設定する際は、各分析対象に対して複数のラインを選択してください。

拡張ラインカタログ

インストール後、分析ラインリストにはあらかじめ選定された分析ラインが含まれています。必要に応じて、拡張分析ラインカタログから追加の分析ラインを選択して補うことができます。

- ▶ 元素/波長の選択 | 元素画面で、拡張ライン一覧をクリックします。
- ▶ リスト内で目的のラインをマウスクリックで選択します。
単一ラインを再度クリックすると、選択が解除されます。選択解除をクリックすると、すべての選択が解除されます。
- ▶ 波長表に追加をクリックして、選択内容をラインリストに転送します。



注記

拡張ラインカタログから追加されたラインは、標準カタログから削除できません。

独自の分析ラインの作成と編集

独自の分析ラインを作成して、分析に使用できます。

- ▶ 元素/波長の選択画面で、1-ザ-定義波長をクリックします。
- ▶ 波長の編集画面で、元素と波長のデータを入力し、リストボックスで種類を選択します。
- ▶ 追加を使用して、選択した項目を独自のラインリストに転送します。
- ▶ 閉じるをクリックすると、独自のラインがラインリストに転送されます。

独自のラインは、ラインリストから再編集または削除できます。

- ▶ 独自リスト内のラインを編集するには、波長の編集画面のリストで該当するラインをマウスクリックで選択します。
新しいラインデータを入力し、変更をクリックします。
- ▶ 削除をクリックすることで、リスト内の選択された項目を削除できます。

これについては次のリンクも参照してください：

- 独自のラインのお気に入りを定義する [▶ 31]

3.2.1.2 複数のラインを同時に測定する

同じ分光器設定で記録された複数のラインは、同時測定が可能であり、これにより分析時間を短縮できます。 **複数波長の評価機能**を使用すると、現在のメソッド内でこれらのラインを検索し、分析用に結合できます。

- ▶ **メソッド | 波長画面**で**複数波長の評価**をクリックします。
同名の画面が表示され、可能なラインの組み合わせが一覧で表示されます。

画面の要素 **複数波長の評価**

可能なラインの組み合わせは、**複数波長の評価画面**にリスト表示されます。選択したリスト行に対応するラインの位置が、バーグラフで検出器上に表示されます。

Multi-line evaluation

Principal line		Additional line		Meas.wavel.	Status	
Line	Wavel. [nm]	Line	Wavel. [nm]	[nm]		
<input checked="" type="checkbox"/>	P178.224	178.2240	I178.218	178.2180	178.2210	OK
<input checked="" type="checkbox"/>	S182.565	182.5650	B182.581	182.5810	182.5730	OK
<input checked="" type="checkbox"/>	Ge265.157	265.1568	Ge265.117	265.1172	265.1606	OK
<input checked="" type="checkbox"/>	Ge265.157	265.1568	Hg265.204	265.2040	265.1606	OK

No combined lines
Swap line priority

Line positions on CCD [nm] Show all line positions

OK Cancel

テーブル列/ボタン	内容
チェックボックス	有効化されている場合、該当するラインの組み合わせはメソッド内で同時に測定されます。
主波長	ラインの組み合わせは、主波長の測定パラメータを使用して測定されます。 波長 主ラインのライン名 波長 主ラインの波長 (nm)
追加波長	波長 分析対象の追加ラインのライン名 波長 分析対象の追加ラインの波長 (nm)
測定波長	測定中の波長 (nm、検出デバイス行の中央)
状態	コメント
同時測定しない	すべての選択を削除します このメソッドでは、同時に測定されるラインはありません。
主波長の入替え	ラインの組み合わせにおいて、主ラインと追加ラインを入れ替えます

ラインの組み合わせでは、主ラインと追加ラインが自動的に決定されます。追加ラインは、主ラインの分析時間およびプラズマパラメータを引き継ぎます。主波長の入替えでは、この割り当てを逆にできます。

3.2.1.3 独自のラインのお気に入りを定義する

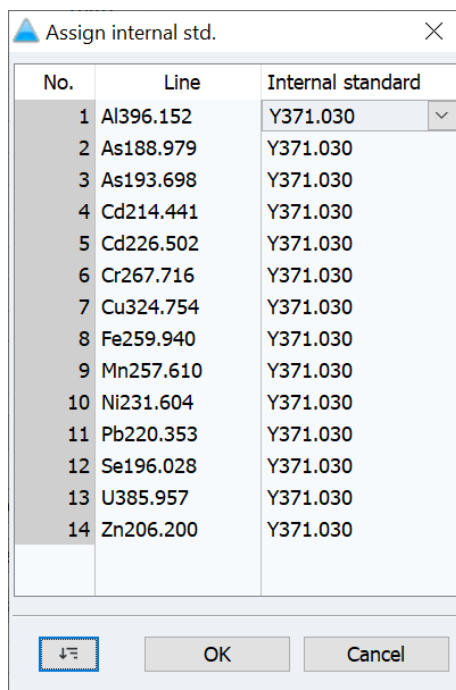
分析ラインをお気に入りリストに追加し、推奨用途に関するメモを添えることができます。分析ラインに関する情報は、すべての線関連のメソッドパラメータとともにこの項目に保存されます。元素ラインの選択時には、常にお気に入りリストを利用できます。

- ▶ **メソッド | 波長画面**のテーブルでラインをマーキングし、★をクリックします。
- ▶ **お気に入りに追加画面**でライン名を編集します。
- ▶ **コメントフィールド**には、ラインに関する追加メモを入力できます。
- ▶ **タグ** リストで、1つまたは複数のアプリケーションを選択します。
キーワードリストに独自の項目を追加できます。事前定義されたキーワードは青でハイライトされています。
✓ このラインは**元素/波長の選択画面**で利用できます。

3.2.1.4 内部基準の定義

内部基準は主に、サンプルの輸送障害などに起因する非スペクトル干渉を補正するために使用されます。**メソッド | 波長画面**のラインテーブルで内部基準を定義します。

- ▶ 内部基準として使用する分析ラインをラインテーブルに挿入し、**種類**テーブル列で**内標オプション**を選択します。
- ▶ **標準を割り当てる**
をクリックします。標準を割り当てる画面が表示されます。
- ▶ テーブル内で、目的の分析ラインに内部基準を割り当てます。これを行うには、**内標列**の該当するラインをクリックし、リストから内部基準を選択します。
- ▶ 分析ラインの設定をテーブル内のすべての後続行に適用するには、**↓**をクリックします。
- ▶ **OK**をクリックして、メソッドに設定を適用します。



3.2.2 プラズマと転送光学系のパラメータを設定する (メソッド | プラズマ画面)

メソッド | プラズマ画面で、以下の設定を指定します：

- トーチ内のプラズマ用ガス流量
- プラズマのモニタリング方向の選択と調整

メソッド | プラズマ画面の要素

No.	Line	Power [W]	Plasma gas [L/min]	Aux. gas [L/min]	Nebulizer gas [L/min]	Direction	x-offset [mm]	y-offset [mm]
1	Al396.152	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
2	As188.979	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
3	As193.698	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
4	Cd214.441	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
5	Cd226.502	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
6	Cr267.716	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
7	Cu324.754	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
8	Fe259.940	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
9	Mn257.610	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
10	Ni231.604	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0

テーブル列	説明
No.	テーブル内の選択済みラインのシーケンス
波長	分析ラインの名称
パワー	有効プラズマ出力 (ワット) プラズマ出力を高めることで、例えば有機溶媒や塩分濃度の高いサンプルを測定溶液とした場合のプラズマの安定性が向上します。同時に、プラズマ出力を高めるには、トーチの溶融や破損を防ぐためにプラズマガス流量も高くする必要があります。
プラズマガス	プラズマガス流量 (L/分) プラズマガスはトーチの外側石英チューブと内側石英チューブの間を流れます。コイルの誘導によってプラズマ状態になり、同時にトーチの外側チューブを冷却します。プラズマガス流量を多くすると、トーチの寿命を向上させることができます。
補助ガス	補助ガス流量 (L/分) 補助ガスは内側の石英チューブとインジェクターの間を流れます。これにより、測定チャネルの形成が促進され、プラズマをインジェクターの先端から押し出されます。例えば、有機溶媒や高塩濃度溶液を測定する場合には、より高い補助ガス流量が必要です。
ネブライザーガス	ネブライザーガス流量 (L/分) ネブライザーガスはネブライザーから導入されます。サンプルを霧化し、スプレーチャンバーとインジェクターを通してプラズマへと送り込みます。
方向	プラズマのモニタリング方向 伝達光学系の設定により、プラズマからの発光を2方向から分光器に取り込むことができます。分析対象線に応じて、最適なモニタリング方向を選択できます。

テーブル列	説明
	<p>ラジアル プラズマは上部コイル端から一定の高さの位置で側方から観察されます。</p> <p>アキシャル モニタリングはプラズマの縦軸に沿って上から行われます。 両方のモニタリング方向を弱めることもできます。これにより、高強度での検出器のオーバーフローを回避し、分析範囲を広げることができます。</p>
x-オフセット および y-オフセット	<p>転送光学系の補正 (mm)</p> <p>測定チャンネルに沿って光学系を移動させる (ラジアル観察の場合)、または測定チャンネルの中心から外側へ移動させる (ラジアルおよびアキシャル観察の場合) ことで、温度の異なる領域を走査でき、分析ラインの最適なエマルジョン温度を決定できます。</p> <p>ラインの最適条件は、プラズマ画面で自動的に決定できます。</p>



注記

メソッド開発の初期段階 (適切なラインの選定) では、あらかじめ設定されたプラズマパラメータで十分です。分析ラインの定義、必要なバックグラウンド補正、および直線性範囲の決定が完了した後に、これらのパラメータを変更してメソッドパラメータをさらに最適化できます。

酸素の使用

有機マトリックスなどの特殊な用途では、酸素を追加ガスとして使用できます。

▶ **酸素ガス流量**フィールドでガス流量を設定します。

これについては次のリンクも参照してください：

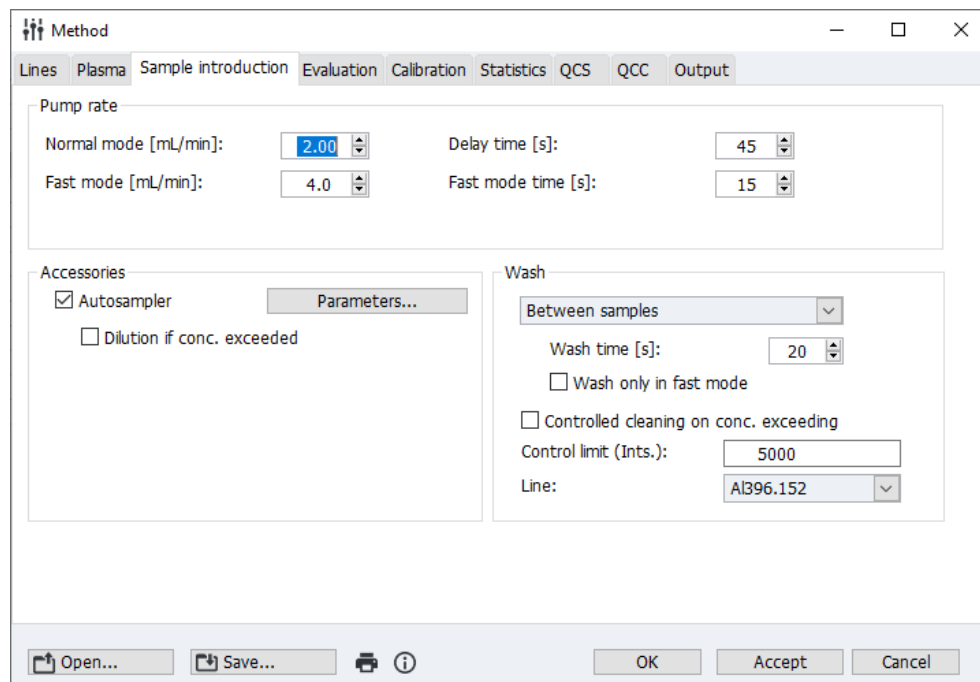
📖 [プラズマの調整と最適化 \[▶ 105\]](#)

3.2.3 サンプル導入用の設定 (メソッド | サンプルリバリー画面)

メソッド | サンプルリバリー画面で、分析装置に対して以下の設定を行います：

- 分析装置におけるポンプのポンプ速度
- オートサンプラーの使用
- パージオプション

メソッド | サンプルリハビリ画面



ICP-OES装置のポンプ時間

オプション	説明
標準モード	分析中にサンプルを移送する際の通常のポンプ速度 この速度は、サンプルの最適な噴霧を保證するものであり、使用するネブライザーの推奨ポンプ速度に基づいて設定すべきです。
ファストモード	測定休止中の洗浄（洗浄液を使用）を実行できる速度、およびサンプルをネブライザーまで移送する速度の向上 この速度を有効にすると、輸送時間が最適化されます。ただし、この速度は測定時間中は使用してはなりません。サンプルの均一な噴霧が保證されなくなるためです。
遅延時間	サンプル吸引開始から実際の測定開始までの時間 この時間は、サンプルを含むトーチまでのサンプル経路全体を洗浄し、安定した霧化を確保するために必要です。 注記： 遅延時間には、ファストモード 時間フィールドに入力された時間も含まれます。
ファストモード時間	遅延時間の経過中に、サンプルが高ポンプ速度で輸送される時間



注記

メソッド | サンプルリハビリ画面で、ICP-OES装置のチューブポンプのポンプ速度を設定します。洗浄液を移送するオートサンプラーのポンプ速度は、オートサンプラー、またはオートサンプラー | 動作パラメータ画面内の Cetac サンプラーのポンプ上部にある回転ノブで調節できます。

オートサンプラーの使用

分析にオートサンプラーを使用する場合は、オートサンプラーオプションを有効にします。パラメータを経由してオートサンプラーの設定に進みます。

洗浄とクリーニングコントロール

シーケンスの完了時に、各サンプル測定後の洗浄ステップを設定できます。洗浄液は、自動測定中にオートサンプラーの洗浄カップから取り出されます。手動測定中は、洗浄液の投入を促すプロンプトが表示されます。

サンプルの濃度が検量曲線の測定範囲を10%超高い場合は、サンプル経路とトーチを洗浄し、前回の測定による汚染を除去できます。洗浄中は強度を測定して洗浄結果を確認し、管理限界に達するまで洗浄を続けます。高濃度サンプルの測定後は、自動洗浄制御の使用を推奨します。

オプション	説明
洗浄	お 洗浄モードがオフになります。自動洗浄しません。 サンプル間 サンプルごとに洗浄します。統計シリーズ間ではしません
洗浄時間	この間、トーチまでのサンプル経路が洗浄されます。
ファストモードでのみ洗浄	洗浄ステップは、高速モード時間でのみ実行されます。 このオプションが無効の場合、洗浄は、最初に入力された高速モード時間（ファストモード時間）は高速モードで、残りの洗浄時間は通常モードで実行されます。
制御された洗浄	有効な場合、濃度が超過すると自動的に制御洗浄が実行されます
管理限界 (Ints.)	洗浄中に、次の溶液を測定する前に到達しなければならない信号レベル値
波長	制御線として使用される元素ライン

3.2.4 ピークの評価 (メソッド | 評価画面)

メソッド | 評価画面で、ピーク評価のパラメータを定義します。



注記

メソッド開発では、**スペクトルの編集 | 評価画面**で各分析ラインに対するバックグラウンド補正の最適設定を決定し、それをメソッドに転送します。

メソッド | 評価画面

No.	Line	Range [nm]		Peak eval.	Poly.deg.	Correction	BGC fit	BGC pixel pos.
		low.	upp.					
1	Al396.152	-0.22	0.22	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
2	As188.979	-0.12	0.12	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
3	As193.698	-0.12	0.12	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
4	Cd214.441	-0.13	0.13	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
5	Cd226.502	-0.13	0.13	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
6	Cr267.716	-0.16	0.16	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
7	Cu324.754	-0.19	0.19	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
8	Fe259.940	-0.15	0.15	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
9	Mn257.610	-0.15	0.15	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
10	Ni231.604	-0.14	0.14	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15

テーブル列 説明

No. テーブル内の選択済みラインのシーケンス

テーブル列	説明
波長	分析ラインの名称
範囲	下 測定波長に対するスペクトル分析の波長範囲下限 上 測定波長に対する波長範囲の上限
多項式次数	静的バックグラウンド補正用回帰グラフの多項式次数の選択 0次、1次、2次、3次の多項式次数から選択することも、多項式次数を自動検索することもできます（自動オプション）。
ピーク評価	ピーク評価の選択 ピークセル 強度解析、および最終的に測定値生成に使用するピクセル数。 評価ピクセルの強度が合計されます。この方法により、ピーク位置の変動による分析の不正確さを軽減できます。 推奨する評価ピクセル数：3 高さ ピーク最大の補間 ユーザー定義 評価ピクセルの自由選択。例：多重線を評価する場合。 サンプル項目：50,120-130は、ピクセル50および120～130の測定値の合計を形成します
補正	スペクトル補正のアルゴリズム（下記参照）。 off スペクトル補正適用なし LSM 最小二乗モデルによるスペクトル補正 IEC 要素間補正によるスペクトル補正
バックグラウンド補正フィット	バックグラウンド補正のピクセルを調整します off バックグラウンド補正を適用しません 自動 バックグラウンド補正用のピクセルはソフトウェアによって自動的に検出されます。 static バックグラウンド補正のピクセルをユーザーがバックグラウンド補正のピークセル位置カラムで指定します。
バックグラウンド補正のピークセル位置	バックグラウンド補正の静的適応における測定ピクセルに対するピクセルの位置 バックグラウンド補正用のピクセル番号を入力します。

ボタン

ボタン	説明
スペクトル補正	分析ラインに対するスペクトル補正モデルを指定します
IEC係数	分析ラインに対する要素間補正を指定します

これについては次のリンクも参照してください：

[ピークの評価とバックグラウンド補正の決定 - スペクトルの編集 | 処理画面 \[82 \]](#)

3.2.4.1 最小二乗モデルによるスペクトル補正

スペクトル補正を行うことで、分析ラインとマトリックス元素のスペクトル線が重なって生じる構造的なバックグラウンド放射を、計算によって除去できます。前提条件として、該当する分析ラインに対して、考えられる干渉スペクトルが補正モデルに統合されている必要があります。

▶ **メソッド | 評価画面でスペクトル補正**をクリックし、各ラインに対して適切な補正モデルを個別に設定します。

✓ 補正モデルが割り当てられているラインは、**補正列でLSM**として識別されます。

これについては次のリンクも参照してください：

[📖 スペクトル干渉の除去 - スペクトルの編集 | スペクトル補正画面 \[▶ 84\]](#)

3.2.4.2 元素間補正

元素間補正を使用することで、スペクトル線の直接的な重なりを補正できます。条件は、干渉物質の干渉を受けない追加の波長です。

単一元素溶液（IEC溶液）を用いて、干渉元素の2本のスペクトル線（重なった分析ラインと干渉のない分析ライン）の比率が求められます。この比率（IEC係数）は、後続のサンプル測定時に、分析ラインから干渉元素の見かけの強度または濃度を差し引くために使用されます。

IEC元素を割り当て画面の要素

Assign IEC Elements						
	Analyte line	Interferent	IEC solution	IEC blank	IEC factor	manually
1	Al396.152	Cr267.716	Cr IEC solution	Cr IEC blank		<input type="checkbox"/>

Interelement correction is based on
 Intensities
 apparent concentrations

制御要素	説明
IEC溶液	元素間補正に使用するIEC元素溶液およびブランク値の名称、濃度、単位、サンプラー位置の入力
追加	リストの末尾に新しい行を追加します
挿入	選択したリストの位置に新しい行を挿入します
削除	選択した行を削除します
元素間補正は	強度 補正は、強度を差し引くことで行われます 濃度 補正は、見かけの濃度を差し引くことで行われます
結果データから係数を抽出	読み込まれた結果ファイルから計算されたIEC係数を抽出します

テーブルの内容

テーブル列	説明
IEC溶液の指定	干渉のある分析ラインの名称
干渉	干渉ラインの名称
IEC溶液	干渉物質を含む単一元素溶液の名称。IEC溶液はIEC溶液ボタンで指定します。
IECブランク	干渉物質の強度または濃度から差し引かれるブランク値溶液の名称。ブランク値溶液はIEC溶液ボタンで指定します。
IEC係数	IEC補正係数 計算された係数はグレーで強調表示されます。
マニュアル	有効にすると、IEC係数を手動で入力できます。測定溶液は不要です。

元素間補正を割り当てます

- ▶ **メソッド | 評価画面**で、**IEC係数**をクリックします。
 - ✓ **IEC元素を割り当て画面**が表示されます。
- ▶ まず、IEC溶液を指定します。各干渉物質について、ブランク値とIEC溶液（単一元素溶液）が必要です。
 - **IEC溶液**をクリックします。

Specify IEC solutions

Type	Name	Conc.	Unit	Pos
IEC blank1	Cr IEC blank	0	mg/L	1
IEC solution1	Cr IEC solution	1	mg/L	2

Add blank
Add IEC solution
Delete

OK
Cancel

- 分析波長画面のテーブルで、**ブランクの追加**と**IEC溶液の追加**をクリックして、ブランク値と各干渉物質のIEC溶液を追加します。
- 対応するテーブルセルに各ソリューションの名称を入力します。
- IEC溶液の場合、IEC溶液中の干渉物質の濃度を**濃度列**に入力します。
- **OK**で入力を確定します。
- ▶ **IEC元素を割り当て画面**に戻り、**IEC溶液の指定**テーブル列で分析対象の干渉ラインを選択します。
- ▶ 干渉列で、干渉物質の干渉を受けないラインを選択します。
- ▶ **IEC溶液列**と**IECブランク列**で、対応する単一元素溶液とブランク値溶液を設定します。
- ▶ **強度**または**見かけ濃度**に基づく元素間補正のタイプを選択します。
- ▶ **OK**で入力を確定します。
 - ✓ 元素間補正が割り当てられているラインは、**メソッド | 評価画面**のラインテーブル内で、**補正列**に**IEC**と表示されて識別されます。

IEC溶液の測定は、校正用標準液の測定または校正値の計算に続く順序で実施する必要があります。

係数の手動入力

単一元素溶液を測定して元素間補正係数を決定する代わりに、既知の係数をテーブルに直接入力できます。

- ▶ **IEC溶液の指定**と**干渉**を入力した後、**マニュアル**チェックボックスをオンにします。
- ▶ **IEC係数列**に、計算済みの係数を入力します。

3.2.5 校正パラメータの入力（メソッド | 検量線画面）

メソッド | 検量線画面で、検量線の種類とブランク値補正を定義します。一般に、検量線には複数元素の標準物質が使用され、これらは原液標準として登録できます。

メソッド | 検量線画面

No.	Line	Calib. func.	Intercept	Weighting	Check	Unit
1	Al396.152	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
2	As188.979	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
3	As193.698	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
4	Cd214.441	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
5	Cd226.502	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
6	Cr267.716	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
7	Cu324.754	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
8	Fe259.940	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
9	Mn257.610	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
10	Ni231.604	linear	calculate	1/conc	none	µg/L

検量線メソッドの選択

検量線の種類リストからメソッドを選択します：

検量線メソッド	説明
検量線なし	サンプル結果は強度のみで表示されます。これらの測定には検量線は不要です。検量線タブにこれ以上の入力はありません。シーケンスリストには、論理的にはサンプルのみを含めるべきです。
検量線法	検量線は、分析対象の既知の濃度のサンプル（標準物質）を用いて行われます。この検量線から未知の濃度のサンプルを測定します。
標準添加法	既知のサンプルを異なる量ずつ未知のサンプルに加え、得られた物質を測定します。分析対象物質の濃度は比較によって得られます。
標準添加検量線法	他の濃度を決定するための検量曲線は、標準添加メソッドによって作成されます。同時に、最初のサンプルの濃度もこのメソッドで得られます。

標準作成

オプション	説明
マニュアル	検量線標準溶液は手作業で調製します。
希釈システムにより	自動希釈機能付きCetac SDXHPLDオートサンプラーを使用する場合のみ 標準溶液は、オートサンプラーのボルテックス（混合容器）で原液を希釈して調製します。

ブランク補正

標準添加メソッドと添加検量線にはブランク値補正が必要です。ブランク補正リストからメソッドを選択します：

補正	説明
強度補正	標準添加法では、必ずブランクも測定し、回帰直線を算出する前に、得られた強度値をすべての測定値から差し引きます。このメソッドは長年慣例とされてきましたが、多くの実サンプルでは正しい値が得られません。
濃度補正	最初に、ブランク溶液に対し、サンプルと同じ濃度の添加物を用いて別途標準添加を行います。得られた濃度結果は、標準添加によって決定された他のすべての濃度（濃度2）から自動的に差し引かれます。

ライン固有の検量線
パラメータ

ライン固有のパラメータは、次のテーブルに設定されています：

テーブル列	説明
No.	テーブル内の選択済みラインのシーケンス
波長	分析ラインの名称
検量線関数	標準メソッドを使用する検量線のみ 線形 検量線関数の線形的進行 $y = a + bx$ nonlin.2次式 有理関数で記述された検量線関数の非線形的進行 $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ nonlin. 有理関数 2次関数で記述された検量線関数の非線形的進行 $y = a + bx + cx^2$ 自動的に 検量線のために、線形関数と非線形関数が計算されます。残差の二乗和を比較します（マンデル検定）。非線形関数の合計が線形関数の合計よりも有意に低い場合、非線形検量曲線が選択されます。それ以外の場合は、線形検量曲線が使用されます。非線形関数は、 オプション 検量線画面 で選択します。デフォルト設定として、分割比率関数が提供されています。 注記： 標準添加メソッドおよび添加検量線では、直線的な曲線進行のみが許可されます。
切片	ゼロを通る 検量曲線は測定されたゼロ地点を正確に交差します。 計算する ゼロ値は他の検量線点と同様に計算に含まれます。
重み	なし すべての検量線点を同等に扱います。 1/conc 低濃度の検量線点をより重視します。 1/SD 標準サンプルの繰り返し測定において、偏差の小さい点をより重視します（平均統計オプションの有効化が必要）。 1/(SD*conc) 計算メソッドの組み合わせ： 1/conc および 1/SD
フィット	本ソフトウェアでは、手動で選択された統計的確実性に基づいて計算された予測範囲に対して、確定された検量曲線を自動的に照合できます。

テーブル列	説明
	<p>なし</p> <p>測定済みで削除されていないすべての検量線点がカーブの計算に使用されます。検量線点はラベル付けも除外もされません。</p> <p>異常値を削除</p> <p>検量線点が計算された予測範囲外にある場合、F検定（点を除外することで残差のばらつきが有意に改善されるかを判定する検定）によって外れ値が除去されます：</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 予測範囲から最も外れた検量線点に対して、F検定が実施されます。 この点を除外しても残差のばらつきに有意な改善が見られない場合、その点は含めたままとなり、検量曲線の最適化はそれ以上行われません。 ■ この点を除外することで残差のばらつきが有意に改善される場合、その検量線点は外れ値として定義され（表では「!」、グラフでは赤色で表示）、その点を除外して検量線が再計算されます。 ■ 予測範囲から現在最も外れている点に対して、再度F検定が実施されます。この手順は、すべての外れ値が除去されるまで繰り返されます。 ■ 新たな予測範囲の外側にある検量線点のうち、外れ値として除去されていないものは、テーブルでは「?」、グラフでは青色で表示されます。
単位	各元素ごとに濃度の単位を個別に入力します。

↓を使用すると、アクティブセルの値をテーブル列内のすべての後続セルに転送できます。検量線表ボタンを使用して、標準濃度を入力するためのテーブルを開きます。

これについては次のリンクも参照してください：

📖 分析シーケンスのオプション [▶ 133]

3.2.5.1 原液標準の指定

原液標準を使用する場合は、各標準物質の濃度の代わりに、それぞれの希釈係数を入力できます。そのため、検量線テーブルを完成させる前に原液標準を指定する必要があります。なお、異なる元素や濃度を持つ複数の原液標準を使用することも可能です。

- ▶ **メソッド | 検量線画面**で、**ストック**をクリックします。
 - ✓ **ストック標準画面**が開きます。
- ▶ **新規**または**挿入**をクリックして、原液標準リストに新しい行を追加します。
原液標準の最大数：20
- ▶ **ストック標準データベース**からオプションでは、リストから原液名を選択します。原液データベースは、**データ | スtock標準/QCサンプル**画面で管理します。
- ▶ データベース内の原液を使用しない場合は、**マニュアル入力オプション**を選択します。
- ▶ **ストック標準**に戻り、原液のデータをテーブルに直接入力します：

テーブル列	説明
名前	標準の名称
元素と濃度	<p>元素と対応する標準濃度</p> <p>濃度を使用すると、濃度を入力するためのリストを開くことができます。</p> <p>代わりに、<i>Element symbol-space-Concentration</i>の入力形式で値を</p>

テーブル列	説明
	行に直接入力することもできます（例えば、ニッケル0.5 mg/Lの場合：Ni 0.5） その他の元素とその濃度は、セミコロンで区切って追加するだけです。入力形式の例は、原液リストの下に表示されています。
単位	標準内の元素の濃度単位。

これについては次のリンクも参照してください：

[原液およびQCサンプル用データベースの管理 \[127\]](#)

3.2.5.2 検量線テーブルへの入力

検量線テーブルに標準データを入力します。

検量線表画面

Calibration Table - □ ×

Number of standards

Calib-Zero standards:

Calibration standards:

Allow deactivated lines
Deactivate individual lines from stock dilutions by clearing the field.
Reactivate with plus key (+).

Name	Unit	Cal-Zero1	Cal-Std1	Cal-Std2
Position		101	102	103
Stock				
Dil.fac.				
Recal.				
Ar420.068				
As188.979	µg/L	0	37.5	112.5
Cd214.441	µg/L	0	12.5	37.5
Hg184.886	µg/L	0	75	225
Pb220.353	µg/L	0	12.5	37.5
Co237.863	µg/L	0	125	375
Ni231.604	µg/L	0	500	1500
V292.464	µg/L	0	250	750
Ag328.068	µg/L	0	375	1125
Se196.028	µg/L	0	375	1125
Tl190.796	µg/L	0	20	60
Au242.795	µg/L	0	250	750

Shift selected column: inc.

- ▶ **メソッド | 検量線画面で、検量線表をクリックします。**
 - ▶ **まず、入力フィールドに標準の数を入力します。選択された検量線メソッドに応じて、複数の標準を選択する必要があります。**
- 標準方式では、検量線標準数（**検量線標準**）とゼロ標準数（**検量線ゼロ標準**）を入力する必要があります。複数のゼロ標準を入力することができます。例えば、分析対象の元素が異なる溶媒中に存在する場合などです。この場合、該当する元素ラインの濃度は「0」に設定し、その他の列は空白のままにします。
- 標準添加法および標準添加検量線法では、それぞれ添加標準に標準数を入力する必要があります。
- ▶ **接続された希釈システムで標準液を調製する場合は、各検量線標準に対して、ストック行で使用する原液標準と、希釈倍率[率行で希釈係数を選択する必要があります。**
- 選択可能な希釈係数：1、2、5、10、15、20、25、50、75、100、200、

250、500、1000、1500、2000、2500、5000です。希釈係数の数は、オートサンプラー|希釈画面の範囲設定に応じて制限されます。希釈係数が1～100の場合は1段階で希釈が行われ、それを超える場合は2段階で希釈されます。

- ✓ 原液標準と希釈係数を選択すると、ソフトウェアが各検量線標準および各分析ラインの濃度を自動的に計算します。
- ▶ 測定対象外の標準濃度は、柔軟な選択チェックボックスをオンにした後、テーブルから手で削除できます。
削除された入力内容を再有効化するには、該当するフィールドにプラス記号 (+) を入力し、Enterキーを押すか、マウスで次のセルに移動して確定します。
- ▶ 検量線標準を手動で調製する場合でも、原液標準を選択し、希釈係数を入力することで、ソフトウェアに濃度を計算させることができます。
または、各標準液について、各分析ラインの濃度をテーブルに直接入力してください。
- ▶ 手で調製した標準液の場合、位置行でオートサンプラー内の配置位置を指定できます。
オートサンプラーを使用しない場合、この行の入力内容は無視されます。
希釈機能付きのオートサンプラーを使用する場合、原液の配置位置は原液標準データベースから取得されます。
オートサンプラーの配置位置の割り当ては、シーケンス内で入力または変更できます。
- ▶ シーケンスアクションまたはQCアクションのシーケンスとして再検量線を指定する場合、標準化行で、検量線ゼロ標準と検量線標準をそれぞれ1つ以上、または検量線標準を2つ以上選択する必要があります。1つのラインに対して2つを超える再検量線標準が選択された場合は、最小値と最大値の標準が使用されます。

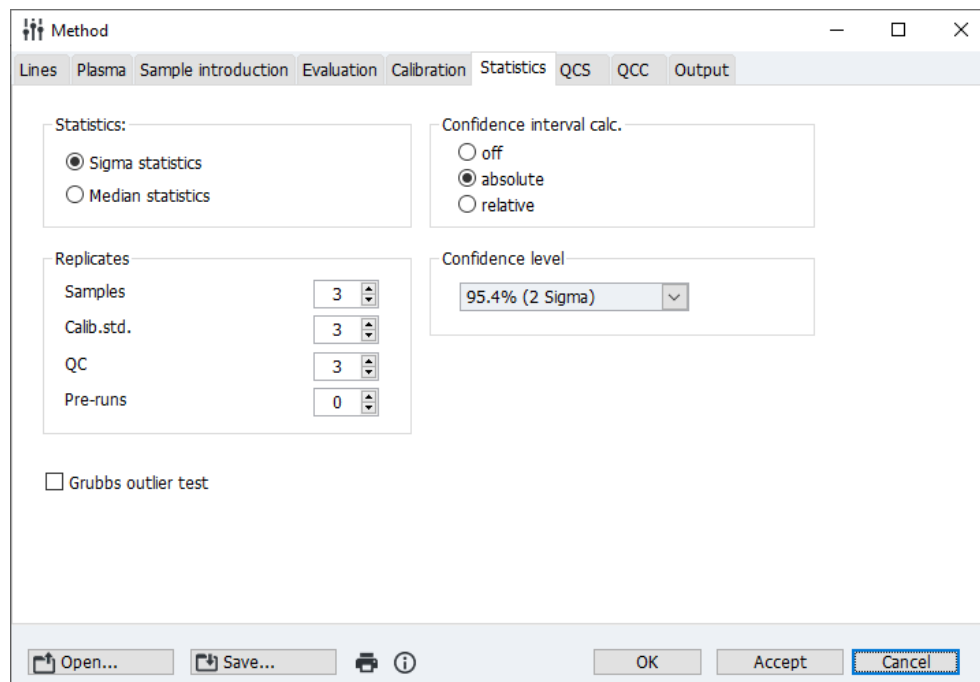
これについては次のリンクも参照してください：

- 📖 原液標準の指定 [▶ 41]
- 📖 希釈機能 [▶ 111]

3.2.6 統計解析の指定 (メソッド | 統計画面)

メソッド | 統計画面で、検量線およびサンプル測定に適用する統計メソッドを選択します。これらの設定は選択した検量線メソッドに依存せず、メソッドを変更しても保持されます。

メソッド | 統計画面



統計タイプ

オプション	説明
シグマ統計	<p>平均値と標準偏差を計算します</p> <p>算術平均による誤差統計： ブラインドサイクルの後にサンプルを複数回測定します。測定結果に基づいて、算術平均、標準偏差、相対標準偏差を計算します。</p>
マジック統計	<p>中央値と範囲 (R) を計算します。</p> <p>中央値メソッドによる誤差統計： ブランクサイクルの後にサンプルを繰り返し測定します。測定値は大きさ順に並べられます。表示される中央値： ■ 測定回数が奇数の場合は、並べ替えたリストの中央値。 ■ 測定回数が偶数の場合は、中央の2つの測定値の平均値。</p> <p>最小値および最大値の測定値は結果に影響しないため、中央値統計は外れ値の除去に適しています。</p>

繰り返し測定回数

オプション	説明
サンプル	サンプルごとの繰り返し測定回数
検量線標準	検量線サンプルごとの繰り返し測定回数
QC	QC測定ごとの繰り返し測定回数
ブランク測定	<p>ブランク測定の繰り返し回数</p> <p>ブランク測定とは、統計処理の前に実施されるサンプル測定であり、測定結果の算出には含まれません。</p>

Grubbs外れ値検定

平均値統計において、各サンプルに対して少なくとも3回の繰り返し測定がある場合

ステータス	説明
無効	平均値の計算には、統計シリーズ内のすべての値が含まれます。
有効	外れ値は除外され、統計の計算には使用されません。この方法で算出された平均値は、出力テーブル内で「!」マークが付けられます。

信頼区間の計算。

信頼区間の計算は、選択された統計的确实性（下記参照）に基づいて行われます。この計算では、サンプル測定時の誤差、特に検量線誤差が考慮されるため、統計機能が無効化されている場合でも値が表示されます。

設定	説明
オフ	信頼区間を計算しません
絶対値	信頼区間を絶対値（濃度単位）で表示します
相対値	信頼区間を相対値（濃度値に対するパーセント）で表示します

信頼水準

信頼水準（68.3～99.9%の範囲で選択可能）は、サンプルの信頼区間および検量曲線の予測範囲の計算に使用されます。

これについては次のリンクも参照してください：

[品質管理の指定（メソッド | QCS画面）](#) [▶ 45]

3.2.7 品質管理の指定（メソッド | QCS画面）

メソッド | QCS画面で、品質管理（QC）用のサンプルを指定できます。シーケンス中、既知の測定結果が得られるべきサンプルによる管理測定が、あらかじめ定められたタイミングで挿入されます。既知であるのは、絶対値（吸光度／濃度）または前のサンプルとの差分濃度のいずれかです。品質管理には、異なるサンプルタイプを定義できます。

管理測定の結果は、自動的に品質管理（QC）チャートに記録されます。QCチャートのシステムは、長期的な品質モニタリングに使用されます。QCチャートは測定メソッドとともに保存され、そのメソッドでの各測定時に継続して使用されます。

No.	Line	Exp. conc. incr	lower deviat. [%]	upper deviat. [%]	QC chart	React.!
1	Al396.152	9.5	10	10	-	-
2	As188.979	9.5	10	10	-	-
3	As193.698	9.5	10	10	-	-
4	Cd214.441	9.5	10	10	-	-
5	Cd226.502	9.5	10	10	-	-
6	Cr267.716	9.5	10	10	-	-
7	Cu324.754	9.5	10	10	-	-
8	Fe259.940	9.5	10	10	-	-
9	Mn257.610	9.5	10	10	-	-
10	Ni231.604	9.5	10	10	-	-

メソッド | QCS画面の要素

要素	説明
種類	このQCサンプルはラインテーブルに表示されます。QCサンプルのパラメータをここで編集できます。
名前	表示されるQCサンプルの名称
リアクション	QCサンプルの結果が指定された限界値を超過または下回った場合の処理内容。

要素	説明
新規/変更	新しいQCサンプルの定義、または既存のQCサンプルの編集を行います
削除	表示されているQCサンプルを削除します
ブランク補正	QC標準およびQCブランク値を除くすべてのQCサンプルに対して、オプションでブランク値補正を有効にできます
単位	対応する濃度単位を選択するためのリストボックス。
QCサンプル概要	すべてのQCサンプルのライン固有パラメータをリスト表示します
ラインテーブル	このテーブルには、種類リストボックスで選択したQCサンプルのパラメータが表示されます

QCサンプルの種類

QCサンプルの種類として、以下を指定できます：

オプション	説明
QCサンプル	<p>サンプルをQCサンプルとして定義します</p> <p>QCサンプルの濃度は、データベースから読み込むことも、直接入力することもできます。</p> <p>データベースから 対応するQCサンプルを、隣接するリストボックスで選択します。QCサンプルのデータベースは、メソッド QCS画面で管理できます。</p> <p>手入力 QCサンプルの濃度をテーブルに直接入力します</p> <p>QCサンプルの最大数：50</p>
QC std.	<p>標準をQCサンプルとして定義します</p> <p>検量線テーブルで定義された任意の標準を、QC標準として使用できます。</p> <p>使用可能なQC標準の数 = 検量線テーブル内の標準数（最大65）</p>
QCブランク	ブランクサンプルをQCサンプルとして定義します
QCスパイク	<p>スパイクサンプルをQCサンプルとして定義します</p> <p>このオプションでは、1つまたは複数のサンプルに既定の濃度を添加した際の測定結果を確認します。この目的のために、サンプルテーブル内の任意のサンプルの後に、QC原液サンプルを定義する必要があります（QC原液サンプル = サンプル + 既知濃度の溶液による添加）。測定後、サンプルとQC原液サンプルの濃度差（Conc1）が、ここで指定された期待濃度増加値（濃度増加期待値）と比較され、回収率が算出されます。</p>

認証済みの管理サンプルが利用できない場合は、重複測定によって品質管理を行うことも可能です：

オプション	説明
QCトレンド	<p>管理サンプルが分析シーケンスに初めて出現した時点で、測定された濃度値が保存されます。QCサンプルが次の分析で出現した際に、濃度差が算出され、評価されます。これらの管理サンプルは、サンプル系列の開始時と終了時に測定することが推奨されます。</p>
QCマトリックス	<p>分析対象のサンプルは、前処理の前に分割されます。両方の分取サンプルは、それぞれ個別にすべての前処理工程を経ます。これらはそれぞれQCトレンドおよびQCマトリックスとして、オートサンプラートレイ上に個別に配置されます。測定された濃度の差が評価されます。</p>

誤差限界を超えた場合の処理手順 QCサンプルの種類ごとに、誤差限界を超えた場合に実行される処理手順を個別に選択できます：

オプション	説明
QCサンプル QC std.	<p>フラグ 測定値はサンプルテーブルにマーキングされます。測定プログラムは次のサンプルに進みます。</p> <p>標準化+継続 再検量線が実行されます。その後、QCサンプルが再測定されます。QCサンプルが許容範囲内であれば、測定は次のサンプルへと進みます。許容範囲を外れている場合は、測定プログラムが停止します。</p> <p>再検量+継続 新たに検量線が実行されます。その後、QCサンプルが再測定されます。QCサンプルが許容範囲内であれば、測定は次のサンプルへと進みます。許容範囲を外れている場合は、測定プログラムが停止します。</p> <p>標準化+再測定 再検量線が実行されます。その後、QCサンプルが再測定されます。QCサンプルが許容範囲外であれば、測定プログラムは停止します。許容範囲内であれば、直前のQCサンプルまたは直前の（再）検量線以降に測定されたすべてのサンプルが再測定されます。QCサンプルが再び許容誤差範囲を外れた場合、測定プログラムは停止します。</p> <p>再検量+再測定 新たに検量線が実行されます。その後、QCサンプルが再測定されます。QCサンプルが許容範囲外であれば、測定プログラムは停止します。許容範囲内であれば、直前のQCサンプルまたは直前の（再）検量線以降に測定されたすべてのサンプルが再測定されます。QCサンプルが再び許容誤差範囲を外れた場合、測定プログラムは停止します。</p> <p>次のメソッド シーケンスに別のメソッドが含まれている場合、現在の測定プログラムはキャンセルされ、次のメソッドの測定プログラムが開始されます。</p> <p>ストップ 現在の測定プログラムは中断されます。</p>
QCストップ	<p>フラグ 標準化+継続 再検量+継続 次のメソッド ストップ</p>
QCブランク	<p>フラグ 次のメソッド ストップ</p>
QCトレント QCマトリックス	対応処理なし

QCサンプルタイプのライン固有パラメータ

QCサンプルタイプのライン固有パラメータをラインテーブルに入力します。

オプション	説明
波長	分析ラインの名称
濃度期待値	QCサンプルおよび QC std. QCサンプルの期待濃度

オプション	説明
濃度増加期待値	QCストックの場合 サンプルからスパイクサンプルへの期待濃度上昇値 原液の体積および濃度に対応する値を入力します。
強度期待値	について QCブランク QCブランクの期待強度値
下限	誤差許容範囲の下限 (%)
上限	誤差許容範囲の上限 (%)
QCフラグ	「+」が付いている場合、そのラインの品質管理結果がQCタブの結果リストに表示されます。
アクション	誤差範囲の限界を超えた場合は、この手順を使用してください。 複数のラインに「+」が付いている場合、それらのうちいずれか1つでも誤差限界を超えていれば、対応処理が実行されます (OR論理)。
単位	について QC std. 想定濃度の単位

- QCサンプルのパラメータ入力 ▶ **新規/変更**をクリックして、QCサンプルタイプの新しいパラメータセットを作成するか、選択されたサンプルタイプを編集します。
- ✓ **QCサンプルタイプの追加/変更画面**が開きます。
 - ▶ **種類**リストでサンプルの種類を選択します。
 - ▶ **QCサンプルのみ**：複数のQCサンプルを定義する場合は、リストボックスに連番を割り当てます。
 - ▶ **QC標準のみ**：検量線テーブル内の順序に応じて、リストボックスで標準の番号を選択します。
 - ▶ **ライン固有パラメータ**をテーブルに入力します。
 - ✓ QCサンプルはメソッド内で定義されます。

これについては次のリンクも参照してください：

[原液およびQCサンプル用データベースの管理 \[▶ 127\]](#)

3.2.8 品質管理の指定 (メソッド | QCC画面)

メソッド | QCC画面で、シーケンス中の品質管理に関するパラメータを指定します：

- 相対標準偏差 (平均値統計) または相対範囲 (中央値統計)
- 検量線管理
- 再検量線管理
- 誤差限界を超えた場合の処理手順

異なる対応処理を持つ複数の管理オプションを同時に選択できます。

Method

Lines Plasma Sample introduction Evaluation Calibration Statistics QCS QCC Output

RSD/RR% check: no react. ▾

Calib. check: no react. ▾

Recal. check: no react. ▾

No.	Line	RSD/RR% <	RSD !	R ² (adj.) >	R ² !	Rec.Fact. >	Rec.Fact. <	Rec. !
1	Al396.152	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
2	As188.979	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
3	As193.698	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
4	Cd214.441	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
5	Cr226.502	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
6	Cr267.716	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
7	Cu324.754	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
8	Fe259.940	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
9	Mn257.610	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
10	Ni231.604	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+

Open... Save... OK Accept Cancel

品質管理の種類

管理タイプ	説明
RSD/RR%チェック	相対標準偏差または相対範囲の管理
検量線チェック	検量線の決定係数の管理
標準化チェック	再検量線係数の管理

誤差限界を超えた場合の対応処理

対応処理	説明
なし	該当する管理を実行しません
フラッグ	誤差限界を超えた場合、サンプルテーブル内の該当するサンプル、検量線、または再検量線がマークされます
繰り返し+継続	次でのみ有効：RSD/RR%チェック 次のサンプルを測定する前に逐次精度限界を超えた場合、該当するサンプルの測定を繰り返します
再検量+継続	次でのみ有効：検量線チェックおよび標準化チェック 検量線または再検量線係数の誤差限界を超えた場合、新たに検量線を実行します。その後、次のサンプルの測定に進みます
次のメソッド	次でのみ有効：検量線チェックおよび標準化チェック 誤差限界を超えた場合、現在の測定プログラムは中断され、メソッド内の次の元素ラインの測定プログラムが開始されます。このオプションは、メソッドに複数の元素ラインが指定されている場合にのみ選択できます。
ストップ	次でのみ有効：検量線チェックおよび標準化チェック 誤差限界を超えた場合、現在実行中のメソッドの測定を停止します。


品質チェックの元素線固有パラメータ

このテーブルに、各品質チェックの元素線固有パラメータを入力します。各分析ラインについて、チェック対象とするかどうかを定義できます。管理対象の元素線のいずれかが誤差限界を超えた場合、上で選択された対応処理が実行されます。

品質管理	パラメータ/意味
RSD/RR%チェック	RSD/RR% < 相対標準偏差または相対範囲が指定値以上の場合、システムは定義された手順で対応します。

品質管理	パラメータ／意味
	RSD ! 「+」が付されたラインでは、RSD%またはRR%のチェックが行われます。
検量線チェック	R2(adj.) 回帰R2(adj.)の決定係数は、指定された値以上である必要があります。それ以外の場合は、選択された対応が実行されます。 R2 ! 「+」が付されたラインでは、 R2(adj.) のチェックが行われます。
標準化チェック	Rec.Fact. > 再検量線係数の上限値 Rec.Fact. < 再検量線係数の下限値 検量線係数がこれらの指定限界を外れた場合、選択された対応が実行されます。 Rec. ! 「+」が付されたラインでは、再検量線係数のチェックが行われます。

これについては次のリンクも参照してください：

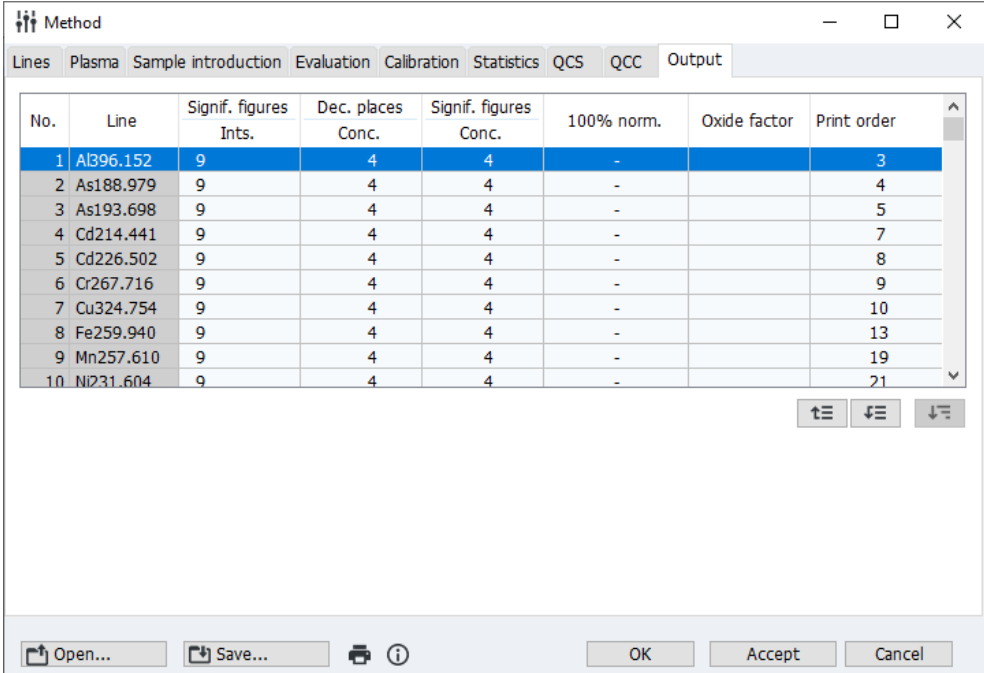
 統計解析の指定 (メソッド | 統計画面) [▶ 43]

3.2.9 結果の出力形式の指定 (メソッド | 出力画面)

メソッド | 出力画面では、画面表示および印刷結果における小数点以下の桁数、追加の出力形式、複数元素の分析における印刷時の分析用ラインの順序を指定します。

下のテーブルで、強度と濃度値の表示および印刷における小数点以下の桁数と、印刷物における分析ラインの表示順序を定義します。

メソッド | 出力画面の要素



No.	Line	Signif. figures Ints.	Dec. places Conc.	Signif. figures Conc.	100% norm.	Oxide factor	Print order
1	Al396.152	9	4	4	-		3
2	As188.979	9	4	4	-		4
3	As193.698	9	4	4	-		5
4	Cd214.441	9	4	4	-		7
5	Cd226.502	9	4	4	-		8
6	Cr267.716	9	4	4	-		9
7	Cu324.754	9	4	4	-		10
8	Fe259.940	9	4	4	-		13
9	Mn257.610	9	4	4	-		19
10	Ni231.604	9	4	4	-		21

要素	説明
有効数字 Ints.	強度値の有効数字の桁数
小数点 濃度	濃度値の小数点以下の桁数
有効数字 濃度	濃度値の有効数字の桁数
100% 正規化	出力濃度濃度2は、全濃度に対する百分率に変換されます。 全濃度は、「+」が付されたラインの濃度値の合計です。
酸化物係数	酸化物が選択されている場合、出力濃度濃度 2はその酸化物の濃度（含有量）に変換されます。酸化物係数は括弧内に表示されます（例：Tiは1.6681を乗じてTiO ₂ に換算されます）。
プリントオーダー	レポートに表示されるラインの順序

4 シーケンス

シーケンスは、測定ルーチン内でサンプルおよびアクションの実行順序を定義します。サンプル名やサンプルラック上の位置など、一部のサンプル記述データは直接入力することもできます。ただし、恒久的に保存するには、サンプル記述データをサンプル情報ファイルとして保存する必要があります。

シーケンスは、読み込まれたメソッドに基づいており、その中には検量線の種類、統計解析、品質管理などの情報が含まれています。

4.1 シーケンスの作成・保存・読み込み

メソッドと同様に、シーケンスもデータベースに保存されます。シーケンスの作成、編集、保存、および読み込みが可能です。シーケンス管理に関する追加機能は、[データ/データ管理](#)画面で確認できます。

これについては次のリンクも参照してください：

[メソッドとシーケンスの管理](#) [▶ 120]

4.1.1 新しいシーケンスの作成

まず、メソッドを作成するか読み込みます。このメソッドに基づいて、サンプル測定およびアクションの新しいシーケンスを指定できます。

- ▶ [ファイル](#) | [新規シーケンス](#)メニュー項目を選択します。
- ▶ または、[☰](#)をクリックするか、[メソッド 開発](#) | [シーケンス](#)メニュー項目を使用して、現在のシーケンスパラメータを含む画面を開くこともできます。
 - ✓ [シーケンス](#)画面が表示されます。これで、測定およびそれに続くアクションを定義できます。

4.1.2 シーケンスの保存

測定とアクションの入力後、[シーケンスを保存](#)画面でシーケンスをデータベースに保存します。これにより、シーケンスを後の測定で再利用できます。シーケンスを保存する際に、分類用の追加データを付加することで、後から容易に検索・識別できるようになります。

シーケンスを保存画面の要素

オプション	説明
名前	シーケンス名
Cat.	シーケンスの識別および分類を目的としたカテゴリ（3文字） この項目の入力は任意です。
テーブル	既存のシーケンスの概要
並び替え	このグループ内のオプションでシーケンスリストを並び替えることができます。 現在のバージョンのみオプションが有効になっている場合は、同じ名前のシーケンスのうち、最新バージョンのみが表示されます。
説明	必要に応じて、シーケンスに関する補足説明を入力できます ...をクリックして、事前定義したコメントのリストを表示します。これらのコメントはデータデフォルトの説明画面で管理します。

シーケンスの保存

- ▶ シーケンス画面で、保存をクリックするか、**ファイル|保存|シーケンス**メニュー項目を選択します。
- ▶ シーケンスを保存画面で、シーケンス名を入力し、追加のパラメータを選択します。
- ▶ **OK**で設定を確定します。
 - ✓ これで、シーケンスはデータベースに保存されます。既存のシーケンス名を選択した場合、既存のメソッドは上書きされず、新しいバージョンがデータベースに作成されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- [定義済みコメントの作成](#) [▶ 128]

4.1.3 シーケンスの読み込み

保存済みのシーケンスを読み込み、メソッドと組み合わせて測定ルーチンを開始できます。

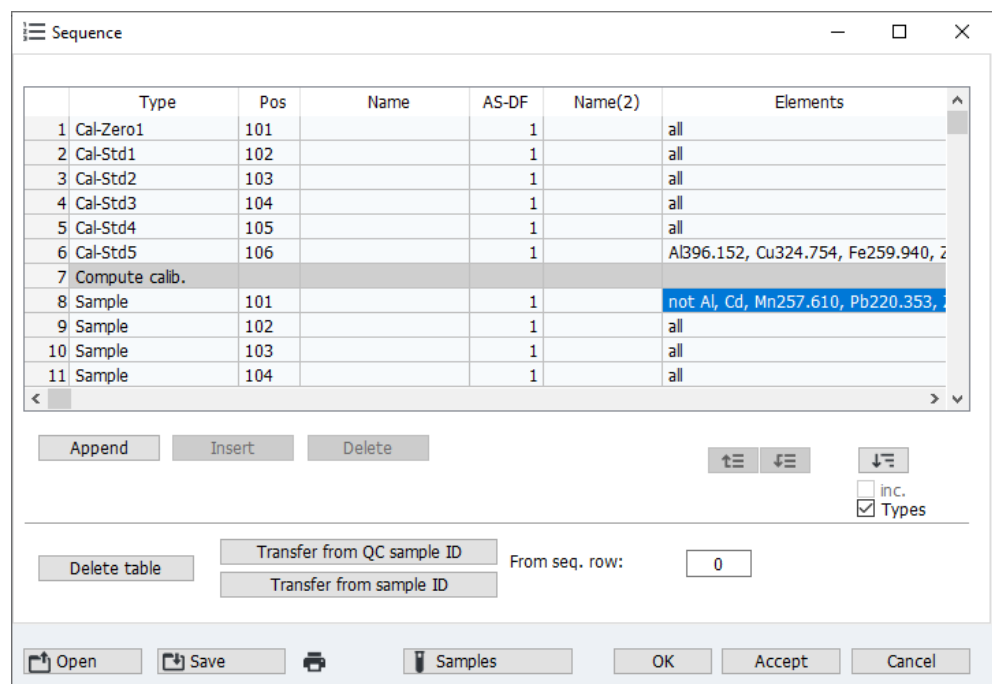
- ▶ シーケンスデータベース画面を以下の方法のいずれかで開きます：
 - ツールバーで、シーケンスフィールドの横にある アイコンをクリックします。
 - **ファイル|シーケンスを開く**メニュー項目を選択します。

- シーケンス画面で、開くをクリックします。
- ▶ 必要に応じて、Cat.フィールドでカテゴリを選択することで、表示されるシーケンスを絞り込むことができます。すべてのカテゴリのシーケンスを表示するには、Cat.フィールドの入力を削除します。
- ▶ 同じ名前のシーケンスのうち、最もバージョン番号が高いシーケンスのみを表示したい場合は、現在のバージョンのみチェックボックスをオンにします。
- ▶ テーブルでシーケンスを選択して、OKをクリックします。
 - ✓ 保存されたパラメータ付きのシーケンス画面が表示されます。

4.2 シーケンス画面

シーケンス画面では、分析中に実行する測定および他のアクションの順序を指定できます。

☰をクリックしてシーケンス画面を開きます。



サンプルおよびアクションシーケンスのテーブル

このテーブルには、選択されたサンプルおよびアクションシーケンスが、実行順に表示されます。

テーブル列	説明
種類	サンプルの種類または分析ステップ。
位置	オートサンプラートレイ上の位置（サンプラーを使用している場合）。
名前	サンプル名 この項目の入力は任意です。検量線およびQCサンプルの場合、メソッドでサンプル名が指定されていれば、その名前が転送されます。分析サンプルおよびQCサンプルについては、サンプル情報ファイルから名称を転送できます。
名前(2)	サンプルIDの追加名（オプション）
元素	サンプル内で分析を行う元素、または特別なアクションを実行する対象元素を選択します。

テーブル列	説明
	<ul style="list-style-type: none"> ▪ なし 現在の選択が削除されます。 ▪ all メソッドで定義されたすべての元素が測定対象となります（デフォルト）。 ▪ 元素記号 指定された元素のみが測定されます（例：「Cu、Pb」）。 ▪ 元素ライン（記号+波長） 指定された元素ラインのみが測定されます（例：「Mn 257.610、Ca 315.887」）。 ▪ not 元素記号またはnot 元素ライン 指定された元素または元素ラインは測定されません（例：「not Cu、Pb」、"not Mn 257.610、Ca 315.887"）

ボタン

ボタンを使用して、シーケンスリストにサンプルやアクションを追加したり、削除したり、既存のサンプル情報データを転送したりできます。

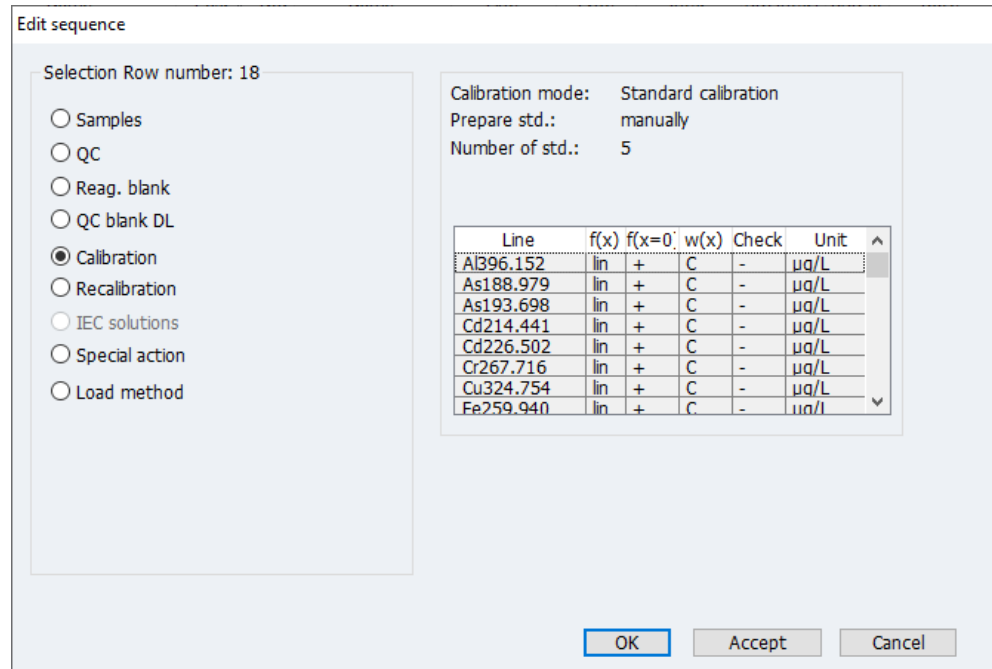
ボタン	説明
追加	リストの末尾に新しい行を追加し、 <i>シーケンスの編集画面</i> を開きます
挿入	選択したリスト位置の上に新しい行を挿入します
削除	選択した行を削除します
表の削除	シーケンスリスト全体を削除します
QCサンプルIDから転送	QCサンプルの名称およびオートサンプラー上の位置情報を、 <i>サンプルID QCサンプル情報画面</i> から転送します QCサンプルIDテーブルの情報がシーケンステーブルに入力されます。新しいサンプルIDの最初の行は、この <i>シーケンス</i> 行からフィールドで定義します。
サンプルIDから転送	サンプル名、オートサンプラー上の位置、および分析対象元素の情報を、 <i>サンプルID画面</i> から転送します サンプルIDテーブルの情報がシーケンステーブルに入力されます。新しいサンプルIDの最初の行は、 <i>サンプルID</i> フィールドで定義します。
サンプル	<i>サンプルID画面</i> を開きます

これについては次のリンクも参照してください：

- 📖 よく使用されるコントロール機能 [▶ 15]
- 📖 サンプル分析／アクションに対する元素／ラインの選択 [▶ 58]

4.3 シーケンス内の測定とアクションの指定


*シーケンスの編集画面*で、分析における測定およびアクションの順序を指定できます。*シーケンス画面*で追加または挿入をクリックすると、この画面が表示されます。




実行可能な測定とアクション メソッド設定に応じて、分析に対して異なる測定およびアクションを指定できます。

サンプル/ アクション	説明
サンプル	数で指定されたサンプル数を測定します。
QCサンプル	QCサンプルを測定し、メソッドで指定された条件に従って評価します リストから、メソッドで指定されたQCサンプルを選択します。QCサンプルのパラメータは、対応するフィールドに表示されます。
試薬ブランク	ブランク値の分析対象を測定します
QCブランクDL	ブランクメソッドに従い、検出限界と定量限界を決定するためにブランク測定を行います
検量線	メソッドで指定された条件に従って、検量線用サンプルを測定し、検量線を計算します
標準化	再検量線用に設定された検量線サンプルを測定し、再検量線を計算します
サンプル-添加	検量線処理：添加法による検量線 このサンプルを追加し、検量曲線およびサンプル濃度を算出します
ブランク-添加	検量線処理：添加法による検量線、およびブランク補正：補正後濃度 このブランクサンプルを追加し、ブランク値を算出します
IEC溶液	IECによるピーク補正のみ IEC溶液を測定します
他の動作	これらのアクションは、サンプルの測定に直接影響しません（下記参照）。
メソッド読み込み	保存済みのメソッドを読み込みます（例：シーケンス内で別の分析を開始するため） ...を使用して、保存済みメソッドのデータベース画面を開きます。保存されている2つのメソッドのうち、いずれかを選択します。

特別なアクション

アクション	説明
プラズマ消灯	プラズマを消火します
暗電流測定	暗電流の追加測定を行います この暗電流測定では、シャッターを閉じた状態で信号が測定されます。暗電流の測定は、シーケンスに組み込まれていない場合でも常に自動で実行されます。
待機時間	フィールドに入力された時間（分）だけ待機し、その後分析を継続します オートサンプラー使用時、カニューレは洗浄位置に留まり、洗浄液をさらに吸引します。
一時停止	分析を停止します その後、  をクリックするか、 ループ 継続 メニュー項目を使用してシーケンスを継続できます。
ビープ音	PCが信号音を生成できるようにします（例：検量線終了を示すため）
繰り返し / 繰り返しの終了	シーケンス内にループ（繰り返し処理）を定義します。 繰り返しを開始点とし、繰り返しの終了を終点とするシーケンスの範囲は、キャンセル条件が満たされるまで繰り返し実行されます。キャンセル条件として、ループサイクル数または時間（分）を指定できます。 オンライン測定（リモートメンテナンスの一環として）を行うには、自動的にオプションを有効にする必要があります。これによって、手動モード中のサンプル分注に関するプロンプトが表示されなくなります。
検量線プロット表示	シーケンス実行中、待機時間（分）が経過するまで検量曲線を表示します。待機時間が経過するか、OKをクリックすると、ソフトウェアは測定を継続します。 待機時間を入力せずに検量線プロット表示アクションを有効にした場合、OKで検量線を確定するまで、ソフトウェアは測定を継続しません。 検量線画面でストップボタンをクリックすると、設定された待機時間に関係なく、ソフトウェアは画面を閉じて分析シーケンスを中断します。
システムクリーニング	洗浄液を使用し、通常のポンプ速度でトーチまでのサンプル経路を洗浄します 入力フィールドに洗浄時間を入力します。

シーケンスの指定

- ▶ をクリックしてシーケンス画面を開きます。
- ▶ 追加をクリックします。
 - ✓ シーケンスの編集画面が表示されます。
- ▶ 必要なアクションを順番に有効化し、承認を使用してシーケンステーブルに転送します。
- ▶ OKで最後のアクションを確認します。
 - ✓ シーケンス画面に戻ります。これで、シーケンステーブルには、すべてのアクションが選択された順に登録されています。
- ▶ 分析対象元素のデフォルトとして、各サンプル/アクションに対してシーケンステーブルでallオプションが選択されています。該当するサンプル/アクションの元素テーブルセルをクリックすると、この設定を画面内で変更できます。

- ▶ オートサンプラーを使用する場合：
オートサンプラー内のサンプルの位置位置を指定します。検量線とQCサンプルの位置は、メソッドから自動的に取得されます。ただし、ここで位置を変更することは可能ですが、シーケンスで設定された位置が常に優先されます。

分析対象サンプルのデータは、**サンプルID**画面で入力し、その後シーケンスリストに転送するのが最善です。

4.4 サンプル分析／アクションに対する元素／ラインの選択

シーケンスでは、サンプルの分析およびアクションの実行に必要なすべての元素がデフォルトで有効化されています。サンプルまたはアクションの分析対象から元素を除外する場合は、以下の手順に従います：

- ▶ **シーケンス画面**で、対応するサンプルまたはアクションのテーブルセルをクリックします。元素と波長の選択画面が表示されます。
現在読み込まれている**メソッド**の元素/波長を表示チェックボックスをオンにします。
 - ✓ 元素リストでは、メソッドで設定されたすべての元素／ラインが青く強調表示されています。
- ▶ 要素を完全に除外するには、対応する元素をクリックして選択を解除します。元素を有効にするには、再度その元素をクリックします。
- ▶ メソッドで元素に複数のラインが設定されている場合、選択したラインのみを使用するには、波長リストで目的のラインをマウスでクリックして選択します。
- ▶ **all**ボタンと**なし**ボタンを使用すると、分析／アクションに対してすべての元素を有効化または除外できます。
- ▶ **しない（選択範囲の反転）**オプションを使用すると、選択されているすべての元素／ラインが分析／アクションの対象から除外されます。未選択の元素／ラインのみが分析に使用されます。元素／ラインのリストは「**not**」で始まります。

出力フィールドには、選択されたすべての元素／ラインがリスト表示されます。シーケンス画面に戻った後、テーブルセル内で元素／ラインを直接編集できます。

元素と波長の選択画面

Select elements and lines - no method lines

Elements	Lines
Al	Al396.152
As	As188.979
Cd	As193.698
Cr	Cd214.441
Cu	Cd226.502
Fe	Cr267.716

Not (invert selection)


Show elements/lines of the currently loaded method

Al, Cr, Fe, As188.979, Cd226.502

Examples: (1) Cu123.56, 55, Cu, Fe123.34 (2) not Fe (3) all


5 サンプル情報データ (サンプルID)

サンプル情報データ (サンプルID) には、現在の分析対象サンプルおよびQCサンプルに関する詳細情報が含まれています。これには、サンプル名、オートサンプラー上の位置、初期重量、希釈または濃度の単位などが含まれます。サンプル名と位置は、マウスクリックでシーケンステーブルに転送できます。サンプル情報データはCSV形式のテーブルとして保存されており、Excelなどの表計算ソフトで編集することもできます。逆も可能です。外部で作成したサンプルテーブルをASpect PQにインポートできます。

サンプルID画面は、アイコンバーの  をクリックすると開きます。

5.1 サンプル情報データを作成する、保存する、開く


新しいサンプルIDセットの作成

- ▶ アイコンバーで  をクリックするか、**ソフト開発 | サンプルID** または **ファイル | 新規サンプル情報ファイル** メニュー項目を選択します。
 - ✓ サンプルID画面が表示されます。
- ▶ 分析用サンプルおよびQCサンプルのデータを指定します。
- ▶ **シーケンスへ転送** をクリックして、データレコードをシーケンスに転送します。
 - ✓ サンプルは有効化されており、次回の分析で使用されます。サンプルIDは、後の分析に備えて保存することもできます。

サンプルIDの保存

- ▶ サンプルID画面で、**保存** をクリックするか、**ファイル | 保存 | サンプル情報** メニュー項目を選択します。
- ▶ **名前を付けて保存** 画面でデータレコードを保存します。
 - ✓ サンプルIDはCSV形式で保存されます。データは読み込んで後の分析に利用することも、表計算ソフトで編集することもできます。

サンプル情報データを開く

- ▶ サンプルIDは、次のいずれかの方法で開くことができます：
 - ツールバーで、サンプルフィールドの横にある  アイコンをクリックします。
 - **ファイル | サンプル情報ファイルを開く** メニュー項目を選択します。
 - サンプルID画面で、**開く** をクリックします。
- ▶ **開く** デフォルト画面で、**ファイル** を選択します。
 - ✓ サンプルIDサンプルID画面に表示され、次の測定で使用できます。

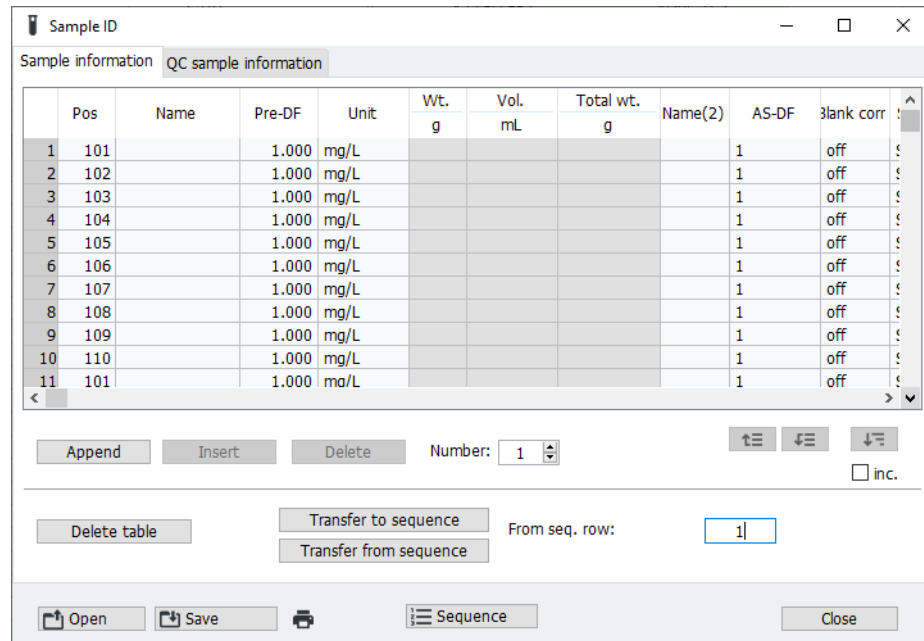
これについては次のリンクも参照してください：

-  [サンプル情報の指定 \[▶ 61\]](#)

5.2 サンプルID | サンプル情報画面

サンプルID画面で、サンプルおよびQCサンプルを指定できます。オートサンプラー上のサンプル名や位置に加えて、分析に重要な各種パラメータを入力できます。

 をクリックしてサンプルID | サンプル情報画面を開きます。



タブ サンプル情報

サンプル情報タブには、サンプルとその特性のリストが表示されます。

テーブル列	説明
位置	オートサンプラー上のサンプル位置
名前	サンプル名 この項目の入力は任意です。最大文字数：20
Pre-DF	対象：単位タイプ液体および 固体 サンプルの予備希釈係数とは、オートサンプラーにセットされる前、またはオートサンプラーを使用しない場合はプラズマに供給される前に、元のサンプルが希釈された倍率を示す係数です。この係数は、元のサンプルの濃度（濃度2）を算出するために必要です。
単位	サンプルの濃度単位。
重量	初期重量（単位：g、単位タイプ固体のみ対象） サンプル調製時に溶解された元のサンプルの質量。初期重量は元のサンプルの濃度（濃度2）を計算するために必要です。
容量	全体容量または充填容量（単位：mL、単位タイプ固体のみ対象）
トータル重量	サンプルと溶媒の初期総重量（単位：g、単位タイプ液体の比重（例：油類）のみ対象）。
名前 (2)	追加のサンプル名。 この項目の入力は任意です。 最大文字数：20
AS-DF	オートサンプラーの希釈係数。
ブランク補正	ブランク値補正（サンプルタイプサンプルにのみ適用） o ブランク補正は実行されません。 o 元サンプルの濃度を計算する際、シーケンス内で最後に測定されたブランク値が差し引かれます。 ブランク補正の手順は、 オプション 検量線 画面で選択します。
サンプル種類	選択肢：サンプルおよびブランク
元素	サンプル中の分析対象の元素またはライン

テーブル列	説明
	テーブルセルをクリックすると、 元素と波長の選択画面 が開き、これらの設定を行うことができます。

ボタン

ボタン	説明
追加	リストの末尾に挿入する新しい行数を入力します。
挿入	選択したリスト位置の前に挿入する新しい行数を入力します。
削除	マークした行を削除します。
数	挿入する行数を入力するための入力フィールド。
表の削除	サンプル情報のテーブル全体を削除します。
シーケンスへ転送	サンプル名、オートサンプラー内の位置、および分析対象元素をシーケンスリストに転送します。 サンプルデータの転送元となるシーケンスリストの先頭行は、この シーケンス 行から入力フィールドで定義する必要があります。
シーケンスから転送	シーケンスリストからサンプルIDテーブルへ、サンプル名、オートサンプラー内の位置、および分析対象元素を転送します。 サンプルデータの転送元となるシーケンスリストの先頭行は、この シーケンス 行から入力フィールドで定義する必要があります。

QCサンプル情報タブ

サンプル情報タブと同様に、このタブにはQCサンプルが含まれます。さらに、**種類列**にはQCの種類に関する情報が含まれます。**単位列**は、単位がメソッド内で定義されているため省略されています。QCサンプルに対するブランク補正はメソッド内で定義されており、ここでは選択できません。

ボタン



ボタン	説明
シーケンスへ転送	QCサンプルの名称およびオートサンプラー内の位置をシーケンスリストに転送します

これについては次のリンクも参照してください：

- [分析シーケンスのオプション \[▶ 133\]](#)
- [サンプル分析／アクションに対する元素／ラインの選択 \[▶ 58\]](#)
- [測定単位の指定 \[▶ 127\]](#)

5.3 サンプル情報の指定

分析にあたり、初期重量や予備希釈係数など、サンプルまたはQCサンプルに関する追加情報が必要な場合は、**サンプルID**画面でデータを指定する必要があります。ここで指定したサンプル名およびオートサンプラー内の位置を、シーケンスに転送できます。





- ▶  をクリックして**サンプルID | サンプル情報**画面を開きます。
- ▶ 次に、分析対象となるサンプル数を**数**フィールドに入力します。次に**追加**をクリックして、行をテーブルに挿入します。
- ▶ テーブルに、各サンプルの必要な情報を入力します。
- ▶ 列内の入力値がすべて同じ場合は、を使用して、選択したセルの値をその列の後続セルにコピーできます。**増加**チェックボックス (inc はincrement (増分) を意味します) をオンにすると、情報が次のセルに転送されるたびに値が1ずつ増加します。このようにして、たとえばオートサンプラーのトレイ上の連続した位置を割り当てたり、サンプル名に連番を付けたりすることが簡単に行えます。

- ▶ 入力フィールドのテキストはクリップボードにコピーして、再度貼り付けることができます。この操作を行うには、Ctrl+CおよびCtrl+Vのキー操作を使用するか、テーブルセルを右クリックしてコンテキストメニューのコマンドを使用します。
- ▶ すべての情報を入力したら、このシーケンス行からフィールドに、サンプル情報をシーケンスに転送する開始行を指定します。シーケンスへ転送をクリックして情報を転送します。
- ▶ QCサンプル情報も、サンプルID|QCサンプル情報画面で同様に指定します。シーケンスへ転送をクリックして、QCサンプル情報をシーケンスに転送します。
 - ✓ このサンプル情報は次回の分析で使用されます。

6 分析の実行と結果の計算

6.1 メイン画面で分析を開始するためのメニューコマンドとボタンの概要

測定ルーチン（シーケンスに基づく分析プロセス）は、ツールバーのアイコンまたはルーチンメニューから開始します。

アイコン	メニュー項目	機能
	ルーチン 測定開始	測定ルーチンを開始します
	ルーチン 選択したシーケンス行の実行... F6	シーケンス内で選択した行を実行します。CtrlキーやShiftキーを併用することで、マウス操作で複数の行を選択できます。
	ルーチン ストップ	測定ルーチンを停止します
	ルーチン 継続	中断された測定ルーチンを再開します

6.2 分光計をオンにしてプラズマ点火



注意

オゾンと窒素ガスによる中毒の危険性

- プラズマに点火する前に、排気ユニットをオンにします。
- 排気ユニットは、運転中オンのままにしてください。

プラズマ動作の安全を確保するため、装置は安全回路を使用して以下の状態をモニタリングしています。

- プラズマコンパートメントの扉が閉じていること。
- プラズマトーチが作業位置にあること。
- 冷却が十分に行われていること。
- 排気が作動していること。
- アルゴンの供給が確保されていること。

すべての条件が満たされるまで、プラズマを点火しないでください。安全回路のいずれかで動作中に障害が発生すると、装置はプラズマを消火します。

プラズマ点火

- ▶ 電源スイッチで PC をオンにしてオペレーティングシステムが初期化されるまで待機します。
- ▶ 電源スイッチで ICP-OES 装置をオンにします。PlasmaQuant 9200/PlasmaQuant 9200 Elite の場合：さらに、装置前面のスタンバイスイッチで装置をオンにします。
- ▶ アルゴン供給口を開きます。予備圧力を 500 ... 700 kPa (5 ... 7 bar) に設定します。
- ▶ 排気ユニットをオンにします。
- ▶ 電源スイッチを使用して、循環冷却器をオンにします。



- ▶ プラズマコンパートメントの扉を開きます。トーチが始動位置にあるか確認します。インジェクタの先端は、誘導コイルの下端から約 1 ~ 2 mm 下に配置されている必要があります。
- ▶ 軸方向に観察する窓で、コーンに汚れや劣化がないか点検します。付属のフックレンチを使用して、コーンがしっかりと固定されているか確認します。
i 注記！ コーンが緩んでいると、十分に冷却されず腐食するおそれがあります。
- ▶ プラズマコンパートメントの扉を閉じます。
- ▶ PlasmaQuant 9200 Elite の場合：オプションのサンプリングコンパートメント照明をオンにしてください。
- ▶ チューブホースを点検します。チューブの柔軟性がなくなったり、ひどく摩耗したりしている場合は交換します。
- ▶ ICP-OES 装置のポンプ内のストッパーの間に、チューブホースをクランプで固定します。
- ▶ クランプブラケットをチューブの上に置き、クランプレバーでガイドを固定します。クランプレバーが噛み合っていることを確認してください！ポンプの方向に **i** 注記！ 注意してください。このポンプは反時計回りに回転します。
- ▶ 分析のために十分な洗浄液がボトルに入っていることを確認します。
i 注記！ この洗浄液の酸含有量は、試料および標準液と同じである必要があります。特に指定がなければ 2 % の硝酸溶液を使用してください。
- ▶ 廃液ボトルの充填レベルを確認し、分析に使用できる十分なリザーバーがなければボトルを空にします。
- ▶ オートサンプラーを使用せずに手動で操作する場合は、サンプル吸引チューブを洗浄溶液に浸します。プラズマ着火処理中は、その後について空気が入らないようにしてください。
- ▶ ASpect PQ プログラムを起動します。
- ▶ **クイックスタート** ウィンドウで、次のような設定を行います。
 - **ルチン** または **メソッド** **開発** オプションを選択します。
 - HF キットを使用している場合は、**トーチの材質** の下で **セラミック** オプションを選択して、光プラズマセンサの感度を調節します。
 - オプションとして： **ワークシート** 領域で、USP 232/233 に従って、クイックスタート用に準備されたワークシート（医薬品中の元素不純物の分析など）を選択します。ワークシートには、メソッド設定と準備済みの順序が含まれています。
- ▶ ワークシートを使用してソフトウェアを起動する場合は、**クイックスタート** ウィンドウで **OK** を選択してクイックスタートを完了します。
- ▶ ワークシートなしでソフトウェアを起動する場合は、**クイックスタートをスキップ** をクリックして ASpect PQ インターフェイスに移動します。
- ▶ システムが長期間使用されていない場合、またはネブライザーチャンバーが取り外されている場合は、ネブライザーガスを使用してネブライザーチャンバーとトーチをパージし、システムから空気をすべて排気します。**▲** をクリックして **プラズマコントロール** ウィンドウを開き、**スプレーチャンバーのパージ** をクリックします。
- ▶ プラズマに点火します。**プラズマコントロール** ウィンドウで、**プラズマ点火** ボタンをクリックします。
 - ✓ この後続く初期フェーズでは、アルゴンでトーチをパージし、ICP-OES 装置の安全回路をチェックします。問題がなければプラズマ点火されます。

- ▶ プラズマが正しく形成されているか確認します。プラズマは円錐形で、誘導コイルを超えて広がり、上部に向かって先細になっていなければなりません。
- ▶ リングプラズマが形成される場合、誘導コイル内でのみプラズマが形成されているか、またはパチパチという音が聞こえます。この場合は、装置の赤いプラズマオフボタンを押してください。
- ▶ 次に点火する前に、サンプルチューブが洗浄溶液に浸漬されていることと、ガス供給および循環冷却器が正しく作動していることを確認してください。
 - ✓ 分光計が冷却されるのは、点火に成功してプラズマ形成が安定した後のみです。1 ... 2 min後、発火ルーチンが完了してチューブポンプが始動します。発光分光計の測定準備ができました。
- ▶ ここで初めて分析システムの詳細設定を行い、測定ルーチンを開始できます。

これについては次のリンクも参照してください：

 ASpect PQの開始 [▶ 7]

6.3 プラズマを消火して分光計をオフにする

- ▶ 分析の終了後、洗浄液をシステムに約3分間ポンプ供給し、続いて水を1分間ポンプ供給します。その後、装置を乾燥させます。チューブ交換が必要な場合は、酸を残留させないでください！
- ▶ ASpect PQ プログラムで、ツールバーの  をクリックしてプラズマを消火します。
または、 を使用してプラズマウィンドウを開き、プラズマ消灯をクリックします。
- ▶ **ファイル|終了** で ASpect PQ プログラムを終了します。
- ▶ パージガスをオフにする場合は、パージガスをオフにして良いかという確認にはいで応答します。
短時間（最大30分）だけ作業を中断する場合や、UV範囲内で作業している場合は、パージガスをオフにしないでください。これにより、検出器が十分にパージされるまで、点火処理中の待機時間が短縮されます。測定を中断している間、装置はオンのままにしてください。
- ▶ 装置と冷却をオフにできるというメッセージが表示されるまで待機します。
- ▶ 電源スイッチを使用して、ICP-OES 装置およびオートサンプラー（該当する場合）をオフにします。
- ▶ 毎日の測定作業中は、代わりに装置前面のスタンバイスイッチを使用して ICP-OES 装置をオフにすることもできます。装置はまだ電源に接続されています。スタンバイモードでは、ガス供給がオフになります。
- ▶ ICP-OES 装置のポンプチューブを取り外します。圧力レバーを緩め、クランプブラケットがチューブを押さない状態にして、ポンプの片側にあるチューブストッパーをロックから引き出します。
- ▶ オートサンプラーを使用する場合は、同じ方法でポンプチューブを取り外します。
- ▶ 装置のスイッチをオフにした後にガス供給を閉じます。
- ▶ 電源スイッチを使用して、循環冷却器をオフにします。
- ▶ 排気ユニットをオフにします。
- ▶ Windows をシャットダウンし、PC の電源を切ります。
 - ✓ これで分析器がオフになりました。



注記

ICP-OES 装置は、冷えるまで待ってからオフにしてください！
プラズマを消火した後は、少なくとも 30 秒待ってから電源スイッチをオフにしてください。


6.4 測定ルーチンの開始

測定の開始

測定の準備には、メソッドとシーケンスを作成するか、準備したワークシートのいずれかを使用します。

必要であれば、希釈などの追加サンプル情報を含むサンプル ID を用意します。

オートサンプラートレイなどの測定用サンプルを用意します。

- ▶ PC の電源を入れます。発光分光計と付属品をオンにします。
- ▶ プラズマに点火します。
- ▶ メソッドを読み込みます。
 - ツールバーで、**メソッド** フィールドの横のフォルダーアイコンをクリックします。**メソッド** を開く ウィンドウでメソッドを選択します。
- ▶ 新しいシーケンスを作成するか、または既存のシーケンスを読み込みます。
 - シーケンスの先頭でキャリブレーションを実施します。
 - シーケンスを読み込む際には、検量線とメソッドが一致していることを確認します。
検量線標準の分析ラインは、**検量線** タブのメソッドで選択した分析ラインと一致している必要があります。
 - キャリブレーションの後、QC サンプルを測定して検量線が正しいことを確認します。
- ▶ 必要に応じて、サンプルに関する追加情報を含むサンプル ID テーブルを作成します。
- ▶ 測定ルーチンを開始するには、 をクリックするか、メニューアイテム **ルーチン | 測定開始** を使用します。
- ▶ **開始** ウィンドウで結果ファイルを選択します。
測定結果は、新しいファイルに保存することも、既存のファイルに追加保存することもできます。既存のファイルを上書きすることはできません。
 - ✓ ファイル名を選択した後、メソッドとシーケンスの設定に従って測定ルーチンが開始されます。オートサンプラーを使用する場合、測定は自動的に実行されます。
- ▶ オートサンプラーを使用せずに手動でサンプルを導入する場合は、画面上のサンプル準備指示に従ってください。

これについては次のリンクも参照してください：


 [分析シーケンスのオプション](#) [▶ 133]

6.5 分析実行中の結果の表示と保存

分析シーケンス中の表示内容 測定ルーチンの実行中は、結果がメイン画面にリアルタイムで表示されます。現在の結果を別画面で表示することも可能です。

- スペクトル表示：分析ラインの表示
- シグナルプロット：測定信号曲線
- 棒グラフ：測定値（棒グラフ）
- レポートウィンドウ：プラズマレポート
- 検量線とサンプル濃度：検量曲線上のサンプル値

これらの表示画面は、オプション|分析シーケンス画面で選択します。分析中は、表示画面の表示/非表示を切り替えることができます。




- ▶ 画面を開くには、ビュー|結果画面を開く F7メニューコマンドを使用するか、F7キーを押します。
- ▶ 画面を非表示にするには、ビュー|結果画面を閉じる F8メニューコマンドを使用するか、F8キーを押します。
- ▶ を使用すると、分析中でも画面を開くことができます。

メイン画面のシーケンスリストには、測定の進行状況が記録されます。連続するアクションを示す行には、テーブル列内に以下の記号が付加されます：

アイコン	意味
-	未測定/未実行。
0	測定中。
+	測定済み/実行済み。

アイコンバーのボタン

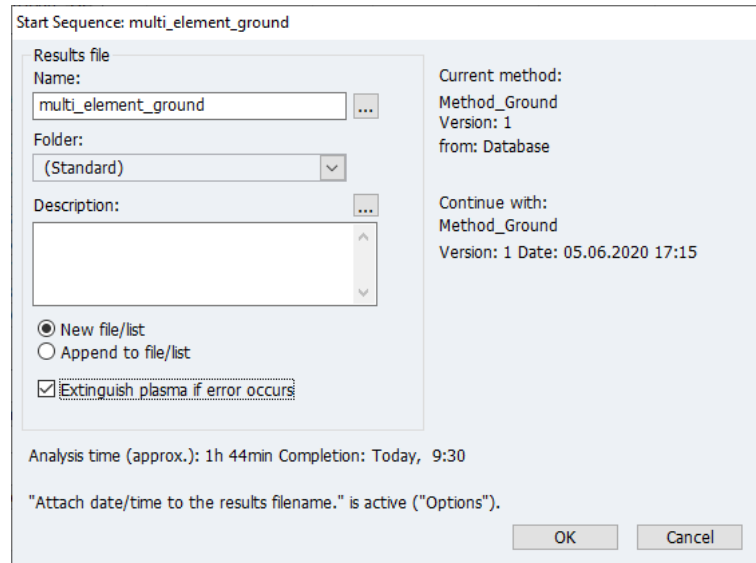
測定中は、アイコンバーに以下のボタンが表示されます：

ボタン	説明
	表示画面を開いたり閉じたりします
	シーケンス画面を表示します メソッドは参照のみ可能で、変更はできません。
	シーケンス画面を表示します 分析中でもシーケンスを展開できます。シーケンス画面にはサンプルボタンがあり、クリックするとサンプルMID画面が開いてサンプルデータを追加できます。

分析シーケンス中の結果データの保存

分析結果は、測定中にデフォルトフォルダまたはユーザー定義のサブフォルダ内のデータベースに直接保存されます。結果データは、新しいデータベースに保存することも、既存のデータベースに追加することもできます。ただし、同じ名前を選択しても、結果データベースを上書きすることはできません。

測定ルーチンの開始時に、結果保存先が自動的に要求されます。関連する開始画面が開き、結果ファイルに関して以下のオプションが表示されます：





オプション	
名前	結果データベースのファイル名を入力します 新しいファイル/リスト 有効にすると、新しいファイル名の入力が必要になります。プログラムは、指定されたファイル名が既に存在するかどうかを確認します。既存のファイルを上書きすることはできません。 結果/リストに追加 新しい結果は、既存の結果ファイルに追記されます。...をクリックすると、既存の結果ファイルを選択できるリスト付きの選択画面が開きます。
フォルダ	結果ファイルの保存先パスを選択します オプション 分析シーケンス画面で結果ファイル名に日/時を加える オプションを有効にすると、この情報が結果ファイル名に自動的に付加されます。この画面には、このオプションの有効化に関するメッセージが表示されます。
説明	ここでは、分析結果とともに保存される追加コメントを入力できます ...をクリックすると、ユーザー定義の記述を選択できます。
エラーが発生した場合はプラズマ消火	測定がエラーメッセージとともに中止された場合、プラズマは消火されます

このファイルには、測定および評価結果に加えて、サンプルID情報が含まれます。さらに、メソッドパラメータも結果データベースに保存されます。結果データベースは、拡張子「.tps」（メソッドパラメータ、強度、濃度）および「.spk」（生スペクトルデータ）で保存されます。

6.6 分析シーケンスの中断と再開

分析シーケンスは途中で中断して、再度継続できます。


- ▶ ルーチン|ストップメニュー項目またはを使うと、分析シーケンスは直ちに停止します。
- ▶ ルーチン|継続またはを使用すると、中断されたルーチンを再開できます。
✓ シーケンスを継続画面が開き、中断前のアクションステータスが表示されます。

- ✓ メソッドを変更した場合は、**変更されたメソッド**で継続オプションを有効にします。これにより、結果ファイルに新たなメソッド項目が追加され、別バージョンのメソッドが保存されます。測定は以下の手順で続行できます：

オプション	説明
継続	現在のサンプル、現在のライン、現在の統計処理を使用して続行します
繰り返し1回目の測定	現在のサンプル、現在のライン、最初の統計処理を使用して続行します
最初の元素	現在のサンプル、最初のライン、最初の統計処理を使用して続行します
表の列から ->	テキストボックスに表示されているテーブル表を使用して続行します

6.7 シーケンスのアクションの繰り返し

シーケンス内の個別アクションを繰り返し実行できます。

- ▶ メイン画面で、**シーケンス**または**シーケンス/結果**タブを開き、繰り返したいアクションを含む行を選択します。
CtrlキーまたはShiftキーを押しながらクリックすることで、複数行を選択できます。
- ▶ をクリックするか、**ルーチン|選択したシーケンス行の実行... F6**メニュー項目を使って、測定ルーチンを開始します。
- ▶ 開始画面で、繰り返し測定の結果を保存するファイル名を選択します。結果は新しいファイルに保存することも、既存のファイルに追記することも可能です。同じファイル名を選択しても、既存の結果を上書きすることはできません。
✓ 次に、選択されたアクションの繰り返しが開始されます。



注記

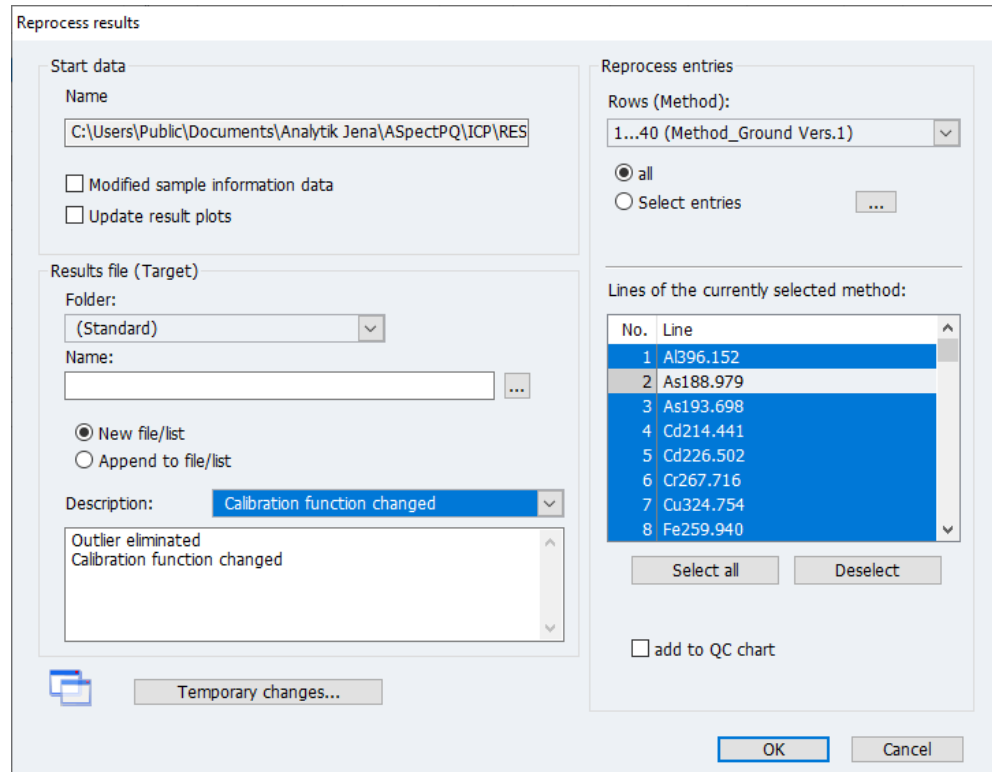
その間にメソッドが変更されていた場合、シーケンスまたは単一のラインを繰り返す際には変更後のメソッドが使用され、結果とともに新しいバージョンとして保存されます。

6.8 分析結果の再処理

分析結果の再処理は、検量線関数やメソッドの変更など、分析条件の変更を反映させるために使用されます。サンプル名や希釈係数など、サンプル情報データを変更した場合も、分析結果に反映させるには再処理が必要です。

再処理されたデータは、現在の結果ファイルに追記するか、新しいファイルとして保存できます。元データの改変は許可されていません。結果ファイル内で異なるパラメータを用いて再処理を複数回実行した場合、それぞれの再処理は常に結果ファイルの元データを参照します。

i 注記！再処理を行うたびに、新しいメソッドバージョンが保存されます。




再計算結果画面の入力
オプション

オプション/ フィールド	説明
最初のデータ	開始データの選択 名前 再処理対象となる結果ファイルの名称が表示されます。 修正したサンプル情報データ -サンプル情報ファイル（例：希釈係数）に変更が加えられた場合に有効にします。このオプションを有効にしない場合、サンプル情報ファイルの変更は結果の再処理に反映されません。
結果ファイルターゲット	結果プロットの更新 結果画面（例：スペクトルの表示）が、測定時と同様に更新されます。 注記：この処理により、再処理の速度が低下します。 再処理した結果データの保存場所を選択します。 新しいファイルリスト 結果データを新規ファイルに保存します 結果ファイルで、フォルダと名前を計算データの保存先を選択します。
説明	結果リストに追加 再処理されたデータを既存の結果ファイルに追記します。 この追加情報は、再処理された分析結果と一緒に保存されます。オプションの21 CFRパート11コンプライアンスモジュールがインストールされている場合は、このエントリが必要です。ユーザー定義の記述はリストから選択できます。
入力を再計算	再処理対象の行を選択します。 all 結果リスト内のすべてのエントリを再処理します。 入力の選択 選択されたシーケンス行のみを再処理します。 ...をクリックし、入力の選択画面で再処理対象のシーケンス行をすべて選択します。




オプション／フィールド	説明
	現在選択しているメソッドの波長リスト内で、再処理対象のラインをすべて選択します。 全て選択 すべてのラインを選択します。選択解除 ラインリストのすべての選択を解除します。
一時的な変更	再処理用の一時的な変更（波長オフセット、削除マーカなど）は拡張子「.rep」のファイルとして保存されます。このデータは、同名の結果ファイルを読み込む際に自動的に読み込まれます。
QCチャートに追加	有効な場合、QCサンプルタイプの結果は、再処理時にQCチャートに登録されます。

再処理の実行

- ▶ メソッドパラメータまたはサブ MID 画面内で変更が加えられます。
- ▶  をクリックするか、**再計算**メニュー項目を選択します。再計算結果画面が表示されます。
- ▶ 開始データ（名称、変更されたサンプル情報データ、更新された結果プロット）、保存先、および出力ファイル名を指定します。
注記：サンプル情報の変更により再計算を行う場合は、**修正したサブ M 情報データ**オプションを有効にします。このオプションを有効にしない場合、これらの変更は再処理に反映されません。
- ▶ 再処理対象の行／ラインを選択します。
- ▶ **OK**をクリックして、再処理を開始します。保存先ファイルが指定されていない場合、確認メッセージ「永久ファイルへ保存せずにデータを再計算しますか？」が表示されます。


検量線標準の交換

既存の検量線標準は、後の時点で測定された標準に置き換えることができます。そのためには、以下の手順を実行します：

- ▶ メイン画面で、**シーケンス**または**シーケンス/結果**タブを開き、交換対象となる検量線標準の行を選択します。
- ▶  をクリックして、シーケンス行の測定を開始します。
- ▶ 開始画面で、結果を既存ファイルに追記するように設定します。その後、検量線標準の測定が開始されます。
- ▶  をクリックして再計算結果画面を開きます。
- ▶  をクリックして、入力**の選択**オプションを有効にし、同名の画面を開きます。
- ▶ 最後に測定した標準を選択し、矢印キーを使って交換対象の標準の位置まで移動します。
- ▶ 再処理する行をすべて選択します。計算に含める必要がなくなった旧標準を無効化します。
- ▶ **OK**をクリックして再計算結果画面に戻り、開始データ、保存先、および出力ファイル名を指定します。
- ▶ **OK**をクリックして、再処理を開始します。
✓ 選択した行に対して、データの再処理が実行されます。

検量線標準の個別ラインの交換

または、以下の手順で標準を置き換えることもできます：

- ▶ メイン画面で、**シーケンス**または**シーケンス/結果**タブを開き、交換対象となる検量線標準の行を選択します。
- ▶  をクリックして、シーケンス行の測定を開始します。
- ▶ 開始画面で、結果を既存ファイルに追記するように設定します。その後、検量線標準の測定が開始されます。


- ▶ 結果リストで、置き換えたい標準（検量線）を右クリックします。コンテキストメニューで「サンプル単一値」項目を選択します。
- ▶ サンプル単一値画面で、入力数値に置き換えるチェックボックスをオンにして、交換対象の標準の行番号を入力フィールドに入力します。
- ▶ 上記の手順に従って、再処理を開始します。
 - ✓ 選択した行に対して、データの再処理が実行されます。


これについては次のリンクも参照してください：

- 定義済みコメントの作成 [▶ 128]
- 品質管理の指定（ロット | QCS画面） [▶ 45]

6.9 分析の実行と並行して測定結果を評価する（オフラインモード）

測定が実行中は、同一のプログラムインスタンス内で結果を評価することはできません。ただし、測定が第1インスタンスで実行されている間でも、アプリケーションの第2インスタンスをオフラインモードで起動することは可能です。このモードでは、装置との通信は行われません。ただし、メソッドの作成や結果の読み込み・解析など、その他すべての機能は、第1インスタンスで測定を実行中でも並行して使用できます。

- ▶ **ファイル | オフラインプログラム開始**メニュー項目を使用して、第2のプログラムインスタンスでASpect PQをオフラインモードで起動します。
- ▶ **ファイル | 結果を開く**メニュー項目を使用して、現在実行中の測定の結果ファイルを開きます。
これまでに取得された測定結果が結果画面に読み込まれます。
- ▶ 現在の測定からの追加結果は、ツールバーのをクリックするか、**ビュー | 結果リストの更新**メニュー項目を使用することで読み込まれます。
 - ✓ 結果表示が更新されます。結果はさらに編集できます。

再処理  注記！ では、再計算された結果が新しいデータベースに保存されます。元の結果ファイルにはアクセスできません。

6.10 結果および分析進行状況をメイン画面に表示する

測定結果とシーケンスは、作業領域の背景にあるメイン画面に詳細に表示されます。メイン画面内の各タブの表示を閲覧することで、測定結果および統計分析の全体像を容易に把握できます。

以下のタブを選択可能です：

- シーケンス/結果（シーケンスタブと結果タブの内容）
- シーケンス（現在のシーケンスの表示）
- 結果（測定結果の表示）
- 概要（測定結果の概要）

結果画面のステータスバーには、現在の結果ファイルのファイル名が表示されます。

ASpect PQのメイン画面
(結果表示付き)

No.	Sample type	Name	Pos.	No.	Name	Line	Type	Ints.	SD(Ints.)	RSD%	Date	Time	Single value(Ints.)
1	Cal-Zero1		101	1	Kal-Hufl1	Al167.022		14	2	10.84	11.02.2025	12:51	15 14 12
2	Cal-Std1		102	2	AD96.152			129	72	55.67	11.02.2025	12:51	50 189 147
3	Cal-Std2		103	3	CG214.441			16	3	21.03	11.02.2025	12:51	12 18 17
4	Compute calib.			4	CG226.502			9	3	28.79	11.02.2025	12:51	12 9 7
5	Sample		101	5	Cr267.716			40	33	82.69	11.02.2025	12:51	35 10 76
6	Sample		102	6	Cu327.396			46	13	27.13	11.02.2025	12:51	35 44 40
7	Sample		103	7	Fa259.940			47	9	19.19	11.02.2025	12:51	58 43 41
8	Sample		104	8	Ni231.856			-198	34	16.98	11.02.2025	12:51	-184 -174 -237
9	Sample		105	9	Pb220.353			24	4	16.54	11.02.2025	12:51	19 26 26
10	Sample		106	10	Zn206.200			105	23	21.89	11.02.2025	12:51	87 98 131
11	Sample		107	11	Zn206.200			30	9	30.63	11.02.2025	12:51	23 41 27
12	Sample		108	12	Kal-Std.1	Al167.022		485	2	0.35	11.02.2025	12:51	486 483 486
13	Sample		109	13	AD96.152			3988	93	2.34	11.02.2025	12:51	4087 3976 3901
14	Sample		110	14	CG214.441			4614	8	0.17	11.02.2025	12:51	4606 4613 4622
15				15	CG226.502			5385	32	0.59	11.02.2025	12:51	5350 5396 5410
16				16	Cr267.716			8831	44	0.49	11.02.2025	12:51	8808 8804 8882
17				17	Cu327.396			3982	45	1.13	11.02.2025	12:51	3932 4020 3993
18				18	Fa259.940			3948	38	0.95	11.02.2025	12:51	3912 3946 3987
19				19	Ni231.856			3405	17	0.49	11.02.2025	12:51	3398 3424 3393
20				20	Pb220.353			345	3	1.00	11.02.2025	12:51	341 346 347
21				21	Zn213.856			5600	60	1.06	11.02.2025	12:51	5643 5626 5522
22				22	Zn206.200			3735	12	0.31	11.02.2025	12:51	3723 3736 3746
23				23	Kal-Std.2	Al167.022		2411	30	1.25	11.02.2025	12:51	2385 2405 2444
24				24	AD96.152			19736	283	1.43	11.02.2025	12:51	20039 19699 19478
25				25	CG214.441			22989	213	0.93	11.02.2025	12:51	22767 23009 23192
26				26	CG226.502			27072	106	0.39	11.02.2025	12:51	27083 26961 27172
27				27	Cr267.716			45323	225	0.50	11.02.2025	12:51	45469 45435 45064
28				28	Cu327.396			19450	104	0.53	11.02.2025	12:51	19481 19534 19234
29				29	Fa259.940			19575	159	0.81	11.02.2025	12:51	19757 19460 19508
30				30	Ni231.856			17495	192	1.10	11.02.2025	12:51	17445 17706 17333
31				31	Pb220.353			1632	14	0.83	11.02.2025	12:51	1640 1640 1617
32				32	Zn213.856			28289	153	0.54	11.02.2025	12:51	28197 28466 28205
33				33	Zn206.200			18746	250	1.33	11.02.2025	12:51	18522 18699 19016
34				34	Kal-Std.3	Al167.022		4820	32	0.66	11.02.2025	12:51	4786 4849 4824
35				35	AD96.152			38550	324	0.84	11.02.2025	12:51	38924 38349 38376
36				36	CG214.441			46168	53	0.11	11.02.2025	12:51	46216 46175 46111
37				37	CG226.502			54897	473	0.86	11.02.2025	12:51	55433 54716 54540
38				38	Cr267.716			891 98	460	0.57	11.07.2025	17:51	89047 89047 88804

6.10.1 シークス/結果タブ

シークス/結果タブには、シークステーブルと結果テーブルのデータが含まれます。

これについては次のリンクも参照してください：

[シークスタブ \[▶ 73\]](#)

[結果スタブ \[▶ 73\]](#)

6.10.2 シークスタブ

シークスタブには、現在アクティブなシーケンスがリスト表示されます。

このタブでは、実行中の分析の進行状況を確認できます。各サンプルおよび特殊機能は、表の第1列に以下のように表示されます：

アイコン	意味
-	未測定／未実行。
0	測定中。
+	測定済み／実行済み。

i 注記！ 測定後に、選択したサンプルを再測定できます。

そのためには、シーケンス内でサンプル行をあらかじめマーキングしておく必要があります。その後、ツールバーのをクリックします。

6.10.3 結果タブ

結果タブには、すべての測定結果と統計評価が表示されます。値は、見やすく整理された複数のテーブルに分割して表示されます。これらのテーブルのインデックスタブは、画面の下端に配置されています。

値は、サンプルの測定順に従って並べ替えられています。各サンプルごとに、分析された元素がリスト表示されます。

テーブル 強度/時間

このテーブルには、**Method | QCC**画面で設定されたメソッドに基づき、強度値および統計解析結果が表示されます。

列	説明
No.	分析シーケンスの番号
名前	サンプル、標準、またはQCサンプル/標準の名称
波長	元素ライン
種類	内部標準または分析対象
Ints.	サンプルの個別強度測定値の平均値
SD (Ints.)	標準偏差 (平均値統計)
RSD%	相対標準偏差 (平均値統計)
日付/時間	測定時刻
単一値 (Ints.)	強度測定 of 個別値

濃度1テーブル

濃度1テーブルには、ICP-OES装置に供給された状態でのサンプルの分析濃度が表示されます。使用される単位は、メソッドで設定された検量線単位です。

列	説明
No.	分析シーケンスの番号
名前	サンプル、標準、またはQCサンプル/標準の名称
波長	元素ライン
種類	内部標準または分析対象
単位	濃度単位
濃度1	サンプル中の分析対象濃度/標準中の分析対象濃度
SD1	濃度1の標準偏差 (平均値統計)
RSD%	濃度1の相対標準偏差 (平均値統計)
R	濃度1の範囲 (中央値統計)
R%	濃度1の相対範囲 (中央値統計)
Cf	信頼区間
DF	サンプルの予備希釈係数 オートサンプラーにセットされる前、またはオートサンプラーを使用しない場合にプラズマへ供給される前に、元のサンプルに適用された希釈係数。
残り	値を決定する際の留意事項
Ints.	繰り返し測定された個別強度値の平均値
SD(Ints.)	強度の標準偏差 (平均値統計)
日付/時間	測定時間
単一値(Ints.)	繰り返し測定における個別強度値

濃度2テーブル

濃度2テーブルには、原サンプルの濃度が示されています。濃度2の算出にあたっては、サンプル情報データが考慮されます：

- 予備希釈
- 固体サンプルの初期重量と溶液体積
- 他の単位への変換係数

列	説明
No.	分析シーケンスの番号
名前	サンプル、標準、またはQCサンプル/標準の名称
波長	元素ライン
種類	内部標準または分析対象
単位	濃度単位

列	説明
濃度	サンプル情報データを考慮した原サンプルの濃度
SD2	濃度2（平均値統計）における標準偏差
RSD%	濃度2（平均値統計）における相対標準偏差
Cf	濃度2の信頼区間
100% 正規化	濃度2（総濃度に対する百分率で正規化）
Ints.	測定された個別強度値の平均値
SD(Ints.)	強度の標準偏差（平均値統計）
R(Ints.)	強度の範囲（中央値統計）
日付/時間	測定時間
単一値(Ints.)	強度測定の個別値

QC結果テーブル

QC結果テーブルにはQCサンプルの結果が示されます：

- 濃度の目標値と実測値
- 回収率（ブランク値を除く全タイプ）
- 逸脱に対する対応処理（ブランク値を除く全タイプ）。

列	説明
No.	分析シーケンスの番号
名前	サンプル、標準、またはQCサンプル/標準の名称
波長	元素ライン
種類	内部標準または分析対象
QC（検量線関数用）	R2(adj.)または R 傾き バックグラウンド補正 バックグラウンド相当濃度
QC（QCサンプル用、QCブランクを除く）	濃度1 定格値 回収率 回収率 QCサンプルおよびQC標準では、濃度の回収率が算出されます。 QC-Stock、QC-Trend、QC-Matrixでは、スパイクングによって増加した濃度に対する回収率が算出されます。
QC（ブランク検出限界用）	SD ブランク測定の標準偏差 LOD 検出限界 LOQ 定量限界
残り	QCイベントに関するコメント（例：>cal.）
Ints.	測定された個別強度値の平均値
SD	強度の標準偏差（平均値統計）
日付/時間	測定時間
単一値(Ints.)	強度測定の個別値

エラーテーブル

測定中にエラーが発生した場合、該当する測定値はすべてのテーブルで赤色表示されます。エラーテーブルには、各測定エラーとそのエラー番号が記録されています。

単一値テーブル

単一値テーブルには、測定された個々の強度値および対応するバックグラウンド強度が含まれます。

サンプルIDテーブル

サンプルIDには、サンプル情報データが含まれています。

列	説明
No.	分析シーケンスの番号
名前	サンプル、標準、またはQCサンプル/標準の名称
波長	元素ライン
位置	オートサンプラー上のサンプル位置
Pre-DF	予備希釈係数 オートサンプラーにセットされる前、またはオートサンプラーを使用しない場合に分光器へ供給される前に、元のサンプルに適用された希釈係数。この係数は、原サンプルの濃度を算出するために必要です。
重量	初期重量 (g) サンプル調製時に溶解された元のサンプルの質量 (g)。この質量は、原サンプルの濃度 (濃度2) を算出するために必要です。
容量	初期重量を希釈するために使用した溶媒の体積 (mL)。この値は、原試料の濃度 (濃度2) を算出するために必要です。
トータル重量	秤量された総量 (サンプルおよび希釈液を含む) (単位タイプ液体、液体の比重のみ対象)
名前(2)	サンプル情報テーブルに含まれる追加のサンプル名
AS-DF	オートサンプラーの希釈係数。
ブランク補正	ブランク補正 わ ブランク値補正は実施されていません。 わ 原サンプルの濃度を算出する際には、シーケンス内で最後に測定されたブランク値が差し引かれます。

ユーザー定義テーブル

ユーザー定義テーブルでは、結果出力用のパラメータおよびその表示順を直接選択できます。

- ▶ テーブル右下の列の選択ボタンをクリックします。
- ▶ 列の選択画面上で、マウスでクリックして任意のパラメータを選択します。
- ▶ 表示順を変更するには、位置を変更したいパラメータを選択し、リスト内で⇄キーと⇅のキーを使って移動します。
- ▶ メイン画面に戻ると、結果が表示されます。テーブル列の幅は、ヘッダー部分の列境界にマウスポインターを移動すると (ポインターが両矢印に変化)、マウスボタンを押したままドラッグすることで希望の幅に変更できます。

注記：

列幅はこのビュー内に保持されます。メイン画面内の他のテーブルでは、列幅の変更は終了時にリセットされます。

これについては次のリンクも参照してください：

- 分析シーケンスのオプション [▶ 133]
- 値の表示に使用される記号の概要 [▶ 152]
- サンプル情報データ (サンプルID) [▶ 59]


6.10.4 概要タブ

分析結果は概要タブに集約されています。表示形式は複数のオプションから選択できます：

値	説明
濃度1	濃度1
濃度(RSD%)	濃度1 (相対標準偏差)
濃度2	濃度2
濃度2 (RSD%)	濃度2 (相対標準偏差)
Ints.	強度
Ints.(RSD%)	強度 (相対標準偏差)
Ints.(SD)	強度 (標準偏差)
LOD	検出限界
LOQ	定量限界
回収率(名目値)	回収率 (設定値)
R ² / 標準化係数	決定係数/再検量線係数
100% 正規化	濃度2 (総濃度に対する百分率で正規化)

各チェックボックスをオンにすると、以下のサンプルタイプが表示されます：

- サンプル
- QCサンプル
- Cal-Std
- その他

を使って印刷 概要画面を開きます。この画面で、現在の概要に表示されているデータの印刷を開始できます。

これについては次のリンクも参照してください：

 ASpect PQの印刷機能 [▶ 114]

6.11 サンプル単一値の表示と編集

サンプルの単一値を表示し、サンプル濃度の計算から単一値を除外できます。

- ▶ 結果テーブルの行を右クリックし、コンテキストメニューから**サンプル単一値**項目を選択します。
または、サンプル行を選択した後、**ビュー | サンプル単一値**メニューコマンドを選択します。

オートサンプラー調整画面
サンプル単一値

Sample single values - [Kal.-Std.4]

Cd214.441

No.	Ints.	Rem.
1	49212	
2	49319	
3	48608	

No.:

Type:

Name:

Date/Time:

Ints.(Mean):

SD:

RSD:

Replace with entry number:

[Edit spectra](#)

単一値表示 (テーブル)

サンプル単一値がこのテーブルに表示されます。

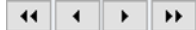
テーブル列	説明
No.	サンプル測定における単一値の数
Ints.	単一値の強度
濃度1	分析対象サンプル中の分析対象の濃度。
残り	なし この単一値はサンプル平均の計算に含まれます。 #MAN この値は手動でサンプル値の計算から除外されました。 #KOR この値は、Grubbs外れ値検定によりサンプル値の計算から自動的に除外されました。

サンプルデータ

フィールド	説明
No.	結果テーブル内の測定回数
種類	サンプルタイプ (サンプル、標準、QCサンプルタイプ)
名前	サンプル名
日付/時間	テーブルで選択された測定の日時
Ints.(平均)	すべての単一値の平均強度
SD	標準偏差 (平均値統計)。このパラメータは、測定に使用された統計メソッド (平均/中央値) に関係なく表示されます。
RSD	相対標準偏差 (平均値統計) このパラメータは、測定に使用された統計メソッド (平均/中央値) に関係なく表示されます。

サンプル単一値画面の追加
ボタンとオプション

オプション/ ボタン	説明
削除/動作	サンプル単一値を平均値計算から除外したり、計算で再度アクティブにしたりします
波長の編集	波長依存の線スペクトルを表示します
入力数値に 置き換える	検量線標準のみ対象

オプション/ ボタン	説明
	再処理時に、現在のサンプルは結果テーブル内の位置濃縮にあるサンプルと置き換えられます
	結果テーブルで、個別サンプルのラインを切り替えたり、サンプルを順に移動したりできます

サンプル単一値の除外

必要に応じて、単一値を手動でサンプル平均の計算から除外できます。

- ▶ そのためには、除外したい単一値をテーブル上でマークします。
- ▶ 再処理時にサンプル平均の計算から値を除外するには、削除をクリックします。
- ▶ 選択した単一値を再び計算に含めるには、動作をクリックします。

外れ値検定オプションを **i** 注記！有効にすると、単一値の中から外れ値を自動的に検出・除外することができます。

これについては次のリンクも参照してください：

[強度スペクトルの表示と編集 \[▶ 79\]](#)

6.12 強度スペクトルの表示と編集

スペクトルの編集画面における強度スペクトルの表示は、以下のタスクに使用されます：

- 分析ラインの主ピークを計算し、ラインファイルに保存する
- サンプルマトリックスを考慮したバックグラウンド補正を計算し、それをメソッドに転送する
- スペクトル補正を作成する
- その分析ラインに隣接するラインを識別します

結果画面では、各測定に対する強度スペクトルの表示および編集が可能です。

- ▶ 結果テーブルで該当するサンプル行をダブルクリックすると、スペクトルの編集画面が開きます。
または、結果テーブル内の該当行を右クリックし、コンテキストメニューからスペクトルの編集を選択します。サンプル行を選択し、ビュー|スペクトルの編集メニューコマンドを選択することでも操作できます。

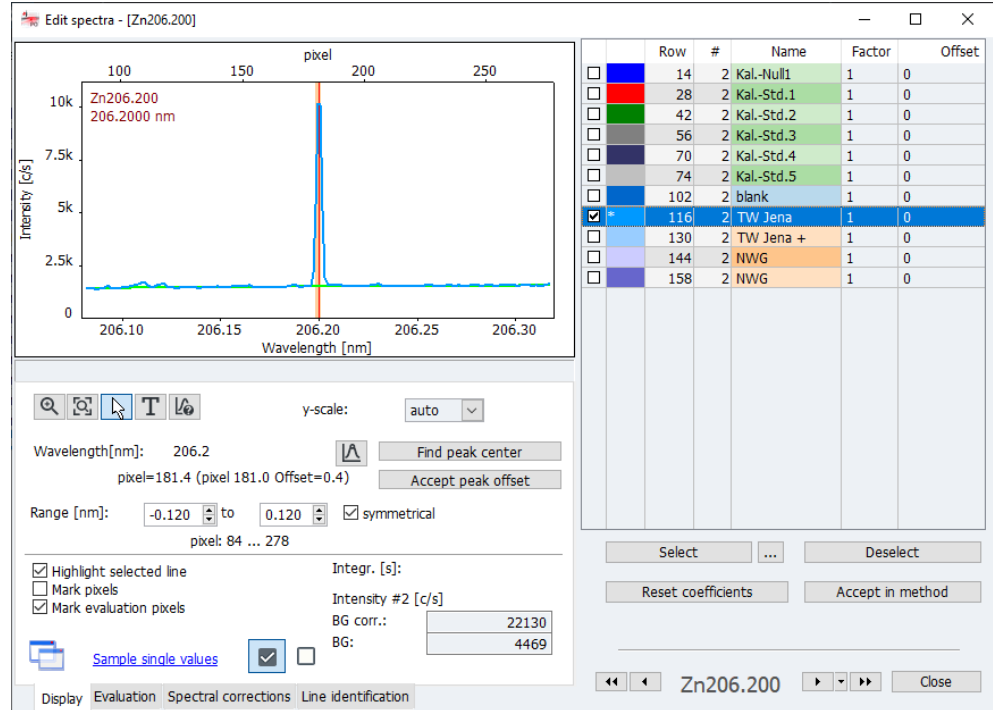
スペクトルの編集画面では、1つの分析ラインごとに、すべての測定サンプルとその単一値がリスト表示されます。個々の分析ラインを切り替えることもできます。

スペクトルの編集画面の左側には、選択されたサンプルの強度スペクトルグラフと、スペクトルの分析および編集用の4つのタブが表示されます。右側では、表示するサンプル単一値を概要から選択できます。

6.12.1 ピークの表示 - スペクトルの編集 / 表示画面

スペクトルの編集|表示画面には、サンプルスペクトルの概要が表示されます。ピーク位置を特定し、検出されたパラメータをライン/波長ファイルおよびメソッドに転送できます。

スペクトルの編集 | 表示画面



スペクトル／
サンプルリストの選択

右側のサンプルリストには、分析ラインの全サンプル単一値がリスト表示されます。

- ▶ グラフに表示したい単一値のチェックボックスをオンにします。選択されたサンプルのスペクトルは重ねて表示されます。テーブルの先頭にあるフィールドの色は、各スペクトルに割り当てられます。
- ▶ テーブルでマウス操作により選択された単一サンプル（青色バーで表示）は、画面左下の選択した波長を強調表示オプションが有効になっている場合、グラフ上で太字で強調表示されます。
- ▶ テーブル下部のボタンを使用して、サンプルリスト内のサンプル／繰り返し測定の表示や、スペクトルのグラフ表示対象（サンプルリスト内のチェックボックスで選択）をフィルタリングできます：
 - 選択の隣にあるをクリックします...
 - 選択画面で、以下の設定を行います：

オプション	説明
all	グラフィカル表示のために、メイン画面の結果リスト内のすべての行を選択し、表示用チェックボックスをオンにします。
からの	結果リスト内で、指定した開始行から終了行までのスペクトルのみを選択します。
繰り返し	サンプル単一値を選択します： all サンプル内のすべてのサンプル単一値を選択します。 参照番号（例：「2」） 選択されたサンプル単一値のみを選択します
選択した回のみ表示	有効にすると、選択された繰り返し測定のエントリのみがサンプルリストに表示されます。 無効にすると、すべての個別スペクトルが表示され、メイン画面で選択されたエントリ（すべて、または指定範囲）が読み込まれます。

- をクリックすると、選択上で設定したパラメータに基づいてスペクトルを表示および選択できます。

- を使用選択解除すると、単一値の表示用チェックボックスをすべてオフにできます。







係数とオフセットの入力



- ▶ 各スペクトルに対して、サンプルテーブルで係数および／またはオフセットを入力できます。この方法で操作されたスペクトルは、x軸方向に拡大／圧縮され、位置が移動します。
- ▶ 係数のリセットをクリックすると、係数とオフセットがリセットされ、スペクトルは元の状態で表示されます。

線スペクトルの表示

選択されたスペクトルは左側に表示されます。強度（カウント／秒）が波長（ナノメートル）に対してプロットされます。グラフの上端にピクセル割り当てが表示されます。分光計は、メインピークを測定ピクセル（例：180）にマッピングするように調整されます。主ピークのオフセットは分析ラインごとに補正する必要があります。



スペクトル表示用の各ボタンには、以下の機能があります：

オプション／ボタン	説明
	グラフィックズームを有効にします。クリック後、左マウスボタンを押したまま拡大したいスペクトル領域を選択します。
	ズーム後は、元の座標に戻します。
	信号プロットまたはスペクトルプロットで選択モードを有効にします。測定点は左マウスボタンで選択します。選択された測定点の値は、ボタンの下にある出力フィールドに表示されます。
	テキストモードを有効にします。左マウスボタンを押したまま、グラフにテキストを追加するための画面領域を選択できます。既存のテキストをダブルクリックすると、テキストを編集または削除できる画面が開きます。既存のテキストは、Ctrlキーとマウスの右ボタンを使って移動できます。
	ライン識別モードを有効にします。マウスでクリックまたはドラッグすることにより、選択した波長位置の元素ラインをラインデータベースから検索します。検出されたラインはグラフの下に表示されます。
y-軸	グラフのスケールリングを選択します： 自動 自動スケールリング：スペクトルは縦軸方向に最適な拡大率で表示されます。 値 手動スケールリング。縦軸の上限値はリストから選択する必要があります。
波長	分析ラインの波長を表示します。
	主ピークを手動で設定します。
ピーク中心の検出	ピークを自動で検出し、オフセットを補正します。
ピークオフセットの承認	ピークのオフセットをラインライブラリに保存します。このオフセットは、この時点から、この元素ラインの各測定に使用されます。
幅(nm)	分析ラインの下と上の波長範囲を選択します。この波長範囲は、バックグラウンド補正などのスペクトル分析に利用できます。 対照チェックボックスがオンの場合、指定波長を中心として上下の波長領域が対称になります。 対応するピクセル範囲は入力フィールドの下に表示されます。




オプション/ ボタン	説明
	メソッドで承認をクリックすると、選択されたラインの波長範囲設定が現在の測定メソッドに転送されます。この範囲は、計算のための動的バックグラウンド調整（または自動バックグラウンド補正）に使用されます。データは、評価タブ内のメソッド画面内でも変更されます。
選択した波長を強調表示	右側の概要で選択された単一スペクトルは、グラフ上で太線で強調表示されます。
ピクセルをマーク	ピクセルはグラフ上で円で示されます。
評価ピクセルをマーク	メインピークの中央の分析ピクセルは赤線で強調表示されます。分析に複数のピクセルを使用する場合、その範囲は薄い赤色で強調表示されます。
強度	バックグラウンド補正 バックグラウンド補正強度 バックグラウンド バックグラウンドの強度
サンプル単一値	サンプル単一値画面へのリンク
	このようにアイコンが強調表示されている場合、そのラインは測定方式で使用されます。 スペクトルの編集画面でメソッドを作成する際に、同様の操作で適切なラインを選択できます。
	メソッドではラインを使用しないでください。

主ピークの自動設定

メソッド作成時には、装置に起因するピークのオフセットや、ラインの重複などによる干渉によるオフセットを補正する必要があります。

- ▶ **ピーク中心の検出**をクリックします。主ピークの自動判定は、ほとんどのピークの検出に適しています。
代わりに、をクリックして、スペクトル上で主ピークを手動で選択することもできます。
- ▶ 必要に応じて結果を再計算し、新しいピークオフセットを評価できます。
結果画面に切り替え、をクリックして再処理を開始します。
- ▶ **ピークオフセットの承認**で検出されたピークオフセットを、装置のライン/波長ファイルに保存します。
✓ このデータは、その後の分析ラインの分析すべてに利用できます。

これについては次のリンクも参照してください：

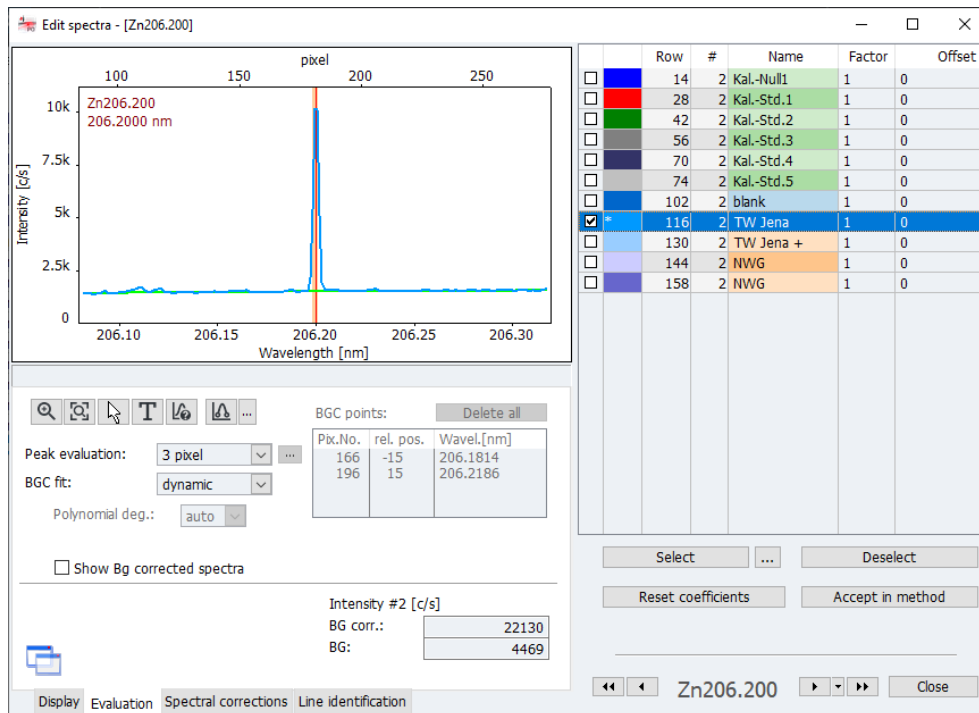
-  [分析ラインの指定 \(メソッド | 波長画面\) \[▶ 25\]](#)
-  [分析結果の再処理 \[▶ 69\]](#)
-  [ラインの検索 - スペクトルの編集 | 波長識別画面 \[▶ 87\]](#)

6.12.2 ピークの評価とバックグラウンド補正の決定 - スペクトルの編集 | 処理画面

分析ライン周辺の広いスペクトル範囲にわたって強度変動を引き起こす連続的なバックグラウンド放射は、バックグラウンド補正を使用して補正することができます。分析ラインの両側でピクセル（バックグラウンド補正ポイント）が選択され、それらのポイントを通る回帰線が計算され、その回帰グラフがバックグラウンド補正に使用されます。

バックグラウンド補正点を選択する静的メソッドでは、補正点は手動で設定され、回帰グラフの多項式次数は独立して決定されます。動的メソッドでは、回帰グラフがABCアルゴリズムによって自動的に計算されます（ABD=自動ベースライン補正）。


例えば、マトリクス要素とのラインの重なりによる不連続なバックグラウンド干渉は、補正スペクトルを用いることで最小限に抑えることができます。



ピーク分析とバックグラウンド補正のための元素概要

スペクトル表示用のボタン、各種値の出力、およびサンプル単一値選択については、[スペクトルの編集 | 表示画面のセクション](#)で説明されています。

オプション／ボタン	説明
ピーク評価	<p>ピーク評価のピクセル数を設定します。</p> <p>1 測定信号は、主ピークが位置するピクセルでのみ決定されます。</p> <p>値 > 1 測定信号が決定されるピクセル数。 各ピクセルの信号値が合計されます。したがって、結果は最大ピーク値を上回ります。主ピークを持つピクセルは、範囲の中心に位置します。</p> <p>高さ ピーク高さが評価に使用されます。</p> <p>ユーザ-定義 評価範囲はユーザーによって定義されます。これは、重複を評価するための推奨オプションです。</p> <p>... クリックすると、評価に使用されるリスト内のすべてのピクセルが有効になります。</p>
バックグラウンド補正フィット	<p>バックグラウンド補正の種類を選択します：</p> <p>自動 バックグラウンド補正は、数学的アルゴリズムを使って自動的に計算されます。このオプションには、他の設定は不要です。</p>

オプション/ ボタン	説明
	<p>static バックグラウンド補正点は、スペクトル内でマウスクリックにより手動で設定します。補正機能を使用するには、さらに多項式の次数を選択する必要があります。</p> <p>静的適応の場合、バックグラウンド補正点を設定または削除します</p> <p>スペクトルグラフ上にマウスカーソルを移動すると、十字カーソルが表示されます。...をクリックすると、機能リストが表示されます：</p> <p>バックグラウンド補正点を設定 スペクトル上の任意の波長に補正点をマウスクリックで設定します。マウスボタンを押したまま範囲上を移動すると、その範囲全体が選択されます。</p> <p>バックグラウンド補正点を削除 すでに選択されている点をクリックすると、対応するバックグラウンド補正点が削除されます。マウスでドラッグすることで、範囲を削除できます。</p> <p>全てのバックグラウンド補正点を削除 選択されたすべての補正点を削除します</p>
<p>バックグラウンド補正点 全削除</p>	<p>手動で設定したバックグラウンド補正点をすべて削除します</p>
<p>テーブル</p>	<p>手動で設定したバックグラウンド補正点を表示します</p>
<p>多項式次数</p>	<p>バックグラウンド補正グラフの回帰の多項式次数を選択します 自動オプションを使用すると、回帰が自動的に選択されます。</p>
<p>バックグラウンド補正 スペクトルの表示</p>	<p>バックグラウンド補正されたスペクトルを表示します 適応されたバックグラウンド（緑線）がサンプルスペクトルから差し引かれます。バックグラウンドはゼロラインに対応します。</p>

データをメソッドに転送する **OK** で承認をクリックして、選択したラインのピーク評価とバックグラウンド補正の設定を現在の測定メソッドに転送できます。データは、**処理**タブ内のメソッド画面内でも変更されます。

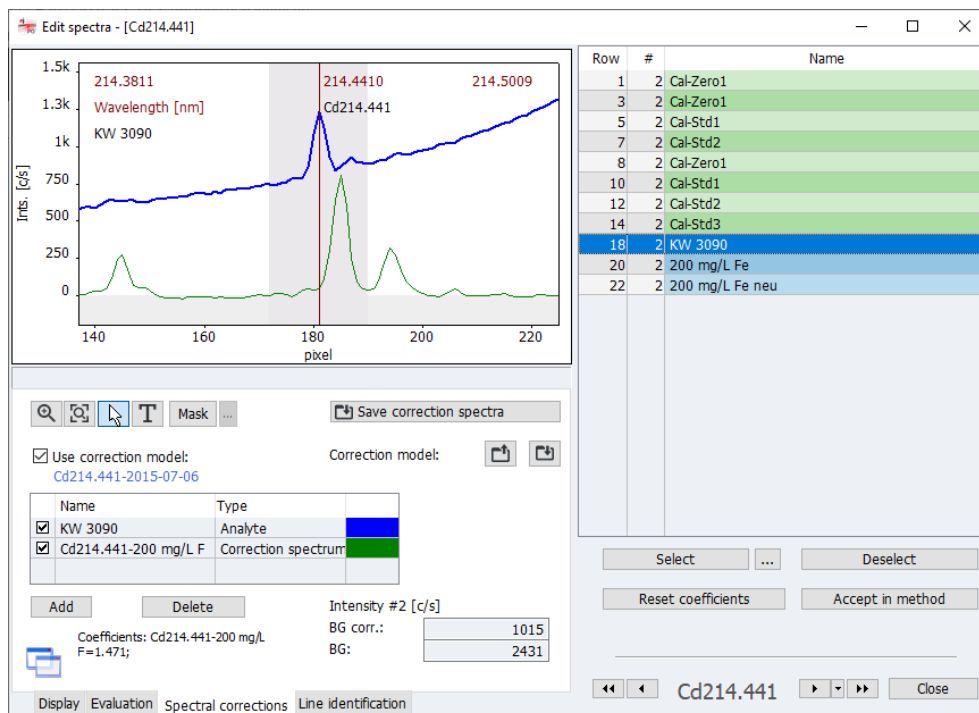
これについては次のリンクも参照してください：

- [スペクトル干渉の除去 - スペクトルの編集 | スペクトル補正画面 \[▶ 84\]](#)
- [ピークの表示 - スペクトルの編集 / 表示画面 \[▶ 79\]](#)

6.12.3 スペクトル干渉の除去 - スペクトルの編集 | スペクトル補正画面

ルーチン実行中、干渉がなく、および／またはバックグラウンド補正が容易なラインが分析対象として選択されます。これが不可能な場合は、補正スペクトルを使用して、不連続な干渉（例：1つ以上のマトリクス成分との線重なりによって生じる干渉）を除去できます。マトリクスの補正スペクトルは、それぞれモデル内で統合され、その後メソッド内のスペクトル線にリンクできます。

個別の補正スペクトルの保存および補正モデルの統合に関する機能は、**スペクトルの編集 | スペクトル補正画面**で利用できます。



オプション/
ボタン

説明

補正スペクトルの保存

マトリックスの純成分のスペクトルを、補正スペクトルとして保存します

補正モデルを使用

有効にすると、補正モデルが分析対象に適用されます

補正モデル



現在の補正モデルを保存します



既存の補正モデルを読み込みます

ラインテーブルには、モデルで使用される分析対象と補正スペクトルがリスト表示されます。チェックボックスをオンにすると、個々のスペクトルが図に表示されます。追加を使用すると、補正モデルにさらにスペクトルを追加できます。削除を使用すると、マウスで選択したスペクトルがモデルから削除されます。

ラインテーブル内の **i** 注記！ すべての補正スペクトルは、それらの表示のチェックボックスがオンになっているかどうかに関係なく、モデル内の計算に使用されます。補正スペクトルを除外するには、削除する必要があります。

6.12.3.1 ピーク補正用の補正モデルを作成する

分析ラインの補正モデルを作成して使用するには、以下のステップを実行する必要があります：

1. 可能性のある干渉を識別します。
2. 補正スペクトルを作成して保存します。
3. 補正モデルを作成します。
4. 分析ラインのパラメータを補正モデルと一緒にメソッドに転送します。

ステップ1：干渉を識別する

- ▶ 分析ラインを含むメソッドを作成します。

ステップ2：補正
スペクトルを測定し、保存
する

- ▶ マトリックス中の分析対象を測定し、スペクトルを **スペクトルの編集** 画面に読み込みます（メイン画面でサンプル行をダブルクリックします）。
 - ▶ **スペクトルの編集 | 波長識別** 画面で、考えられる干渉線を特定します。
 - ▶ スペクトル重複を引き起こす干渉性マトリックス成分の測定をシーケンスに追加し、これらの成分を単元素溶液で測定します。
- 注記：
マトリックス成分の濃度は、サンプル中の濃度と一致している必要はありませんが、スペクトルに明確な強度が現れる程度には十分である必要があります。正確なスペクトル補正を行うには、各成分を純物質として1種類ずつ測定してください。

ステップ3：補正モデルを
作成する

- ▶ マトリックス成分のスペクトルを **スペクトルの編集 | スペクトル補正** 画面に読み込みます。
- ▶ **補正スペクトルの保存** をクリックします。
 - ✓ 補正スペクトルを保存するためのデータベース画面が開きます。
- ▶ 名前を入力し、**保存** で処理を完了します。
- ▶ 他のマトリックス成分のスペクトルも同様の手順で保存します。
- ▶ マトリックス中の分析対象のスペクトルを再度読み込みます。
- ▶ **補正モデル** を使用チェックボックスをオンにします。
- ▶ **追加** をクリックして、すでに保存されている補正スペクトルの選択画面を開きます。
- ▶ リストから補正スペクトルを選択し、**読み込み** をクリックします。
- ▶ すべての補正スペクトルを同様の手順で追加します。
- ▶ スペクトル表示画面で、得られたサンプルスペクトルに重複が残っていないかを確認します。
- ▶ **マスクボタン** を使用すると、マウスボタンを押したまま範囲を選択することで、補正モデルの計算に含めない領域をマスキングできます。初期設定で、分析ラインの領域（±9ピクセル）はあらかじめマスクされています。純物質を用いた記録が行えなかった場合、混入物がさまざまな比率で存在する可能性があるため、追加の範囲をマスキングする必要がある場合があります。
- ▶ 補正モデルを保存するには、**OK** をクリックして、モデル名を指定します。**保存** をクリックして処理を完了します。

ステップ4：分析ラインを
補正モデルと一緒に
メソッドに転送します

- ▶ **メソッド** で承認を使用して、補正モデルを含む分析ラインのパラメータを現在のメソッドに転送します。
 - ✓ **メソッド | 評価** 画面では、補正列でLSM（最小二乗モデル）として分析ラインが識別されます。

メソッドを保存すると、今後の測定は作成された補正モデルを含むこのメソッドで実行されます。すでに完了した測定は、新しいメソッドバージョンで再処理できるため、再測定の必要はありません。

スペクトル補正モデルおよび補正スペクトルは、結果データとともに保存されます。結果データが補正モデルを保存していない別のコンピューターに転送された場合、問い合わせの後に補正モデルがインポートされます。

6.12.3.2 ラインの検索 - スペクトルの編集 | 波長識別画面

スペクトルの編集 | 波長識別画面で、ラインデータベースに基づいて測定スペクトル中のラインを識別できます。

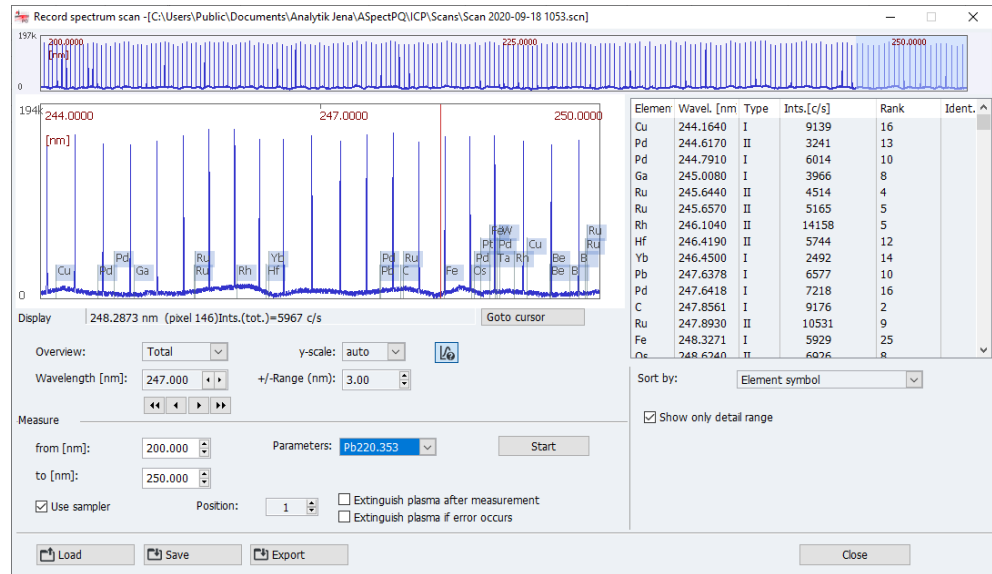


スペクトルの下部にある表には、スペクトル領域で識別されたすべてのラインが表示されます。

- ▶ ボタンを有効にします。
- ▶ スペクトル上で関心のあるピークをクリックします。
最も近いラインがスペクトル下部に表示され、テーブル内でハイライトされます。
- ▶ 逆に、テーブル内でラインを選択すると、そのラインがスペクトル上に表示されます。

6.13 概要スペクトルを記録する


ソフト開発 | オペレーションメニュー項目を使用すると、指定した波長範囲で概要スペクトルを記録できます。



- ▶ **メソッド開発 | オートサンプラー**メニュー項目を選択します。
- ▶ 測定領域で、希望する波長範囲を入力します (からの)。
- ▶ メソッドを有効化すると、スペクトルスキャンに使用するメソッド内のラインのパラメータを選択できます。メソッドが読み込まれていない場合は、あらかじめ設定されたパラメータが使用されます。
- ▶ サンプルを準備します。オートサンプラーを使用する場合は、**サンプラー**を使用オプションを有効にし、サンプルの位置を選択します。
- ▶ **スタート**をクリックしてスキャンを開始します。
スキャンが完了すると、概要スペクトルが画面上部に表示されます。
- ▶ 概要スペクトルの任意の領域をクリックすると、選択したラインの詳細がグラフィックに表示されます。詳細領域の幅は、**+/-範囲**で設定します。
- ▶ 検出されたラインは、右側のテーブルに表示されます。 **詳細な範囲のみ表示**オプションを使用すると、表示を現在のスペクトル範囲に限定できます。

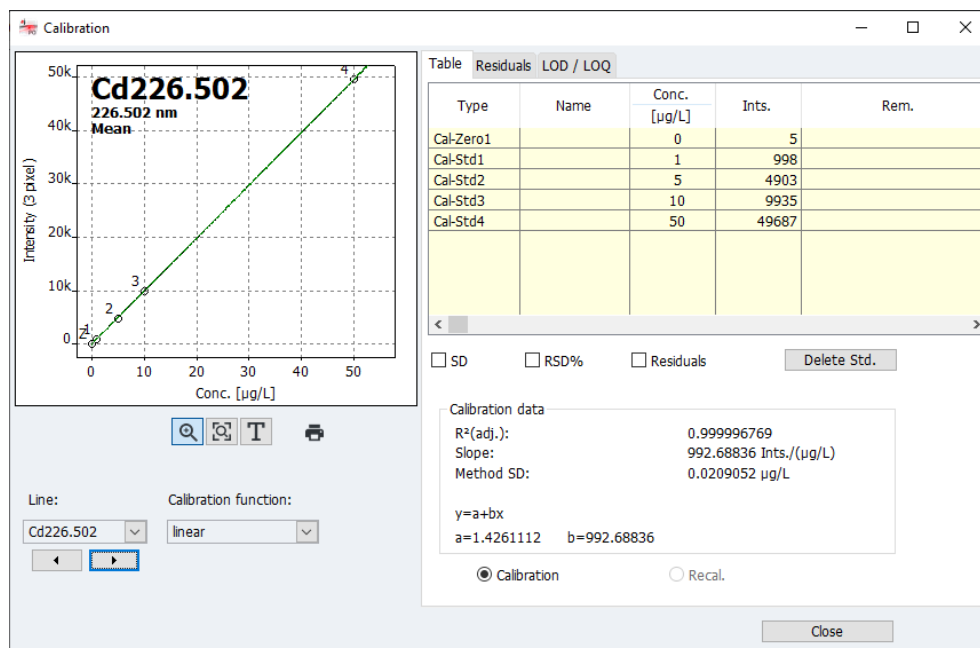
7 検量線

検量線は、シーケンスで選択されたオプションに従って測定中に実行されます。測定後に、検量曲線および関数を表示・編集できます。

- ▶ アイコンバーのをクリックして検量線画面を開きます。
または、検量線計算シーケンス行のいずれかをダブルクリックするか、**メソッド開発 | 検量線**メニュー項目を選択します。

検量線画面

検量線画面には、グラフパラメータを考慮して計算された検量曲線が表示されます。



この画面には、シーケンスで定義された各分析ラインについて、以下の情報が含まれます：

- 検量曲線のグラフィック表示
- 検量線テーブル
- パラメータ
- 残差
- 検出限界 (LOD) と定量限界 (LOQ)

ラインの選択

波長リストボックスで、検量線表示に使用する分析ラインを選択します。リストの下にある矢印キーを使用して、個々のラインの表示を切り替えます。

検量線関数の選択

検量線関数リストで、検量曲線に使用する回帰計算方式を選択します：

検量線オプション	説明
線形	検量線関数の線形的進行 $y = a + bx$
nonlin.2次式	有理関数で記述された検量線関数の非線形的進行 $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$
nonlin. 有理関数	2次関数で記述された検量線関数の非線形的進行 $y = a + bx + cx^2$

検量線オプション	説明
自動的に	検量線では、線形関数と非線形関数の両方が計算されます。これに続いてマンデル検定が実行され、残差の二乗和が比較されます。非線形関数の合計が線形関数の合計よりも有意に低い場合、非線形検量曲線が選択されます。それ以外の場合は、線形検量曲線が使用されます。非線形関数は、オプション 検量線画面で選択します。デフォルト設定として、分割比率関数が提供されています。

これについては次のリンクも参照してください：

■ 検量線とブランク補正の一般設定 [▶ 134]

7.1 検量曲線のグラフィック表示

グラフには、測定点、計算された検量曲線、残差が表示されます。測定点に表示されている番号は、表タブで使用されている番号と対応しています。検量線のゼロ点はZ（ゼロ）で識別されています。

色分け

測定点は以下のようにマーキングされています：

色	意味
黒	通常の測定点
明るい灰色	削除された点／外れ値（計算には含まれない）
青	外れ値の疑いがある点（計算には含まれる）



曲線も色分けされて表示されます：

グラフの色	意味
黒	有効な検量線範囲内の検量曲線
青	有効な検量線範囲外の検量曲線
緑	有効な検量線範囲内の予測範囲（上下限）
明るい灰色	有効な検量線範囲外の予測範囲（上下限）

予測範囲または信頼範囲に関する注記


予測範囲の位置は、選択された統計的信頼度に応じて決定されます。それは検量線の「品質」の測定であり、また、分析サンプルの測定の統計的信頼度も最終的にはこれに依存します。さらに、予測範囲は検量線点の中から外れ値の疑いがある点を特定するためにも使用されます。統計的信頼度は **メット | 統計画面** で選択します。 **オプション| 検量線画面** で、予測範囲または信頼範囲の表示を選択できます。

検量曲線の拡大

 をクリックした後、マウスボタンを押したままにすると、グラフィカル領域を拡大できます。 をクリックすると、拡大表示が元に戻ります。

備考の挿入

グラフ内に備考用のテキストフィールドを挿入できます。

- ▶  をクリックします。
- ▶ マウスの左ボタンを押したまま、テキストフィールドの枠をグラフ上にドラッグします。
- ▶ 入力画面が開いたら、**フォント** をクリックしてフォントを選択します。
- ▶ テキストを入力し、**OK** をクリックします。
 - ✓ テキストがグラフ上に表示されます。

検量曲線の印刷

 をクリックすると、検量曲線と検量線データがプリンタに出力されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- 📖 検量線とブランク補正の一般設定 [▶ 134]
- 📖 統計解析の指定 (メソッド | 統計画面) [▶ 43]
- 📖 分析結果の印刷 [▶ 114]

7.2 検量線結果の表示

検量線の結果は、検量線画面の右側にある3つのタブに表示されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- 📖 検量線とブランク補正の一般設定 [▶ 134]

7.2.1 検量線 - 表タブ

検量線画面では、標準の値ペア（計算濃度／測定値）が表タブに表示されます。

標準を複数回測定し、かつメソッドで統計解析オプションが設定されている場合は、対応するチェックボックスをオンにすることで、標準偏差 (SD) および相対標準偏差 (RSD%)、または範囲 (R) および相対範囲 (R%) を追加で出力できます。

計算から特定の検量線標準を除外するには、テーブル内で該当する標準をマウスクリックで選択し、標準の削除をクリックします。

測定値は削除済みとしてマークされるだけで、いつでも再有効化できます。

測定値テーブルの下には、有意の計算が可能な場合に限り、検量線データが表示されます：

パラメータ	意味
R2(adj.)	決定係数
傾き	検量曲線の傾き
メソッド SD	メソッド標準偏差
バックグラウンド補正	BEC値（バックグラウンド等価濃度）は、バックグラウンドと同等の強度を生成する分析対象の濃度です。値が低いほど、感度は高くなります。

7.2.2 検量線 - 残差タブ

検量線画面の残差タブでは、検量線点の計算された検量曲線からの偏差および予測帯の限界がグラフ上に表示されます。

7.2.3 検量線 - LOD/LOQタブ

検量線画面のLOD/LOQタブには、ICP-OES装置の検出限界および定量限界が表示されます。これらの限界値は、現在の検量線結果に基づいて計算されます。この領域では、装置がすでに検量線化されている場合に限り、ブランク法および検量曲線メソッドの値が表示されます。

パラメータ	意味
検出限界	所定の統計的信頼度で検出可能な、分析対象元素の重量（濃度）。

パラメータ	意味
定量下限	所定の信頼水準で定量可能な、分析対象元素の最小重量（濃度）。
SDブランク (DL)	ブランク値メソッドにのみ適用 ブランク (IDLサンプル) の測定標準偏差

検量曲線メソッド

計算する をクリックすると、検出限界および定量限界の計算が開始されます。検量曲線メソッドによる検出限界および定量限界の算出には、線形の検量曲線が必要です。検量線は、低濃度域で実施する必要があります。計算結果にとって重要な検量線パラメータには、以下の項目が含まれます：

- 検量線点の数と位置
- 標準ごとの繰り返し測定の回数
- 回帰の品質
- 検量曲線の傾き
- 相対的な統計的确实性（信頼水準）

ブランクメソッド

検量曲線メソッドで得られた値は、低濃度域で検量線が実施された場合にのみ有効と見なされます。

サンプル測定内でブランクの標準偏差が算出されます。このため、測定シーケンスにはブランク (QCブランクDL) の測定が含まれます。

ブランクメソッドでは、以下の計算規則が使用されます：

- ブランクは11回測定します。
- 得られた値から、ブランクの絶対標準偏差 (SD) が算出されます。
- 検出限界および定量限界には、以下の計算式が適用されます：

検出限界 (LOD)

$$LOD = 3 * SD / (\text{検量曲線の傾き})$$

定量限界 (LOQ)

$$LOQ = 9 * SD / (\text{検量曲線の傾き})$$

これについては次のリンクも参照してください：

■ シーケンス内の測定とアクションの指定 [▶ 55]

7.2.4 検量線 – LOD/LOQタブ

検量線画面のLOD/LOQタブには、ICP-OES装置の検出限界および定量限界が表示されます。これらの限界値は、現在の検量線結果に基づいて計算されます。この領域では、装置がすでに検量線化されている場合に限り、ブランク法および検量曲線メソッドの値が表示されます。

パラメータ	意味
検出限界	所定の統計的信頼度で検出可能な、分析対象元素の重量（濃度）。
定量下限	所定の信頼水準で定量可能な、分析対象元素の最小重量（濃度）。
SDブランク (DL)	ブランク値メソッドにのみ適用 ブランク (IDLサンプル) の測定標準偏差

検量曲線メソッド

計算する をクリックすると、検出限界および定量限界の計算が開始されます。検量曲線メソッドによる検出限界および定量限界の算出には、線形の検量曲線が必要です。検量線は、低濃度域で実施する必要があります。計算結果にとって重要な検量線パラメータには、以下の項目が含まれます：

- 検量線点の数と位置

- 標準ごとの繰り返し測定回数
- 回帰の品質
- 検量線の傾き
- 相対的な統計的确实性（信頼水準）

検量線メソッドで得られた値は、低濃度域で検量線が実施された場合にのみ有効と見なされます。

ブランクメソッド

サンプル測定内でブランクの標準偏差が算出されます。このため、測定シーケンスにはブランク（QCブランクDL）の測定が含まれます。

ブランクメソッドでは、以下の計算規則が使用されます：

- ブランクは11回測定します。
- 得られた値から、ブランクの絶対標準偏差（SD）が算出されます。
- 検出限界および定量限界には、以下の計算式が適用されます：

検出限界（LOD）

$$\text{LOD} = 3 * \text{SD} / (\text{検量線の傾き})$$

定量限界（LOQ）

$$\text{LOQ} = 9 * \text{SD} / (\text{検量線の傾き})$$

これについては次のリンクも参照してください：

📖 シーケンス内の測定とアクションの指定 [▶ 55]


7.3 検量線の編集

既存の検量線は、**検量線画面**で以下の手順により編集できます：

- 使用中の検量線関数の変更
- 標準の有効化／無効化
- 測定済み標準の置換

検量線関数を変更するには、**検量線関数リストボックス**から新しいモデルを選択します。

計算から標準を除外するには、**表タブ**で該当する標準を選択し、**標準の削除**をクリックします。測定値は削除済みとしてマークされるだけで、いつでも再有効化できます。

変更された検量線パラメータは、結果の再処理時に適用されます。これを行うには、**再計算結果**メニュー項目を選択するか、ツールバーのアイコンをクリックします。

標準は再測定することもでき、結果を再処理できます。

これについては次のリンクも参照してください：

📖 分析結果の再処理 [▶ 69]


8 品質管理

品質管理機能は、より長い期間にわたってメソッドの測定結果をモニターするのに役立ちます。そのため、メソッドごとに複数の種類のQCサンプルが定義され、シーケンスに組み込まれます。

評価結果はQCチャート（QCチャート）に表示され、メソッドとともに保存されます。QCチャートはメソッドを読みだすことに利用でき、次の測定開始時に更新されます。

QCサンプルの種類およびそのパラメータは、**メソッド | QCS画面**で定義され、測定シーケンス内で統合されます。

読み込まれている（アクティブな）メソッドのQCチャートは、**QC画面**で表示できます。同じ画面で、QCチャートのパラメータおよび設定も定義できます。

- ▶ **QC画面を開くには、アイコンバーのをクリックするか、メソッド 開発 | QCメニュー項目を選択します。**

これについては次のリンクも参照してください：

- [品質管理の指定（メソッド | QCS画面） \[▶ 45\]](#)
- [シーケンス内の測定とアクションの指定 \[▶ 55\]](#)

8.1 QCチャートのパラメータ

QCチャートの種類と表示は、**QC / QCチャートパラメータ画面**で定義します。

QC | QCチャートパラメータ画面

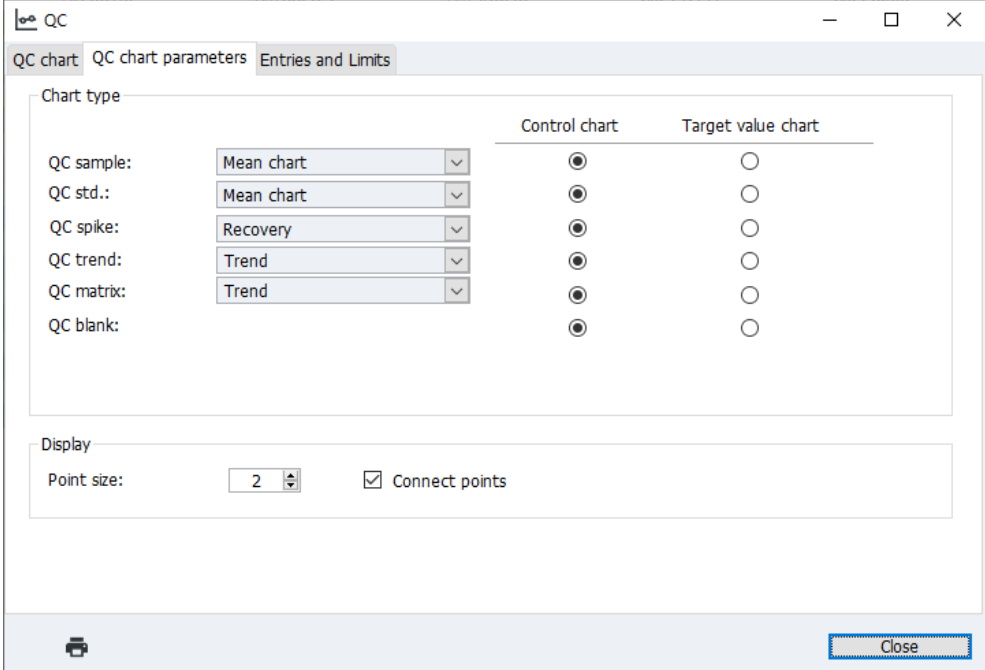


Chart type		Control chart	Target value chart
QC sample:	Mean chart	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC std.:	Mean chart	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC spike:	Recovery	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC trend:	Trend	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC matrix:	Trend	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC blank:		<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>

Display

Point size: 2 Connect points

Close

QCサンプルのタイプと評価 各QCサンプルタイプに対して、以下の評価を選択できます：

QCサンプルのタイプ	QC評価タイプ
QCサンプル	平均チャート
QC std.	平均チャート(正規化) - ターゲット値チャートには使用されない 回収率
QCストック	回収率
QCトレンド	トレンド
QCマトリックス	レンジ - ターゲット値チャートには使用されない 正確さ - ターゲット値チャートには使用されない
QCブランク	選択なし。ブランクの強度が表示される。

コントロールチャートタイプ（プロセス管理チャート）では、ターゲットパラメータおよび管理限界（K）・警告限界（W）は、前期間の値の平均値とばらつきから算出されます。目標値チャートタイプでは、ターゲット値および除外限界は、品質管理サンプルの期待値と設定された限界値に基づいて決定されます。

表示

このフィールドでは、グラフに使用するポイントサイズと、ポイント同士を線で接続するかどうかを選択できます。

オプション	説明
ポイントサイズ	各ポイントは円として表示されます。円を大きく表示するには、ポイントサイズを大きく設定します。
ポイントを接続	グラフ上のポイント同士を線で接続します。

8.2 QCチャートの項目と限界値

QCチャートの内容は、QC入力と限界値画面で定義されており、項目の記録頻度に関して、各分析室の要件に応じて調整できます。

オプション	説明
入力図	全数値 実施された各QCチェックを入力します。 1数値/日 その日の最後のQCチェックのみを入力します。 2数値/日 その日の最初と最後のQCチェックのみを入力します。 注記 「1日」とはPCの時計に基づく暦日を指します。つまり、同一日の間に記録されたQCチャートのエントリは、新しいQC値によって上書きされます。ただし、新しい日付になると、新たなエントリが生成されます。
周期数	コントロールチャートのみ： 準備期間とは、管理限界（C）およびエラー限界（E）の算出に使用されるQCチャートのエントリ数を指します。準備期間には常に過去のチャートのエントリが含まれます。「0」に設定した場合（準備期間なし）、入力されたすべてのQCデータが管理限界およびエラー限界の算出に使用されます。
目標値チャートの除外制限	目標値チャートのみ： 除外限界は、品質管理試料に対して指定された限界値に ファクター （初期値は1）を乗じて算出されます。

チャートの更新

チャートがほぼ満杯になった場合の処理手順を定義します。このために、リストからいずれかのオプションを選択します：

オプション	説明
周期設定の承認、残りを削除	コントロールチャートのみ： 旧チャートの準備期間を新しいチャートに適用し、残存する値を削除します。
最後の数値->新しい周期設定	コントロールチャートのみ： 旧チャートのうち、最後に測定された値が新しいチャートの準備期間として使用され、それ以外の値はチャートから削除されます。新たに作成された準備期間に基づいて、新しい測定値が評価されます。
全て削除、新しい周期設定	すべての値が削除されます。 コントロールチャートのみ： 新しい測定値は、まず準備期間を満たすために使用されます。


プルダウンをクリックすると、上記で選択したオプションに従ってQCチャートが置き換えられます。

8.3 QCチャートの表示

QCチャートはQC|QCチャート画面に表示されます。メソッドで定義されたQCサンプルタイプごとに、またメソッドで指定された元素ラインごとに、個別のチャートが生成されます。

オプション/ビュー

オプション/ビュー	説明
コントロールサンプル	ここで、表示するQCサンプルタイプを選択します。
波長	ここで、表示する元素ラインを選択します。
表示値	表示されている値の件数、および最初と最後の値の日付が表示されます。

オプション/ ビュー	説明
保存値	現在のQCチャートに記録されている全エントリ数と、その最初および最後の値の日付が表示されます。
x(最小値)/ x(最大値)	グラフに表示する開始エントリとエントリ数を選択します。
y-軸	入力 Y軸の最大値は、最高値に基づいてスケーリングされます。 コントロールリミット Y軸の最大値は、管理限界または除外限界の範囲に基づいてスケーリングされます。
	QCグラフを、英数字データおよび測定値を含めて印刷します。

グラフ領域

色/マーク	意味
黄色の領域	管理チャートのみ：準備期間
灰色の水平線	管理チャートのみ：準備期間から算出された平均値を示します。 ターゲット値チャートのみ：ターゲット値
赤色の水平線	管理チャートのみ：準備期間に基づいて算出された管理限界の上限値および下限値 (C) (3シグマ) ターゲット値チャートのみ：QCサンプルの限界に基づく除外上限値および除外下限値 (EU、EL)
緑色の水平線	管理チャートのみ：計算された警告限界 (W ; 2シグマ)。
小さい円	測定点 (黒色：有効なエントリ、灰色：無効なエントリ)

グラフ上の測定値をクリックすると、その測定値に関する以下の情報が表示される画面が開きます。

オプション	説明
数	QC系列内の測定値番号
値	測定値 (QCチャートの表示タイプに従って変換済み)
日付/ 時間	測定時間
オペレーター	測定時にログインしていたユーザー
バージョン	使用されたメソッドのバージョン
入力の削除/ 入力を有効	測定値を削除対象として選択するか、再有効化します
コメントの追加	測定点に対するコメントを入力します (例：削除理由)


9 分光器とアクセサリーのコントロールとモニター

9.1 分光器

分光器画面は、分光器の機能テストとパラメータ調整のために使用されます。

以下のデータの調整または表示、および以下のアクションを実行できます：

- 装置データ
- 検出器の読み出しパラメータを表示します
- 装置の最適化を目的とした測定を開始します

分光器画面を、をクリックするか、**Word 開発 | 分光器メニュー**項目を使用して開きます。

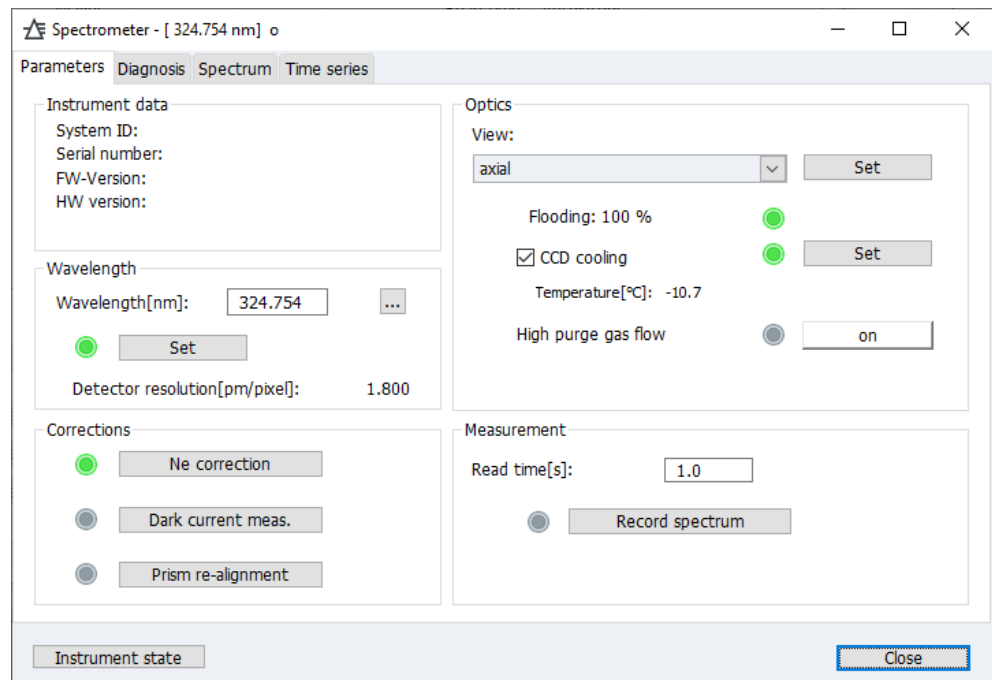
装置の状態をクリックすると、安全センサーからのメッセージ出力をグラフで表示します。プラズマに問題が発生した場合は、ここでセンサーのエラーメッセージを確認できます。

9.1.1 分光器のパラメータ設定および機能テスト

分光器 | パラメータ画面では、以下の機能を利用できます：

- 装置の基本機能をチェックします
- 光学系の自動補正を開始します
- 選択した波長でテスト測定を開始します

分光器 | パラメータ画面の要素



パラメータ	説明
装置データ	装置データグループには、装置の保守に必要な各種サービス番号およびバージョン情報が表示されます。
波長	波長フィールドには、選択された波長が表示されます。 波長は、 元素/波長の選択 画面内の...をクリックすることで調整できます。 設定をクリックすると、分光器が選択された波長に移動します。
Ne補正	検出器の波長校正を実行します

パラメータ	説明
暗電流測定	ダーク信号を補正します
プリズム再調整	プリズムを調整して、分散次数の検出器上でのマッピングを最適化します（エネルギー最大点に合わせて調整）。
ビュー	リストボックスでプラズマのモニタリング方向を選択します（ アキシャル - 上方から、 ラジアル - 側方から）
CCD冷却	<p>チェックボックスがオンの場合、設定を使用してCCD検出器の冷却を開始できます。チェックボックスがオフの場合、冷却は停止します。</p> <p>CCDの冷却は、プラズマの点火と同時に自動的に開始されます。手動制御が必要なのは、自動制御中にエラーメッセージが表示された場合など、例外的な場合に限られます。</p> <p>操作温度フィールドには、CCD検出器の現在の温度が表示されます。</p>
ハイパージガスフロー測定	<p>分光器を高流量のアルゴンでパージします</p> <p>選択した波長で測定を開始するには、測定で測定全体の時間を入力する必要があります。</p> <p>スペクトルの登録をクリックして、測定を開始します。測定には、プラズマのメイン設定が使用されます。</p> <p>サンプルは手動で供給する必要があります。オートサンプラーは使用されません。</p>

選択した分析ラインでのスペクトルピークの測定

分光器 | **パラメータ**画面で、選択した分析ラインでのテスト測定を開始します。

- ▶ プラズマを点火します。
- ▶ 波長領域で、**...**を使用して、**元素/波長の選択画面**を開き、目的のラインを設定します。
または、**波長入力フィールド**に値を直接入力することもできます。
- ▶ **設定**を使用して、分光器を目的の波長に移動させます。
設定が正常に完了すると、設定項目の横にあるマーカーが緑色に変わります。
- ▶ **暗電流測定**を使用して、暗電流測定を開始します。
- ▶ 次の測定に向けて、観測方向として**アキシャル**または**ラジアル**を選択します。
- ▶ **読み取り時間**を設定します。
- ▶ サンプルを準備し、吸引チューブをサンプル中に浸します。
- ▶ サンプルのネブライゼーションが安定するまで、所定の時間待機します。**スペクトルの登録**で測定を開始します。
✓ 測定が実行され、測定結果が**スペクトルの編集画面**に表示されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- 📖 [ラインテーブルへの分析ラインの挿入 \[▶ 27\]](#)
- 📖 [強度スペクトルの表示と編集 \[▶ 79\]](#)

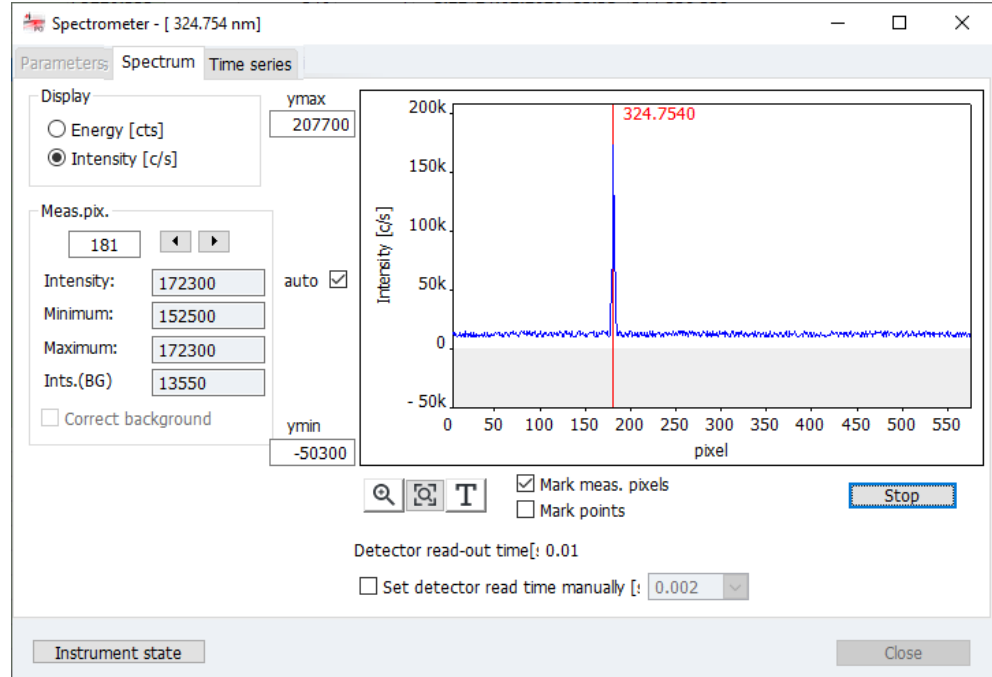
9.1.2 装置パラメータの診断

サービス関連のパラメータは、**分光器 | 診断画面**に表示されます。

9.1.3 連続ピーク測定の実行

分光器 | スペクトル画面で、指定した波長で連続測定を開始します。連続測定は、サービス時の装置最適化に使用されます。

グラフ表示とデジタル分析



オプション	説明
表示	<p>スペクトル表示用のオプション。</p> <p>エネルギー エネルギースペクトルの表示、測定単位：cts（カウント） 可能な限りノイズの少ない測定結果を得るため、検出器の積算時間は、エネルギーの最大値が約30000 ctsになるように選択されます。</p> <p>強度 エネルギーの時間単位あたりの表示、測定単位：cts/s（カウント毎秒） 強度に基づいて、異なるピークを積算時間に関係なく比較できます。</p>
ピクセルを測定	<p>エネルギーまたは強度フィールドには、選択されたピクセルの値が継続的に表示されます</p> <p>最大および最小フィールドには、連続測定の対応する結果が表示されます。</p>
測定ピクセルにマークポイントマーク	<p>グラフ上で設定された測定ピクセルを赤い垂直線でマークします</p> <p>グラフ上で各ピクセルの測定値を点でマークします</p>
検出器読み取り時間を手動で設定	<p>リストボックスからCCD検出器の読み出し時間を選択します</p> <p>読み出し時間が長いほど、エネルギー値は高くなります。</p> <p>CCD検出器の読み出し時間のデフォルトは0.01秒です。</p>
グラフのスケールリング	<p>座標の始点と終点の値を、軸の入力フィールドに直接入力します。</p> <p>または、ズームモード を有効にした後、マウスの左ボタンを押したまま表示範囲を選択します。</p> <p>自動オプションを有効にするか、 をクリックしてスケールリングを反転させます。</p>

ピーク測定の開始

- ▶ ピーク測定を開始するには、分光器|パラメータ画面で波長と観測方向を設定します。
- ▶ スペクトルタブに切り替えます。

▶ **スタート**をクリックして、連続測定を開始します。

測定値は設定されたパラメータに基づいて記録され、**ストップ**が押されるまで連続して繰り返されます。

9.1.4 信号推移の記録

分光器 | 時系列画面で、分光器で現在設定されている波長に対する強度の信号推移を、選択された測定ポイント数にわたって記録します。



グラフ表示に加えて、現在の強度、到達した最大強度値と最小強度値、およびバックグラウンドの強度のデジタル値が出力されます。


信号推移を記録する際には、以下のパラメータを設定できます：

オプション	説明
スケール	ズームモード を有効にした後、マウスの左ボタンを押したまま表示範囲を選択します をクリックしてスケーリングを反転させます
強度は0から開始	y軸のスケーリングを自動設定せず、「0」から開始させます。
測定ポイント	測定点の数をリストから選択します
ポイントマーク	グラフの測定点を点でマーキングします
検出器読み取り時間を手動で設定	リストボックスからCCD検出器の読み出し時間を選択します
ベースラインを引く	バックグラウンド補正後の強度値を表示します

9.2 プラズマ

プラズマ画面では、以下の機能を利用できます：

- プラズマの点火/消火
- HFジェネレータの制御
- ガス流量の設定
- アナライザーポンプの制御

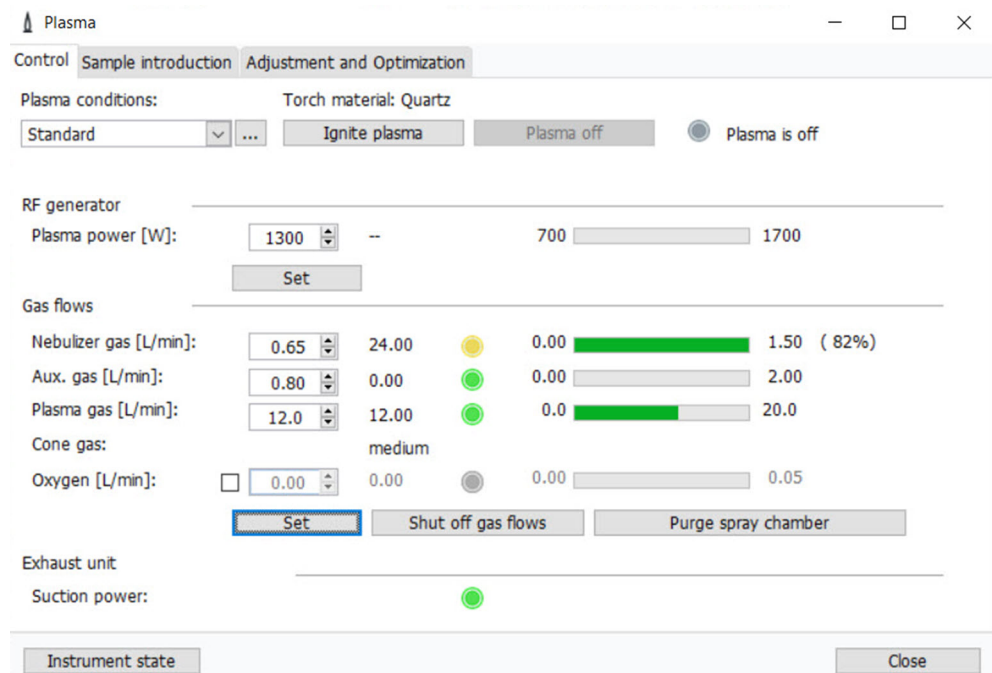
- 転送光学系の調整
- ネブライザーガス流量とプラズマ出力の自動最適化
- ▶ プラズマ画面を開くには、アイコンバーの  をクリックするか、**メソッド開発|プラズマ**メニュー項目を選択します。

装置の状態では、ICP-OES装置の安全センサーからのメッセージ出力がグラフで表示されます。プラズマに問題が発生した場合は、ここでセンサーのエラーメッセージを確認できます。

9.2.1 プラズマの点火とプラズマ条件の設定

プラズマコントロール画面では、プラズマの点火/消火および装置内のガス流量の調整を行います。

プラズマコントロール画面の機能



オプション	説明
プラズマ条件	プラズマ条件（プラズマ出力およびガス流量）を選択します。
プラズマ点火/プラズマ消火	ICP-OES装置が準備完了状態のときに、プラズマの点火/消火を行います。
RFジェネレーター	有効なプラズマ出力を設定します。 プラズマ出力によりプラズマの温度が決まります。有効なプラズマ出力を達成するために、ジェネレーター電流はファームウェアによって制御されます。
ガス流量	スイッチを入れ、ガス流量を調整します。 プラズマガス プラズマガスは外側チューブに沿って流れ、プラズマの生成に使用されます。 ネブライザーガス ネブライザーガスはサンプルを霧化し、サンプルのエアゾルをプラズマ内へ輸送します。これはネブライザーに接続されています。 ネブライザーガス行のパーセンテージ値は、ネブライザーの透過性/清浄度を示します（下記参照）。

オプション	説明
	<p>補助ガス 補助ガスはプラズマをインジェクターから押し出すように働き、内側チューブとインジェクターの間を流れます。</p> <p>コーンガス - コーンガスは「冷たい」プラズマの尾部を除去し、軸方向の観測における再結合による干渉を防ぎます。同時に、コーンガスはコーンの冷却も補助します。</p> <p>酸素 特定の用途に応じて、酸素をネブライザーガスに追加ガスとして導入することができます。酸素流量を変更するには、ガス設定の前にあるチェックボックスをオンにする必要があります。</p>
ガスの流れを遮断	すべてのガスバルブを閉じます。
スプレーチャンバーのパーズ	<p>ネブライザーガスは1分間作動し、スプレーチャンバー内の空気をパーズします。これにより、中断後のプラズマ点火が容易になります。</p> <p>この間、カウントダウンが表示されます。</p>
吸引力	安全回路により、接続された排気装置の出力がICP-OES装置の動作に十分であるかが確認されます。この場合、インジェクターランプは緑色に点灯します。

ネブライザー機能の評価

設定ボタンを使用して、ICP-OES装置の変更されたパラメータ（プラズマ出力およびガス流量）を設定します。

試料中の粒子や高濃度の塩分によりネブライザーが詰まった場合は、洗浄が必要です。ネブライザーの詰まりを示す兆候として、ネブライザーガスの圧力上昇が挙げられます。

現在のネブライザーガスパラメータのパーセンテージ（圧力）を、新品または洗浄済みのネブライザーを取り付けた際に得られた値と比較します。

このパーセンテージが著しく上昇している場合（元の値の半分以上）、または75%に達した場合には、ICP-OES装置の取扱説明書に従ってネブライザーを洗浄してください。

プラズマ条件の選択

プラズマ条件リストには、さまざまなサンプルマトリックスに対応した保存済みのプラズマパラメータが含まれており、メソッドが読み込まれている場合は、そのメソッドに固有のラインパラメータも表示されます。

...をクリックすると、リストで選択されたパラメータを管理するためのコンテキストメニューが開きます：

機能	説明
現在のプラズマパラメータを保存	設定済みのプラズマ条件（プラズマ出力およびガス流量）を保存し、リストに追加します
入力の削除	選択したエントリを削除します 標準、知ソ、水素化物発生法'）のデフォルトは削除できません。
プラズマ条件の設定	選択したエントリのプラズマパラメータをICP-OES装置に設定します
メソッド波長にコピー	メソッドラインがリストで選択されている場合に使用可能 プラズマ条件を、選択したラインのメソッドパラメータに転送します。
全てのメソッド波長にコピー	メソッドラインがリストで選択されている場合に使用可能 プラズマ条件を、すべてのラインのメソッドパラメータに転送します。

機能	説明
メソッドのデフォルトとして設定	現在のプラズマ条件を、新しく挿入されるメソッドラインの初期値として保存します（ラインのお気に入りには適用されない）

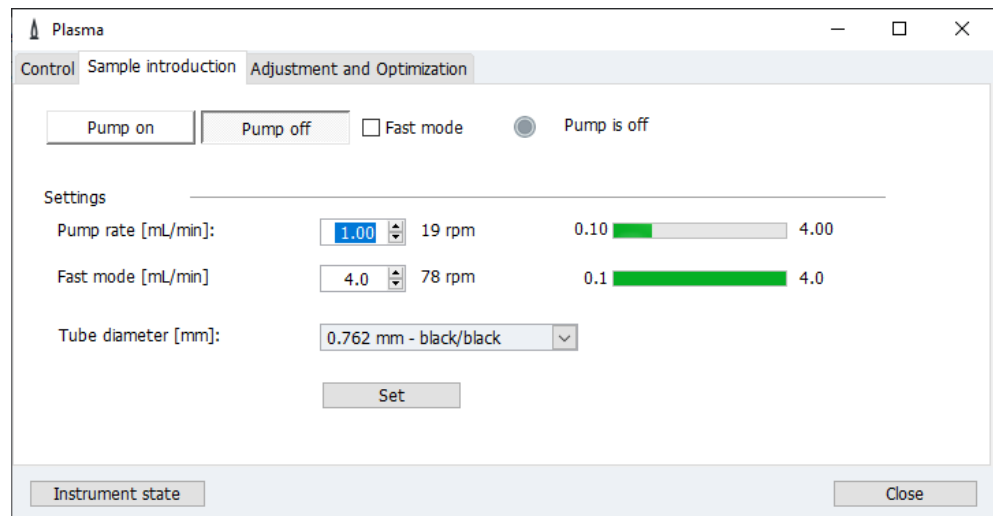
これについては次のリンクも参照してください：

[分光計をオンにしてプラズマ点火](#) [▶ 63]

9.2.2 サンプル導入とポンプのチェック

プラズマ|サンプル導入画面で、ICP-OES装置のチューブポンプの動作をチェックできます。

プラズマ|サンプル導入画面の機能

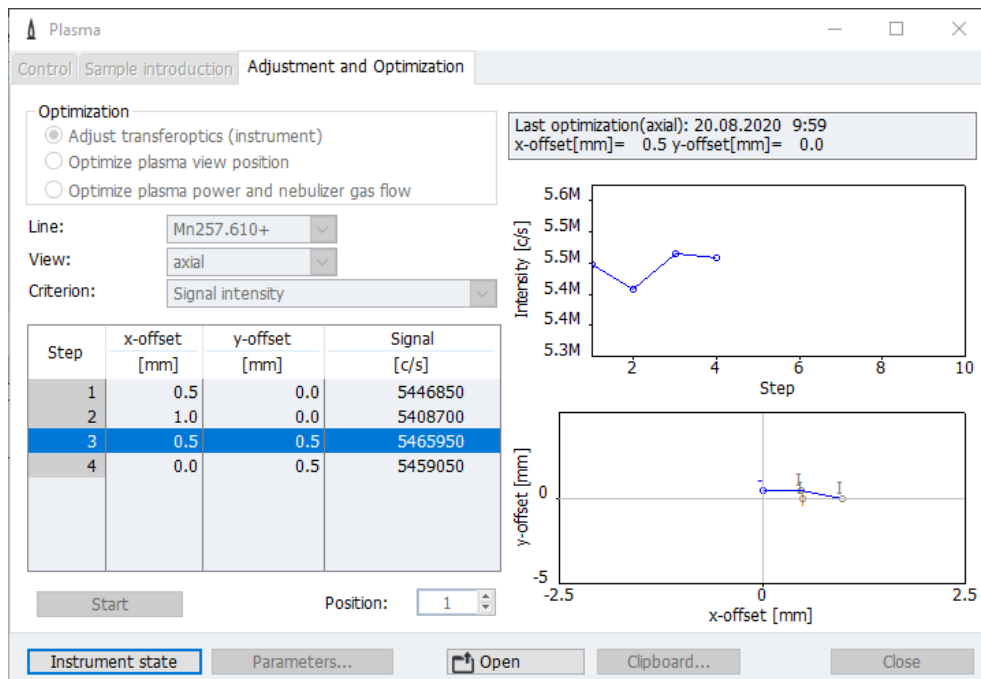


機能／パラメータ	説明
ポンプ オン/ ポンプ オフ	ポンプのオン／オフを切り替えます。ICP-OES装置を起動した直後の初期状態では、ポンプはオンになっています。
ファストモード	ポンプを手動で高速モードに切り替えます この機能は、サンプル導入系を手動でパージする際に使用します。 パージが完了したら、チェックボックスをオフにしてポンプをサンプル輸送モードに戻す必要があります。
ポンプが作動中/ ポンプが停止	ポンプの状態 ポンプの現在の回転速度は、RPM（回転数／分）で表示されます。
ポンプ速度	測定中のサンプル輸送に使用するポンプ速度を設定します
ファストモード	高速モード用のポンプ速度を設定します 高速モードでは、サンプルの切り替え時やパージ液をネブライザーへ送る際の輸送時間が最適化されます。
チューブ径	使用するチューブのタイプを選択します 輸送されるサンプル量（ポンプ速度）は、ポンプの回転速度とチューブの内径情報から算出されます。チューブには色付きのストッパーで識別コードが付けられています。使用するチューブのストッパーの組み合わせをリストから選択します。
設定	設定を適用します

9.2.3 プラズマの調整と最適化

プラズマ調整と最適化画面で、以下の調整を行います：

- 分光器の光軸に対する転送光学系の位置合わせ
- メソッド内の分析ラインに対する転送光学系のオフセット値の算出
- プラズマ出力とネブライザーガス流量の最適化



調整および最適化には、2種類のメソッドが用意されており、パラメータをクリックして選択できます：

メソッド	説明
グリッド検索	範囲はグリッドに基づいてスキャンされます。多数の測定点の中から、最も強度の高いものが特定されます。この方法は高精度ですが、多数の測定ポイントを評価するため時間がかかります。
シンプレックス最適化	エネルギー最大点は反復的に決定されます。開始測定点から、周辺で最も高い値を持つ測定点を特定します。その測定ポイントを起点として、再度最も高いエネルギーを持つ測定ポイントを探します。このプロセスを繰り返し、最終的にエネルギー最大点を特定します。 このメソッドはグリッド探索よりも高速ですが、確実性は劣ります。プラズマ内の複数の高温領域では複数のエネルギー最大点が存在する可能性があり、開始点が不適切な場合には誤った最大点を選ばれることがあります。 シンプレックスメソッドでは、停止基準としてパーセンテージ値を定義する必要があります。3回連続の測定値がこのパーセンテージ値以内の差であれば、調整は終了します。 最適化した値でスタートが有効になっている場合、前回の調整/最適化で得られたパラメータが、今回の最適化の初期値として使用されます。

転送光学系（装置）の調整には、信号強度が基準として使用されます。

最適化の評価基準は、分析ラインの波長に応じて自動的に設定されますが、手動で変更することも可能です：

基準	分析ラインの波長範囲
シグナル強度	< 200 nm
シグナルバックグラウンド	200~350 nm
シグナルバックグラウンドの平方根	> 350 nm

転送光学系の光軸調整
(プラズマ中心)

転送光学系の光軸への調整は、Mn溶液を用いて行われます。以下の濃度で調整用のMn溶液を準備します：

モニタリング方向	Mn溶液
アキシャル	1 mg/L
ラジアル	10 mg/L

- ▶ トランスファーオフティクス(装置)の調整オプションを有効にします。
✓ Mn分析ラインは、波長リスト内で自動的に設定されます。
- ▶ 調整メソッドをパラメーターで選択します(上記参照)。
- ▶ モニタリング方向を選択します：

オプション	説明
アキシャル	上方からのモニタリング
ラジアル	側方からのモニタリング
プラスアキシャル	減衰エネルギーの上方からのモニタリング
プラスラジアル	減衰エネルギーの側方からのモニタリング
閉じる	シャッターを閉じた状態でのモニタリング(サービス目的)

- ▶ 吸引チューブをサンプルに浸します。オートサンプラーを使用する場合は、サンプルラック上の位置を設定します。
- ▶ スタートをクリックします。
✓ 転送光学系の調整は自動的に行われます。調整の終了時に、新しいデータが表示されます。
- ▶ OKをクリックして、新しい調整値を確定します。

アクティブなメソッドの分析ラインに対するモニタリング位置の最適化

プラズマ内には温度の異なるゾーンが存在します。この最適化では、分析対象が最大の信号強度を示すプラズマ内の観測位置が検出されます。得られた値は、ワレットとしてメソッド内に保存されます。

- ▶ 波長リストで、メソッドから分析ラインを選択します。
- ▶ プラズマ観測位置の最適化オプションを有効にします。
モニタリング方向の情報はメソッドから自動的に転送され、最適化の評価基準が設定されます(上記参照)。
- ▶ パラメーターをクリックして、調整メソッドを選択します(上記参照)。
- ▶ 吸引チューブをサンプルに浸します。オートサンプラーを使用する場合は、サンプルラック上の位置を設定します。
- ▶ スタートをクリックします。
✓ モニタリング位置の調整は自動的に行われます。調整終了後、最適化されたオフセット値が表示されます。
- ▶ OKをクリックして、新しいオフセット値をメソッドに転送します。

サンプルに対するプラズマ条件の最適化

サンプル中の分析対象元素のモニタリング位置を定義した後、プラズマ条件(プラズマ出力およびネブライザーガス流量)を最適化できます。

- ▶ プラズマ出力とネブライザーガス流量の最適化オプションを有効にします。
- ▶ 波長リストで、メソッドから分析ラインを選択します。

- ✓ 既存のプラズマ条件情報はメソッドから自動的に転送され、最適化の評価基準が設定されます（上記参照）。
- ▶ 調整メソッドを設定で選択します（上記参照）。
- ▶ 吸引チューブをサンプルに浸します。オートサンプラーを使用する場合は、サンプルラック上の位置を設定します。
- ▶ スタートをクリックします。
- ✓ プラズマ出力とネブライザーガス流量の最適化は自動的に実行されます。最適化終了後、最適化された値が表示されます。
- ▶ をクリックして、新しい値をメソッドに転送します OK


9.3 オートサンプラー

オートサンプラーはオプション品です。ASpect PQプログラム起動後、クイックスタート画面で初期化時にオートサンプラーが検出されます。

オートサンプラー画面では、以下の機能を利用できます：

- 接続されているオートサンプラーのタイプを表示する
- オートサンプラーを設定する
- オートサンプラーを調整する
- サンプル経路をさらにすすぐ
- オートサンプラーを再初期化する
- セルフテストを実行する

分析に直接関連するパラメータ（サンプルラックへのサンプルの配置や洗浄ステップ）は、メソッド、シーケンス、および試料識別データ（サンプルID）内で指定します。

ツールバーのをクリックするか、**メソッド開発 | オートサンプラー**メニュー項目を使用して、オートサンプラー画面を開きます。

オートサンプラーの初期化

オートサンプラーは通常、主電源スイッチがオンになった際に初期化されます。機械的な衝撃などによりオートサンプラーの位置情報が失われた場合、再初期化が必要になることがあります。再初期化により、オートサンプラーとICP-OES装置およびPCとの接続が再確立されます。

- ▶ 必要に応じて、ASpect PQプログラムを再起動せずに初期化をクリックすることで、オートサンプラーを再初期化できます。

オートサンプラーの検出

ASpect PQの起動後にオートサンプラーのスイッチをオンにした場合は、オートサンプラーの使用をプログラムに登録する必要があります。

- ▶ そのためには、**検出**をクリックし、その後**初期化**をクリックします。

注記：希釈システム付きのCetac ASX-560を使用している場合、**検出**ボタンは表示されません。

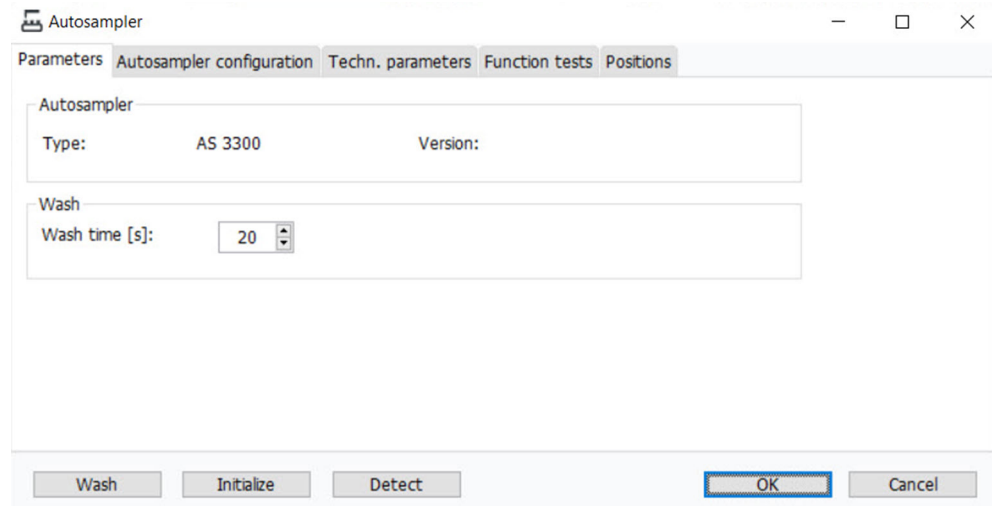
サンプル流路の洗浄

- ▶ **オートサンプラー | パラメータ**画面で、**洗浄時間**を設定します。洗浄時間のデフォルト値は現在のメソッドから転送されます。
- ▶ **洗浄**をクリックします。あるいは、**メニュー | 洗浄**メニュー項目を選択します。
 - ✓ サンプル経路（チューブ - ネブライザー - スプレーチャンバー - トーチ）は、設定された洗浄時間で高速モードのポンプによって洗浄されます。

9.3.1 接続されているオートサンプラーの表示

オートサンプラー|パラメータ画面では、以下のパラメータの表示または設定が可能です：

- オートサンプラーのタイプ
- 洗浄パラメータ



オートサンプラーのタイプ

オートサンプラー|パラメータ画面には、初期化時に検出されたオートサンプラーのタイプとファームウェアのバージョンが表示されます。

洗浄パラメータ

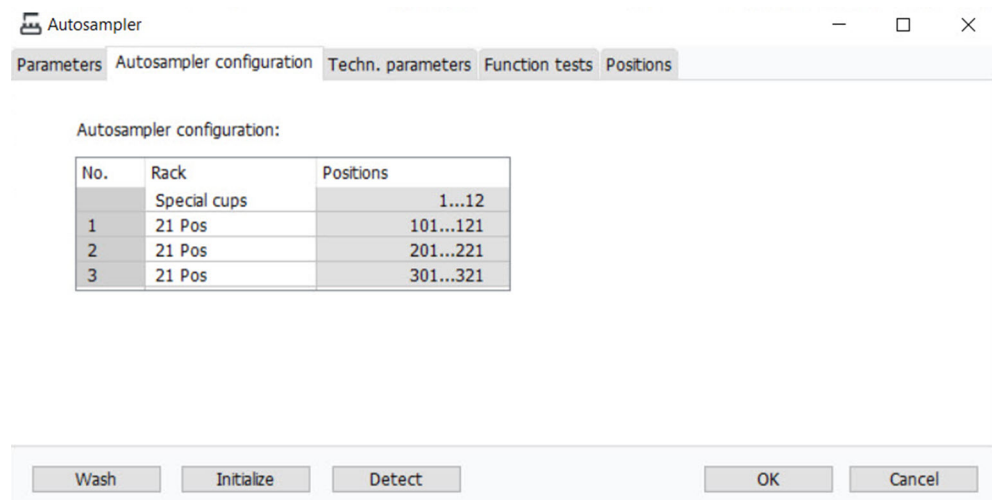
サンプルカップからトーチまでのサンプル経路のシステム洗浄時間は、現在のメソッドから転送されます。逆に、オートサンプラー|パラメータ画面で変更した洗浄時間は、メソッドの設定には影響しません。オートサンプラーによるシステム洗浄では、洗浄液はオートサンプラーの洗浄カップから供給されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- サンプル導入用の設定 (メソッド|サンプルリハリー画面) [▶ 33]

9.3.2 オートサンプラーラックの設定

オートサンプラー|オートサンプラーの構成画面で、オートサンプラーで使用するサンプルラックを設定します。



使用するオートサンプラーに応じて、さまざまなサンプルラックや特殊サンプル用ラックを配置できます。

テーブル内でサンプルラックを選択します。可変サンプルラックについては、位置番号として3桁の数字が割り当てられます。最初の1桁はオートサンプラー上のラック位置を示し、残りの2桁はラック上の位置を示します。例えば、番号113はサンプルラック1の位置13を示します。可変サンプルラック1は、オートサンプラー上で洗浄カップの前に配置され、その後ラック2とラック3が続きます。

9.3.3 オートサンプラーの技術パラメータ

オートサンプラー | 動作パラメータ画面で、各種カップに対するカニューレの浸漬深さを設定します。

The screenshot shows the 'Autosampler' configuration window with the 'Techn. parameters' tab selected. It features a table of actions and their parameters, along with a 'Table' control panel on the right.

Action	Type	Location	Depth mm
Take up	AS 3300	Sample cup	140
Take up	AS 3300	Special cup	140
Wash	AS 3300	Wash cup	140

The 'Table' control panel includes:

- Speed: 6 (with a slider)
- Depth [mm]: 140 (with a slider)
- Depth at pos.: 101 (with 'down' and 'open' buttons)

Below the table, there is a checked checkbox: Move sampler probe into wash reservoir (when plasma on)

At the bottom, there are buttons for 'Wash', 'Initialize', 'Detect', 'OK', and 'Cancel'.

カップタイプごとに、以下のアクションが考慮されます：

カップ	アクション
サンプルカップ	チューブポンプを通じてサンプルを吸引します。
スペシャルカップ	チューブポンプを通じて特殊サンプルを吸引します。
洗浄カップ	カニューレと吸入経路を洗浄します。

アクションテーブルの要素

オプション	説明
アクション	実行可能なアクションオプション： 吸引 カップから試料を取り込み、トーチへ輸送します。 洗浄 洗浄液を吸引します。
種類	接続されているオートサンプラーのタイプ
位置	指定されたアクションが適用されるカップ
深さ	カニューレが浸漬される深さ（単位：mm）

テーブルサブ領域

表領域のコントロールを使用して、選択されたテーブル行のパラメータを変更します。

オプション	説明
深さ	カニューレの浸漬深さを設定します 浸漬深さは、オートサンプラーアームの最上位置からの距離として測定されます。

オプション	説明
深さの位置	特殊カップまたは通常のサンプルカップの位置に応じて、浸漬深さが設定されます。
設定	有効な場合、オートサンプラーのアームは位置調整が必要なカップの上に移動します。サンプルカップおよび特殊カップでは、これは次で指定された位置に基づいて行われます： 深さの位置 無効な場合、アームはカップ上に移動せず、浸漬深さと速度のみが変更されます。

追加オプション

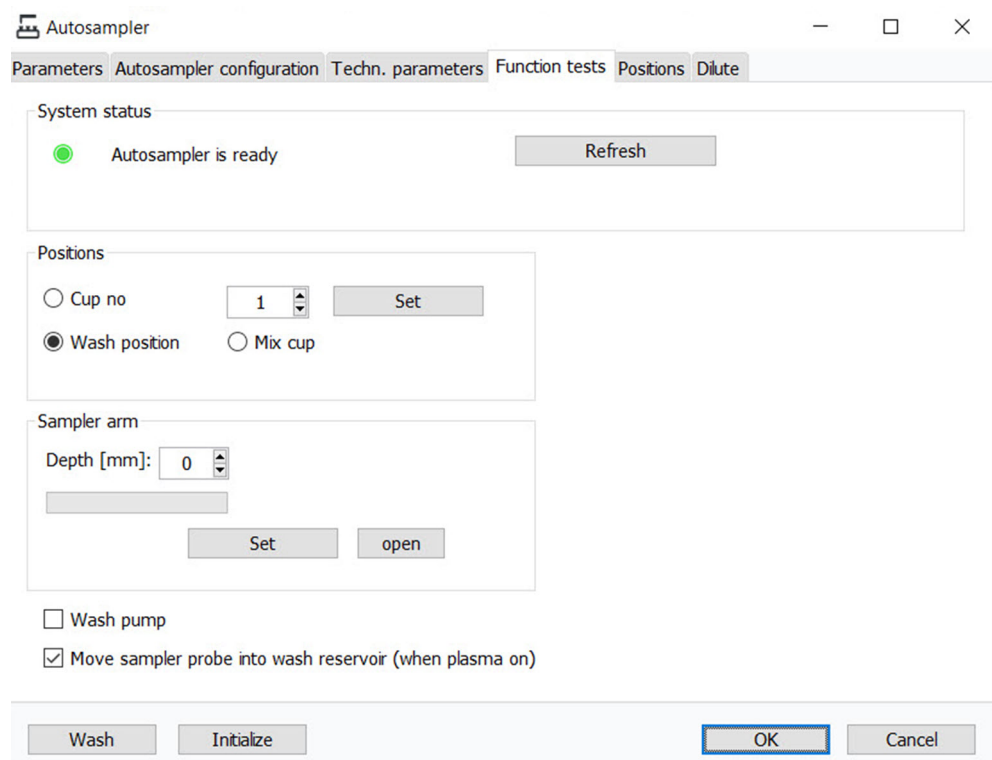
プローブを洗浄ポットへ移動(プラスマ点灯時オプションが有効な場合、画面を閉じた後にカニューレが自動的に洗浄リザーバーに浸漬されます。

ASX-560のみ：洗浄ポンプの速度を設定します（レベル：0~99）。設定を使用して、この値をオートサンプラーに永久保存します。

9.3.4 オートサンプラー機能のテスト

オートサンプラー|機能テスト画面で、オートサンプラーが使用可能かどうかを確認できます。

オートサンプラー|機能テスト画面



オートサンプラーの以下の機能がテストされます：

機能	説明
システム状況	動作準備状態を確認します。 更新で、動作準備状態を再確認します。
位置	設定をクリックすると、オートサンプラーが選択した位置に移動します。 カップ番号 オートサンプラーはリストで選択した位置に移動します。 洗浄位置 オートサンプラーは洗浄カップの位置へ移動します。

機能	説明
サンプルアーム	リストボックスで設定した深さまでオートサンプラーのアームを下げます。
洗浄ポンプ	洗浄ポンプのオン/オフを切り替えます。

オートサンプラーの
カニューレを洗浄
リザーバーへ移動させます

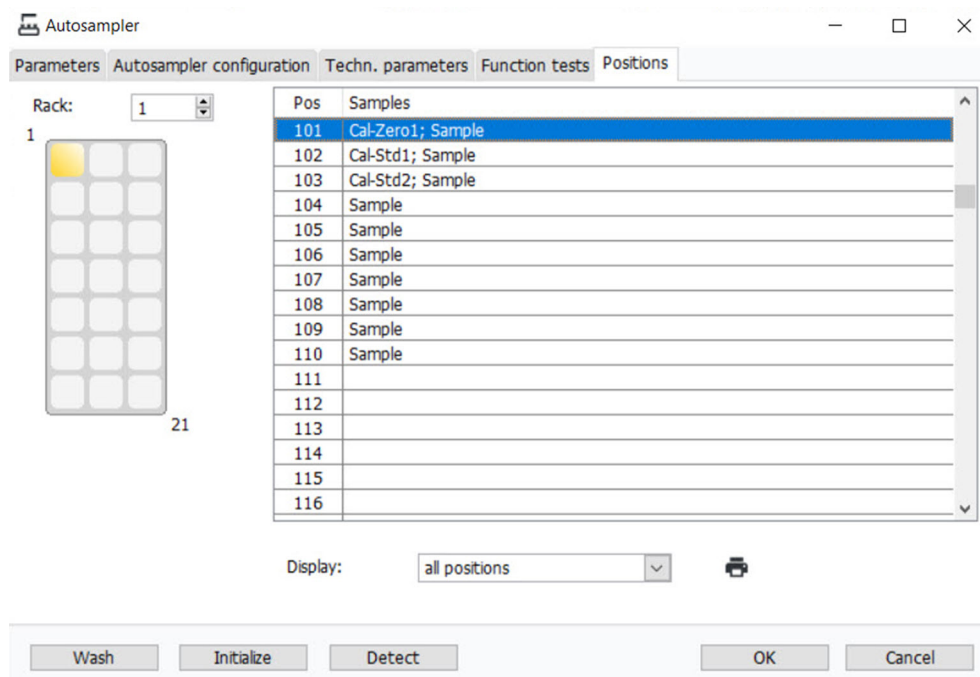
プローブを洗浄ポットへ移動(プローブ点灯時チェックボックスがオンの場合、オートサンプラー画面を閉じると、カニューレが洗浄リザーバーに浸漬されます。

9.3.5 オートサンプラー上のサンプル位置の表示

オートサンプラー位置画面には、現在のシーケンスで使用されているサンプルトレイの位置が表示されます。

表示については、オプション全ての位置、サンプル位置のみ、スペシャル位置のみから選択できます。

現在選択されているサンプル位置を示すサンプルラック図が、表の横に表示されます。サンプル位置は、図とテーブルの両方から選択できます。



9.3.6 希釈機能

Cetac ASX 560オートサンプラーをCetac SDX_{HPLD}と併用する場合のサンプル希釈のパラメータは、オートサンプラー/希釈画面に表示されます。

Autosampler
— □ ×

Parameters
Autosampler configuration
Techn. parameters
Function tests
Positions
Dilute

Dilution system: CETAC Technologies ASX-560 Standard V 1.11.0 16-Mar-2018, Cetac Thermo AA Compatible
Cetac SDX Controller ver 1.0.0
Cetac Technologies ASXpress+ V 2.71 ASX-5x0 Standard, 2-Feb-2019

Settings: ASX-560/SDX ASXpress+

Parameters	Range	Value
Max. dilution factor	2...5000	5000
Min. dilution factor	2...5000	2
Vessel wash cycles	1...4	2
Vortexing speed	500...3000 rpm	2500
Air gap volume	50...200 µL	50
Aspiration speed diluent	50...3500 µL/s	1800
Aspiration speed sample	50...3500 µL/s	170
Dispense speed	50...3500 µL/s	1800
Syringe delay	500...5000 ms	1000

Consider dilution when calculating the internal standard

Service: Prime syringe and vortexer Start

Wash
Initialize
OK
Cancel

設定

設定セクションのパラメータは、サンプル希釈において良好な結果を得るための初期設定です。これらのパラメータは、メソッド最適化の際に設定範囲内で変更可能です。

内部基準の計算では希釈を考慮する

このチェックボックスをオンにすると、ソフトウェアは内部標準の計算時に希釈を考慮します。

- 内部標準を元のサンプルに添加した場合、サンプルとともに内部標準も希釈されるため、このチェックボックスをオンにしてください。このチェックボックスをオンにすると、希釈を内部標準の計算に反映させることができます。
- 内部標準を希釈液に添加する場合、または内部標準キットを使用してサンプル溶液に添加する場合、内部標準は希釈されません。この場合、このチェックボックスをオンにしないでください。
- 内部標準としてアルゴンを使用する場合でも、このチェックボックスはオンにしないでください。

サービス

サービスリストで、SDX_{HPLD}に対するサービス機能を選択し、**スタート**で実行できます：

オプション	機能
1 プライムシリンジとホルテクサー	シリンジポンプで希釈液をシステム内に送液し、ホルテクサーへ分注します。これにより、システム内の気泡が除去され、ホルテクサーがコンディショニングされます。
2 シリンジを取り外し位置に移動	メンテナンスのためにシリンジポンプを取り外す必要がある場合は、この機能を使ってプランジャーを適切な位置に移動させてから作業を行う必要があります。
3 洗浄のために分解した後、ASXpress+を再設置	ASXpress+が設置されている場合のみ： ASXpress+を設置またはメンテナンス後に初期化します。

9.4 循環式チラー

ICP-OES装置の冷却回路では、バルブが切り替えられ、回路の開閉が行われます。そのため、冷却水の交換はウィザードによってサポートされます。



注記

循環式チラーのメンテナンスおよび冷却水の準備については、ICP-OES装置の取扱説明書に記載された注意事項を必ず確認してください。

-
- ▶ その他 | メンテナンスメニュー項目を選択します。
 - ▶ メンテナンス画面で、変更をクリックすると冷却液の交換が開始されます。
 - ▶ ウィザードの指示に従ってください。

10 データ管理

このセクションでは、以下について説明します。

- 印刷オプション
- メソッドとシーケンスの管理
- 結果データの管理
- 濃度と含有量の単位定義
- よく使用する原液とQCサンプルのデータ管理

10.1 ASpect PQの印刷機能

ASpect PQは、さまざまな出力形式に対応しています。プリンタへの出力に加えて、データはExcel、PDF、HTML、XML、テキスト形式でエクスポートでき、またビットマップまたはスケーラブルなグラフィックとして保存することも可能です。

分析結果や画面の内容（例：メソッド画面やシーケンス画面）の出力には、レポートテンプレートが使用されます。レポートテンプレートセットがデフォルトでインストールされます。必要に応じて、これらのシートを「レポート/印刷モジュールリスト & ラベル (Report-/Print module List & Label)」というレポートデザイナーを使って個別に調整できます。


10.1.1 分析結果の印刷

ASpect PQでは、結果データの印刷に関してさまざまなオプションが用意されています：

- 完全な記録を印刷します。分析の完全な記録には、メソッドパラメータ、検量線結果、統計処理を含む個々のサンプル値を含む分析結果が含まれます。現在の結果（メイン画面に表示されているもの）および保存済みデータのレポートを印刷できます。
- 現在の結果を印刷します。この印刷では、メイン画面のデータのみが印刷されます。ここでは、完全な印刷と簡易印刷のいずれかを選択できます。
- 概要タブで選択したデータを印刷します。この印刷では、ダイアログ画面で分析ラインと結果を選択できます。

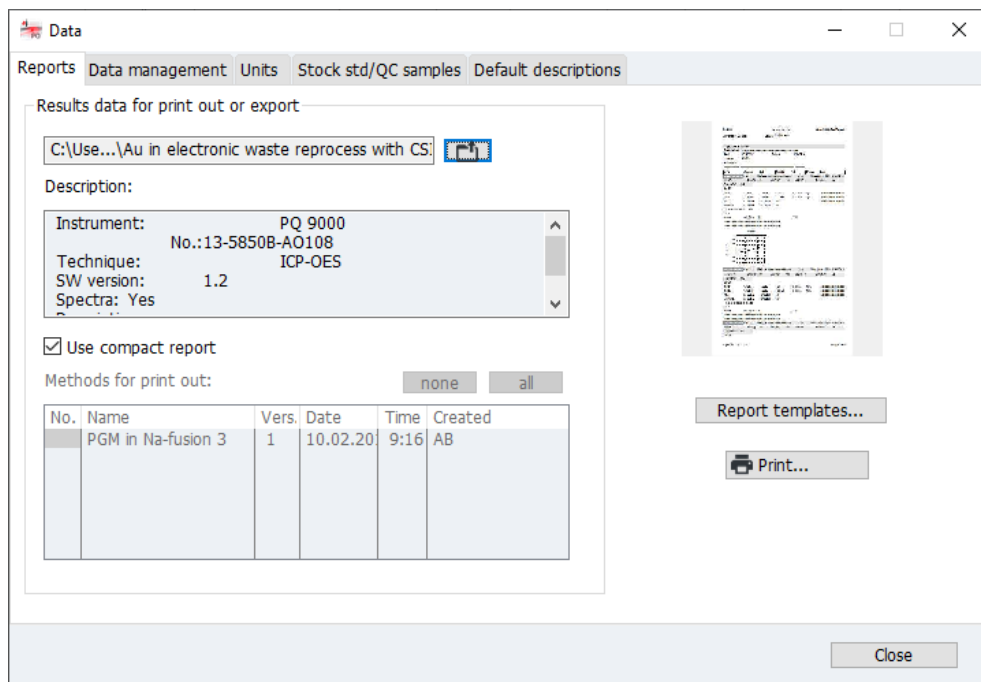
完全な記録を印刷する

分析の完全な記録には、メソッドパラメータ、検量線結果、統計処理を含む個々のサンプル値を含む分析結果が含まれます。完全な記録は、メイン画面に表示されている結果または保存済みファイルから印刷できます。

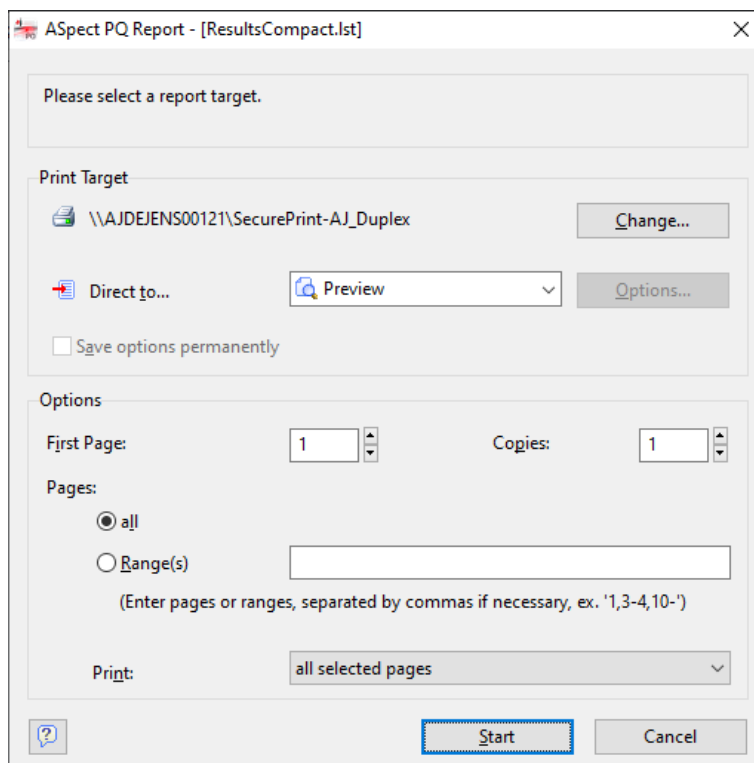
- ▶  アイコンを使ってデータ|レポート画面を開きます。
- ▶ または、その他|データメニュー項目、あるいはファイル|印刷|レポートメニュー項目を使用して画面を開くこともできます。

現在のファイル名、ファイル情報（説明リスト）、および現在の結果ファイルの作成に使用されたすべてのメソッドバージョンが表示されます。

データレポート画面で印刷する
結果データを選択する



- ▶ 保存済みのファイルを印刷したい場合は、を使って開く（Open）デフォルト画面を開き、目的のファイルを選択してください。
- ▶ 短縮された簡易レポートを印刷する場合は、コンパクトレポートを使用オプションを有効にします。
- ▶ 印刷対象のメソッドバージョンは、テーブル内で選択します。ShiftキーまたはCtrlキーを押しながら、選択したいメソッドバージョンをクリックします。すべてのバージョンを選択するにはallボタンを、すべての選択を解除するには(なし)ボタンを使用します。
- ▶ ASpect PQレポート画面を開くには、印刷をクリックします。



- ▶ 必要に応じて、**Direct to**リストで出力形式を変更し、オプションで出力形式の詳細パラメータを設定します。
- ▶ **Start**で印刷を開始します。

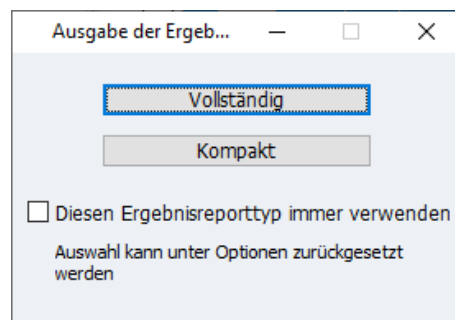
印刷には、出力先 (**Direct to**) | **プレビュー (Preview)** 設定を **i**

注記！ 使用します。 **Start**をクリックすると、印刷対象のページがまず印刷プレビューに表示されます。これにより、必要なデータがすべて含まれているか、または不要なデータが出力されていないかを、プリンタに送信する前に確認できます。

現在の結果を印刷する

メイン画面に表示されている結果を印刷できます：


- ▶ 印刷したい内容が表示されているメイン画面の [結果 (Results)] タブをアクティブにします。
- ▶ **ファイル|印刷|アクティブ ウィンドウ**メニュー項目を使用して印刷を開始します。
✓ **結果レポートフォーマット**画面が表示されます。

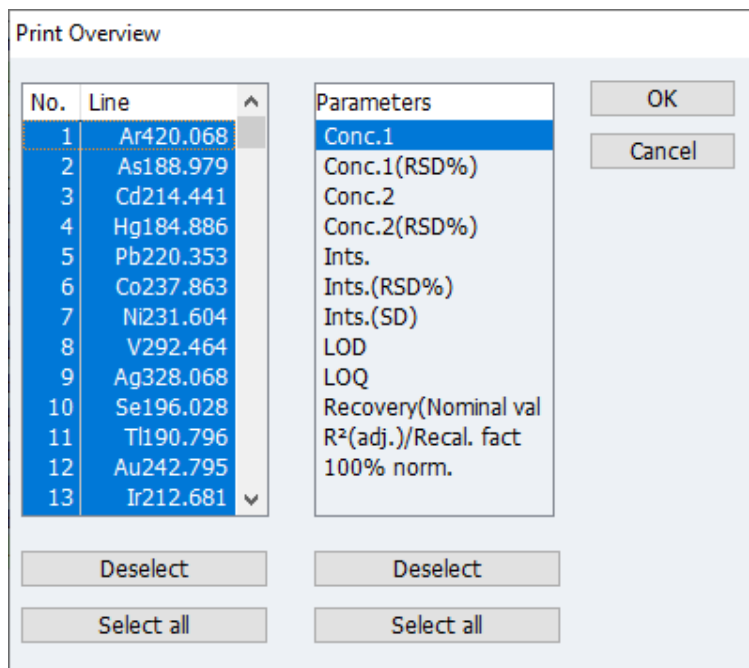


- ▶ 結果を信号ダイアグラム付き印刷したい場合は、**完全な**をクリックします。結果を簡易表示形式で印刷するには、**コンパクト**を選択します。
- ▶ その後の操作は「完全な記録を印刷する」の手順に従ってください。

結果レポートフォーマット画面で常にこの**結果レポートタイプ**を使用チェックボックスをオンに **i** 注記！ して、**完全な**または**コンパクト**をクリックすると、次回の結果印刷時にはこの画面は表示されず、直前に使用したレポート形式が自動的に使用されます。この設定は、オプションメニュー画面でリセットできます。

選択したデータを印刷する

- ▶ メイン画面で、**概要**タブに切り替えます。
- ▶ このタブの下部にある  をクリックするか、**ファイル|印刷|アクティブ ウィンドウ**メニュー項目を選択します。
印刷 概要画面が表示されます。




- ▶ 印刷したいすべての行とパラメータを選択し、**OK**で選択を確定します。ASpect PQレポート画面が表示されます。
- ▶ その後の操作は「完全な記録を印刷する」の手順に従ってください。

これについては次のリンクも参照してください：

☞ 表示オプション [▶ 130]

10.1.2 追加の分析パラメータおよび設定の印刷

以下の分析パラメータおよび設定を、それぞれの画面から印刷できます：


- メソッド
- シーケンス
- メイン画面の概要タブに表示される結果データ
- サンプルID
- QC (品質管理チャート)
- 検量線
- オートサンプラーの位置
- ▶ Aspect PQワークスペースで、印刷したい内容が表示されている画面を有効にします。
- ▶ 画面内の  をクリックすると、パラメータの印刷が開始されます。
- ▶ または、**ファイル | 印刷 | アクティブ ウィンドウ**メニューコマンドを開きます。
✓ ASpect PQレポート画面が表示されます。
- ▶ 必要に応じて、**Direct to**リストで出力形式を変更し、**オプション**で出力形式の詳細パラメータを設定します。
- ▶ **Start**で印刷を開始します。

10.1.3 レポートテンプレート

レポート設計モードの使用

初期設定でインストールされるレポートテンプレートを個別に調整できます。全体像を把握しやすくするために、レポート表示は実際の値で編集できます。

- ▶ **ファイル | レポートデザイン**メニュー項目を有効にします。

- ▶ 変更したいレポートテンプレートの画面を開きます。
- ▶  アイコンがあれば、それをクリックします。ない場合は、**ファイル|印刷|アクティブウィンドウ**メニュー項目を選択します。
- ▶ レポートテンプレートの編集に関する確認メッセージが表示されたら、はいで確定します。レポートデザイナーが開きます。
- ▶ 必要な変更を加え、変更後のレポートテンプレートを保存します。
- ▶ レポートテンプレートに対応する印刷内容にリンクさせます（「割り当ての変更」を参照）。

レポートデザイナーの簡単な紹介

レポートテンプレートを構成する各要素は「オブジェクト」と呼ばれます。例えば、テーブルはヘッダー、リスト値、グラフのそれぞれが個別のオブジェクトとして構成されます。

これらのオブジェクトには、印刷対象の情報が含まれており、フォント、配置、改ページ、色などのレイアウトプロパティが設定されています。

レポートデザイナーでは、テキストオブジェクト、グラフ、バーコードなど、さまざまな種類のオブジェクトが利用可能です。これらは作業領域に自由に配置でき、サイズの変更も可能です。オブジェクトの種類によって、表示される情報や特性が異なります。


通常、目的のオブジェクトはマウスで作業領域にドラッグして配置し、必要な内容とレイアウト特性を設定します。また、変数リストから作業領域に変数をドラッグ&ドロップすることもできます。その位置にまだオブジェクトが存在しない場合は、自動的にオブジェクトが作成され、変数とそのオブジェクトに割り当てられます。

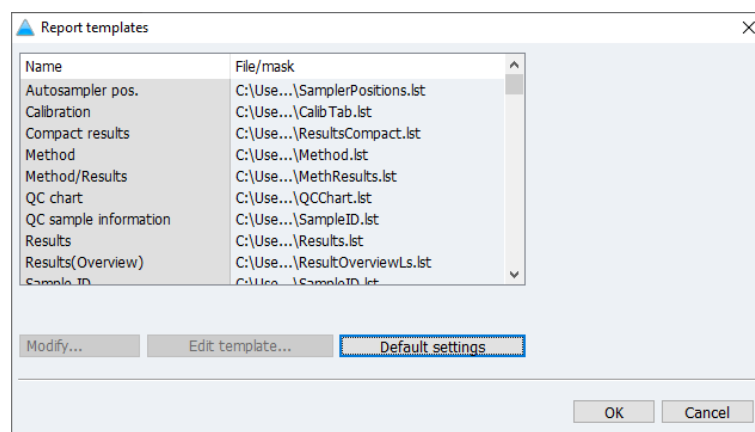
既存のオブジェクトを編集するには、まず選択する必要があります。そのためには、左マウスボタンでオブジェクトをクリックします。枠線が強調表示されて選択状態であることが確認できます。新しいオブジェクトを作成すると、自動的に選択された状態となり、サイズや位置をすぐに変更できます。オブジェクトをダブルクリックすると、設定を変更するためのダイアログ画面が表示されます。

レポートデザイナーの操作と機能の詳細は、ソフトウェアのインストール CD の「designer_deu.pdf"/"designer_eng.pdf」マニュアルを参照してください。

レポートテンプレート画面

レポートテンプレート画面では、テンプレートの編集およびASpect PQの各画面への割り当てを行います。ファイルマスクを使用することで、1つの画面に複数のテンプレートを割り当てることができ、印刷時に目的のレポートを選択できます。


- ▶  アイコンを使用して、**データ|レポート画面**を開きます。
- ▶ **レポートテンプレート**をクリックします。



以下の各画面には、対応するレポートテンプレートが必要です：

名前	説明
結果	メイン画面の結果タブの内容
コパ外結果	結果の簡易概要
結果 (概要)	メイン画面の概要タブの内容
検量線	分析検量線：画面 検量線
メソッド	メソッドパラメータ：画面 メソッド
メソッド / 結果	完全なレポート
オートサンプラーの位置	オートサンプラーの割り当て：画面オートサンプラー 位置
サンプルID	サンプル情報データ：サンプルID サンプル情報
QCチャート	QCチャートのデータ：画面 QC
QCサンプル情報	QCサンプルの情報データ：画面サンプルID QCサンプル情報
シーケンス	シーケンス：画面 シーケンス

割り当ての変更

- ▶ レポートテンプレート画面で、レポートテンプレートを変更したい画面を選択します。
- ▶ 変更をクリックして、ファイル割り当て用のダイアログ画面を開きます。
- ▶ 1つのレポートテンプレートのみを割り当てている場合は、レポートテンプレートファイルの使用 (*.lst) オプションを有効にし、 をクリックして目的のファイルを選択します。
- ▶ 印刷時に複数のテンプレートを同時に選択肢として表示させたい場合は、ファイルの選択を許可(マスク、例 c:\Reports\Results* オプションを有効にします。入力フィールドにワイルドカードを使用してマスク名を入力します。
- ▶ OKで設定を確定します。

レポートテンプレートの編集

- ▶ レポートテンプレート画面で、編集したいレポートテンプレートに対応する画面を選択します。
- ▶ テンプレートの編集をクリックして、レポートデザイン画面を開きます。


デフォルト設定の復元

- ▶ プログラムインストール時の設定に戻すことができます。
- ▶ デフォルト設定をクリックします。

10.2 ASpect PQにおけるすべてのデータタイプの管理

ASpect PQでは、以下のデータが生成されます：

- メソッド
- シーケンス
- 結果ファイル
- ライン/波長ファイル
- 補正モデル
- 補正スペクトル
- レポートテンプレート
- ラインのお気に入り
- ワークシート

これらのデータタイプはすべて、データ管理画面で管理されます。この画面は、 をクリックするか、その他データメニューコマンドを選択することで表示されます。

10.2.1 メソッドとシーケンスの管理

メソッド、シーケンス、補正モデルは、それぞれ個別のデータベースに保存されます。メソッドデータベースは「method.tps」として保存されます。シーケンスを含むデータベースは「sequ.tps」と呼ばれます。このセクションでは、メソッドとシーケンスはこれ以降「データレコード」と呼びます。

データベース画面の要素

メソッドとシーケンスを保存、開く、削除、インポート、エクスポートするときは、共通の構成要素を持つデータベース画面が開きます。

オプション／表示	説明
名前	選択したメソッドまたはシーケンスの名称を表示または入力します
Cat.	データベース内でメソッド／シーケンスを検索するための追加プロパティ カテゴリー名として、3桁まで入力できます。リストの表示は、Cat.フィールドでカテゴリー名を入力することで、絞り込むことができます。すべてのカテゴリーのデータレコードを表示したい場合は、Cat.フィールドの入力を消去します。
レコードのリスト	保存されているメソッド／シーケンスが、名前、バージョン、日付、時刻、カテゴリ、オペレーターとともに表示されます
並び替え	さまざまなプロパティに基づいてリストを並び替えます 並び替えは、選択したオプションに応じて、昇順または降順で並び替えることができます。
説明	レコードの用途などに関する追加メモを入力または表示できます 定義済みのコメントをデータレコードの説明画面で作成できます。
現在のバージョンのみ	同一名称のデータレコードが複数存在する場合、最も高いバージョン番号のレコードのみが表示されます。
定義されたメソッド	利用可能な検量曲線をメソッドと一緒に保存します この検量曲線は以降の分析に使用できます。

このソフトウェアでは、同名のレコードは上書きされず、新しいバージョンとして保存され、バージョン番号が1つ増加します。

各データベースから個別のメソッドやシーケンスをインポート、エクスポート、または削除する機能も提供されています。

注記

データベース画面で複数のデータレコードを選択するには、CtrlキーまたはShiftキーを押しながらマウスで選択します。

データ管理を開きます

- ▶ **☰**をクリックして**データ管理**画面を開きます。
- ▶ **種類**リストで、編集対象のデータレコードタイプ (**メソッド** または **シーケンス**) を選択します。

データレコードのエクスポート

レコードを他の装置／コンピューターで利用できるようにエクスポートできます。複数のデータレコードを1つの共通ファイルにエクスポートすることもできます。エクスポートファイルには、メソッドデータレコードには「.met」、シーケンスデータレコードには「.seq」の拡張子が付けられます。

- ▶ **エクスポート**でデータベース画面を開きます。
- ▶ データレコードを選択し、**エクスポート**をクリックします。
- ▶ **名前**を付けて保存画面でファイル名を入力し、**保存**で確定します。
 - ✓ データベース画面が開き、エクスポートされたファイルが表示されます。
- ▶ **閉じる**をクリックしてデータベース画面を閉じます。

データレコードのインポート

インポート機能を使用すると、他の装置／コンピューターからデータレコードをデータベースに読み込むことができます。インポートされたファイルには複数のデータレコードが含まれている場合があり、読み込むレコードを選択できます。

- ▶ **インポート**を使用して、ファイルを開くための標準機能を備えた**インポートするメソッドファイル**を選択または**インポートするシーケンスファイル**を選択)画面を開きます。
- ▶ インポートするファイルを選択します。
 - ✓ これによりデータベース画面が開き、ファイルに含まれるデータレコードの名称、作成日、カテゴリが表示されます。画面のタイトルバーには、インポートファイル名が表示されます。
- ▶ データベース画面で、インポートするデータレコードを選択し、**インポート**をクリックします。データレコードがデータベースにインポートされます。同じ名前のデータレコードがすでに存在する場合は、新しいバージョンのデータレコードが作成されます。データベース画面には、利用可能なデータレコードの現在のバージョンが表示されます。
- ▶ **閉じる**でデータベース画面を終了し、**データ**画面に戻ります。

データレコードの削除


削除機能を使って、データレコードをデータベースから恒久的に削除できます。

- ▶ **削除**でデータベース画面を開きます。
- ▶ 削除するデータレコードを選択します。
- ▶ **削除**をクリックします。
 - ✓ データベース画面が更新され、残っているデータレコードのみが表示されます。同じ名前のデータレコードについては、バージョン番号が1つ減少します。

ファイルメニューからのレコードの削除

- ▶ また、**ファイル | 削除 | メソッド** または **ファイル | 削除 | シーケンス**メニューコマンドで、**メソッド** 削除または**シーケンス**を削除データベース画面を開くこともできます。
- ▶ その後は、上で説明した手順に従ってください。

10.2.2 結果ファイルの管理

	<p>結果データは、測定中にデータベースに保存されます。結果データを含むデータベースは、コピーまたは削除できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ データ データ管理画面を開くには、その他 データメニュー項目を使用するか、をクリックします。 ▶ 種類リストで、結果オプションを選択します。
結果データのインポート	<p>結果データをソフトウェアにインポートできます。この処理中に、データはソフトウェアのファイル構造内の結果フォルダに配置されます。</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ インポートをクリックします。 <ul style="list-style-type: none"> ✓ 結果ファイルの選択画面が表示されます。 ▶ TPSファイルを選択し、開くをクリックします。 ▶ 結果保存用のサブフォルダを選択し、OKをクリックします。 <ul style="list-style-type: none"> ✓ TPSファイルおよび関連するSPKファイル（存在する場合）が、選択された結果フォルダにコピーされます。
結果データのエクスポート	<p>このコマンドを使用して、1つ以上のデータベースおよび既存のスペクトルファイルを別のフォルダにエクスポートできます。</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ エクスポートをクリックします。 エクスポート画面が表示され、利用可能な結果データベースの概要が表示されます。 ▶ マウスクリックでコピーする結果データベースを選択します。CtrlキーまたはShiftキーを押しながら複数のデータベースを選択できます。 ▶ エクスポートをクリックして、フォルダの検索 (Find folder)画面を開きます。 ▶ ターゲットフォルダを選択し、OKをクリックします。 <ul style="list-style-type: none"> ✓ TPSファイルとSPKファイルが宛先フォルダにコピーされます。
結果ファイルの削除	<p>結果データを恒久的に削除できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ 削除をクリックします。 ▶ 結果ファイルの削除画面で、削除する結果データベースをマウスクリックで選択します。 ▶ 削除をクリックし、削除確認のメッセージに対してOKで確定します。 <ul style="list-style-type: none"> ✓ データが恒久的に削除されます。
個々のサンプルの結果を検索する	<p>既知のサンプル名をもとに、データベース内で個々のサンプルを検索できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ データ データ管理画面で、サンプル検索をクリックします。または、その他 サンプル検索メニュー項目を選択します。

Search for sample [3 file(s) found]

Search for:

Sample:

Search in (incl. subfolders):

Substring search

Date between: and:

Search results:

Results file	Folder	Technique	Method	Date
Au in electronic waste reproces	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019
Au in electronic waste reproces	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019
Au in electronic waste original r	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019

- ▶ **サンプル**入力フィールドにサンプル名を入力します。
- ▶ 名前の一部を入力してサンプルを検索するには、**部分検索**チェックボックスをオンにします。
- ▶ 測定した日付で検索範囲を制限するには、**日期间**チェックボックスをオンにします。
- ▶ **スタート**で検索を開始します。
 - ✓ 入力されたサンプル名を含むサンプルの結果がすべてテーブルに表示されます。
- ▶ 表示された結果データベースのいずれかを開くには、リストでそのデータベースを選択し、**開く**をクリックします。
 - ✓ 結果がメイン画面に表示されます。

10.2.3 ライン／波長ファイルのエクスポート

分析ラインと保存された主ピークを含むライン／波長ファイルは装置固有のもので、このファイルは、ICP-OES 装置を制御するコンピューターに保存されています。ライン／波長ファイルを別のコンピューターで使用するには、以下の手順を実行します：

- ▶ **その他** | **データ管理**メニューコマンドを使用するか、**≡**アイコンをクリックして、**データ** | **データ管理**画面を開きます。
- ▶ **種類**リストで、**波長ファイル**オプションを選択し、**エクスポート**をクリックします。
- ▶ ファイルの保存先フォルダを選択し、**OK**をクリックします。
 - ✓ 「lines.dat」という名前のファイルが、選択したフォルダに保存されます。

10.2.4 補正モデルの管理

補正モデルはスペクトル補正に使用されます。これらは、ある装置から別の装置へ転送することが可能です。補正モデルファイルの拡張子はMODです。

- ▶ **その他** | **データ管理**メニューコマンドを使用するか、**≡**アイコンをクリックして、**データ** | **データ管理**画面を開きます。
- ▶ **種類**リストで、**補正サンプル**オプションを選択します。

補正モデルのインポート

このコマンドを使用して、補正モデルをASpect PQにインポートします。

- 補正モデルのエクスポート
- ▶ インポートをクリックします。
 - ▶ インポートする補正モデルファイルを選択し、開くをクリックします。インポート補正モデルデータベース画面が表示されます。
 - ▶ インポートをクリックします。
 - ✓ 補正モデルがデータベースに転送されます。
- このコマンドを使用して、補正モデルを別のコンピューターで使用するためにエクスポートします。
- 補正モデルの削除
- ▶ エクスポートをクリックします。
 - ▶ エクスポート補正モデルデータベース画面で、目的のモデルを選択します。複数の選択が可能です。
 - ▶ エクスポートをクリックします。
 - ▶ 名前を付けて保存画面で、名前と保存先パスを入力し、保存をクリックします。
 - ✓ 補正モデルを含むファイルが保存されます。
- このコマンドで、必要でなくなった補正モデルを削除します。
- ▶ 削除をクリックします。
 - ▶ 補正モデルデータベース画面で目的のモデルを選択します。
 - ▶ 削除をクリックします。
 - ✓ 補正モデルがデータベースから削除されます。



注記


補正モデルを削除すると、メソッドが使用不能になる可能性があります。補正モデルがメソッドで使用されているかどうかの確認は行われません。

これについては次のリンクも参照してください：

- [スペクトル干渉の除去 - スペクトルの編集 | スペクトル補正画面](#) [▶ 84]


10.2.5 補正スペクトルの削除

不要になった補正スペクトルをデータベースから削除できます。

- ▶  アイコンをクリックしてデータ管理画面を開きます。
- ▶ 種類リストで、補正スペクトルオプションを選択し、削除をクリックします。
- ▶ 補正スペクトルデータベース画面で削除するスペクトルを選択し、削除をクリックします。
 - ✓ スペクトルが補正モデルで使用されているかどうかの確認が行われます。使用されていない場合、補正スペクトルは削除されます。

10.2.6 レポートテンプレートのインポート

外部で作成された印刷レポートテンプレートは、データ管理を通じてASpect PQにインポートする必要があります：

- ▶  をクリックしてデータ管理画面を開きます。
- ▶ 種類リストで、レポートオプションを選択し、インポートをクリックします。

- ▶ 開く画面でファイルを選択し、開くをクリックします。
レポートファイルの拡張子は「.lst」です。
- ✓ レポートテンプレートがASpect PQにインポートされます。次に、レポートテンプレートを印刷内容に割り当てます。


これについては次のリンクも参照してください：

📖 レポートテンプレート [▶ 117]

10.2.7 ラインのお気に入りへの管理

ラインのお気に入りは「**My Favorites**」画面で定義できます。これには、特定用途に使用される分析ラインと、そのラインに依存するメソッドパラメータが含まれます。ラインのお気に入りファイルの拡張子は「.fav」です。

ラインのお気に入りの
インポート

- ▶  をクリックして「**データ管理**」画面を開きます。
 - ▶ **種類リスト**で、お気に入りオプションを選択します。
- このコマンドを使用して、お気に入りのレコードをASpect PQにインポートします。

- ▶ **インポート**をクリックします。
- ▶ **お気に入り波長の詳細データベース画面**で**インポート**をクリックします。
- ▶ インポートするラインのお気に入りファイルを選択し、**開く**をクリックします。
- ✓ 確認メッセージの後、お気に入りレコードがラインのお気に入りに追加されます。

ラインのお気に入りの
エクスポート

- ▶ **エクスポート**をクリックします。
- ▶ **お気に入り波長の詳細データベース画面**で、目的のデータレコードを選択します。複数の選択が可能です。
- ▶ **エクスポート**をクリックします。
- ▶ **ターゲットファイル(新規または既存のファイル)**画面で名前と保存先パスを入力し、**保存**をクリックします。
既存のファイルをターゲットファイルとして使用することもできます。この場合、データレコードはそのファイルに統合されます。
- ✓ ラインのお気に入りのレコードを含むファイルが保存されます。

ラインのお気に入りの削除








- このコマンドを使用して、不要になったラインのお気に入りを削除します。
- ▶ **削除**をクリックします。
 - ▶ **お気に入り波長の詳細データベース画面**で、データレコードを選択します。
 - ▶ **削除**をクリックします。
 - ✓ 選択したレコードがデータベースから削除されます。

これについては次のリンクも参照してください：

📖 独自のラインのお気に入りを定義する [▶ 31]

10.2.8 ワークシートのインポート、エクスポート、削除



ワークシートは、「**データ管理**」画面でインポート、エクスポート、削除できます。エクスポート時には、保存されているメソッドやシーケンスを指定することも可能です。ワークシートの拡張子はWSTです。

- ▶ その他|データ管理メニューコマンドを使用するか、 アイコンをクリックして、データ|データ管理画面を開きます。
- ▶ 種類リストで、ワークシートオプションを選択します。
- ワークシートのエクスポート ▶  をクリックします。
- ▶ ワークシートを  画面で、該当するワークシートを選択します。ワークシートに含まれるメソッドおよびシーケンスもエクスポートするには、**シーケンスとメソッド** を含むオプションを有効にします。
- ▶  をクリックし、エクスポートファイルのフォルダとファイル名を入力します。
- ▶ 保存で入力を確定します。
✓ ワークシートは拡張子「WST」付きで保存されます。
- ワークシートのインポート ▶  をクリックします。
- ▶ ワークシートを  画面でワークシートを選択し、 をクリックします。ワークシートに含まれるメソッドおよびシーケンスもインポートするには、**シーケンスとメソッド** を含むオプションを有効にします。
- ▶ デフォルト画面でワークシートを選択し、開くをクリックします。
✓ ワークシートがインポートされます。
- ワークシートの削除 ▶ 削除をクリックします。
- ▶ 削除画面でワークシートを選択し、削除をクリックします。

10.3 結果のASCII/CSV形式での保存

- 測定結果および分析結果は、ASCII形式またはCSV形式で自動的または手動で保存できます。いずれのエクスポート形式でも、小数点の区切り文字および列の区切り文字は、**オプション|ASCII/CSVIエクスポート**画面で設定します。
- 連続データの自動エクスポート ▶ 連続データの自動エクスポートオプションを有効にすると、結果テーブルの各エントリが定義されたASCIIファイルに即座にエクスポートされます。このASCIIファイルの名前は、**オプション|連続ASCIIエクスポート**画面で指定します。
- 手動データエクスポート ▶ データを手動でエクスポートする場合は、結果テーブルからエクスポート対象の行を選択します。
- ▶ 結果テーブルでサンプルを選択します。
CtrlキーまたはShiftキーを押しながら、サンプル行をクリックして選択します。すべてのサンプル行を選択するには、**編集 | 全て選択 Ctrl+A**メニューコマンドを使用します。
 - ▶ **編集 | 選択を保存**メニュー項目を使用して名前を付けて保存画面を開きます。または、選択した行を右クリックして、コンテキストメニューから該当するメニュー項目を選択します。
 - ▶ ファイル名を入力し、OKで確定します。
データは、表計算ソフトで読み取り可能な形式（「.csv」拡張子付き）で保存されます。

これについては次のリンクも参照してください：

-  [エクスポートオプション \[▶ 132\]](#)
-  [連続ASCIIエクスポートのオプション \[▶ 132\]](#)

10.4 測定単位の指定

プログラム全体で使用可能な測定単位は、**データ|単位**画面で定義できます。

▶ **☰**アイコンをクリックして**データ|単位**画面を開きます。

3種類の推奨単位（溶液サンプル：mg/L、 μ g/L、ng/L、mg/kg(liq)；固体サンプル：mg/kg、 μ g/kg、ng/kg、m-%）を使用できます。これらの単位をオペレーターが変更することはできません。これら以外の単位は自由に定義できます。自由定義の単位については、変換係数を「係数」に入力する必要があります：

オプション	説明
単位	単位名（最大10文字）
コメント	単位に関するコメント（最大20文字）
ファクター	係数1は、1 μ g/Lまたは μ g/kgに相当します。係数1000は、1 ng/Lまたはng/kgに相当します
種類	固体 固体サンプルに関連する単位 液体 液体サンプル（溶液）に関連する単位 液体の比重 秤量が必要な液体サンプル（例：油）に関連する単位

ユーザー定義のエントリを管理するには、以下のボタンを使用します。

ボタン	説明
追加	リストの末尾に新しい行を追加します
挿入	現在選択している行の上に新しい行を挿入します
削除	ユーザー定義単位のみ（推奨単位は削除不可）
保存	変更内容と入力内容を保存します

10.5 原液およびQCサンプル用データベースの管理

頻繁に使用される原液標準およびQCサンプルのデータベースは、**データ|ストック標準/QCサンプル**画面で管理します。これらのデータベースでは、エントリの追加・削除・編集が可能です。これらの原液標準およびQCサンプルは、メソッド開発時に利用可能です。

▶ **☰**アイコンをクリックして**データ|ストック標準/QCサンプル**画面を開きます。

▶ **ストック標準**または**QCサンプル**オプションを選択します。

▶ テーブル内で標準のパラメータを入力または編集します：

テーブル列	意味
名前	ここに標準名を入力します（最大20文字）。
単位	標準の単位名を選択します（最大10文字）。
元素と濃度	元素濃度は、「元素記号濃度」の形式で、選択した単位で入力します（例：Fe 0.5、Cu 10、Co 0.005）。または、濃度を使用して濃度入力入力フィールドを開き、各元素に対して濃度を割り当てることもできます。

エントリの管理には以下のボタンを使用します：

ボタン	機能
追加	リストの末尾に新しい行を追加します。
挿入	現在選択されている行の上に行を挿入します。
削除	マークした行を削除します。
保存	原液標準/QCサンプルのリストを保存します。
濃度	選択した標準の元素と濃度を入力するための入力画面を開きます。

10.6 定義済みコメントの作成

ユーザー定義コメントは、以下の操作に対して設定できます：

- メソッドの保存
- シーケンスの保存
- 再処理の開始
- 測定の開始

ユーザー定義のコメントは、対応する画面の説明フィールドの横にある...をクリックすることで挿入できます。

コメントの作成

- ▶ アイコンをクリックしてデータフォルトの説明画面を開きます。
- ▶ カテゴリを選択リストから処理を選択します。
- ▶ テンプレートの編集をクリックして、コメントリストを開きます。
- ▶ 新規をクリックして新しいコメントを作成します。名前に、コメント選択時に表示される説明を入力します。テキストフィールドに、コメント本文を入力します。
- ▶ コメントは、変更で編集、削除で選択リストから削除できます。

10.7 Windowsクリップボードの使用

結果データを
クリップボードにコピーする

このアプリケーションでは、選択したサンプルの結果をWindowsクリップボードに直接コピーでき、他のWindowsアプリケーションで利用可能になります。

対応するコマンドは、編集メニューにあります：

編集メニュー	説明
Ctrl+表示列のみ Ctrl+C	現在のテーブルに表示されているサンプル結果をコピーします。
Ctrl+全列	すべてのテーブルのサンプル結果をコピーします。
列のタイトル	オン（チェックマーク付き）の場合、列ヘッダーもコピーアクションに含まれます。

- ▶ 結果リストのテーブルでサンプルを選択します。
 - CtrlキーまたはShiftキーを押しながら、サンプル行をクリックして選択します。
 - すべてのサンプル行を選択するには、編集 | Ctrl+全列メニューコマンドを使用します。
- ▶ 必要に応じて、編集 | 列のタイトルメニューコマンドを有効にすると、コピーアクションに列ヘッダーが含まれます。

グラフィックスを
スクリーンショットとして
コピーする

- ▶ 希望するメニューコマンドを実行して、結果をWindowsクリップボードにコピーします。

検量曲線、強度信号、発光信号などのグラフィック画面を、スクリーンショットとしてWindowsクリップボードにコピーすることも可能です。

- ▶ グラフ上で右クリックします。2つのコピーコマンドを含むコンテキストメニューが表示されます。
- ▶ コピー対象として「グラフのみ」または「表示されている画面全体」のいずれかを選択します。
 - ✓ 選択されたオブジェクトはクリップボードにコピーされ、他のWindowsアプリケーションで利用可能になります。

11 ASpect PQのカスタマイズ

オプション画面では、ASpect PQ全体の動作に適用される以下の設定を行うことができます：

- 表示オプション
- ファイルの保存パス
- データエクスポート用のパラメータ
- 分析シーケンス、検量線、ブランク補正に関する一般設定

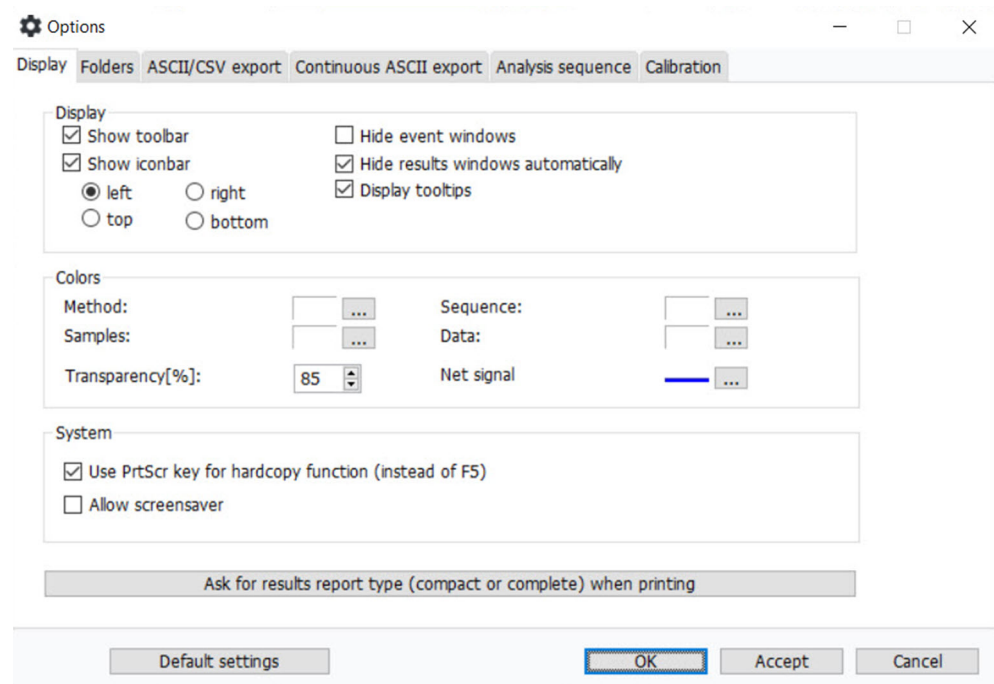
設定した内容は、ASpect PQを終了・再起動した後も有効です。すべての設定を初期値に戻すには、デフォルト設定ボタンを使用します。

その他、オプションメニュー項目を使用して、オプション画面を開きます。

11.1 表示オプション

オプション表示画面で、ワークスペースに表示する機能を定義できます。
スクリーンショット

オプション表示画面



オプション	説明
ツールバーを表示	測定ルーチン用のボタンが並ぶツールバーを表示します
アイコンバーを表示	ボタンの大きいアイコンバーを表示し、素早いアクセスを可能にします（アイコンバーの位置は選択可能） アイコンバーの位置は、マウスでドラッグしても変更できますが、設定は次回起動時まで保存されません。
イベントウィンドウを非表示	イベント画面を非表示にします（例：遅延時間） メッセージはメイン画面のステータスバーに表示されます。
自動的に結果ウィンドウを非表示	サブウィンドウ（例：検量線画面）を開くと結果画面が非表示になります。サブ画面を閉じると結果画面が再表示されます。

オプション	説明
ツールチップの表示	マウスオーバー時に、アイコンボタンやメット、シーケンス、サンプルID画面の列ヘッダーに簡易ヘルプテキスト（ツールチップ）を表示します。
色	...ボタンをクリックすると色選択ダイアログが表示されます。ここで、リストの背景として、定義済みまたは新規に定義した色を選択できます。
ハードウェア機能 (F5の代用)にPrtScrキーを使用	デフォルトでは、F5キーでスクリーンショットの印刷が開始されます。この場合、キーボードの印刷キーはWindowsのクリップボード機能に使用されます。このチェックボックスをオンにすると、印刷ボタンでスクリーンショットの印刷を開始します。このオプションは、ASpect PQの再起動後にのみ有効になります。
スクリーンセーバーを許可	有効にすると、入力の一時停止中にWindowsのスクリーンセーバーが起動します。
印刷時に結果レポートの種類(コネクタ外か全出力)を確認	ファイル印刷 アクティブウィンドウメニュー項目から結果画面を印刷する際に、「完全版」または「簡易版」のレポートを選択できます。このボタンをクリックすると、常にこの結果レポートタイプを使用の選択がリセットされ、レポートタイプを再度選択できるようになります。

11.2 保存パス

インストール時に、データ保存用のパスが定義されます。これらのパスはオプション|フォルダ画面に表示され、一部はここで編集できます。

フォルダ	説明
プログラム	実行可能プログラムファイルのインストールパス
作業ディレクトリ	ユーザーデータ用ディレクトリ この作業フォルダにはサブフォルダが含まれます。これは、インストール時またはオプションのユーザー管理機能により定義されます。
一時データ	一時アプリケーションファイル用のディレクトリ。
サンプル情報	サンプル情報ファイルのオープンや保存に使用されるデフォルトパス このパスは変更可能です。...をクリックして新しいフォルダを選択します。サンプル情報データのオープンや保存時に、デフォルトパスとは異なるパスを選択することも可能です。
エクスポート/インポート	メソッドおよびシーケンスデータのインポート/エクスポート、ならびに結果データのCSVファイルのエクスポートに使用されるデフォルトのパス このパスは変更可能です。...をクリックして新しいフォルダを選択します。エクスポートおよびインポート時に、異なるパスを選択することもできます。
結果	結果ファイル用フォルダ このデフォルトフォルダには、結果保存用のサブフォルダを含めることができます。これらのフォルダは、測定開始時に結果ファイルの保存に利用できます。
アプリケーションデータ	ASpect PQが必要なデータを格納するデータ用ディレクトリ

11.3 エクスポートオプション

オプション|ASCII/CSVエクスポート画面では、結果データのASCII形式によるエクスポートに関するパラメータを設定できます。これらのパラメータは、自動連続データエクスポートと手動によるデータエクスポートの両方に適用されます。

設定

オプション	説明
小数点以下の区切り	小数点の区切り文字を定義します
リスト区切り	リスト内の各要素を区切る文字を定義します

結果リストをエクスポートするには、**小数点以下の区切り**および**リスト区切り**を選択します。

エクスポートのための結果フィールド フィールドでは、結果テーブルのどの列をASCIIファイルにエクスポートするかを定義できます。**all**オプションは、結果リストのすべての列（すべてのサブタブを含む）をエクスポートします。**選択したフィールドのみ**オプションでは、エクスポートする列を選択できるリストが開きます。

これについては次のリンクも参照してください：

- [結果のASCII/CSV形式での保存 \[▶ 126\]](#)

11.4 連続ASCIIエクスポートのオプション

オプション|連続ASCIIエクスポート画面では、分析シーケンス中の結果データの自動エクスポートを有効にします。プロセス画面および結果画面に新しい行が出力されるたびに、エクスポートファイルが更新されます。結果データは既存のファイルに追加されます。

その他のエクスポートオプションは、**オプション|ASCII/CSVエクスポート**画面で定義します。

結果データのエクスポート

結果データの連続ASCIIエクスポートチェックボックスをオンにすると、エクスポート機能が有効になります。次にファイル名のオプションを選択する必要があります：

オプション	説明
"メソッド名".csv	ファイル名はメソッド名に対応します。ファイル名拡張子は「.csv」です。ファイルはデフォルトのエクスポート/インポートパス (オプション フォルダ -画面) に保存されます。
"結果ファイル名".csv	ファイル名は結果ファイル名に対応します。ファイル名拡張子は「.csv」です。ファイルはデフォルトのエクスポート/インポートパス (オプション フォルダ -画面) に保存されます。
その他	ファイル名および保存パスは自由に定義できます。 ... ボタンをクリックすると、名前を付けて保存デフォルト画面を開き、保存先パスとファイル名を指定できます。 データは、新しい名前が指定されるか、別の命名オプションが選択されるまで、このファイルに継続的に書き込まれます。

オプション	説明
サンプルごとに個別のファイルを作成(結果の行番号とサンプル名がファイル名に追加)	ファイル名には、結果リストの行番号およびサンプル名が付加されます。使用できない文字はアンダースコアに置き換えられます(例: Testmethod-001 QC 1 mg_L.csv)。

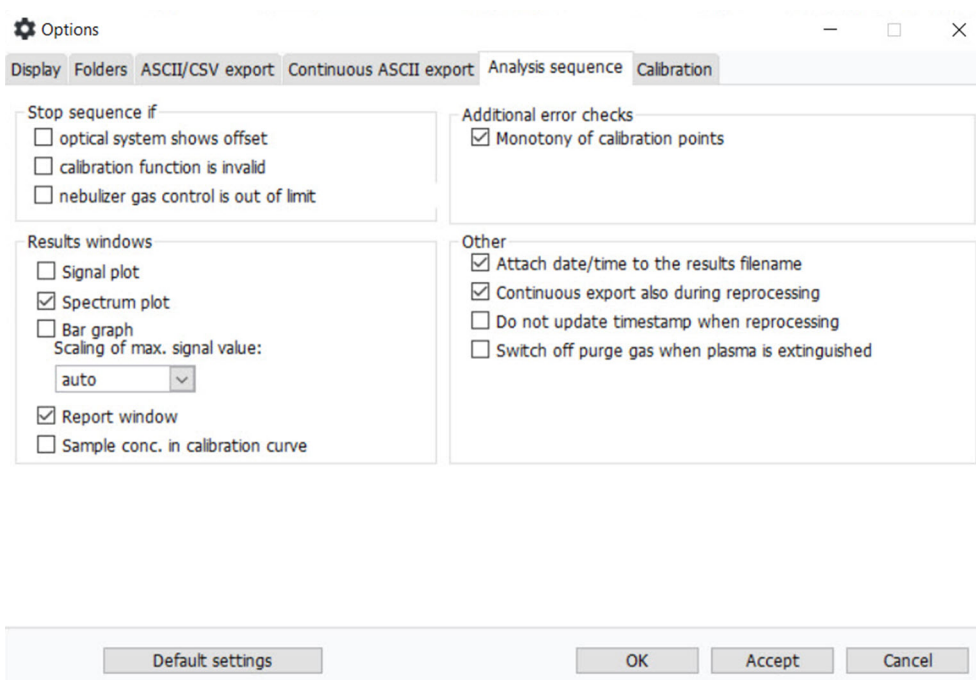
スペクトルのエクスポート スペクトルをエクスポートするには、**スペクトルの連続エクスポート(CSV)**オプションを有効にし、保存パスを選択します。

スペクトルは、指定されたエクスポートパスにCSVファイルとして追加で出力されます。ファイル名は「ListRow-SampleName-LineName-RepeatMeasurement」の形式で生成されます(例: 0007-sample-A1309-02.csv)。

11.5 分析シーケンスのオプション

オプション|分析シーケンス画面では、分析シーケンスに関する一般的なオプションを定義できます。スクリーンショット

オプション|分析シーケンス画面



以降のエラー発生後にシーケンスを中止する

分析中に以下のエラーが監視され、発生した場合はシーケンスをキャンセルできます:

オプション	説明
光学系はオフセット	波長設定またはNe補正に異常がある場合に、シーケンスを停止します
検量線機能が無効	検量線関数を計算できなかった場合、シーケンスを停止します
ネブライザーガスの制御が限界	ネブライザーの制御値が上限を超えた場合に停止します 検量線中に、ネブライザーの流量制御値が決定されます。以降の分析中にこの制御値が変化した場合、それは、粒子によるネブライザーの詰まりを示唆しています。

追加のエラーチェック

オプション	説明
検量線ポイントの単調さ	検量線点は単調性について検査されます。 単調性テストは、より高い標準濃度がより高い測定値につながっているかどうかを確認するために実施されます。

結果表示

オプション	説明
シグナル表示	分析シーケンス中に表示される画面に、測定された信号のグラフが時間の関数として示されます。
スペクトル表示	分析シーケンス中に表示される画面に、記録されたスペクトル範囲のグラフが示されます。
棒グラフ	測定された強度値が棒グラフで表示されます
M号最大値のスケール	信号曲線表示用の測定値軸の最大値を定義します 自動：軸の自動スケールリング。 代わりに、ビュー スケールメニュー機能を使用してこの設定を行うこともできます。
レポートウィンドウ	分析シーケンス中に表示される画面に、プラズマの状態情報が示されます。
検量線とサンプル濃度	検量線とサンプル濃度画面に、現在の検量曲線および既に測定済みであれば再検量曲線が表示されます。サンプル測定後、発光から計算された補正前濃度が赤色の補助線で強調表示されます。加算検量線が使用されている場合は、変換された検量曲線が表示されます。

その他

オプション	説明
結果ファイル名に日/時を加える	測定開始時のPC名および時刻が、結果ファイル名に自動的に追加されます。
再計算中も自動的にエクスポート	結果の再処理後、自動的にエクスポートが実行されます。
再計算時にタイムスタンプを更新しない	結果の再処理後でも、元の測定時間が保持されます。
プラズマ消火時にパージガスをストップ	プラズマが消火された場合、パージガスを停止してガス消費を抑えます。

これについては次のリンクも参照してください：

- 検量線 [▶ 89]
- 校正パラメータの入力 (メソッド | 検量線画面) [▶ 39]

11.6 検量線とブランク補正の一般設定

オプション|分析シーケンス画面で、検量線に関する基本設定を行い、ブランク補正手順を選択できます。

検量線

このグループでは、検量線の基本設定を行います。すべてのチェックボックスはデフォルトでオフになっています。

オプション	説明
Correlation coefficient	検量曲線の適合度を示す比率を選択します R：相関係数 R2！：決定係数 R2(adj.)：調整済み決定係数
信頼区間の代わりに予測を表示	有効にすると、検量線の予測区間が表示されます。信頼区間はデフォルトで提供されます。
"自動"は有理関数の代わりに2次関数と比較	「自動」は、検量線関数の自動選択を示します。有効にすると、2次関数が比較で使用されます。デフォルト設定は分割比率関数です。

オプション	説明
0の代わりに平均濃度の傾きを計算	有効にすると、検量線範囲の平均濃度に対して検量線の傾きが計算されます。デフォルトでは、濃度0に対する傾きが計算されます。



ブランク補正

注記

上記のすべてのオプションは、DIN 38402およびISO 8466-2に基づく2次検量線関数の計算との互換性を確保するために有効化する必要があります。

ブランク補正は、2種類の計算方法（Conc.1ベースまたはConc.2ベース）のいずれかを使って計算できます。

Conc.2ベースの計算では、まずブランクのサンプルIDに基づいてブランクの元濃度（Conc2_{BV}）が算出されます。Conc2_{BV}は、サンプルのConc.2を求める際に考慮されます。

Conc.1ベースの計算では、サンプルから直接求めたブランク濃度（Conc1_{Blank}）を使用してサンプル濃度を算出します。このメソッドは、サンプルIDの情報（例：希釈）がブランク溶液の濃度に大きく影響しない場合に使用でき、ブランクにはサンプルID情報が入力されません。

予備希釈された液体原サンプルに対する計算例：

- Conc.1ベース： $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} - \text{Conc1}_{\text{Blank}}) * \text{DF}_{\text{Sample}}$
- Conc.2ベース： $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} * \text{DF}_{\text{Sample}}) - \text{Conc2}_{\text{Blank}}$

Conc1 _{Sample}	サンプルIDの情報を考慮しないサンプルの濃度
Conc2 _{Sample}	サンプルの元濃度
Conc1 _{Blank}	サンプルIDの情報を考慮しないブランクの濃度
Conc2 _{Blank}	ブランクの元濃度
DF _{Sample}	サンプルの希釈係数

ブランク補正のデフォルト設定は、Conc.2ベースメソッドです。ブランクのサンプルIDを考慮せず、より簡略なConc.1ベースメソッドに切り替えるには、**濃度1に基づくブランク補正オプション**を有効にします。

検出限界（LOD）と定量限界（LOQ）

検出限界と定量限界の係数と繰り返し測定回数は編集可能です。計算された検出／定量限界は、**検量線画面**に表示されます。既存の結果に設定を適用するには、結果の再処理が必要です。使用した係数と繰り返し測定回数は、**検量線画面**、および**検量線および結果／ブランク測定**の印刷出力に表示されます。

係数と測定回数を編集するには、**LOD** および **バックグラウンド** をクリックします。以下のデフォルト設定が提供されています：

パラメータ	値
ファクタ-LOD	3
ファクタ-LOQ	9
繰り返し	11

12 外部ジョブ管理システムとのデータ交換の設定

ASpect PQから、測定結果をASCII/CSV形式でラボ情報管理システム（LIMS）やその他の外部プログラムへデータインターフェース経由でエクスポートできます。

また、LIMSやMicrosoft Officeアプリケーションなどの外部プログラムから、サンプル情報データ（サンプルID）をASCII/CSV形式でインポートすることも可能です。

12.1 測定結果のエクスポート

エクスポートオプションの定義

測定結果は、ASCII/CSV形式のテキストファイルとして自動または手動でエクスポートできます。これにより、LIMSなどの他のアプリケーションでの後処理が可能になります。

- ▶ **その他** | オプションメニュー項目を使用して、オプション画面を開きます。
- ▶ **フォルダ** - タブの **エクスポート** / **インポート** で、結果データの保存パスを定義します。
- ▶ **ASCII/CSV** | **エクスポート** タブで区切り文字を定義します：
 - 小数点以下の区切り：小数点の区切り文字を選択します。
 - リスト区切り：リスト要素の区切り文字を選択します。
- ▶ 結果エクスポートのフィールドを定義します：
 - **all**：すべてのサブタブを含む結果リストのすべての列をエクスポートします。
 - **選択したフィールドのみ**：... をクリックするとリストが開き、エクスポートする列を選択できます。
- ▶ 承認ボタンをクリックしてエクスポート設定を確定します。
 - ✓ これでエクスポートオプションが定義されました。設定は自動および手動エクスポートの両方に適用されます。

自動エクスポートの設定

分析シーケンス中に結果データを自動エクスポートするよう設定できます。新しい行がプロセス/結果画面に出力されるたびに、ソフトウェアはエクスポートファイルを即座に更新します。ソフトウェアにより、既存のファイルにデータが追記されます。

- ▶ オプション画面で **連続ASCII** | **エクスポート** タブを開きます。
- ▶ **結果データの連続ASCII** | **エクスポート** チェックボックスをオンにします。
- ▶ エクスポートファイル名を定義します：
 - **"メソッド名".csv**：メソッド名に対応するファイル名（拡張子「.csv」）。
 - **"結果ファイル名".csv**：結果ファイル名に対応するファイル名（拡張子「.csv」）。
 - **その他**：... ボタンをクリックして名前を付けて保存デフォルト画面を開きます。保存パスとファイル名を指定します。
 - ✓ 新しい名前を付けるか、別のファイル命名オプションを選択するまで、ソフトウェアは継続的にデータをこのファイルに書き込みます。
- ▶ サンプルごとにファイルを作成する場合は、**サンプルごとに個別のファイルを作成**（結果の行番号とサンプル名がファイル名に追加）チェックボックスをオンにします。

✓ ソフトウェアにより、結果リストの行番号とサンプル名がファイル名に追加されます。使用できない文字はアンダースコアに置き換えられます（例：Testmethod-001 QC 1 mg_L.csv）。

- ▶ スペクトルも自動エクスポートする場合は、**スペクトルの連続エクスポート(CSV)** チェックボックスをオンにします。エクスポートパスで保存パスを指定します。
- ▶ **承認** ボタンをクリックしてエクスポート設定を確定します。
- ▶ **分析シーケンス** タブに切り替えます。
- ▶ 再処理後も結果を自動的にエクスポートする場合は、**再計算中も継続的にエクスポート** チェックボックスをオンにします。
- ▶ **OK** をクリックして画面を閉じます。
 - ✓ これで自動データエクスポート設定が完了しました。

結果の手動エクスポート

測定結果は、手動でもエクスポート可能です。

- ▶ メイン画面で、**結果** タブに切り替えます。
- ▶ 結果リストでサンプルを選択します。
CtrlキーまたはShiftキーを押しながら対象のサンプル行をクリックして、エクスポートするデータを選択します。
すべてのサンプル行を選択するには、**編集 | 全て選択Ctrl+A**メニュー項目を使用します。
- ▶ **編集 | 選択を保存**メニュー項目を選択します。
- ▶ **名前を付けて保存**デフォルト画面でファイル名を入力します。 **OK** をクリックして入力を確定します。
 - ✓ ソフトウェアは、結果をASCII/CSV形式（拡張子「.csv」）でエクスポートします。
- ▶ **編集 | コピー表示列のみCtrl+C** または **コピー全列** メニュー項目を選択すると、データがクリップボードにコピーされます。Ctrl+Vキーを使って、開いているExcelファイルにデータを貼り付けることができます。

データ形式

ソフトウェアは、指定されたリスト区切り文字を使用してテキストファイル内の各項目を区切ります。各行の末尾には改行文字（CR/LF）が付加されます。

- エクスポートファイルは、装置の情報、使用されたソフトウェアのバージョン、ファイル作成日時を含むヘッダーデータから始まります。
- 日付の書式は、Windowsのコントロールパネルの設定に従います。短い日付形式が使用されます。
- 空白行の後に、エクスポート対象のフィールドリストが続きます。
- ヘッダーデータは一度だけ生成されます。ヘッダーデータの後に、測定値が続きます。

エクスポートファイルの例：

```

Instrument: PQ 9200 #10587200262BB0101 Tech: ICP-OES
SW-Version: ASpect PQ 1.3.2.2007 Created: 29.10.2024 14:04

Nr.;Name;Linie;Typ;Einheit;Konz.1;SD1;RSD%;VB;VF;Einheit;
Konz.2;SD2;RSD%;VB;100%
norm.;QC;QC;QC;Bem.;Ints.;SD(Ints.);RSD%;Datum;Zeit;
Norm.Ints.;SD;RSD%;Masse;Einh.;Feuchte[%];RHF[%];Einw.[mg];
Fehler;Pos;Vor-VF;Einw.[g];Vol.[mL];Ges.einw.
[[g];Name(2);AS-VF;BW-
Korr.;Faktor;Einzelwerte(Ints.);;Untergrund(Ints.);
1;Sample1;Co237.863;0;µg/L;1968;47.49;
2.41;215.9;1;mg/L;1.968;0.0475; 2.41;0.2159;;;;;>
KAL;257059;6194; 2.41;29.10.2024;14:04;;;;;;101;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;256411;251214;263551;20389;9786;27849;
2;Sample1;Ni231.604;0;µg/L;1537;62.95;
4.10;93.89;1;mg/L;1.537;0.0630;
4.10;0.0939;;;;;254729;10328;
4.05;29.10.2024;14:04;;;;;;101; 1.000;;;;; 1;aus;
0.00;246002;252054;266131;4598;16546;33369;
3;Sample2;Co237.863;0;µg/L;2289;17.01;
0.74;254.0;1;mg/L;2.289;0.0170; 0.74;0.2540;;;;;>
KAL;298914;2219; 0.74;29.10.2024;14:04;;;;;;102;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;300902;299321;296520;27198;27379;28180;
4;Sample2;Ni231.604;0;µg/L;1755;20.57;
1.17;108.4;1;mg/L;1.755;0.0206; 1.17;0.1084;;;;;>
KAL;290377;3374; 1.16;29.10.2024;14:04;;;;;;102;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;294115;287557;289459;26485;9243;18241;

```

図1 CSVエクスポート

12.2 サンプル情報ファイルのインポート

LIMSやMicrosoft Officeアプリケーションを使用して、ASCII/CSV形式のサンプル情報ファイル（サンプルID）を作成し、手動でインポートできます。

インポートを正常に行うには、サンプル情報ファイルの各行が改行文字（CR/LF）で終わっていることを確認してください。

有効なサンプル情報ファイルの例：


```

Sample1;101;1.000000;mg/L;0.001;0;;100.000000;ID154-21;
1.000000;0;-1.000000;0.000000;alle
Sample2;102;1.000000;mg/kg(liq);0.001;2;5.6;100.000000;
ID154-22;5.000000;0;-1.000000;0.000000;Co

```

図2 CSVインポート

サンプルIDの手動インポート

- ▶ サンプルIDは、次のいずれかの方法で開くことができます：
 - ツールバーで、サンプルフィールドの横にある  アイコンをクリックします。
 - ファイル|サンプル情報ファイルを開くメニュー項目を選択します。
 - サンプルID画面で、開くをクリックします。
- ▶ 開くデフォルト画面で、ファイルを選択します。
 - ✓ サンプルIDサンプルID画面に表示され、次の測定で使用できます。

12.3 結果エクスポートフィールド

フィールド名	説明	データ型
No.	シーケンスリスト内の番号	整数
名前	サンプル、標準、またはQCサンプル/標準の名称	文字列、最大20文字
波長	元素ライン	文字列、最大10文字

フィールド名	説明	データ型
種類	分析対象または内部標準 0 = 分析対象 IS1 ... x = 内部標準	整数
単位1	濃度1の単位（分析用サンプルの濃度）	文字列、最大10文字
濃度1	サンプル／標準中の分析対象の濃度	小数
SD1	濃度1の標準偏差（平均値統計）	小数
RSD%	濃度1の相対標準偏差（平均値統計）	小数
Cf	濃度1の信頼区間	小数
DF	サンプルの自動希釈用希釈係数（濃度計算に使用）	小数
単位2	濃度2の単位（元サンプルの濃度）	文字列、最大10文字
濃度2	元サンプルの濃度	小数
SD2	濃度2の標準偏差（平均値統計）	小数
RSD%	濃度2の相対標準偏差（平均値統計）	小数
Cf	濃度2の信頼区間	小数
100% 正規化	濃度2（総濃度に対する百分率で正規化）	小数
QC	QCおよび検量線情報	文字列、最大30文字
QC	QCおよび検量線情報	文字列、最大30文字
QC	QCおよび検量線情報	文字列、最大30文字
残り	コメント	文字列、最大40文字
Ints.	測定された個別強度値の平均値	小数
SD (Ints.)	標準偏差（平均値統計）	小数
RSD%	相対標準偏差（平均値統計）	小数
日付	測定日	Windowsの短い日付形式設定（例：2024-01-30）
時間	測定時刻	hh:mm（例：14:29）
正規化強度	（ASpect PQでは使用されない）	/
SD	（ASpect PQでは使用されない）	/
RSD%	（ASpect PQでは使用されない）	/
重量	（ASpect PQでは使用されない）	/
単位	（ASpect PQでは使用されない）	/
湿度[%]	（ASpect PQでは使用されない）	/
RHF[%]	（ASpect PQでは使用されない）	/
重量 [mg]	（ASpect PQでは使用されない）	/
I7-	測定中にエラーが発生した場合のエラーメッセージ	文字列
位置	オートサンプラー上のサンプル位置	整数
Pre-DF	予備希釈係数。 オートサンプラーにセットされる前、またはオートサンプラーを使用しない	小数

フィールド名	説明	データ型
	場合に分光器へ供給される前に、元のサンプルに適用された希釈係数。この係数は、元のサンプルの濃度（濃度2）を算出するために必要です。	
重量 [mg]	初期重量（ミリグラム）。サンプル調製で溶解された元サンプルの重量（濃度2の計算に使用）	小数
容量 [mL]	秤量されたサンプル分を希釈するために使用された溶媒の体積（mL）（濃度2の計算に使用）。	整数
トータル重量 [g]	サンプルと希釈液の合計秤量重量（g）	小数
名前(2)	追加のサンプル名	文字列、最大20文字
AS-DF	オートサンプラーまたは希釈システムの希釈係数	小数
ブランク補正	ブランク補正 Ⓜ ブランク補正は実行されません。 Ⓜ 元サンプルの濃度を計算する際、シーケンス内で最後に測定されたブランク値が差し引かれます。	0 1
ファクター	(ASpect PQでは使用されない)	/
単一値(Ints.)	強度測定の個別値	スペースで区切られた小数値の文字列（最大1000文字）
バックグラウンド(Ints.)	元素ラインにおけるバックグラウンド強度	スペースで区切られた小数値の文字列（最大1000文字）

12.4 サンプル情報ファイルのフィールド

フィールド名	説明	データ型
位置	オートサンプラー上のサンプル位置	整数
名前	サンプル、標準、またはQCサンプル/標準の名称	文字列、最大20文字
Pre-DF	予備希釈係数。オートサンプラーにセットされる前、またはオートサンプラーを使用しない場合に分光器へ供給される前に、元のサンプルに適用された希釈係数。この	小数

フィールド名	説明	データ型
	係数は、元のサンプルの濃度（濃度2）を算出するために必要です。	
単位	サンプルの濃度単位。	文字列、最大10文字
ファクター	単位係数 係数1は、1 µg/Lまたはµg/kgに相当します。係数1000は、1 ng/Lまたはng/kgに相当します	文字列、最大10文字
種類	単位タイプ 0 = 液体 1 = 固体 2 = 液体（重量法）	整数
重量 [mg]	初期重量（ミリグラム）。サンプル調製で溶解された元サンプルの重量（濃度2の計算に使用）	小数
容量 [mL]	秤量されたサンプル分を希釈するために使用された溶媒の体積（mL）（濃度2の計算に使用）。	整数
トータル重量 [g]	サンプルと希釈液の合計秤量重量（g）	小数
名前(2)	追加のサンプル名	文字列、最大20文字
AS-DF	オートサンプラーまたは希釈システムの希釈係数	小数
ブランク補正	ブランク補正 0 ブランク補正は実行されません。 1 元サンプルの濃度を計算する際、シーケンス内で最後に測定されたブランク値が差し引かれます。	0 1
サンプル種類	サンプルまたはブランク 0 = サンプル 1 = サンプル - ブランク	整数
元素	サンプル中の分析対象の元素またはライン all = メソッドのすべての元素 カンマ区切りの元素記号（例：Fe、Co、Ni）	文字列、最大10文字

13 オプション FDA 21 CFR パート 11 コンプライアンスモジュール

ASpect PQのオプション機能であるFDA 21 CFRパート11準拠モジュールには、電子記録および電子署名に関するFDAの要件（21 CFRパート11）に従って、以下の機能が含まれます：

- ユーザー管理
- 電子署名
- 監査証跡
- ファイルを故意および過失のデータ改ざんから保護するAJファイル保護

ユーザー管理では、デフォルトで6つのユーザーレベルが作成されます。ユーザーレベルは自由に設定でき、追加することも可能です。

ユーザー管理がインストールおよび構成済みの場合は、ASpect PQのシステムメニュー項目が有効化され、そこからユーザー管理機能にアクセスできます。

ユーザーデータに対する変更は、該当画面を閉じる際に暗号化されたデータベースに永久保存されます。

13.1 ユーザー管理

13.1.1 ユーザー管理 - 表示および設定

ユーザー管理の設定は、ユーザー管理パッケージの初期インストール時またはそれ以降の任意のタイミングで、管理者権限を持つユーザーによって行うことができます。

各ユーザーにはアカウントが作成されます。アカウントには、所定のユーザープロファイルが含まれます。ユーザーアカウントが不要になった場合は、無効化または使用禁止にできます。ユーザーアカウントは削除できません。

- ▶ ASpect PQ内で、システム|**User Management**メニュー項目を開きます。
- ▶ または、Windowsメニューの**ASpect PQ|User Management**から、ASpect PQの外部でユーザー管理を開くこともできます。
- ▶ ユーザー管理権限を持つユーザーのログインデータを入力します。
 ✓ **User Management**画面が表示されます。

User Management画面

この画面には、登録済みのユーザー名と対応する氏名のリストが表示されます。画面の右側には、選択したユーザーのプロファイルの詳細が表示されます。

ユーザープロファイルの詳細

リストで選択されたユーザーについて、以下のデータが表示されます：

オプション	説明
User ID	ユーザーのログイン名
User level	割り当てられたユーザーレベルとユーザー権限
Full name	ユーザーの氏名
E-signature	Yes：ユーザーは結果データに電子署名する権限を持っています。 No：ユーザーには電子署名の権限がありません。
Status	Active：使用が許可されているユーザー名（緑色の円）。 Disabled：ユーザー名は無効化されており、使用できません（赤色の円）。

オプション	説明
Passwd. protect.	Active : ユーザーログインにはパスワードが必要です。 Not active : ユーザーログインはパスワードなしで可能です。 錠前アイコンをクリックすると Modify user data 画面が開きます。錠前が閉じている場合、パスワード保護は有効です。
Valid until:	Indefinitely : パスワードが期限切れになりません。 Date/days : 指定された期間の終了時に、ユーザーはパスワードを変更する必要があります。 このオプションは、Active Directory経由でログインする場合には表示されません。

ボタン

ボタン	説明
New ...	新しいユーザーの作成 Add user data 画面が表示されます。
Modify ...	選択したテーブル行のユーザーデータを変更します 選択されたユーザーの Modify user data 画面が表示されます。 この画面は、ユーザーをダブルクリックしても開けません。
Active users only	有効なユーザーのみを表示します
Audit trail	イベントレポートを開きます
Permissions	ソフトウェア内でユーザー権限を割り当てます
Exit	アプリケーションを終了します

13.1.2 ユーザーレベルの設定

FDA 21 CFRパート11準拠モジュールのバージョン2.0以降、ユーザーレベルを設定するための新機能がユーザー管理に追加されました。従来のソフトウェアバージョンでは、ユーザーレベルに割り当てられる権限は固定されていましたが、現在ではユーザーレベルを自由に設定できます。ソフトウェア機能のリストで、各ユーザーレベルでアクセス可能とする機能を有効化または無効化してください。

利用可能なユーザーレベルの数

ユーザー管理では、デフォルトで6つのユーザーレベルが作成されます。ユーザーレベルは自由に設定でき、追加することも可能です。

- 管理者レベル (レベル0)
管理者はユーザー管理に関するすべての権限を持ち、ユーザー管理の設定、ユーザーレベルの権限設定、ユーザーの作成やブロックを行うことができます。デフォルトでは、管理者はASpect PQに対する権限を持たず、ソフトウェアにログインすることはできません。
- レベル1
このレベルのユーザーは、メソッド開発とルーチンに関するASpect PQのすべての権限を持っており、ソフトウェアの設定も可能です。
- レベル2~4
これらのレベルのユーザーは、分析操作に関する段階的な権限を持ち、レベル2 > レベル3 > レベル4が適用されます。ASpect PQの設定権限は持ちません。
- ユーザレベル5
このレベルのユーザーは、ユーザー管理へのログイン権限と、ASpect PQに対する最小限の権限 (例: 監査目的) を持ちます。

オプションで、特別な設定のために最大4つの追加レベル (レベル6~9) を作成できます。

ユーザーレベルの設定

- ▶ **User Management**画面で、**Permissions**をクリックします。
✓ **Change user permissions**画面が表示されます。

- ▶ 権限／レベルマトリクスでは、チェックボックスをオンにすることで、各レベル内で機能を有効化できます。
チェックボックスを右クリックして、コンテキストメニューからそのレベルのすべてのチェックマークをオン／オフしたり、別のレベルの権限を適用したりできます。
- ▶ マトリクスにレイヤーを追加したい場合は、**Configure**をクリックします。**Additional user levels (max.4)**:オプションを有効にし、リストで希望する数値を設定します。
- ▶ 権限の割り当てをデフォルト設定にリセットしたい場合は、**Configure**をクリックします。**Reset permissions and levels to default**オプションを有効にします。すでに追加のユーザーレベルがユーザーに割り当てられている場合、対応するユーザープロファイルを変更するよう求められます。
- ▶ 各機能の権限にはIDが割り当てられます。ユーザが権限を持たないアクションを実行しようとする、このIDが警告／エラーメッセージに表示されます。そのIDを使用して、不足している権限を明確に特定できます。必要に応じて、**Show column "ID"**オプションを有効にしてください。

ユーザー権限に関する注記

個々のユーザー権限は、ユーザー管理の一般設定にリンクされています。これらの設定には、**User Management**画面の**Extras | Preferences**メニュー項目からアクセスできます。

権限	説明
Skip calibration interval (ME003)	ユーザー管理設定では、検量線の有効期間を任意で定義できます。この期間が有効化されており、ユーザーがこの権限を持っていない場合、測定を開始することはできません。
Measurement with unreleased methods (categories) (ME004)	メソッド保存時に Cat. (カテゴリ) 特性を割り当てることで、使用対象のメソッドを識別できます。ユーザー管理では、承認済みとしてマークされたメソッドのカテゴリ名を最大5つまで指定できます。 ユーザーがこの権限を持っている場合、未承認のメソッドでも測定を開始できます。

アップデートに関する情報

すでにユーザ管理を設定済みの場合、新しいユーザレベルAdminおよびレベル1～レベル4がユーザに割り当てられます。設定された権限が要件を満たしているかどうかを確認し、各レベルの権限を変更してください。特に注意すべき点として、新規インストールでは管理者は初期状態でユーザー管理にのみアクセス可能であり、ASpect PQを使用する権限は付与されていません。

13.1.3 ユーザー管理の一般設定の構成

Preferences画面で、以下のオプションを使用してユーザー管理の一般設定を行うことができます：

- パスワードの登録とガイドライン
- データディレクトリの使用
- 検量線とメソッドの使用に関する設定
- 署名

これらの設定は新規作成したユーザーアカウントに適用されるため、インストール後、ユーザーアカウント作成前に行ってください。

- ▶ **ASpect PQ**User Management画面で、**Extras | Settings...**メニュー項目を選択します。**Preferences**画面が表示されます。
- ▶ 左側で変更したいアクショングループを選択します。

User access

- ▶ 設定を行います。
Default settingsをクリックすると、選択したアクショングループの設定をデフォルトに戻すことができます。他のグループの設定には影響しません。
- ▶ **OK**をクリックして設定を適用します。

ログインは、ユーザー管理経由でローカルに設定することも、Active Directory経由のログインサーバーを使用して設定することもできます。

ローカルログインの場合は、**User access**ページで**Local (with user management)** オプションを選択し、新規ログインとパスワードに関する一般的なガイドラインを設定します：

オプション	説明
Number of login attempts:	無効なログイン試行の回数を表示します（最大10回）。この回数を超えると、待機期間後にASpect PQが終了し、再度ログインするには再起動する必要があります。エントリ（警告）が監査証跡ファイルに追加されます。
Disable account after failed login attempts	ログイン試行回数を越えた場合、ユーザーをブロックします
Minium user name length:	新規作成するユーザー名の最小文字数（最大10文字）
Enforce login with password	新規作成するユーザー名にはパスワードを割り当てる必要があります。
Password with letters and numbers:	文字と数字の両方を含むパスワードのみを有効できます。このポリシーはパスワードの変更時にも適用されます。
Password and user ID must be different	パスワードは、ユーザー名と同じものは認められません。このポリシーはパスワードの変更時にも適用されます。
User must change password at next login is active	初期設定では、新規ユーザーは初回ログイン時にパスワードを変更する必要があります。
Password expires in	有効期限が切れた後、ユーザーはログイン時にパスワードの変更を求められます。パスワードはポリシーで設定された期間分延長されます（最大999日）。この値はデフォルトとして認識されます。
Minium password length:	新規作成するパスワードの最小文字数 文字数：3～10文字

サーバーベースのログインを行うには、**Server-based (with Active Directory)** オプションを有効にして、以下の項目を設定します：

オプション	説明
Domain name(s)	ログインサーバーのドメイン名 2台のサーバーを指定できます。
Allow local login if login server not reached	サーバー経由でのログインに失敗した場合、適切な権限を持つユーザーは、Windowsのスタートメニューからユーザー管理にローカルでログインすることができます。そのためには、ユーザーにローカルパスワードを割り当てておく必要があります。 ユーザー管理では、権限を持つユーザーが Local (with user management) オプションを有効にすることで、ASpect PQにローカルログインできるようになります。

Folders

オプション	説明
Allow local login for AJService account	このオプションを有効にすることで、AJサービス担当者が管理者の追加サポートなしで装置の保守作業を行うことが可能になります。

制御および評価ソフトウェアの作業ディレクトリと、監査証跡ファイルのディレクトリを指定できます。

オプション	説明
ASpect working directory	作業ディレクトリの設定 作業ディレクトリには、メソッドおよびシーケンスのデータベースと結果ファイルが含まれます。作業ディレクトリはASpect PQのインストール時に定義されたもので、ここで変更できます。
Audit trail	監査証跡ファイルのパス設定 このパスは変更可能です。
Folder with user database	ユーザーデータベースパスの表示 このパスは、インストールプログラムを使用してのみ変更可能です。
AJファイル保護	オプションのAJファイル保護ソフトウェアにより、追加の保護が提供されます。このソフトウェアは、意図的または偶発的なデータ改ざん（例：データの削除や変更）からファイルを保護します。 AJファイル保護がインストールされている場合、ボタンが有効化され、保護状態がマーカーで表示されます。緑色 - ファイル保護が有効；赤色 - ファイル保護ドライバーが無効。このボタンをクリックすると、保護対象ディレクトリのリストを含む画面が表示されます。

Permissions (Details)

このグループでは、ユーザーレベルの権限に影響するメソッドおよび検量線に関する一般設定を行います。

オプション	説明
Calibration validity period [h:mm]:	検量線の有効期間を指定します（任意） ユーザーに Skip calibration interval 権限が付与されていない場合（ユーザーレベルを参照）、有効期間が終了した後はシーケンスを開始できません。 Skip calibration interval 権限が有効な場合、ユーザはシーケンスを開始できます。検量線の有効期間が終了している旨のメッセージが表示されます。
Method categories for released methods	メソッドを承認済みとして識別するためのカテゴリを最大5つまで入力できます。メソッド保存時に、 Cat. フィールドにカテゴリを入力します。 ユーザーに Measurement with unreleased methods (categories) 権限が付与されていない場合、指定されたカテゴリのいずれかでマークされていないメソッドに対しては、シーケンスを開始できません。

Signatures

このリストには、署名の意味と、署名時に選択可能なユーザーレベルが表示されます。

ボタン	説明
Add	新しい署名の意味を追加します このボタンをクリックすると、 Edit list of signature meanings 画面が表示され、新しい署名の意味と有効なユーザーレベルを選択できます。

ボタン	説明
Modify	選択した署名の意味を編集します
Delete	選択した署名の意味を削除します

13.1.4 新しいユーザーアカウントの作成

新しいユーザーアカウントの作成は、対応するユーザー権限を持つユーザーのみが実行できます。ユーザーレベルのデフォルト設定では、ユーザー管理の権限は管理者レベルに割り当てられています。新しいユーザーは、**Add user data**画面で対応する権限とともに設定されます。

Add user data画面の
オプション

オプション	説明
User ID	ユーザーはこの名前でログインします。 大文字と小文字は区別されません。最小長は、ユーザー管理の一般設定に依存します。
Full name	ユーザーの氏名 この名前は電子署名の構成要素として使用されます。 最大文字数：32文字
Description	注記用フィールド 入力は任意です。
User level	対応する権限を持つユーザーレベルの選択
Password	パスワードの設定 パスワードは大文字と小文字が区別されます。パスワード入力なしでパスワードダイアログを確定すると、パスワード保護は無効になります。最小長およびその他のパスワードポリシーは、ユーザー管理の一般設定で指定します。 最大パスワード長：20文字
錠前アイコン	閉：パスワードを割り当てることでパスワード保護が有効化されています。 開：パスワード保護はまだ有効化されていません。
Password never expires	このボックスが有効な場合、パスワードは無期限に有効です。 無効化されている場合、設定された期限でパスワードは失効します。 指定値はパスワードポリシーから取得されます。ユーザーは事前にパスワードを延長することもできます。 この設定は、ログインサーバーおよびActive Directory経由でログインする場合は表示されません。
User-specific working directory	ユーザーには、の構成で専用の作業ディレクトリが設定されます：\ASpect-Working directory\ユーザー名。このディレクトリ構造は、ユーザーの初回ログイン時に作成されます。
Use e-signature	ユーザーは、測定結果に電子署名できます。ユーザーレベルに応じた署名の意味が用意されています。
Disable user ID	ユーザーアカウントを無効化します ユーザー名は一時的に無効化できます。無効化されたユーザー名を、新規ユーザー作成時に再使用することはできません。
User must change password at next login	次回ログイン時に、ユーザーはパスワードの変更を求められます。

ユーザーデータの指定

- ▶ **User Management**画面で、**New ...**をクリックします。
Add user data画面が表示されます。

- ▶ 各フィールドとオプションで設定を行い、**OK**をクリックして確定します。
 - ✓ 新しいユーザーアカウントが、**ASpect PQ User Management**画面に表示されます。

これについては次のリンクも参照してください：

■ ユーザー管理の一般設定の構成 [▶ 144]

13.1.5 既存のユーザーアカウントの変更

ユーザーアカウントのプロパティは変更可能です。

- ▶ **User Management**画面で、対象のユーザーアカウントを選択し、**Modify ...**をクリックします。アカウント設定を含む**Modify user data**画面が表示されます。
- ▶ 設定を行い、**OK**をクリックします。
 - ✓ 変更が適用され、ユーザーが次回ログインしたときに有効になります。

これについては次のリンクも参照してください：

■ 新しいユーザーアカウントの作成 [▶ 147]

13.2 パスワードの変更

この機能は、ASpect PQまたはユーザー管理へのローカルログイン時でのみ利用可能です。ログインサーバー経由でログインする場合、パスワードとその有効性はサーバー側で管理されます。

ユーザーアカウントの指定に応じて、ユーザーはローカルログイン時には定期的に割り当てられたパスワードを変更する必要があります。

- ▶ **ASpect PQ**では、**システム | Change password**メニュー項目を選択してください。**Change password**画面が表示されます。
- ▶ 旧パスワードを入力し、新パスワードを2回入力し、**OK**をクリックして確定します。
 - ✓ 入力が正しい場合は、**Password was changed**メッセージが表示されます。

13.3 監査証跡の表示、印刷、エクスポート

監査証跡ファイルには、ASpect PQおよびユーザー管理におけるシステムイベント、警告、エラーメッセージが記録されます。監査証跡を表示するには、ユーザーアカウントで権限が付与されている必要があります。

監査証跡は、ASpect PQでメニュー項目**システム | 監査証跡**を選択するか、ユーザー管理で**Audit Trail**をクリックして開くことができます。

監査証跡では以下の機能を利用できます：

- 表示
- フィルター
- 更新
- 印刷
- CSVファイルとしてエクスポート（監査証跡がユーザー管理画面から呼び出された場合のみ）

監査証跡ファイルには、以下のパラメータが記録されます：

テーブル列	説明
Type	イベントのタイプを示します 監査証跡では、次のタイプのイベントが記録され、記号で識別されます：情報、警告、エラー、ログイン、ログアウト
Date/Time	イベントの日時（PCの時計に基づく） 両列のテーブルヘッダーにある[+]および[-]ボタンで、日時の昇順／降順に並べ替えることができます。
Time zone	イベントの時刻が参照するタイムゾーンを示します（Windowsのシステム設定）
User	イベント発生時にログイン状態だったユーザーを示します。
Source	ユーザー管理内のイベントか、ASpect PQ内のイベントかを区別します
Description	選択したイベントの詳細情報

表示ビューの選択

User Management画面で監査証跡を開いた場合、ASpect PQとユーザー管理の両方でイベントが表示されます。Viewリストでは、表示をASpect PQのイベントまたは管理者イベントに絞り込むことができます。

ASpect PQで**System | Audit Trail**メニュー項目を使用して監査証跡を開いた場合、ASpect PQのイベントのみが表示されます。

監査証跡のフィルタリング

Filterをクリックすると、登録ユーザー、エントリタイプ、期間で検索できます。また、メソッド、シーケンス、結果、ワークシートに関するアクションに検索を絞り込むこともできます。**Deactivate filter**をクリックすると、設定されたフィルターの制限を解除できます。

監査証跡の更新

Refreshをクリックすると、監査証跡のエントリリストが更新されます。以前に表示された監査証跡に新たなエントリが追加された場合、更新が必要になることがあります。

監査証跡の印刷

監査証跡を印刷できます。エントリをフィルタリングしている場合は、フィルタリングされたエントリのみが印刷されます。

- ▶ 現在の監査証跡ビューの印刷を開始するには、**Print**をクリックします。印刷画面が開きます。
- ▶ **Direct to**リストから印刷形式を選択します。
- ▶ **Start**をクリックして印刷を開始します。
 - ✓ 監査証跡が選択した出力形式で出力されます。

監査証跡のエクスポート

監査証跡のエントリをCSVファイルとしてエクスポートできます。エクスポート機能は、監査証跡をユーザー管理で開いている場合にのみ利用できます。フィルターが有効になっている場合は、フィルタリングされたエントリのみがエクスポートされます。

- ▶ **Export**をクリックすると、名前を付けて保存画面が開きます。
- ▶ パスと名前を入力し、**OK**をクリックして確定します。
 - ✓ 監査証跡ファイルがエクスポートされます。

13.4 電子署名

ASpect PQでは、結果データに電子署名を行うことができます。署名を行うと、対象ファイルの作業は終了したものと見なされ、後からそのファイルに変更を加えると署名が無効な状態になります。署名の意味とそれに対応する権限レベルの割り当ては、ユーザー管理の一般設定で作成されます。ユーザーが

文書に署名できるかどうかの設定は、ユーザーアカウントで行います。したがって、ユーザーアカウントでこの機能が有効化されており、かつその権限レベルに署名が割り当てられている場合に、ユーザーは文書に署名できます。

署名は、所定のファイルを暗号化して、このファイルに署名状態と署名ユーザーのデータを割り当てる手続きです。さらに、暗号化された署名ファイルは、結果リストと同じ名前、ファイル拡張子「.sig」で作成されます。このファイルには、ピークファイルのものを含めて (含まれる場合)、関連する結果ファイルのチェックサムが含まれます。

1つのファイルに対して複数のユーザーが署名することも可能です。

これについては次のリンクも参照してください：

- ユーザー管理の一般設定の構成 [▶ 144]
- ユーザーレベルの設定 [▶ 143]

13.4.1 測定結果の署名

測定結果ファイルには、測定後または後からファイルを読み込んだ際に、適切な権限を持つユーザーがサインオフ画面で電子署名を付与できます。

サインオフ画面のオプション

オプション	説明
ユーザーID	現在のユーザーのログイン名 ユーザー名は変更可能です。これにより、他のユーザーによる署名が可能になります。
パスワード	ユーザーのパスワード
意味	署名の意味 署名の意味のリストは、ユーザー管理の管理者が定義します。
コメント	任意のコメント用 (最大256文字)
サインオフ	上記の設定で文書に署名します

結果への署名

- ▶ 署名対象の測定結果をソフトウェアのメイン画面に表示します。
- ▶ システム | 結果の承認メニュー項目を選択します。
- ▶ ユーザー名とパスワードを入力します。
- ▶ 署名の意味を選択します。
- ▶ サインオフをクリックします。
 - ✓ 署名を付与するか、処理をキャンセルするかの確認が表示されます。署名の付与が完了すると確認メッセージが表示されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- 新しいユーザーアカウントの作成 [▶ 147]
- ユーザー管理の一般設定の構成 [▶ 144]

13.4.2 署名の表示

署名済みの結果データをプレビューまたは印刷する際、Signaturesセクションがレポートの末尾に付加されます。これには、対応するファイルのすべての電子署名が含まれます：

オプション	説明
Issued by	ファイルに署名したユーザーの氏名とログイン名

オプション	説明
Signed on	署名付与の日時
Status	署名状態は以下のいずれかの意味を持ちます : Valid 署名と結果データは揃っていて正確です。署名時点での署名ファイルに含まれるチェックサムと、ファイルの計算済みチェックサムに差異はありません。 Invalid (missing or invalid signature file) レコードに関連付けられた署名ファイルが見つからないか、破損しています。 Invalid (TPS data) 結果ファイルが署名後に変更されました。新たに計算されたチェックサムと保存済みチェックサムの比較により、差異が検出されました。 Invalid (SPK data) 署名後に生スペクトルデータのファイルが変更されました。新たに計算されたチェックサムと保存済みチェックサムの比較により、差異が検出されました。
Meaning	署名の意味
Comment	署名に含める任意のコメント

13.5 AJ ファイル保護

オプションのAJファイル保護ソフトウェアは、意図的または偶発的なデータの改ざん（例：削除や変更）からファイルを保護します。

フィルタードライバーにより、認可されたアプリケーションのみがディレクトリにアクセスでき、その他のアプリケーションからのアクセスは遮断されます。Microsoftの標準に準拠していれば、ウイルススキャナーやプロフェッショナルなレプリケーション、同期、バックアップソフトウェアの機能に支障はありません。

AJファイル保護は、システム管理者がインストールおよび設定する必要があります。インストールには管理者権限が必要です。

ソフトウェアのインストールおよび設定に関する詳細な説明は、インストール用データ媒体に記載されています。

自動保存およびエクスポートに関する個別の権限と組み合わせることで、AJファイル保護ソフトウェアは、メソッド作成、データ取得、評価における完全なデータ保護を保証します。

14 付録

14.1 値の表示に使用される記号の概要

コメント	意味	値	表示箇所
> Cal	平均値が検量曲線の作業範囲を超えている。	平均値	処理・結果画面
< Cal	平均値が検量曲線の作業範囲よりも小さい。	平均値	処理・結果画面
< LOD	値が検出限界より小さい。	平均値	処理・結果画面
< LOQ	サンプル値が定量限界未満で、検出限界より大きい	平均値	処理・結果画面
RSD!	サンプル平均または標準平均が、指定された相対標準偏差の範囲外にある	平均値	処理・結果画面
RR!	サンプル平均または標準平均が指定された相対範囲の外にある	平均値	処理・結果画面
Factor!	検量曲線の再検量線係数の上限を超えた	検量曲線	処理・結果画面
R ₂ (adj.) またはR	検量線の回帰における決定係数 R ₂ (adj.)またはR (オプション 分析ツールの画面での選択に依存) が、指定値を下回った	検量曲線	処理・結果画面 オートサンプラ ー調整画面 検量 線
#MAN.	サンプル単一値または標準単一値が、手動でサンプル平均値の計算から除外された	サンプル 単一値	オートサンプラ ー調整画面 サンプ ル単一値
#KOR.	サンプル単一値または標準単一値が、Grubbs外れ値検定により自動的にサンプル平均値の計算から除外された	サンプル 単一値	オートサンプラ ー調整画面 サンプ ル単一値