

取扱説明書

ASpect CS



製造元

Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Strasse 1
07745 Jena / Germany
電話: +49 3641 77 70
Fax: +49 3641 77 9279
メール: info@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

D (05/2023)

技術ドキュメンテーション

Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2023, Analytik Jena GmbH+Co. KG

目次

1	ASpect CS ソフトウェア	7
1.1	ASpect CS の開始.....	7
1.1.1	クイックスタート画面	7
1.1.2	ワークシートで開始する.....	9
1.1.3	ワークシートなしで開始する.....	10
1.1.4	アプリケーションの2番目のインスタンスを開く.....	11
1.2	ASpect CS を閉じて分析装置をオフにする.....	11
1.3	操作上の一般情報	11
1.3.1	ワークスペース	11
1.3.2	ヘルプの使用	12
1.3.3	メニューバー、ツールバー、アイコンバーの概要.....	13
1.3.4	よく使用されるコントロール機能.....	15
2	ワークシートの管理.....	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	20
2.3	ワークシートの削除	21
2.4	ワークシートの読み込み.....	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.....	24
3.2.1	メソッド / 波長 画面 - 測定波長の指定	25
3.2.2	メソッド / フレーム画面 - フレームパラメータを指定.....	29
3.2.3	メソッド / ファーネス画面 - グラファイトファーネス内の原子化用パラメータを指定	30
3.2.4	メソッド / 水素化物 画面.....	37
3.2.5	メソッド / サンプル導入 画面 - サンプル導入を指定.....	40
3.2.6	メソッド / 測定条件 画面 - ピーク範囲とバックグラウンド補正を指定.....	47
3.2.7	メソッド / 検量線 画面 - 検量線を指定	49
3.2.8	メソッド / 統計 画面 - 統計パラメータを指定.....	55
3.2.9	メソッド / QCS 画面 - 品質管理サンプルを指定.....	56
3.2.10	メソッド / QCC 画面.....	60
3.2.11	メソッド / アウトプット 画面 - 結果のアウトプットおよびメモリー内容を指定.....	61
4	シーケンス	62
4.1	シーケンスの作成、保存、読み込み	62
4.1.1	新しいシーケンスの作成.....	62
4.1.2	シーケンスの保存	62
4.1.3	シーケンスの読み込み.....	63
4.2	シーケンス画面	64
4.3	シーケンス内の測定と動作の指定	65
5	サンプル情報データ (サンプル ID).....	69
5.1	サンプル情報データを作成する、保存する、開く	69
5.2	サンプル ID 画面.....	69

5.3	サンプル情報と QC サンプルの指定	72
6	測定の実行と結果の計算	73
6.1	メイン画面で測定を開始するためのメニューコマンドとボタンの概要	73
6.2	測定ルーチンの開始	73
6.3	測定ルーチンの一時停止、継続、または停止	76
6.4	シーケンスの動作の繰り返し	76
6.5	測定結果の再処理	77
6.6	測定中に結果の計算をおこなう	78
6.7	結果と測定経過の表示	79
6.7.1	シーケンス/結果 タブ	79
6.7.2	シーケンスタブ	79
6.7.3	結果 タブ	79
6.7.4	概略 タブ	83
6.7.5	固体 タブ	83
6.8	結果ファイルを開くまたは表示からそれらを削除する	84
6.9	サンプルの詳細とピーク	84
6.9.1	サンプルの個々の測定値の表示	84
6.9.2	ピークの表示と評価	87
6.10	グラフィットファーンネス法による固体測定	96
6.10.1	固体 タブ上の機能	96
6.10.2	固体サンプルの測定	98
6.10.3	以前に準備したサンプルのデータの保存	99
6.10.4	固体測定用サンプルの再測定	100
6.11	システムの洗浄	101
7	検量線	102
7.1	検量線の表示	103
7.2	検量線結果の表示	103
7.3	検量線の編集	105
7.4	検量線標準を再測定で置き換える	105
8	品質管理	106
8.1	QC チャートの表示	106
8.2	QC チャートのパラメータ	107
8.3	QC チャートの項目と限界	107
9	分光器とアクセサリーのコントロールとモニター	109
9.1	分光器	109
9.1.1	contrAA の装置機能テスト	109
9.1.2	選択した波長でのピークの測定	111
9.1.3	連続測定	111
9.2	フレーム	112
9.2.1	フレーム機能のテスト	112
9.2.2	フレームの最適化	115
9.3	ファーンネス	119
9.3.1	ファーンネスプログラムの表示	119
9.3.2	マトリックスモディファイア、濃縮、前処理の表示	120
9.3.3	ファーンネスプログラムの最適化	120
9.3.4	ファーンネスプログラムのグラフィカル表示とグラフィットチューブのコーティング	122

9.3.5	その他のファーンネス機能.....	123
9.4	水素化物システム	125
9.4.1	水素化物システムの機能のチェック	126
9.4.2	水素化物システムのエラーテスト	127
9.5	オートサンプラーパラメータ	128
9.5.1	フレイム法のオートサンプラー	128
9.5.2	グラファイトファーンネス法用オートサンプラー	135
9.5.3	固体オートサンプラー	142
10	データ管理	146
10.1	印刷機能の情報	146
10.1.1	結果データの印刷	146
10.1.2	その他の測定パラメータおよび設定の印刷	148
10.1.3	レポートテンプレートの調整	148
10.2	すべてのファイル種類の管理	150
10.2.1	メソッドとシーケンスの管理	150
10.2.2	結果データの管理	152
10.2.3	波長ファイルのエクスポート	154
10.2.4	補正モデルの管理	154
10.2.5	補正ピークの削除	155
10.2.6	レポートテンプレートのインポート	155
10.2.7	ワークシートの管理	155
10.3	単位の管理	156
10.4	ストックおよび QC サンプル用データベースの管理	156
10.5	事前定義の備考の作成	157
10.6	Windows クリップボードの使用	157
11	オプション - ASpect CS のカスタマイズ	159
11.1	表示のオプション	159
11.2	保存パス	160
11.3	ASCII/CSV エクスポートのオプション	160
11.4	連続 ASCII エクスポートのオプション	161
11.5	測定シーケンスのオプション	162
11.6	光学ページのオプション	163
11.7	検量線およびブランク補正のオプション	164
12	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	166
12.1	ユーザー管理	166
12.1.1	階層構造と機能へのアクセス	166
12.1.2	ユーザー管理 - 表示および設定	167
12.1.3	ユーザー管理の一般設定の構成	168
12.1.4	新しいユーザーアカウントの作成	170
12.1.5	既存のユーザーアカウントの変更	171
12.1.6	パスワードの変更	172
12.2	監査証跡の表示、印刷、エクスポート	172
12.3	電子署名	173
12.3.1	測定結果の署名	173
12.3.2	署名の表示	174
12.4	AJ ファイル保護	174

13 付録	176
13.1 値の表示で使用されるマーキングの概要	176
13.2 ピークバックグラウンド補正に使用するアルゴリズムについて	176
13.2.1 "リファレンスなし" バックグラウンド補正	176
13.2.2 "リファレンスあり" バックグラウンド補正	177
13.2.3 「IBC」 および 「IBC-m」 バックグラウンド補正	178
13.2.4 ピーク減算 (パーマネントストラクチャーの補正)	178
13.3 ASpect CS ファイルの保存場所	178

1 ASpect CS ソフトウェア

ASpect CS は、アナリティーク・イエナ原子吸光分析装置の操作や測定を行うためのソフトウェアです。このソフトウェアは contrAA シリーズからの AAS 装置をサポートします。

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。取り込んだデータを再計算することができ、分析結果はさまざまなファイル形式でエクスポートすることや印刷することができます。

説明対象のソフトウェアバージョン この文書はバージョン ASpect CS 2.3 に基づいています。

使い方 ASpect CS 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 CS 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 CS と分析装置を操作してください。オペレーターは、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 ASpect CS の開始

ASpect CS は AAS 装置と一緒に開始してください。この手順では、装置を PC に接続し、ソフトウェア内で装置を初期化します。

- AAS 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 CS アイコンをクリックします。ASpect CS がスタートします。
- 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 CS プログラムを使用するには、これら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。測定を迅速に開始するためにメソッドとシーケンスがあらかじめ設定されたワークシートを選択したり、ASpect CS インターフェイスに直接切り替えたりするオプションが表示されます。

1.1.1 クイックスタート画面

ソフトウェアがスタートし、オペレータ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、初期設定なしでソフトウェアのメイン画面に切り替えたりできます。メイン画面からメニューアイテム **ファイル | クイックスタート** でクイックスタート画面を開くこともできます。

02.03.2022 10:21:18

装置: contrAA 800D ASpect CS バージョン: 2.3.0.0 **analytikjena**
An Endress+Hauser Company

オペレーター:

ホスト:

測定方法: チューブ種類の検出

ワークシート	最終変更日	〜によって	分析方法	説明
Ag aqueous	01.10.2021 8:00	Analytik Jena	グラファイトファーネス (プラットフォーム)	Measurement details: Modifier: Pd/Mg(NO3)2 Sample volume: 20 µL Temperature: 700/2400 °C Calibration range: 0 - 1.2 µg/L Elem./Wavelength: Fe 228.725 nm Measurement details: Modifier: Pd/Mg(NO3)2 Sample volume: 20 µL Temperature: 700/2400 °C Calibration range: 0 - 600 µg/L
Al-Cr aqueous (C2H2-N2O)	01.10.2021 8:00	Analytik Jena	フレイム	
As aqueous	01.10.2021 8:00	Analytik Jena	水素化物EA	
As aqueous HS	21.10.2021 15:22	Analytik Jena	水素化物	
B aqueous (C2H2-N2O)	01.10.2021 8:00	Analytik Jena	フレイム	
Cd-Fe simultaneous, aqueous	01.10.2021 8:00	Analytik Jena	グラファイトファーネス (プラットフォーム)	
Cu aqueous	01.10.2021 8:00	Analytik Jena	グラファイトファーネス (プラットフォーム)	
Fe-Ni-Cu-Zn aqueous (C2H2-Air)	01.10.2021 8:00	Analytik Jena	フレイム	

お気に入り 最近 定義済み 全て システムチェック

シミュレーション

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、オペレーター名をマニュアルで入力できます。
ホスト	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。
分析方法	<p>AAS 装置の設定に応じて異なる原子化技術を選択できます。</p> <p>グラファイトファーネス (ウォール) グラファイトチューブ内の電熱原子化 (EA) サンプルは液体です。グラファイトチューブの壁面から、サンプルの原子化を行います。</p> <p>グラファイトファーネス (プラットフォーム) サンプルポート付グラファイトチューブ内の電熱原子化 (EA) 試料は液体です。グラファイトチューブのサンプルポートで、サンプルの原子化を行います。</p> <p>フレイム バーナー / ネブライザーシステムでフレイム内の原子化</p> <p>水素化物 セル内で水素化物形成金属と水銀の同定、必要に応じて水銀濃縮と組み合わせます。</p> <p>水素化物EA コーティンググラファイトチューブ内で水素化物形成金属と水銀 (濃縮) の同定</p> <p>グラファイトファーネス 固体 固体サンプル用グラファイトチューブ内の電熱原子化 (EA) サンプルは、固体オートサンプラー (SSA 600 または SSA 6z) を使ってサンプルポート上でグラファイトチューブに転送されます。</p>
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ソフトウェアを操作できます。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。

オプション / ボタン	説明
システムチェック	AAS 装置と PC (ソフトウェア) の接続を確立します このボタンをクリックすると、分光器とアクセサリが検出されます。選択した原子化技術に応じてそれらを設定します。
ランプ 交換	ソフトウェアを使用したキセノンランプの交換 このボタンをクリックすると、ランプを交換する手順が表示されます。
ワークシートをステップ	ワークシート選択なしでメイン画面に切り替えます
プログラムの終了します	ワークシート画面を閉じてソフトウェアを終了します
OK	ワークシートを選択した後に、メイン画面に切り替えて測定を開始します

ワークシート表

ワークシート表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・イエナからのワークシート。ソフトウェアと同時にインストールされます
全て	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、1 つ以上の元素を含むワークシートがすべて表示されます (OR ロジック)。ソフトウェアは、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を検索します。

1.1.2 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ーです。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をインストールしてから、アクセサリと装置をオンにします。
- ▶ ソフトウェアを起動します。
ワークシート画面が表示されます。
- ▶ パラメータ および ランプ フィールドに必要な詳細を入力します。
- ▶ 分析方法 リストから原子化技術を選択します。
- ▶ システムチェック をクリックします。
装置とアクセサリが初期化されて PC/ソフトウェアに接続されます。装置設定が上記のフィールドに表示されます。インストールされたアクセサリが選択済み技術と一致しているかどうかもチェックされます。
- ▶ ワークシート表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。

- ✓ ソフトウェアのメイン画面が表示されます。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。

これについては次のリンクも参照してください：

■ [クイックスタート画面](#) [▶ 7]

1.1.3 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。
- ▶ パラメータ および 単位 フィールドに必要な詳細を入力します。
- ▶ 分析方法 リストから原子化技術を選択します。
- ▶ システムチェック をクリックします。
装置とアクセサリーが初期化されて PC/ソフトウェアに接続されます。装置設定が上記のフィールドに表示されます。インストールされたアクセサリーが選択済み技術と一致しているのかもチェックされます。
- ▶ クイックスタートをスキップ をクリックします。
ソフトウェアのメイン画面が表示されます。

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。

次の手順は、マニュアル測定や自動測定の手順で必ず行わなくてはならない操作です：

- ▶ メソッドパラメータを指定します (メソッド作成)。
- ▶ シーケンスを作成します。シーケンスには、サンプルの情報と測定操作順序を含んでいます。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。これらのデータは、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でアクセスされます (エクスポート、印刷など)。

測定ルーチン開始後は、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、常に表の最後に追加されます。結果の上書きはできません。

再計算機能によって、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。

1.1.4 アプリケーションの 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。このモードではソフトウェアは装置と接続しません。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あります。

プログラムをメニューアイテム **ファイル | 開始 オフライン** を使って 2 番目のインスタンスで開始します。

これについては次のリンクも参照してください：

 測定中に結果の計算をおこなう [▶ 78]

1.2 ASpect CS を閉じて分析装置をオフにする

分析装置は必ず、ソフトウェアで ASpect CS を終了することでオフにしてください。

- ▶ メニューアイテム **ファイル | 終了** を選択します。
- ▶ この時点で、メソッド、シーケンス、またはサンプル情報データがまだ保存されていない場合は、データを保存することを求められます。
- ▶ インストールされているアクセサリーと使用する原子化技術によっては、ソフトウェアベースの動作に関する通知も提供されます：
 - フレーム: 燃焼中フレームを消火します
 - 水素化物システム: 水素化物システムを排出します
 - キセノンランプ: キセノンランプをオフにします
ノート: ランプをオフにした後に、30 秒経過してから、contrAA をオフにする必要があります。待機時間のカウントダウンが画面に図示されます。
- ▶ contrAA 800 のみ: 光学排出が実行中の場合は、排出プロセスをオフにするかどうかを確認されます。
 - ✓ 動作の処理後、ASpect CS が閉じて分析装置がオフになります。

1.3 操作上の一般情報



1.3.1 ワークスペース

ソフトウェアの起動後、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。

The screenshot shows the ASpect CS 2.3 software interface. The main window displays a data table with the following columns: Nr., 名前 (Name), 波長 (Wavelength), 濃度 (Concentration), SD, 単位 (Unit), 濃度 (Concentration), 単位 (Unit), SD (Abs), RSD, and Abs. The table contains multiple rows of data, including reference values and calibration standards for elements like Cd228, Zn213, and Cu324. The interface also features a menu bar at the top, a toolbar on the left, and a status bar at the bottom.

Nr.	名前	波長	濃度	SD	単位	濃度	単位	SD (Abs)	RSD	Abs.
1	Softwaretest_FL-02									
2	Referenzwert	Cd228			mg/L					0.0000
3		Zn213			mg/L					0.0000
4		Cu324			mg/L					0.0000
5	Kal.-Null1	Cd228	0	0.00010	mg/L			0.00010		-0.00087
6		Zn213	0	0.00189	mg/L			0.00189		-0.01469
7		Cu324	0	0.00025	mg/L			0.00025		-0.00007
8	Kal.-Std.1	Cd228	0.2	0.00066	mg/L			0.00066		0.9090
9		Cu324	0.2	0.00084	mg/L			0.00084		0.95242
10	Kal.-Std.2	Cd228	0.5	0.00521	mg/L			0.00521		2.0264
11		Zn213	0.5	0.00208	mg/L			0.00208		2.8970
12		Cu324	0.5	0.00043	mg/L			0.00043		1.3248
13	Kal.-Std.3	Cd228	1	0.00498	mg/L			0.00498		3.5996
14		Zn213	1	0.00128	mg/L			0.00128		4.8486
15		Cu324	1	0.00376	mg/L			0.00376		2.5308
16	Kal.-Std.4	Zn213	2	0.01472	mg/L			0.01472		7.6379
17		Cu324	2	0.00237	mg/L			0.00237		5.5030
18	Kalib. berechnen	Zn213								
19	Kalib. berechnen	Cd228								
20	Kalib. berechnen	Cu324								
21	Kal.-Null1	Cu324	0	0.00035	mg/L			0.00035		0.00048
22	Kal.-Std.1	Cu324	0.2	0.00068	mg/L			0.00068		0.05403
23	Kal.-Std.2	Cu324	0.5	0.00128	mg/L			0.00128		0.12995
24	Kal.-Std.3	Cu324	1	0.00110	mg/L			0.00110		0.25838
25	Kal.-Std.4	Cu324	2	0.00307	mg/L			0.00307		0.48748
26	Kalib. berechnen	Zn213								
27	Kalib. berechnen	Cd228								
28	Kalib. berechnen	Cu324								
29	Softwaretest_FL-02									
30	Referenzwert	Cd228			mg/L					0.0000
31	Referenzwert	Cd228			mg/L					0.0000
32		Zn213			mg/L					0.0000
33		Cu324			mg/L					0.0000
34	Kal.-Null1	Cd228	0	0.00042	mg/L			0.00042		-0.00110
35		Zn213	0	0.00196	mg/L			0.00196		-0.00354
36		Cu324	0	0.00021	mg/L			0.00021		-0.00020
37	Kal.-Std.1	Cd228	0.2	0.00030	mg/L			0.00030		0.09206
38		Cu324	0.2	0.00070	mg/L			0.00070		0.06304

ワークスペースの主要コンポーネント

No.	説明
1	タイトルバーには、ソフトウェアバージョン、接続された装置、技術、ワークシート (読み込まれている場合) に関する情報が提供されます。
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。  ボタンは、新しいワークシートを作成するために使用されます。
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	メイン画面のさまざまなタブ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ファイルの名前に関する情報が表示されます。

1.3.2 ヘルプの使用

プログラムの操作時に、メニューアイテム ? でヘルプを利用できます。| ヘルプ | トピック。Aspect CS画面やダイアログ操作中に、**[F1]** 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。

ボタンの上にマウスを置くと、ボタンに関する簡単な情報 (ツールチップ) が表示されます。

1.3.3 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

メニューバーはワークスペースの一番上に表示されています。ソフトウェアのさまざまな操作を開始するために使用されます。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。いくつかのメニューアイテム、たとえば印刷機能などは、開いている他の画面により表示が変わります。

メニューアイテム	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 ■ クイックスタートを開きます ■ ワークシートを作成します ■ 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
アクション	<ul style="list-style-type: none"> ■ ファーネスを開いて / 閉じ、加熱し、フォームします ■ フレームを消火します ■ スクレーパーをアクティブにします ■ システム (水素化物システム、オートサンプラー、またはバーナーシステム) を排出します ■ contrAA 800: 原子化部ドライブを初期化します
表示	<ul style="list-style-type: none"> ■ 測定中のピークなどのグラフや情報などの画面を表示したり非表示にしたりします ■ グラフ表示のスケールを選択します ■ 個々のサンプル値を表示します
メソッド最適化	<ul style="list-style-type: none"> ■ メソッド開発のための画面を開きます ■ ワークシートを編集します ■ クックブックを開きます
ルーチン	<ul style="list-style-type: none"> ■ 測定を開始、一時停止、停止します ■ 個々のシーケンス行を開始します ■ 結果を再処理します
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 ■ サンプルを検索します ■ メソッド開発のために再測定モードをアクティブにします ■ 診断データを文書化するために監視モードをアクティブにします (許可されたサービス担当者によって要求された診断測定の場合のみ)
システム	<p>オプションモジュール「21 CFR パート 11 コンプライアンス ASpect CS」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 ■ パスワードを変更します ■ 監査証跡を表示します ■ 結果を署名します
?	<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、測定ルーチンを開始/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、サンプル ID が表示されます。

ツール	説明
	シーケンス測定を開始します
	シーケンスの選択した行を測定します
	実行中測定ルーチンを直ちにキャンセルします
	実行中測定の処理後に測定ルーチンを停止 その場合でも、原子化ユニットのクリーニング手順は実行されます。
	結果を再処理します
	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。
	クックブックを開きます
	新しいワークシートを作成します
	2番目のプログラムインスタンス内のみ: 結果リストを更新します

アイコンバー

アイコンバーから、ソフトウェアの主要機能にすばやくアクセスできます。ボタ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。

ボタン	説明
	分光計機能をチェックします
	フレーム画面を開きます
	ファーネス画面を開きます
	Hg/水素化物システム 画面を開きます
	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
	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



ボタン	説明
	ワークシートを管理、保存済みワークシートを開きます
原子化部のリセット	contrAA 800 のみ 装置は原子化部の位置が適切かどうかを自動的に監視します。このボタンをクリックして、原子化部を元の位置に戻すこともできます (装置の何らかの問題でバーナーヘッドに影響があった後など)。

1.3.4 よく使用されるコントロール機能

いろいろなボタンやマウス、キーボードの機能がソフトウェア内で使用されていて、それらは同じ又は似たコマンドになっています。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、内容が表示されません。

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
適用	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。

表

一部の画面では、値が表に直接入力されます。項目種類に応じて、表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が制限された入力フィールドのように振る舞います。




- ▶ 表の行を選択するには、灰色の背景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たままカラム幅を調整します。

入力欄では次の機能が追加されています:

- ▶ 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、矢印キーは文字ごとの編集に使用します。もう一度F2を押すと、矢印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。
- ▶ テキストをメニューアイテム **編集 | 北** - またはキーの組み合わせ **Ctrl+C** で Windows クリップボードにコピーし、**編集 | 挿入** またはキーの組み合わせ **Ctrl+V** で挿入できます。

表で使用できるボタン

ボタン	説明
追加	リストの最後に新しい行を増やします
挿入	選択した行を1行下に下げます
削除	選択した行を削除します

ボタン	説明
	選択した行を1行上に上げます ノート: 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、表の最初のカラム内で該当する行の番号をクリックしてください。
	選択した行を1行下に下げます
	選択したセルの値をサンプル種類が同じである後続のすべての行に転送する inc. チェックボックスにチェックマークが付いている場合 ([inc.] は増分を表す)、この値は自動的に増分します (Sample001、Sample002 など)。

シークス





位置	種類	名前	名前 (2)	元素
1	参照	54		all
2	Cal-ゼ口1	10		all
3	Cal-Std 1	3		Cd, Cu
4	Cal-Std 2	3		all
5	Cal-Std 3	3		all
6	Cal-Std 4	3		Zn, Cu
7	計算 検量線			
8	サンプル	54		all
9	サンプル	54		all
10	サンプル	54		all
11	サンプル	54		all

inc.
 種類

行から

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 クリップボードを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:

記号	説明
	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に、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大きさに戻します
	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に、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が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


キー	機能
F1	状況に応じたヘルプを開きます
F2	表セルの編集
F6	シーケンスの選択した行を測定します
F7	測定ルーチン中に追加の表示画面を開きます (シグナルカーブなど)
F8	表示画面を閉じます
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	停止していた測定を再開します
F12	測定ルーチンを開始および停止します

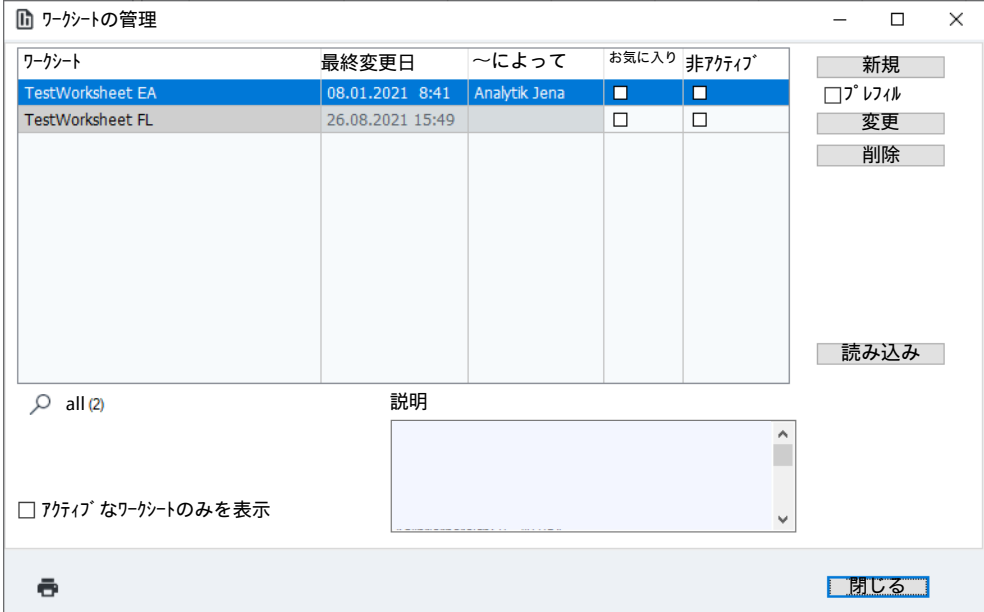
プリンターの使用

このソフトウェアでは Windows で初期設定されたプリンターが使用されます。

2 ワークシートの管理

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ーです。サンプル ID の設定および結果データの設定をワークシート内に保存することもできます。ワークシートを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	最終変更日	～によって	お気に入り	非アクティブ
TestWorksheet EA	08.01.2021 8:41	Analytik Jena	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
TestWorksheet FL	26.08.2021 15:49		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

all (2) 説明

アクティブ なワークシートのみを表示

閉じる

ワークシートの管理画面内の要素

オプション / ボタン	説明
新規	新しいワークシートを作成します
プロフィール	アクティブなシーケンスとメソッドを初期設定として適用します
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	非アクティブとしてマークしたすべてのワークシートを表内で隠します
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。

表にはワークシートに関する以下の情報が表示されます:

表カラム	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	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	ワークシートはクイックスタート画面に表示されません。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で読み込めます。

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。

新しいワークシート

名前:

メソッド:

08.01.2021 8:40

シーケンス:

08.01.2021 8:40

サンプルID:

結果ファイル:

フォルダ:

名前:

C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectCS\EA\RESULTS\Filename.tps


要素:

最終変更日 30.08.2021 13:25



説明:

新しいワークシート 画面内の要素

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 📁 をクリックするとデータベース画面が開き、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 📁 をクリックするとデータベース画面が開き、シーケンスを選択します。
サンプルID	サンプルID ファイルを読み込むためのオプション設定 (なし) サンプルID ファイルの設定は保存されません。 📁 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。

オプション	説明
	<p>サンプルIDファイルを読み込む</p> <p>ワークシートが読み込まれるときにサンプル 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>結果を保存するためのオプション設定</p> <p>(なし)</p> <p>測定ルーチンは 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指定します。</p> <p>常に新規ファイルを作成 (タイムアップを追加)</p> <p>測定ルーチンの結果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ー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</p> <p>結果ファイルは初回開始時に作成されます。初回より後の開始時には、結果はこのファイルに追加されます。</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。これらの項目は、ワークシートの作成方法に関する具体的な情報を提供するために、自由に編集できます。この項目は、選択したワークシートの クイックスタート および 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</p> <p>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は、ワークシートはクイックスタートに表示されません。</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、ツールバーで  をクリックします。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。
ノート: シーケンスで、追加の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、結果ファイルを保存してサンプル ID ファイルを使用することを指定して、説明を編集します。
- ▶ **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 \[▶ 73\]](#)


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。
- ▶ **OK** をクリックして **ワークシートを編集** 画面を閉じます。
 - ✓ ワークシートのデータレコードがアップデートされます。


2.3 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。

2.4 ワークシートの読み込み

ワークシートは **クイックスタート** 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。
- ▶ 表でワークシートを選択して **読み込み** をクリックします。
 - ✓ ワークシートが読み込まれ、対応する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。

ノート:


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。

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。

- 測定波長の選択
- 線分析のパラメータ
- 分光器設定
- 原子化部設定
- 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。分析内のサンプル測定およびその他のアクションの順序はシーケンス内で定義します。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。プログラムが開始してからメソッドが読み込まれない場合は、メイン設定が空であることが画面に表示されます。

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。既存のメソッドのメソッドパラメータが変更されて、これらの変更が同じ名前前で保存された場合、新しいバージョンのメソッドが作成されます。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。メソッドを作成したり、変更したり、保存したり、読み込んだりできます。メソッドを管理するためのその他の機能は、[データ/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](#) [▶ 150]

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、初期設定、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。

- ▶ メニューアイテム [ファイル](#) | [新規メソッド](#) を選択します。

アクティブになっているメソッドがない場合は、 をクリックします。

- ▶ [新規メソッド](#) 画面で3つのオプションのいずれかを選択します：

- [初期値から作成](#): 検量線または統計用初期設定のみで [メソッド](#) 画面を開きます。

- [現在のパラメータから作成](#): 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作成](#): [メソッド](#) を開く 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。

選択した初期設定で [メソッド](#) を開く 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。

- ▶ メソッドパラメータを [OK] または [適用] ボタンでアクティブにします。
 - ✓ 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 表を入力します。測定を開始します。

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 **メソッドを保存** 画面でデータベースに保存されます。メソッドを分類して見つけやすくするために、メソッドと一緒に追加データを保存できます。

メソッドを保存 画面内の要素

メソッドを保存

名前 Cat.

名前	バージョン	月日	時間	Cat.	オペレーター
Ground Cd Zn Cu		27.07.2021	14:39	KK	
SW-Test_Scraper	1	08.01.2021	8:34	KK	admin

並べ替え
 / 昇順 降順

現在のバージョンのみ
 検量線データの保存

説明

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) この項目は任意です。
表	既存のメソッドの概要
並べ替え	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。
検量線データの保存	利用可能な検量線をメソッドと一緒に保存します この検量線は今後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付きでリストが開きます。これらのコメントはデータ/デフォルト値 画面で管理します。

メソッドの保存

- ▶ **メソッド** 画面で、**保存** をクリックして **メソッドを保存** 画面を開きます。または、メニューアイテム **ファイル|保存|メソッド** を選択します。
- ▶ **メソッドを保存** 画面でメソッドの名前とその他のパラメータを選択します。
- ▶ **OK** で選択を確定します。

- ✓ 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。

ノート: 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に、メソッドを復元することもできます。メソッドのその他の管理機能はデータ/データ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:

- 事前定義の備考の作成 [▶ 157]
- メソッドとシーケンスの管理 [▶ 150]


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、それらに基づいてシーケンスと一緒に測定を開始できます。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** フィールドの横のフォルダーアイコン  をクリックします。
 - メニューアイテム **ファイル | メソッドを開く** を選択します。
 -  をクリックしてから **開く** をクリックすることで、**メソッド** 画面を開きます。
- ▶ オプションで、**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するには、**Cat.** フィールドを消去します。
- ▶ オプションで、最新バージョンのメソッドだけを表示したい場合は、**現在のバージョンのみ** オプションをアクティブにできます。
- ▶ リストでメソッドを選択して **OK** をクリックします。
 - ✓ 保存済みパラメータで **メソッド** 画面が表示されます。

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。これは、個々のサンプル値が表示されているときに自動的に実行されます。
- ▶ 結果リスト内のサンプルをダブルクリックするか、サンプルを右クリックしてコンテキストメニューで **測定値** を選択します。
 - ▶ メソッドパラメータを読み込みたいかどうかを確認されたら、**Yes** をクリックすると確定されます。
 - ✓ メソッドは、 をクリックすることで開くことができます。



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** 画面で指定できます。



 をクリックして **メソッド** 画面を開きます。

メソッド 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
適用	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


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]
-  サンプル情報と QC サンプルの指定 [▶ 72]

3.2.1 メソッド / 波長 画面 - 測定波長の指定

メソッド / 波長 画面で、メソッドの測定波長を選択します。この選択によって、元素の原子化のためのデータが初期設定でクックブックから読み込まれます。

メソッド / 波長 画面内の要素



No.	元素	種類	波長 [nm]	波長	積算モード	主波長	読み取り時間 [s]	グループ	順序
1	Zn	Abs	213.8570	Zn213			3.0	1	2
2	Cd	Abs	228.8018	Cd228			3.0	1	1
3	Cu	Abs	324.7540	Cu324			3.0	1	3

波長表パラメータ

表カラム	説明
No.	表内で選択した波長のシーケンス
元素	分析対象元素の元素アイコン
種類	測定モードの選択 Abs: 吸光モード Ems: 炎光モード
波長	測定波長 (nm)
波長	測定波長の名前 メイン設定で、線の名前は元素記号を波長で構成されます。ただし、名前は事由に編集でき、一意である必要があります。

表カラム	説明
積算モード	<p>シグナル評価の選択</p> <p>平均: 積算時間での平均値</p> <p>面積: 積算時間での吸光のピーク面</p> <p>高さ: 積算時間での吸光のピーク高さ</p> <p>使用するサンプル量が十分なときは、平均 評価を使用します。例: フレーム法を使用し、必要に応じて水素化物法を使用。</p> <p>定義したサンプル量を原子化するときには、面積 および 高さ 評価を使用します。グラフアイトファーンズ法、水素化物法、またはフレーム法をインジェクションモジュールと組み合わせて使用するときには、これらのシグナル評価を選択します。</p>
主波長	<p>現在の線がどの測定波長と一緒に同時に測定されるかを示します (同時測定)</p> <p>分析の合計時間は、分光器構成で隣接する線を記録することで、短縮できます。波長の組み合わせ 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	測定波長の合計測定時間
グループ	<p>フレーム法のみ</p> <p>グループ番号が同じ測定波長は、1回のサンプル吸引で測定されます。例: 次の測定波長を開始してバーナーを調整している間は、オートサンプラーのプロブはサンプル内で浸液されています。これによって、個々の元素波長の分析間の遅延時間が短縮されるため、合計測定時間も短縮されます。</p> <p>オートサンプラーは、グループが異なる場合はサンプルから抜け出します。サンプル吸引は停止します。フューエルガス流量とバーナー高さが大きく変わる場合は、元素は異なるグループに割り当ててください。その場合、分析間の遅延時間は、フレーム設定の安定化に使用されます。</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>フレーム法のみ</p> <p>最適化 をクリックすると、フューエルガス流量の昇順で順序を自動的に定義できます。</p>

波長 グループ内のボタン

測定波長を波長表に追加したり、選択した波長を編集したりするには、**追加**、**挿入** および **変更** ボタンを使用します。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 つまたは複数の測定波長を選択して削除するには、**削除** ボタンを使用します。

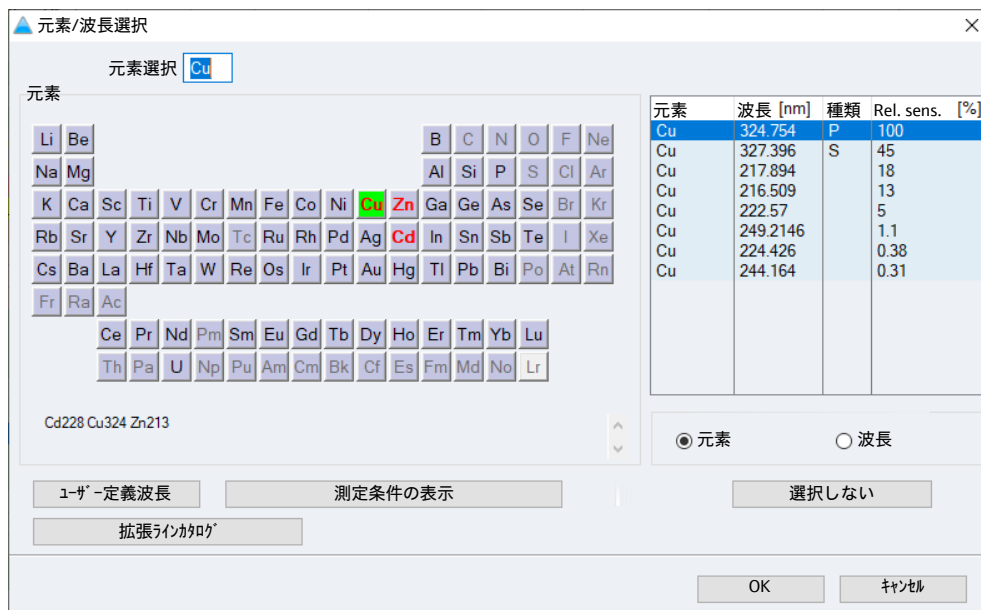
その他のボタン

ボタン	説明
波長の組み合わせ	1 つの分光器設定で記録できる波長は、同時に測定できます。これによって測定時間が短縮されます。
最適化	<p>フレーム法のみ</p> <p>フューエルガス流量の昇順で波長を配置します</p>

3.2.1.1 測定波長を波長表に挿入

測定波長は、**元素/波長選択** 画面で選択します。


元素/波長選択 画面は、**メソッド / 波長** 画面で **追加** をクリックすると表示されません。



元素/波長選択 画面内の要素

周期表には、AAS 法で測定できるすべての元素が表示されます (濃い灰色のボタンと黒い元素記号)。灰色の元素は AAS 法で測定できません。

波長表には選択可能なすべての波長と以下の情報が含まれています:

表カラム	説明
元素	元素
波長	分析波長 (nm)
種類	波長種類 P: 第一波長 (nm) この波長は、相対感度 100% の最も感度の高い波長です。 S: 第二波長 第二波長は 2 番目に感度が高い波長です。 ノート: 第一波長が常に測定で推奨されるわけではありません。詳細については、備考のクックブックを参照してください。
Rel. sens.	第一波長 P との相対感度
元素 / 波長	元素記号または波長の昇順で波長表を並べ替えます
	推奨される測定設定でクックブックを開く

波長を選択

- ▶ **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/波長選択画面が表示されます。
- ▶ 周期表で元素記号をクリックします。濃い灰色のボタンは選択可能な元素です。波長表で選択した元素の波長のみが表示されます。
または、元素選択フィールドで元素記号を入力します。
元素選択フィールドを消去すると、波長表内のすべての元素のリストが表示されます。
- ▶ 波長表で波長を選択します。
- ▶ 各検体の波長を選択するまで続けます。OK で画面を終了します。
✓ 選択した波長は、メソッド / 波長 画面に転送されます。

ノート:

メソッドを操作するときは、各検体で複数の波長を選択してください。第一波長が常に最適とは限りません。推奨される原子化パラメータと可能な干渉については、クックブックを参照してください。

フレームパラメータを
チェック

フレーム法を使用するときは、**測定条件の表示** をクリックして選択した波長の原子化パラメータをチェックしてください。可能な場合は、メソッド内でフレーム種類が同じ元素のみを組み合わせることをお勧めします。例: 空気/アセチレンフレームまたは亜酸化窒素/アセチレンフレーム。波長メソッドページに戻って最適化をクリックすると、フューエルガス流量の昇順で波長を自動的に並べ替えることができます。

拡張波長カタログ

インストール後、波長リストにはあらかじめ選択された測定波長が含まれています。このリストに拡張波長カタログの測定波長を追加できます。

- ▶ **拡張波長カタログ** をクリックします。
- ▶ マウスでクリックしてリストで波長を選択します。
特定の波長を再度クリックすると選択が解除されます。 **選択しない** をクリックすると、すべての選択が解除されます。
- ▶ **追加** をクリックすると、選択したものが波長リストに転送されます。



注意

拡張波長カタログから追加した測定波長は、標準カタログから削除できません。

独自の測定波長を作成 / 編集

独自の測定波長を作成してそれらを測定に使用できます。

- ▶ **1-ザ-定義波長** をクリックします。
- ▶ 新しい波長のデータを **波長の編集** 画面で入力します: **元素**、**波長** および **種類**。
- ▶ **追加** をクリックして項目を独自の波長リストに転送します。
- ▶ **閉じる** をクリックすると、独自の波長が **元素/波長選択** 画面の波長リストに転送されます。

波長リストの独自の波長を編集したり削除したりできます。

- ▶ 波長を編集: **波長の編集** 画面のリストで波長を選択し、新しい波長データを入力してから、**変更** をクリックします。
- ▶ 波長を削除: 波長を選択して **削除** をクリックします。

3.2.1.2 波長を同時に測定

波長を組み合わせると、波長の現在の測定プログラムで検索が実行されます。それらは、検出デバイスによって同じ単色分光器構成と一緒に記録できるため、同時に測定することもできます。

- ▶ **メソッド / 波長** 画面で、**波長の組み合わせ** をクリックします。
同じ名前の画面が、組み合わせ可能な波長の概要と一緒に表示されます。

画面内の要素 波長の組み合わせ

組み合わせ可能な波長が **波長の組み合わせ** 画面で一覧表示されます。選択したりリスト行の棒グラフに、検出デバイス上の波長の位置が表示されます。

表カラム / ボタン	内容
チェックボックス	有効になっている場合は、対応する波長組み合わせがメソッド内で同時に測定されます。
主波長	主波長の測定パラメータが波長組み合わせの測定に使用されます。 波長 主波長の波長名

表カラム / ボタン	内容
	波長 主波長の波長 (nm)
追加波長	波長 分析する追加波長の波長名 波長 分析する追加波長の波長 (nm)
波長	測定中の波長 (nm、検出デバイス行の中央)
動作状態	注釈
コンプレッソライナし	すべての選択を削除します。メソッド内の波長は一緒に測定されません。
測定に使用	波長組み合わせ内の主波長と追加波長を入れ替えます。

波長組み合わせの場合は、主波長と追加波長が自動的に同定されます。追加波長の分析時間と原子化パラメータは、主波長から取られます。この割り当ては、測定に使用 をクリックすることで逆にできます。

3.2.2 メソッド / フレーム 画面 - フレームパラメータを指定

フレーム法のみ

メソッド / フレーム 画面で、フレーム内で以下の原子化用パラメータを指定します：

- バーナーネブライザーとのパラメータ
- フレーム種類
- ガス流量
- スクレーパーの使用

クックブックからのデータは、まず初期設定として読み込まれます。



をクリックすると、メソッド / フレーム 画面が開きます。

No.	波長	C2H2/air [L/h]	C2H2/N2O [L/h]	サシガント(補助) [L/h]	バーナー高さ [mm]
1	Zn213	45		0	6
2	Cd228	40		0	6
3	Cu324	45		0	5

波長に依存しない設定

波長に依存しないパラメータは、すべての元素測定で現在のメソッドと同じです。最初に、メソッド全体に適用し、測定波長ごとに変更できないパラメータを設定します。

オプション	説明
フレーム / 種類	フレーム種類の選択 C2H2/air : アセチレン-空気フレーム、フューエルガス流量 = 40 - 120 L/h C2H2/N2O : アセチレン-亜酸化窒素フレーム、フューエルガス流量 = 120 - 180 L/h このフレーム種類は 50 mm バーナー使用時のみ選択できます。
スクレーパー	スクレーパーは、50mm バーナーおよびアセチレン / 亜酸化窒素フレームによる自動測定プロセスの場合にアクティブになります。バーナーヘッドはスクレーパーが自動でクリーニングします。クリーニングは、各サンプル前、各グループ前、各波長前、各測定前、または各2番目 / 3番目測定前に実行できます。
バーナー / 種類	使用されるバーナー種類の表示 装置はバーナーをバーナーセンサーで自動的に認識します。
バーナー角度	光路に対するバーナースリットの角度 バーナー角度はマニュアルでセットします (通常 0°)。値の入力は必ず必要ではありません。これはメソッドやレポートに表示されるだけです。 バーナーをマニュアルで回転すると感度が変わります。経験則として: バーナーが 10°回転すると、感度が 2 ~ 3 倍下がります。バーナーが 90°回転すると、感度が 10 倍下がります。
ネブライザー-流量	ネブライザーの噴霧量 噴霧量はネブライザー固有の値です。値の入力は必ず必要ではありません。これはメソッドやレポートに表示されるだけです。

波長に依存するパラメータ

この表は、フューエルガス流量とバーナー高さの波長に依存するパラメータの一覧です。値は、フレーム最適化プログラムでマニュアルまたは自動で検索し、この波長に依存するフレームパラメータ表に転送できます。補助オキシダントを使用している場合は、フレームをマニュアルでのみ最適化できます。または、値をマニュアルで編集できます。

これについては次のリンクも参照してください：

 フレームの最適化 [▶ 115]

3.2.3 ミッド / ファーネス 画面 - グラファイトファーネス内の原子化用パラメータを指定

ミッド / ファーネス 画面には、分析する元素の原子化用ファーネスプログラムの最も重要なパラメータの概要が含まれています。クックブックからのファーネスプログラムのデータは、グラファイトファーネス法を使用する個々の元素の原子化用初期設定として入力されます。各測定のファーネスプログラムは ファーネス 画面で編集できます。



をクリックすると、ミッド / ファーネス 画面が開きます。

メソッド

波長 フェーネス サンプル導入 測定条件 検量線 統計 QCS QCC 770777

No.	波長	ステップ数		灰化温度	原子化			注入	前処理	濃縮	モディファイア	
		#	#		温度	温度	昇温				ガス	#1
1	Cu324	8	4	1000	2300	1500						
2	Cr357	8	4	950	2450	1200						

フェーネスプログラムの編集 フェーネスプログラム適用

モディファイアと濃縮

フェーネスクリーニングを行う

温度 [°C]: 2450

昇温 [°C/s]: 500

保持 [s]: 4

開く 保存 印刷 OK 適用 キャンセル

この表を使って、メソッドがどのグラフィットフェーネス種類 (ウォールまたはサンプルポート) 用に作成されたかを確認できます。この種類が初期化された種類と異なる場合は、その事実も表示されます。

以下のフェーネスプログラムパラメータが一覧表示されます:

オプション	説明
波長	測定波長の名前
ステップ数	フェーネスプログラムステップの総数
乾燥	フェーネスプログラム内の乾燥ステップの数
灰化温度	灰化温度 (°C)
原子化	原子化段階の温度とガスのデータを表示 温度 原子化段階の終了温度 昇温 原子化段階の昇温速度 (°C/秒) ガス 内部ガスの流量
注入	選択されていない フェーネスプログラム開始前にサンプルをインジェクション *** マークのついている段階の後にサンプルをインジェクション
前処理	熱前処理 選択されている場合は、サンプルやモディファイアの熱前処理を行います。
濃縮	選択されている場合は濃縮を行います。
モディファイア	追加で使用されるモディファイア それぞれの測定に最大5個までのモディファイアを選択できます。

ボタン

ボタン	説明
ファーンズプログラム編集	ファーンズプログラム全体を見ることができるファーンズ/ファーンズプログラム画面を開きます。ファーンズパラメータは分析する元素波長に合わせて編集できます。 波長表の測定波長の行をダブルクリックすることで、ファーンズ/ファーンズプログラム画面を開くこともできます。
ファーンズプログラム適用	選択した測定波長のパラメータをリスト内で後続のすべての波長に適用します。
モディファイアと濃縮	使用するモディファイアを指定するためのファーンズ/モディファイアと濃縮画面

追加のシーケンスアクションとしての「ファーンズクリーニング」

すべての測定で、ファーンズのクリーンアウトが行われます。さらに、ファーンズクリーニング 他の動作を選択することで、追加のクリーニングステップをシーケンス内に定義できます。このアクションのパラメータはファーンズクリーニング を行う で入力します。

オプション	説明
温度	クリーニングの温度。
昇温	昇温速度
保持	クリーニング温度での保持時間

3.2.3.1 ファーンズプログラムの編集

メソッド / ファーンズ画面で、ファーンズプログラムの編集 ボタンをクリックすると、ファーンズ/ファーンズプログラム画面が編集モードで開きます。

ステップ	*	名前	温度 [°C]	昇温 [°C/s]	保持 [s]	時間 [s]	ガス		注入	E/P
							フロー	停止		
1		乾燥	80	6	20	28.3	Max	停止		
2		乾燥	90	3	20	23.3	Max	停止		
3		乾燥	110	5	10	14.0	Max	停止		
4		乾燥	350	50	20	24.8	Max	停止		
5		灰化	1100	300	10	12.5	Max	停止		
6		オートゼロ	1100	0	5	5.0	停止	停止		
7		原子化	2300	1500	3	3.8	停止	停止		
8		クリーニング	2450	500	4	4.3	Max	停止		

行: 追加 挿入 削除

遅延時間 時間[s]: 0


クックブックプログラム (選択済み) フェックプログラム

表の削除 乾燥ステップの転送 クリーニングステップの転送

波長: Ga287 OK キャンセル

表 測定波長ごとに、現在のファーンズプログラムに属しているすべてのステップ、温度、保持時間、ガス供給、モディファイアの使用、濃縮 / 熱前処理に関連付けられた設定が一覧表示されます。測定波長を選択した後に、クックブックの初期設定が最初に読み込まれます。

コントロールボタンと入力フィールド

オプション	説明
追加	リストの最後に新しい行を挿入します
挿入	選択した場所の前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	ファーンエスプログラム表をすべて削除します
	選択した行のパラメータを後続のすべての行にコピーします
遅延時間	必要に応じて、測定シグナルの取り込みの遅延時間を入力します 初期設定では、原子化ファーンエスプログラムステップが開始すると、測定シグナルの取り込みが開始します。遅延時間を設定すると、設定した時間分シグナルの取り込みを遅らせることができます。この機能は、原子化温度が一定になった後に測定を開始するためにのみ使用します。
クックブックプログラム	選択した測定波長のファーンエスプログラムをクックブックから読み込みます
チェックプログラム	ファーンエスプログラムをチェックします ファーンエスプログラムに実行不可能な間違いがあると、メッセージボックスに、間違いのあるステップが表示されます。この場合、プログラムは開始しません。間違ったステップを修正するか、このステップの前のプログラムを変更します。 プログラムの開始時に、すべての基本状態がわかっている場合は、ファーンエスはオーバーヒートがないかチェックをします。選択した温度または時間が高すぎる場合は、プログラム開始後にエラーメッセージが表示されます。
乾燥ステップの転送	選択した測定波長の乾燥パラメータをすべての測定波長に適用します
クリーニングステップの転送	選択した測定波長のグラフィートファーンエスクリーニングパラメータをすべての測定波長に適用します。

個々のファーンエスプログラムステップのパラメータを指定

選択した測定波長で、適当なファーンエスプログラムをクックブックから読み込みます。

- ▶ ファーンエスステップをファーンエスプログラムに挿入したり、ステップを削除したりするには、追加、挿入 および 削除 ボタンを使用します。
- ▶ 表セルを編集するにはクリックします。
前選択が制限されている場合は、リストはこのセルの中で開きます。直接フィールドに数を入力しなければなりません。

プログラムステップ

以下のステップをファーンエスプログラムでプログラムできます：

ステップ	説明
乾燥	サンプル内の溶媒の蒸発
灰化	酸素の管理なしでサンプルを熱分解する熱前処理
灰化	適切に選択されたアディショナルガス (酸素など) を使用してサンプルを熱分解する熱前処理
原子化	検体原子の解放
クリーニング	残留サンプルの除去
冷却	
オートゼロ	原子化状態に合わせたガス流量の適合

温度パラメータ

オプション	説明
温度	このステップの終了温度 設定範囲: 最高温度 3000 °C 1 °C刻み 最低温度 20 °C 以上で、冷却水温度より上 (推奨冷却水温度 35 °C)
昇温	設定した温度に達するための加熱速度 設定範囲: 1 ~ 3000 °C/秒 1 °C/秒刻み、FP (最大速度)、NP (加熱なし)
保持	設定温度の保持時間 設定範囲: 0 から 999秒
時間	このステップの合計時間 (加熱時間と保持時間の和) は自動的に計算されます。

ガス供給

オプション	説明
パージ	保護ガスの流量 Stop 流入なし、ステップ変更前に 2 秒有効 Min 最小流入速度 (0.1 L/分 Ar) Max 最大流入速度 (2.0 L/分 Ar)
添加	アディショナルガスの流量、例: 空気、窒素、その他 Stop 流入なし、ステップ変更前に 2 秒有効 Max 最大流入速度 (0.5 L/分)

インジェクションステップ / 熱前処理

オプション	説明
注入	「*」が付いていると、サンプル (HydrEA 法ではガス) をこの段階が終わるまで、グラファイトチューブに導入しません (予備加熱チューブへのピペッティング)。
E/P	溶液測定のみ 濃縮 / 熱前処理 濃縮では、測定サイクル中の濃縮ステップ前にサンプルが前処理されます。チューブが室温に戻ってから、次のサンプル量が注入されます。 検体溶液および / またはモディファイアの熱前処理では、この前処理は指定したステップまで実行されます。このステップの終わりに、グラファイトチューブを冷却してサンプルを注入する必要があります。濃縮サイクルの数、モディファイアの使用、熱前処理の種類は、 ファースト / モディファイア と 濃縮 画面で指定できます。

測定波長のファーストプログラムは**ファースト / 最適化**画面でソフトウェアを使って最適化できます。

3.2.3.2 マトリックスモディファイア、濃縮、前処理を指定

メソッド / **ファースト**画面で、**モディファイア**と**濃縮** ボタンをクリックすると、**ファースト / モディファイア**と**濃縮**画面が編集モードで開きます。以下のパラメータを指定できます:

- マトリックスモディファイアの使用と量
- ピペッティングと乾燥の繰り返しによるグラファイトチューブでの濃縮
- サンプルの熱前処理

マトリックスを区切るためのモディファイアおよび熱前処理の選択は、波長ごとに行う必要があります。

マトリックスモディファイア この測定の際に、最大5種類のモディファイアを添加することができます。これらは、対応するモディファイアチェックボックスをクリックすることでアクティブにできます。キャリーオーバーによるエラーを回避するために、測定成分は以下の標準順序で記録されます:

- ブランク (希釈の場合)... 他のモディファイア (設定した場合)
- モディファイア 1
- 他のモディファイア (指定された場合)
- サンプル溶液

グラファイトチューブへの出力は逆順で実行します。例: サンプルが最初に注入されます。他の成分が供給されている、残留サンプルは注入チューブから排出され、グラファイトチューブに注入されます。必要に応じて、サンプルとモディファイアのこの標準順序は変更できます。

以下のモディファイア用パラメータを入力します:

オプション	説明
チェックボックス	測定用モディファイアをアクティブにします
名前	リストフィールドには良く使用するモディファイア名が含まれています。このリストから名前を選ぶか、入力フィールドに直接名前を入力します。
注入量	採取する量 (1 ~ 50 µL)
位置	オートサンプラーでのモディファイアの位置
後サンプル	オートサンプラーは、サンプルの後にモディファイアを採取します。例: サンプルの前に、グラファイトチューブに注入されません。
前処理	モディファイアの熱前処理

濃縮

濃縮は、設定ステップ (カラムE/P) までファーンエスを加熱し、設定した回数それを繰り返します。各サイクルの一部として、サンプル表に基づいて指定されているサンプル量が注入および前処理されてから、チューブが室温に冷却されて次のサンプル量が注入されます。この手順では、より多くのサンプル量をファーンエスに注入できます。モディファイア量は 1 回だけ注入されます。

以下の濃縮モードを指定できます:

オプション	説明
off	濃縮なし
毎回 (サンプルのみ)	各サンプルで濃縮 (標準などの特殊サンプルなし)
毎回 (検量線も含む)	標準や QC サンプル、添加標準等も含め、各サンプルで濃縮
濃度が低い時	検出限界より濃度が低いサンプルでのみ濃縮
サイクル	濃縮回数 (2 から 100) ノート: 実サンプルの濃縮ステップの数は制限する必要があります。測定している元素とチューブ内のすべての残留汚染が濃縮されるためです。

熱前処理

検体溶液および/またはモディファイアの熱前処理では、このオプションはファーンエスプログラムで指定したステップまで実行されます。このステップの終わりに、残りの成分がチューブに注入されます。

オプション	説明
熱前処理	モディファイアまたはサンプルの熱前処理 モディファイア 領域で、前処理するモディファイアの 前処理 チェックボックスにチェックマークを付ける必要があります。 ノート: モディファイアの前処理温度はサンプルの灰化温度より高くてもかまいません。
サンプル予備加熱	検体溶液を前処理してから、モディファイアやその他の成分を追加します。
ウォームアップ 遅延	成分を追加してから、次の成分への熱前処理を実行するまでの、待機時間を定義します



注意

300 °C より高い熱前処理後は、ファーンエスを冷却してください!

熱前処理の温度が 300 °C より高い場合は、残りの成分を追加する前に、追加ステップでグラファイトファーンエスを 300 °C 未満に冷却する必要があります。熱いファーンエス (300 °C 超) にピペティングすると、チューブの先端が破壊されます。高い温度のエラーメッセージはありません!

SSA 600 固体オートサンプラーを使った固体測定

固体測定では、マトリックスモディファイアの添加を指定できます。モディファイアがアクティブになったら、その名前と量を定義できます (上記と同様)。

溶液注入機能なしの SSA 600 の場合は、モディファイアはサンプルに手で注入する必要があります。モディファイアは、サンプルポートがファーンエスに入る直前に、または SSA 600 による完全なサンプル準備の最終ステップとして、注入します。

溶液注入機能付きの SSA 600 の場合は、モディファイアまたは溶液サンプルは自動注入されます。

固体測定の前処理では、サンプルポートは最初にモディファイア (パラジウムなど) によって前処理されます。ファーンエスプログラムは、ステップ E/P まで実行されます。そこで、空サンプルポートの重量 (tare) がコーティングされたサンプルポートから同定され、サンプルが注入されます。それから、ファーンエスプログラムがステップ E/P から引き続き実行されます。

3.2.4 メソッド / 水素化物 画面

メソッド / 水素化物 画面は、以下の水素化物システム原子化のパラメータを設定するために使用します:

- HS60A/HS60
- HS55A/HS55
- HS 60 モジュール構成
- HS 55 モジュール構成

水素化物システムの接続は、装置の初期化の時に認識されます。水素化物インジェクター HS50のパラメータは、メソッド / サンプル導入 画面で指定します。水素化物システムのその他の洗浄または読み込みのコマンドは、Hg/水素化物システム 画面で指定します。



をクリックすると、メソッド / 水素化物 画面が開きます。

モード

装置にあわせてモードを選択して下さい。

オプション	説明
水素化物 (連続)	HS 60 A / HS 60 / HS 60 モジュール構成 反応は、連続フローの反応器で行います。サンプルは、オートサンプラーまたはマニュアルで供給できます。
水素化物 (バッチ)	HS 55 A / HS 55 / HS 55 モジュール構成 サンプルをピペットで反応容器 (最大30 mL) に入れます。容器をバッチモジュールのヘッドに取り付けます。4チャンネルポンプの手前のチャンネルのチューブで、還元剤を容器に送り込みます。反応により、金属水素化物または水銀が遊離します。
FBRモード	連続フローの水銀測定のみ Fast Baseline Return、FBR

オプション	説明
	最大吸光度に達した後に洗浄時間 2 の間直接アルゴンをセルに流すため、シグナルがベースラインに速やかに戻ります。

セル温度 / ポンプ速度レベル

オプション	説明
セル温度	水素化物法のみ 水素化物生成元素 As、Se、Sn、Sb、Te、および Bi の場合は、セル温度は 600 °C ~ 1000 °C の範囲から選択できません。Hg 測定の場合は、RT (室温 < 60 °C) または 150 °C から選択できます。 セルは、測定プロセス開始時に選択したセル温度まで加熱します。または、 Hg/水素化物法 で過熱を開始することもできます。
ポンプ速度レベル	ポンプ速度は4段階 (1 - 4) で調節できます。連続モードでは、ポンプ速度と反応時間でサンプル量が決まります。

システムクリーニング

連続フローのみ

システムクリーニングを各サンプル測定後にオプションで選択できます。アクションとして設定することもできます。

オプション	説明
サンプル間	各サンプル測定後にクリーニングを行います off クリーニングしません。 酸でクリーニング 希釈した酸溶液でクリーニングします。時間は 酸溶液洗浄時間 で指定します。設定時間の途中で、サンプル流路が反応器に切り替わります。 還元剤+酸でクリーニング このクリーニングメソッドはシステムが特に汚れたときに使用します (サンプルに高濃度の元素が含まれていたとき)。最初にシステムを 還元剤洗浄時間 で設定した時間で還元剤を使用して洗浄します。次にポンプを停止 (浸液時間) し、チューブ壁面の汚れをとります。最後にシステムを希釈した酸溶液で洗浄します (酸溶液洗浄時間)。
動作時	システムクリーニングをプログラムの他の動作で設定します。この追加のクリーニングステップは、高濃度の検体が含まれたサンプル後に挿入できます。オプション 酸でクリーニング および 還元剤+酸でクリーニング はシーケンス内のアクションで利用できます (上記を参照)。
還元剤位置	サンプルトレイ上の還元剤の位置
洗浄時間	以下の 3 つの洗浄時間を定義するための画面が開きます: 酸溶液洗浄時間 , 還元剤洗浄時間 , 浸液時間 . クリーニングオプションに応じて時間を設定します。

オペレーション時間

オペレーション時間は選択した測定モードにあわせて調整する必要があります。すべての時間は秒単位です。

オプション	説明
導入時間	サンプルポンプでは、2 バルブグループのサンプルホース上流をサンプルで充填するために、この時間が必要です。この時間は、新しいサンプルの最初の測定でのみ必要です。
AZ 待ち時間	ベースライン (オートゼロ) 調整の直前の時間。

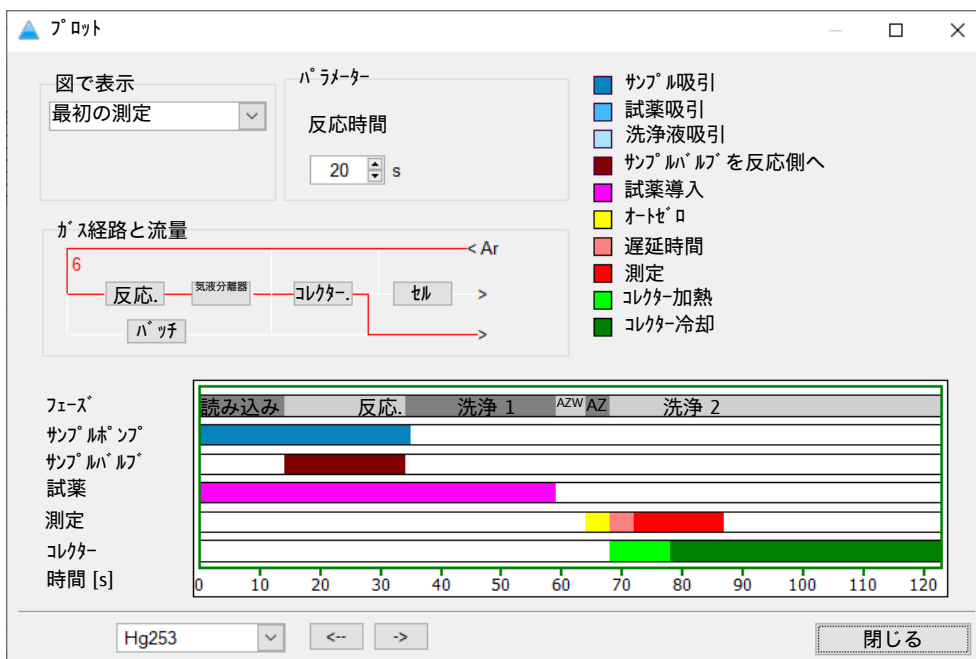
オプション	説明
プレウォッシュ時間	反応の前に、容器をアルゴンでクリーニングする時間 (水素化物生成元素のみ) プレウォッシュ時間は、その後の反応における酸水素反応を防ぐために空気を追い出す時間です。
反応時間	この時間に、サンプルポンプがサンプルを反応器に送ります。この時間は、供給するサンプル量と測定感度にとって非常に重要なパラメータです。
ポンプ時間	この時間に、反応を開始するために還元剤が容器に送られます。
洗浄時間 1 ... 3	アルゴンガスで反応ガスを追い出す時間。測定モードによってガスを送る流路が異なります。ガス流路は図で示されます。
コレクター加熱時間	この時間に、金コレクターから濃縮された水銀を追い出すために加熱器が動作します。
コレクター冷却時間	この時間に、次の濃縮を準備するために、金コレクターが冷却されます。
ガスフロー	アルゴンガスがこの値に関連付けられたフェーズに送られます。アルゴンガス流量は、新しいガス流量が入力できるようになるまで適用されます。測定モードごとに、ガス流量をさまざまな頻度で切る替えることができます。それぞれのフェーズでのガス流路は、水素化物システムの測定プロセスの図で確認できます。ガス流量は 5 から 15 L/h で 3 段階の調整ができます。

バッチパラメータ

オプション	説明
サンプル容量	容器内のサンプルの量
濃縮サイクル	コレクターでの水銀濃縮を含むバッチ操作 濃縮が実行される容器の数

水素化物/HydrEAシステムのガス流量および分析手順をグラフィカルに提示

プロットボタンをクリックすると、分析プロセスの個々のフェーズのガス流路をグラフィカルに提示する画面が開きます。この画面では、プログラムした分析プロセスがグラフィカルに表示されます。



分析プロセスの個々のフェーズは、プロセスチャート内で色分けして表示されます。色分けしたフィールドで示されたフェーズをクリックすると、**パラメータ** 領域に対応するパラメータ、**ガス経路と流量** 領域に設定済みガス流量が表示されます。プロセスは、選択した操作モードで決まります。

オプション	説明
図で表示	サンプル統計がアクティブになっている場合は (メソッド / 統計画面)、最初の測定、次の測定、最後の測定のさまざまなプロセスを表示できます。
ガス経路と流量	水素化物システムのガス流路をこのフロー図で示します。反応器 (反応器)、気液分離器 (気液分離器)、コレクター (金コレクター)、バッチ (バッチモジュール)、およびセル (セル) ファイナルモジュールが接続ホースと一緒に表示されます (アルゴンおよび反応ガスの場合)。 プロセス図で、ガス流路を表示したいフェーズをクリックします。ガス流路は赤でマークされ、アルゴン流路は数字 (L/h) で表示されます。
パラメータ	選択したフェーズの操作時間、測定時間、対応するガス流量を表示および編集します 対応するフェーズをクリックします。操作時間または測定時間 / ガス流量の名前と数値が表示され、これらは変更できます。グラフには変更が反映されます。
波長	選択した測定波長

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動作の指定 [▶ 65]

3.2.5 メソッド / サンプル導入画面 - サンプル導入を指定

メソッド / サンプル導入画面の表示は、使用する原子化法によって異なります。

3.2.5.1 フレーム法および水素化物法のオートサンプラー用メソッドパラメータ

フレーム法では以下のオートサンプラーを利用できます：

- AS 52s / AS 51s
- AS-FD / AS-F

メソッド / サンプル導入画面で、以下のパラメータを指定します：

- オートサンプラーの使用
- 洗浄モードとクリーニングコントロール
- 測定中の自動希釈
- SFS 6 インジェクションスイッチまたは HS 50 水素化物インジェクターの使用



をクリックしてメソッド / サンプル導入画面を開きます。

アクセサリーの使用

オプション	説明
オートサンプラー	<p>接続された初期化済みオートサンプラーを使用します。</p> <p>アクティブ解除されている場合は、サンプルがオートサンプラーなしでマニュアルで供給されます。</p>
インジェクションスイッチ SFS	<p>SFS 6 インジェクションモジュールは、オートサンプラーを使用しているときもマニュアル測定時にも使用することができます。SFS 6 はフレーム内で再現可能な状態を保証します。ページおよびキャリア溶液を永続的に吸引します。バーナーを一定温度に保つことができます。少量のサンプルを再現可能な方法で測定し、キャリア溶液で測定できます。</p> <p>面積または高さ オプションがメソッド / 波長 画面でシグナル評価として選択されている場合は、以下のパラメータがアクティブになります。</p> <p>インジェクション時間 この時間に、SFS 6 のバルブがサンプル流路を開き、サンプルを原子化してエアロゾルをバーナーに導入します。時間は想定される最大濃度によって異なります。一般的な値: 0.5 ~ 2.0 秒。</p> <p>ロード時間 この時間に、サンプルとインジェクションモジュールとの間のサンプル吸引流路が新しいサンプルで充填されます。</p> <p>SFS 6 は、時間が一定のシグナルを処理するためにも使用できます (平均積算)。</p>
水素化物システムHS50	<p>水素化物インジェクター HS 50 は、マニュアル操作の純粋なガス圧バッチシステムです。バッチインストールとクォーツセル付きセルホルダーで構成されます。還元剤は、供給ボトルから反応タンクにガス圧で導入されます。クォーツセルはフレームによって加熱されます。</p> <p>HS 50 は 面積 または 高さ シグナル評価と連携します。操作手順は以下の部分に分かれています: 予備洗浄 - オートゼロ - 反応 / 積算。</p> <p>反応時間 反応フェーズに、還元剤が反応容器に転送されます。測定シグナル取り込みは、反応時間開始と同時に始まります。積算時間は、すべてのシグナルを取り込めるように設定する必要があります。</p>

オプション	説明
	<p>プレウォッシュ時間 予備洗浄時に、反応容器から空気が追い出されます。予備洗浄フェーズは、水銀の同定では省略されます。水銀をサンプルから導入するにはアルゴンガスが必要なためです。</p> <p>サンプル容量: 使用されるサンプル量</p>

濃度が高い時希釈する

AS-FD および AS 52s オートサンプラーを使用している場合は、サンプルを自動的に希釈できます。メソッド内で、ミックスカップ内の充填レベルを定義して、濃度が高いときの自動希釈をアクティブにできます。

濃度が高いときの希釈では、サンプルの測定済み濃度をチェックします。濃度が検量線の測定範囲の 10% 超高い場合は、サンプルがミックスカップ内で希釈されます。必要な容量は、未希釈溶液状態の吸光度値に応じて、プログラムシーケンスの一部として数学的に算出されます。計算した量のサンプルをミックスカップに入れて、あらかじめ設定した希釈サンプルの作成量になるように希釈液をカップに足します。

オプション	説明
濃度が高い時希釈する	<p>なし 自動希釈が無効になります。</p> <p>ミックスカップ内 希釈が上記のように実行されます。</p>
ミックスカップレベル	<p>ミックスカップがこの充填レベルまで希釈液で充填されます。ここで入力した値は、サンプルの個々の希釈でも使用されます。</p>

ノート: サンプルの個々の希釈は **サンプル MID** 画面で定義します。

洗浄とクリーニングコントロール

測定中に、システムとそのアクセサリユニットの中にさまざまなサンプル経路をクリーニングするための洗浄ステップを設定できます。

サンプルの濃度が検量線の測定範囲の 10% 超高い場合は、バーナー/ネブライザーシステム (フレイム法) または水素化物システム (水素化物法) を以前の測定での汚染を取り除くために洗浄できます。洗浄時に、クリーニング結果をチェックするために吸光度/炎光度が測定されます。濃度が高いサンプルの後は、自動クリーニングコントロールが推奨されます (特に、**濃度が高い時希釈する** モードがアクティブなとき)。

オプション	説明
洗浄モード	<p>off 自動洗浄が無効になります。</p> <p>サンプル間 洗浄がサンプルごとに実行されますが、統計シリーズ内では実行されません。</p>
洗浄時間	<p>この時間に、ミックスカップから洗浄液が噴霧されます。チューブ流路とバーナーネブライザーシステムの洗浄が含まれます。</p>
ミックスカップ サイクル	<p>ミックスカップの洗浄回数 ミックスカップに洗浄液または希釈液を満たして、排水するまでが 1 サイクルです。</p>
クリーニングコントロール	<p>濃度が高い場合は、クリーニングコントロールが自動的に実行されます。</p>
コントロールリミット(Abs)	<p>希釈されたサンプルまたは低濃度のサンプルが測定される前に、シグナルレベルが洗浄サイクル時にこの値に戻る必要があります。</p>

ノート: クリーニングコントロールはシーケンス内にも定義できます。

オートサンプラー洗浄シーケンス サンプル吸引チューブとバーナーネブライザーシステムの洗浄は、サンプラーアームがオートサンプラーの洗浄カップに入っているときに行われます。その間に、メンブレンポンプが洗浄液ボトルから洗浄液を供給します。ポンプの溶液供給量はネブライザーの噴霧量や水素化物システムのサンプル吸引量より多いです。サンプル流路全体がクリーニングされます (プローブ、サンプルチューブ、インジェクションモジュール SFS6、バーナーネブライザーシステム)。余分な洗浄液は廃液ボトルに流れていきます。

AS 52s または AS-FD のミックスカップの洗浄は、洗浄液または希釈液を満たして、その溶液をポンプで廃液します。

遅延時間 遅延時間は、サンプルを原子化ユニット (水素化物システムのフレームまたは反応チェンバーなど) に導入するために必要です。測定遅延時間は、サンプルとネブライザー間の噴霧距離にあわせて調整する必要があります。

- ▶ 時間を **遅延時間** フィールドに設定します。模擬測定を **メッド / 統計** 画面で定義する場合は、以下の時間を使用します。模擬測定をアクティブにしない場合は、指定時間を 3 秒長くします。

アクセサリ / 模擬測定がアクティブな状態	時間
短い噴霧キャピラリー、マニュアルで操作	8 秒
標準噴霧キャピラリー、マニュアルで操作	12 秒
インジェクションモジュール SFS、マニュアルで操作	18 秒
オートサンプラー、インジェクションモジュールあり	18 秒
オートサンプラー、インジェクションモジュールなし	20 秒

その他のボタン / オプション

オプション / ボタン	説明
参照溶液位置	オートサンプラートレイ上の参照溶液の位置 ノート: シーケンスまたはサンプル ID 内の他のすべてのサンプル位置を定義します。
動作パラメータ	オートサンプラー / 動作パラメータ 画面を開きます ここで、オートサンプラーのその他のパラメータを指定できます (サンプルカップの浸液深さ、注入速度など)。

これについては次のリンクも参照してください :

- フレーム法用オートサンプラーの動作パラメータ [▶ 130]
- サンプル情報と QC サンプルの指定 [▶ 72]
- シーケンス内の測定と動作の指定 [▶ 65]

3.2.5.2 グラファイトファーネス法用オートサンプラーのメソッドパラメータ (溶液測定)


サンプルをグラファイトファーネスに導入する場合、以下のオートサンプラーのいずれかを使用する必要があります:

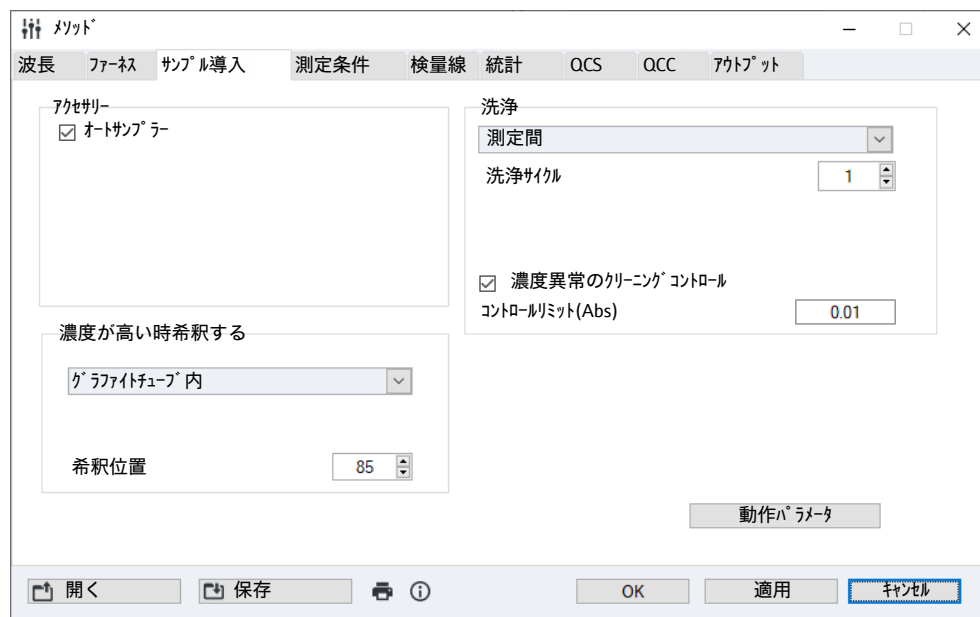
- MPE 60 または MPE 60/2
- AS-GF

メッド / サンプル導入 画面で、これらのオートサンプラーの以下のパラメータを指定します:

- オートサンプラーの使用
- 洗浄モード
- 測定中の自動希釈

グラファイトファーネス法の溶液測定では、**オートサンプラー** オプションは必ずアクティブにする必要があります。

 をクリックすると、**メソッド / サンプル導入** 画面が開きます。



オートサンプラーで自動希釈を行う

MPE 60 では、サンプルの自動希釈を実行できます。サンプルごとに希釈倍率を設定することができ、設定は、サンプル ID 画面で行います。メソッドを使用して、希釈を実行するための一般的なパラメータを設定できます (希釈液のモードと位置)。

濃度が制限を超えたときに自動的に希釈するパラメータを指定することもできます。サンプルの濃度が検量線の測定範囲の 10% 超高い場合は、サンプルが希釈されます。最大希釈倍率は、確実に注入できる最少量に制限されます (2 µL)。

ミックスカップ内の希釈は MPE 60 のみ可能です。MPE 60/2 および AS-GF オートサンプラーの場合は、グラフィイトチューブ内で検体が直接減らされます。さらに、濃度が高い場合は、未使用のサンプルカップが希釈に使用されます。

オプション	説明
なし	サンプルが希釈されません。
グラフィイトチューブ内	設定した希釈倍率に従って、サンプル注入量を減らします。元のサンプル量から減らされた分は、希釈液で補充されます。
容量を減らす	設定した希釈倍率に従って、サンプル注入量を減らします。初期サンプル量から減らされた分は補充されません。
ミックスカップ内	MPE 60 のみ ミックスカップで希釈します。容量は常に 500 µl です。
サンプルカップ内	希釈が未使用のサンプルカップで実行されます。その数およびトレイ上の開始位置は、 No. ミックスカップ で選択します。最大量は ミックス位置のレベル で指定します。使用される位置は、サンプルカップを交換した後に、今後使用するときのために オートサンプラー / 動作パラメータ 画面の ミックスカップ の 排液 オプションでリセットする必要があります。
希釈位置	サンプルトレイ上の希釈位置を選択します。

洗浄ステップの指定

測定シーケンスの実行中に、アクセサリユニット内のサンプル流路をクリーニングするための洗浄ステップを指定できます。

オプション	説明
洗浄モード	off 洗浄モードがオフになります。自動洗浄しません。 測定間 各統計実行後に洗浄 成分間 各成分 (モディファイア、標準、サンプルなど) をグラフアイトチューブに転送後に洗浄
洗浄サイクル	洗浄ごとの洗浄回数、1 から 5
ミックスアップ サイクル	MPE 60 のみ ミックスアップの洗浄回数 ミックスアップに洗浄液または希釈液を満たして、排水するまでが 1 サイクルです。

クリーニングコントロール

サンプルが測定されて検量線の測定範囲の 10% 超高い場合は、グラフアイトファーンネスを以前の測定での汚染を取り除くために加熱できます。クリーニング時に、クリーニング結果をチェックするために吸光度が測定されます。濃度が高いサンプルの測定後および濃度が高い時希釈する オプションがアクティブなときは、自動クリーニングチェックが推奨されます。

オプション	説明
濃度異常のクリーニングコントロール	濃度が高い場合は、クリーニングコントロールが自動的に実行されます。
コントロールリミット(Abs)	希釈されたサンプルまたは低濃度のサンプルが測定される前に、シグナルレベルがクリーニング時にこの値に戻る必要があります。

ノート

クリーニングコントロールは、濃度の高いときにかかわらず測定シーケンスの一部として定義されています。

オートサンプラーの洗浄

サンプルまたはその他の溶液を受け取った後、ピペッターチューブは希釈カップ内で洗浄液 (超純水、0.1 N HNO₃ でわずかに酸性化されたもの) で自動的にクリーニングされます。クリーニング液が、洗浄液ボトルから注入チューブおよびオートサンプラーの洗浄カップに供給されます。

浸液深さと注入速度のパラメータ

オートサンプラーのさまざまなカップの浸液深さと注入速度に関するパラメータは、オートサンプラー / 動作パラメータ画面で選択します。動作パラメータをクリックして、画面を開きます。

これについては次のリンクも参照してください：

- グラフアイトファーンネス法用オートサンプラーの動作パラメータ [▶ 137]
- サンプル情報と QC サンプルの指定 [▶ 72]
- シーケンス内の測定と動作の指定 [▶ 65]

3.2.5.3 固体測定のためのオートサンプラー用メソッドパラメータ

メソッド / サンプル導入画面で、以下のパラメータを指定します：

- SSA 600 または SSA 6 (z) 固体オートサンプラーの使用
- 操作モード - 分析手順
- オートサンプラー変更



をクリックすると、メソッド / サンプル導入画面が開きます。



オートサンプラー

オプション	説明
SSA6/SSA6Z マニュアルサンプラー	マニュアルオートサンプラー SSA 6 (z) マニュアル SSA 6 オートサンプラーを使用する場合は、これ以上のサンプル導入オプションを指定する必要はありません。すべてのサンプルをそれぞれ秤量し、サンプル重量をメイン画面の 固体 タブで入力する必要があります。
SSA600 オートサンプラー	自動固体オートサンプラー SSA 600
SSA600 溶液注入機能付	溶液 (標準やモディファイア) 注入機能付きの自動固体オートサンプラー SSA 600

SSA 600 オートサンプラーはサンプル導入の設定など、この画面上で詳細設定を行います。

オプション	説明
モード	<p>1-サンプルポートモード 1つのサンプルポート (常に再ロードされます) でのみ測定が実行されます。このサンプルポートは、トレイ 1 番に置きます。測定手順時に、すべての必要ステップ (空サンプルポート秤量、注入、秤量、溶液注入) がこのサンプルポートで実行されます。</p> <p>オートモード (全固体入力) 複数のサンプルポートが測定で使用されます。測定前にセッティングして、自動で測定を行います。</p> <p>オートモード (標準溶液位置42) 複数のサンプルポートが測定で使用されます。測定前にセッティングして、自動で測定を行います。重量を測らないサンプル (Cal-zero や溶液の標準の測定など) には、42 番に置いたサンプルトレイを使用します。ピペットによる溶液注入操作が必要なので、この位置に空のサンプルポートを置きます。</p> <p>サンプルポート数 オートモード (全固体入力) および オートモード (標準溶液位置42) の場合使用されるサンプルポートの数および利用可能なサンプル位置の数</p>
タイムクリティカルサンプル用ワークフロー	<p>サンプル準備および注入時のオートサンプラーの振る舞い</p> <p>アクティブになっている場合は、サンプルポートは測定前に直接サンプルと一緒に読み込まれます。これによって、サンプルトレイ上での待機時間が長いときにサンプルが揮発したり、粘着性が</p>

オプション	説明
	<p>高いためにサンプルポート上を「動いたり」することを防ぐことができます。このモードでは、オペレーターが常時介入する必要があります。</p> <p>アクティブ解除されているときは、利用可能なサンプルポートはすべて測定開始前に準備されます。ユーザーの介入を必要とするすべてのアクション（サンプル読み込みまたはモディファイアのマニュアルピペッティング）は組み合わせで実行されます。AAS 装置は、オペレーターの常時介入なしでこのモードで測定できます。</p>
速度	SSA600 の実行速度は 3 段階で設定できます。推奨レベル: 2
サンプルトレイ	設置しているトレイの枚数。
サンプル秤量	<p>重量確認なし サンプルの重量を測りますが、重量が表示されずにそのまま測定されます。</p> <p>重量確認あり 秤量ごとに重量が表示されます。この重量でよいのなら、サンプラーの緑色のボタンまたは画面の OK を押します。秤量をやり直したい場合には、サンプラーのオレンジ色のボタンまたは画面の 繰り返し を押します。サンプルポートはサンプリング位置に戻ります。</p> <p>重量を測らない このモードは濃度を測定しない場合に使用します。定性測定のために使用します。</p>
設置場所	<p>振動などの干渉に対してマイクロ天秤が秤量値を決定するために必要な信頼限界設定。</p> <p>秤量時間が長すぎるなら、設定を変更します。これによって信頼性は低下します。</p>
クリーニングコントロール	<p>濃度が高い場合は、クリーニングコントロールが自動的に実行されます。</p> <p>サンプルが測定されて検量線の測定範囲の 10% 超高い場合は、グラフアイトファーンネスとサンプルサンプルポートが以前の測定での汚染を取り除くために加熱されます。クリーニング時に、クリーニング結果をチェックするために吸光度が測定されます。</p> <p>ノート: クリーニングコントロールは、濃度の高いときにかかわらず測定シーケンスの一部として定義されています。</p>
コントロールリミット(Abs)	低濃度のサンプルが測定される前に、シグナルレベルがクリーニング時にこの値に戻る必要があります。

3.2.6 メソッド / 測定条件 画面 - ピーク範囲とバックグラウンド補正を指定

メソッド / 測定条件 画面で、ピークから測定結果を同定するための、波長固有のパラメータを定義します。



をクリックして **メソッド / 測定条件** 画面を開きます。

シグナル評価のための波長固有のパラメータ

オプション	説明
波長	元素波長の名前
シグナル / スムージング	<p>フレーム法以外</p> <p>off: シグナルはスムージングされません。</p> <p>弱: シグナルは少しスムージングされます (例: ノイズ抑制のため)。</p> <p>強: シグナルは大きくスムージングされます。</p>

オプション	説明
読み込み幅	ピークを記録するためのピクセル数 (最大 200) 指定したピクセル数の CCD 行のみ読み込み、保存します。これによって、評価時の演算時間と保存されるデータ量が最適化されます。
測定ピクセル	1 ~ 19 ピクセル 吸光シグナルの評価に使用されるピクセル数。これに基づいて測定値が最終的に形成されます。吸光度は測定ピクセルの合計値です。これによって、2つのピクセルの間にピークトップが来た場合におきる分析の誤差をなくすることができます。したがって、理論的には、最大で吸光度 9 を測定結果として表示させることもできます。 推奨する評価ピクセル数: 3 高さ ピーク最大の補間 1-ザ-定義 評価セルの自由選択。例: 多重線を評価する場合。例: 50,120-130 では、ピクセル 50 および 120 ~ 130 の測定値の合計が計算されます。
BGCモード	IBC 反復ベースライン補正。このバックグラウンド補正では、シーケンス内に参照ピークが必要です。 IBC-m ブロードバンドストラクチャー用反復ベースライン補正 (分子吸光)。このバックグラウンド補正では、シーケンス内に参照ピークが必要です。 リファレンスなし このバックグラウンド補正では、参照ピークが必要ありません。 リファレンスあり このバックグラウンド補正では、シーケンス内に参照ピークが必要です。
ベースライン補正	パーマネントストラクチャーを除去します この手順では、参照ピークが必要です。パーマネントストラクチャーは、リファレンスおよびサンプルピーク内に異なる強度で存在する可能性があるバンドですが、測定している元素が原因ではありません。通常は、亜酸化窒素フレームなどによる分子振動がバンド吸収の原因です。 off: パーマネントストラクチャーを補正しません。 on: パーマネントストラクチャーを補正します。
BG補正法	バックグラウンド補正のピクセルを調整します 自動 ソフトウェアが自動で補正ピクセルを検出します。 static バックグラウンド補正のピクセルをユーザーが BGCピクセル カラムで指定します。
BGCピクセル	バックグラウンド補正を静的に調整するピクセルの位置 バックグラウンド補正のピクセル数を入力します。例はステータス行で見つかります。

ボタン

ボタン	説明
補正ピクセル	補正ピクセル画面が表示されます。既存の補正モデルを選択したり、新しいモデルを作成したりできます。

ボタン	説明
減衰	<p>ノート: 波長ピーク表示で、グラフィカル表示に基づいてバックグラウンド補正のピクセルを選択して、それらをメソッドに転送できます。</p> <p>減衰 画面が表示されます。シグナル減衰の場合は、ピーク最大の左右のピクセルのみがシグナル生成で考慮されます。ピークピクセルの信号と、減衰レベルに応じて、その隣接ピクセルは、「切り取られます」。選択したシグナル減衰のレベルが高いほど、評価されるシグナル領域はピークシグナルから遠くなります。シグナル減衰は検量の測定範囲を広げることができます。評価に使用されるエッジピクセルは、測定ピクセルのカラムに表示されます。</p> <p>例: 中央レベルが選択された場合は、ピークレベルから3ピクセルの距離にある2ピクセルが測定値の形成時に考慮されます。</p>
シグナル積算	<p>フレーム法以外</p> <p>シグナル積算 画面が表示されます。過渡信号の領域評価の場合は、積算範囲を積算開始と積算終了の間に制限できます。これは、特に同時複数波長評価で役立ちます。その他の場合は、範囲は測定時にあらかじめ制限されている必要があります (例: 適切な測定時間を選択することで)。シグナル積算の制限は 測定値 画面のピークグラフで設定することもできます。</p> <p>選択した行の範囲を測定時間全体に設定するには、リセットをクリックします。行が選択されない場合は、すべての波長の積算制限がリセットされます。</p>

これについては次のリンクも参照してください：

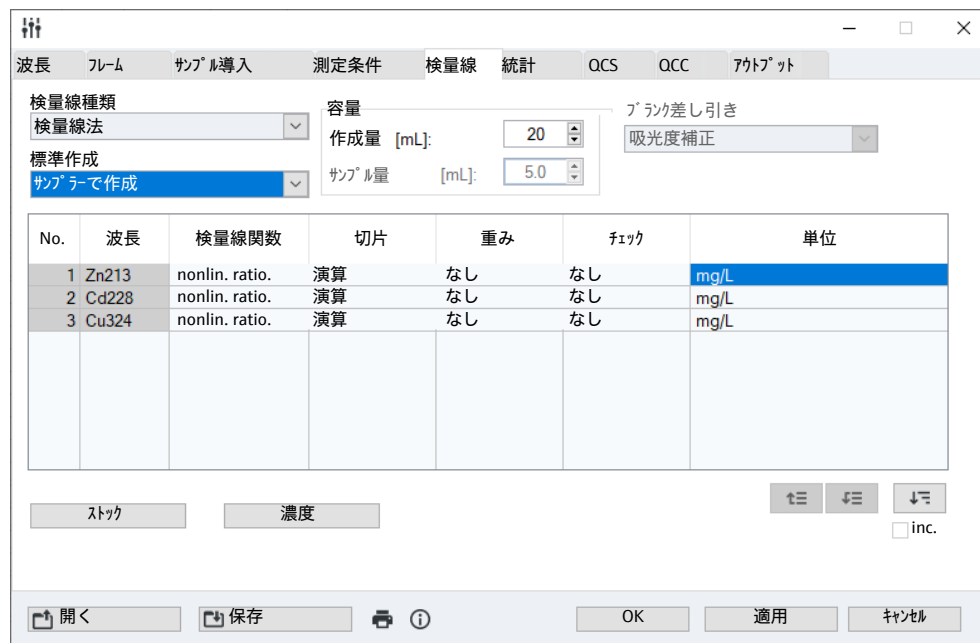
- ピーク補正用補正モデルの作成 [▶ 91]
- ピークバックグラウンド補正に使用するアルゴリズムについて [▶ 176]
- サンプルの個々の測定値の表示 [▶ 84]

3.2.7 メソッド / 検量線 画面 - 検量線を指定

メソッド / 検量線 画面で、検量線の種類を定義し、標準の濃度表を入力します。検量線に複数元素標準を使用できます (ストックとして指定します)。



をクリックすると、メソッド / 検量線 画面が開きます。



検量線種類を選択

検量線種類 リストからメソッドを選択します:

検量線種類	説明
作成しない	サンプル結果が強度として排他的に提示されます。これらの測定には検量線は必要ありません。
検量線法	標準溶液で検量線を作成します。作成した検量線から未知サンプルの濃度を算出します。
標準添加法	段階的に標準溶液を一定量の未知サンプルに添加して、検量線を作成します。未知サンプルの濃度は作成した検量線より算出します。
標準添加検量線法	標準添加法と同様に検量線を作成して、この検量線でほかの試料濃度を算出します。検量線の作成に用いた最初のサンプルの濃度も算出されます。

ブランク値補正に合意

標準添加法と標準添加検量線法にはブランク値補正が必要です。ブランク差し引きリストからメソッドを選択します:

補正	説明
吸光度補正	すべての標準添加のプロセスで、ブランクを測定し、測定された強度値をすべての測定値から減算します。この方法は以前より良く使用されていましたが、実試料の測定で、正しい値が得られないことがあります。
濃度補正	最初に、ブランク溶液に対して、試料と同じ濃度の添加物を用いて別の標準添加法を用います。得られた濃度結果を他の標準添加の結果 (Conc.2) から減算します。

標準作成


メソッド	説明
マニュアル	標準溶液を調整して用意します。
サンプラーで作成	オートサンプラー AS-FD または AS 52s を使用するときのみ 標準溶液は、ミックスカップでストック標準を希釈液で希釈し作成します。 この場合、容量で以下のように設定して標準溶液を準備します: 作成量: ミックスカップに作成するサンプルの総容量 (値の範囲: 1 から 20 mL)

メソッド	説明
	<p>サンプル量: 標準添加検量線法のみ サンプルの量 (0.5 mL 刻みで)</p> <p>標準添加は測定サンプルに対するサンプル溶液の割合はいつも同じです。添加する標準の量に対して少なくなければなりません。サンプルとストック標準を入れた残りの容量は希釈液を足します。サンプル量とトータル容量の比が濃度計算のファクターになります。</p>
容量を変化させる	<p>グラファイトファーンズ法のみ</p> <p>段階的に量 (サンプル量やサンプル重量) を変えてストック標準や参照標準試料をグラファイトチューブに注入します。</p>
希釈する	<p>グラファイトファーンズ法のみ</p> <p>サンプル量から減った、定義済みのストック標準と希釈液の量をグラファイトファーンズに注入します。ストック標準は検量線が作成できるように段階的に量を変えます (サンプル量に基づいて)。</p>

波長固有の検量線パラメータ 波長固有のパラメータを表で設定します:

表カラム	説明
No.	表内で選択した波長のシーケンス
波長	測定波長の名前
検量線関数	<p>検量線法を使用する検量線のみ</p> <p>linear 線形進行の検量線関数 $y = a + bx$</p> <p>nonlin. ratio. 非線形進行の検量線関数 (有理関数で記述) $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$</p> <p>nonlin. quadr. 非線形進行の検量線関数 (二次関数で記述) $y = a + bx + cx^2$</p> <p>自動 検量線の線形および非線形関数が計算されます。それぞれの検量線の残差平方和を算出します (マンデル検定)。非線形関数の和が線形関数より著しく低い場合は、非線形検量線が選択されます。そうでない場合は、線形検量線が使用されます。非線形関数は、オプション / 測定シーケンス 画面で選択します。初期設定として、断続有理関数が提供されています。</p> <p>ノート: 線形曲線進行は、検量線および標準添加検量線法でのみ許可されず。</p>
切片	<p>ゼロを通る 検量線は必ず 0 の点を通ります。</p> <p>計算 検量線濃度 0 も他の点と同じように検量線のポイントとして計算に含まれます。</p>
重み	<p>なし すべての点は同じ加重で検量線を作成します。</p> <p>1/conc 検量線の濃度の低い点に多くの重みをつけます。</p> <p>1/SD 検量線の各ポイントの繰り返し測定の結果から、標準偏差の小さい点に重みをつけます (必要条件: 平均統計を使用していること)。</p>

表カラム	説明
	$1/(SD \cdot conc)$ $1/conc$ と $1/SD$ の両方を使用します $1/SD$
フィッ	<p>ソフトウェアは、選択した統計に基づいて計算した予測範囲により、検量線の自動チェックを行います。</p> <p>なし 検量線のすべての点を使用します。削除を行いません。マークもつけられず棄却もされません。</p> <p>異常値を削除 検量線の点が予測範囲を超えた場合、アウトライアは F 検定の結果 (ポイントを削除すると残差分散が改善されるかどうかを確認するテスト) から削除されます:</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ F 検定は最も予測範囲から外れた検量線の点について行われます。このポイントを検量線から外しても残差分散が改善されない場合は、このポイントは検量線に含まれたままで、それ以上の変更は行われません。 ■ 改善される場合は、このポイントはアウトライアとして棄却されます (表に「!」がつけられ、グラフ上の点は赤色になります)。検量線は、この点なしで再計算されます。 ■ 次に、再び F 検定が行われます。すべてのアウトライアが削除されるまで繰り返し行われます。 ■ 検量線のすべてのポイントが予想範囲より外れた場合には、アウトライアとして削除されませんが、表に「?」がつけられ、グラフ上の点は茶色になります。
単位	測定元素の濃度単位を入れます。

アクティブセルの値を表カラム内のすべての後続セルに転送するには、 を使用します。表を開いて標準濃度を入力するには、**検量線テーブル** ボタンを使用します。

3.2.7.1 ストック標準の指定

オートサンプラーで標準濃度を自動作成させるには、個々の標準からストック標準を指定する必要があります (ストック標準から個々の標準が希釈液によって生成されます)。そのためは、ストック標準を指定してから、濃度表を完了する必要があります。元素と濃度の異なる複数のストック標準を使用できます。ストック標準を頻繁に使用する場合は、**データ / ストック標準溶液 / QC サンプル** 画面のデータベースでこれらを管理する必要があります。

- ▶ **メソッド / 検量線** 画面で、**ストック** をクリックします。ストック標準のリストが表示されます。1つの測定で最大 20 の標準を定義できます。
- ▶ **追加** または **挿入** をクリックすると、新しい行がストックリストに追加されません。
ストック標準挿入 画面が以下の 2 つのオプションで開きます:
 - データベースから既存の標準を使用したい場合は、**ストック標準データベース** からオプションを選択します。リストからストック標準を選択します。
 - ストック標準をマニュアルで入力したい場合は、**マニュアル** オプションを選択します。
- ▶ **OK** をクリックして確定します。
- ▶ **ストック標準** 画面の **位置** カラムでオートサンプラー上の標準の位置を入力し、**単位** カラムで単位を選択します。
- ▶ マニュアル入力の場合は、**ストック標準** 画面で、**濃度** をクリックし、**設定濃度** 画面で各元素の濃度を入力します。

- ▶ 閉じる をクリックして入力を終了します。

3.2.7.2 マニュアル調製した標準の濃度の入力

検量線テーブル画面で、検量線標準とそれらの元素濃度を指定します。

検査線法とマニュアル調整した標準の検査線表

検量線テーブル

検量線ゼロ 検量線標準

種類	位置	REC	Zn mg/L	Cd mg/L	Cu mg/L
1 Kal-Null1	10		0	0	0
Kal-Std.1	21	-		0.2	0.2
Kal-Std.2	22	-	0.5	0.5	0.5
Kal-Std.3	23	-	1	1	1
Kal-Std.4	24	-	2		2

inc.

標準種類

検量線種類ごとに以下の標準種類を指定する必要があります:

検量線種類	標準種類
検量線法	<p>Cal-Null: 検体なしの検量線ゼロ標準 複数の検量線ゼロ標準を入力できます。例: 測定している元素が異なる溶媒で提示されている場合。この場合、該当する検量線ゼロに濃度「0」を入力します。他の検量線ゼロはブランク (なにも入力しない) のままにします。</p> <p>Cal-Std: 検量線標準</p>
標準添加法	<p>Cal-Std: 検量線標準</p> <p>サンプル+添加: 添加標準</p>
標準添加検量線法	<p>サンプル+添加: 添加標準</p>

標準表

カラム	説明
種類	標準種類 標準が選択した番号に基づいて番号付けされます。
位置	オートサンプラーを使用するとき: オートサンプラーのサンプルトレイ上の標準の位置を入力します。
REC	検査線法の場合のみ 再検量用標準として認識させます
元素	それぞれの元素の濃度

検量線テーブルの作成

- ▶ メソッド / 検量線 画面で、濃度 をクリックします。検量線テーブル画面が表示されます。
- ▶ 表の上のフィールドで標準の数を選択します。
- ▶ 表内の標準ごとに元素の濃度を入力します。

- ▶ オプションで、オートサンプラー上の標準の位置を入力します。この設定は、初期設定としてシーケンスに転送され、そこで変更できます。
- ▶ **OK** をクリックして設定を確定します。

3.2.7.3 自動調整した標準の濃度の入力

フレーム法では、検量線標準は、オートサンプラーと組み合わせて自動的に調整されます。グラファイトファーネス法では、グラファイトファーネス内で量を段階的に変えるか希釈することで、検量線が作成されます。

検量線標準の自動調整には、ストック標準が必要です。

検査線法と自動調整した標準の検査線表 (フレーム法)

検量線テーブル

検量線ゼロ: 1 検量線標準: 4

種類	位置	容量		Zn mg/L	Cd mg/L	Cu mg/L
		[%]	注入量 ストック			
1 Kal.-Null1	10	0	0	0	0	0
Kal.-Std.1	3	2	200	1	0.2	0.2
Kal.-Std.2	3	5	500	1	0.5	0.5
Kal.-Std.3	3	10	1000	1	1	1
Kal.-Std.4	3	20	2000	1	2	2

Ctrl + マウスでクリック または Ctrl + スペースで標準をアクティブにしない

OK

標準種類

検量線種類ごとに以下の標準種類を指定する必要があります:

検量線種類	標準種類
検量線法	<p>Cal-ゼロ: 検体なしの検量線ゼロ標準 複数の検量線ゼロ標準を入力できます。例: 測定している元素が異なる溶媒で提示されている場合。この場合、該当する検量線ゼロに濃度「0」を入力します。他の検量線ゼロはブランク (なにも入力しない) のままにします。</p> <p>Cal-Std: 検量線標準</p>
標準添加法	<p>Cal-Std: 検量線標準</p> <p>サンプル+添加: 添加標準</p>
標準添加検量線法	<p>サンプル+添加: 添加標準</p>

標準表

カラム	説明
種類	<p>標準種類</p> <p>標準が選択した番号に基づいて番号付けされます。</p>
位置	<p>サンプルトレイ上のストックの位置</p>
容量	<p>%: フレーム法の場合 溶液内のストック成分の量パーセント</p> <p>注入量: フレーム法の場合 ストック成分の量 (µL)。この量は、入力された % 値と ミッド / 検量線 画面で定義されたミックスアップ 作成量 の合計量から計算されます。</p>

コラム	説明
	注入量: グラファイトファーネス法の場合 この量がグラファイトファーネスに注入されます。 ストック ストック表内でのストック標準の数
REC	検査線法の場合のみ 再検量用標準として認識させます
元素波長	標準内でのそれぞれの元素の計算済み濃度

検量線テーブルの作成

- ▶ **メソッド / 検量線** 画面で、**濃度** をクリックします。
検量線テーブル画面が表示されます。
- ▶ 表の上のフィールドで標準の数を選択します。
- ▶ フレーム法: 標準ごとに、表上の標準の量パーセントを入力します。
- ▶ グラファイトファーネス法の場合: 標準ごとに、グラファイトファーネスに注入される量を入力します。
- ▶ 標準ごとに、ストック標準の数を入力します。
- ▶ 標準内の波長が検量線に使用されない場合は、それらをアクティブ解除します:
そのためには、波長フィールドをクリックしてから、スペースバーを押します。再度アクティブにするには、手順を繰り返します。
- ▶ **OK** をクリックして設定を確定します。

3.2.8 メソッド / 統計 画面 – 統計パラメータを指定

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。ここでの選択した設定は、選択した検量線メソッドから独立していて、あらゆるメソッドの変更に対しても設定されたままで残ります。



をクリックして **メソッド / 統計** 画面を開きます。

統計:

オプション	説明
平均統計	平均と標準偏差を計算します

オプション	説明
	平均に基づく誤差の計算: サンプルを繰り返し測定します。測定結果に基づいて、平均、標準偏差、相対標準偏差が計算されます。
メジアン統計	中央値と分散 (R) を計算します。 メジアン法に基づく誤差の計算: サンプルを繰り返し測定します。測定値を数字順に並べます。表示される中央値は、 <ul style="list-style-type: none"> ■ 測定回数が奇数の場合は、その中央値。 ■ 偶数の場合は、真ん中の 2 つの値の平均値。 測定の最小値と最大値の影響を受けないので、メジアン統計はアウトライアテストを行う場合に適しています。

繰り返し

オプション	説明
サンプル	サンプルの測定回数
検量線標準	検量線サンプルの測定回数
QC	QC 測定の測定回数
プレ測定	この数の測定とサンプル (ブランクサイクル) が統計シリーズの前に挿入されます。例: フレームを標準化するため。値は結果の計算に使用されません。

グラフ棄却検定

平均統計使用時にサンプルの 3 回以上の繰り返し測定

オプション	説明
チェックを入れない	測定したすべての結果が、平均値として計算に使用されます。
チェックを入れる	統計計算からアウトライアを削除します。このようにして得られた平均値には、結果テーブルに「!」がつけられます。

信頼区間の計算

信頼区間の計算は、選択した信頼性 (下記参照) に基づき計算されます。サンプル測定における誤り、特に検量線による誤差が含まれています。統計機能をアクティブにしても値が提示されます。

オプション	説明
off	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 (濃度のパーセント) で表示します。

信頼水準

68.3 ~ 99.9% の間で選択できます。サンプルの信頼限界や検量線の予想範囲の計算に使用します。

3.2.9 メソッド / QCS 画面 - 品質管理サンプルを指定

メソッド / QCS 画面で、品質管理 (QC) サンプルを指定できます。これには、定義済みの位置に管理測定とサンプルが測定時に挿入する必要があります。これらの管理測定では既知の結果が生成されるはずですが、絶対値 (吸光度 / 濃度) または前回の測定からの濃度差異のどちらか既知のものです。品質管理用のサンプル種類を定義できます。

管理測定の結果は、品質管理カード (QC カード。品質ルールカードまたは管理チャートとも呼ばれる) に自動的に文書化されます。タブは、メソッドと一緒に保存され、そのメソッドでの今後の測定で引き続き使用されます。したがって、QC 管理チャートのシステムは、長期間の品質監視に使用されます。



をクリックしてメソッド / QCS 画面を開きます。

No.	波長	濃度	下限 偏差	上限 偏差	QC チャート	反応
1	Zn213				-	-
2	Cd228				-	-
3	Cu324	2	2	2	+	+

メソッド / QCS 画面内の要素

オプション	説明
種類	この QC サンプルは波長表に表示されます。QC サンプルのパラメータはここで編集できます。
名前	表示される QC サンプルの名前
リアクション	QC サンプルの結果が指定した制限を上回るまたは下回る場合のリアクション。
新規/変更	新しい QC サンプルを定義したり、既存の QC サンプルを変更したりします
削除	選択した QC サンプル を削除します
単位	QC サンプルの濃度単位
新規/変更	新しい QC サンプルを定義したり、既存の QC サンプルを変更したりします
QC サンプル概要	すべての QC サンプルの波長ごとのパラメータのリストを開きます
波長表	この表には、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

以下の QC サンプル種類を指定できます:

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データ/ストック標準溶液/QC サンプル画面で管理できます。</p>

オプション	説明
	<p>マニュアル QC サンプルの濃度を波長表に直接入力します 最大 QC サンプル数: 50</p>
QC std.	<p>標準を QC サンプルとして定義します 検量線テーブルに定義されているすべての標準を QC 標準として使用できます。 設定できる QC サンプルの数 = 検量線テーブルの標準の数 (最大 65)</p>
QC ブランク	<p>ブランクサンプルを QC サンプルとして定義します</p>
QC ストック	<p>スパイクサンプルを QC サンプルとして定義します 回収 / 添加では、1 つまたは複数のサンプルへの定義済み濃度添加の測定結果がチェックされます。 そのために、サンプル表内のサンプルの後に QC ストックサンプルを定義します (QC ストックサンプル = サンプル + 既知濃度の溶液)。サンプルと QC ストックの測定後に、2 つの濃度の差を「添加した濃度」と比較して、回収率を計算します。フレーム法の場合は、スパイク溶液は事前に作成しておく必要があります。</p>

認証値のついている品質管理サンプルがない場合には、品質管理は、二重度測定として行われます。

オプション	説明
QC トロッド	<p>品質管理サンプルが最初に測定されたときに、測定値が保存されます。次に QC サンプルを測定したときに、最初の値との差が計算されます。この QC サンプルは、測定の最初と最後に測定することをお勧めします。</p>
QC マトリックス	<p>サンプルを前処理前に分けます。それぞれに同じ前処理をおこないません。これらのサンプルを、QC トロッド および QC マトリックスとしてオートサンプラー上に置きます。測定した濃度の差を計算します。</p>

エラー制限を超えた場合の手順

QC サンプル種類のために、エラー制限を超えたときに従う必要がある手順を選択できます。

QC サンプル種類	手順
QC サンプル	<p>フラッグ サンプルテーブル内で測定値にマークをつけます。測定プログラムは次のサンプルに進みます。</p>
QC std.	<p>標準化 + 継続 検量線が再度作成されます。QC サンプルが再度測定されます。QC サンプルが範囲内の場合は、次のサンプルで測定が継続されます。そうでない場合は、測定プログラムは停止されます。</p>
QC ストック	<p>再検量 + 継続 新しい検量線が作成されます。QC サンプルが再度測定されます。QC サンプルが範囲内の場合は、次のサンプルで測定が継続されます。そうでない場合は、測定プログラムは停止されます。</p> <p>標準化 + 再測定 検量線が再度作成されます。QC サンプルが再度測定されます。QC サンプルが範囲外の場合は、測定プログラムは停止されます。範囲内の場合は、最後の QC サンプルまたは最後の検量線作成 (再作成) の後に、すべてのサンプルが再度測定されます。QC サンプルがまた許容範囲を超えた場合には、測定プログラムは停止されます。</p>

QC サンプル種類	手順
	<p>再検量+再測定 新しい検量線が作成されます。QC サンプルが再度測定されます。QC サンプルが範囲外の場合は、測定プログラムは停止されます。範囲内の場合は、最後の QC サンプルまたは最後の検量線作成 (再作成) の後に、すべてのサンプルが再度測定されます。QC サンプルがまた許容範囲を超えた場合には、測定プログラムは停止されます。</p> <p>次のメソッド 現在の測定プログラムが停止され、次のメソッドの測定プログラムが開始されます。</p> <p>Stop 現在の測定プログラムが停止されます。</p>
QC プラック	<p>フラッグ</p> <p>次のメソッド</p> <p>Stop</p>
QC トロッド	リアクションなし
QC マトリックス	

QC サンプルの波長ごとパラメータ

QC サンプルの波長ごとパラメータを波長表に入力します。

カラム	説明
波長	測定波長の名前
濃度	QC サンプルおよび QC std. の場合 QC サンプルの想定濃度
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までの想定濃度増加 ストック溶液のスパイク量と濃度に対応する値を入力します。
Exp. ext.	QC プラックの場合 想定吸光度
下限	エラー制限 (パーセント (濃度) または吸光度) の下限
上限	エラー制限 (パーセントまたは吸光度) の上限
QC チャート	「+」がついている場合は、この波長の品質管理の結果は結果リストの QC タブで提示されます。
反応.	この手順は、エラー範囲制限を超えている場合に使用する必要があります。複数の波長に「+」がついている場合は、エラー制限を超えていて反応をトリガーするべきなのは、それらの波長の 1 つだけです (OR ロジック)。
単位	のみ QC std. 想定濃度の単位

QC サンプルのパラメータを入力

- ▶ **メソッド / QCS** 画面で、**新規/変更** をクリックして、QC サンプルの新しいパラメータセットを作成するか、選択したパラメータセットを編集します。
QC サンプルタイプ の追加/変更 画面が表示されます。
- ▶ **種類** リストで QC サンプル種類を選択します。
- ▶ **QC サンプルのみ**: 複数の **QC サンプル** を定義する場合は、隣接するリストボックスで連続番号を定義します。
- ▶ **QC std. のみ**: 検量線テーブル内の順序に応じて、リストボックス内の標準の番号を選択します。

- ▶ 波長固有のパラメータを表で入力します。
- ✓ 追加の QC サンプルを同様に定義します。

3.2.10 メソッド / QCC 画面

メソッド / QCC 画面で、シーケンスでの品質管理について以下のパラメータを指定します:

- 相対標準偏差 (平均統計) または相対範囲 (メジアン統計)
- 検量線管理
- 再検量管理
- エラー制限を超えた場合の手順

さまざまな管理オプションとさまざまなリアクションを同時に選択してもかまいません。

 をクリックしてメソッド / QCC 画面を開きます。

品質管理の種類

オプション	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	検量線管理
再検量チェック	再検量ファクターの管理

エラー制限を超えた場合のリアクション

オプション	説明
なし	該当する管理を実行しません
フラッグ	エラー制限を超えた場合、サンプル表内の対応するサンプル、検量線、または再検量にマークをつけます。
繰り返し + 継続	のみ RSD/RR% チェック エラーリミットを越えると、次のサンプルの測定の前にもう一度サンプルを繰り返し測定します。
再検量+継続	以下のみ: 検量線チェックおよび 再検量チェック 検量線または再検量ファクターのエラー制限を超えた場合は、新しい検量線を実行してから、次のサンプルで測定を継続します。

オプション	説明
次のメソッド	以下のみ: 検量線チェック および 再検量チェック エラーリミットを越えると現在のメソッドの測定を停止して、次のメソッドの測定を開始します。
Stop	以下のみ: 検量線チェック および 再検量チェック エラーリミットを越えると現在の測定を停止します。

グラファイトファーネスの管理

グラファイトファーネス法のみ

グラファイトファーネスチューブが使用時間が長すぎる場合、分析品質が低下します。グラファイトファーネスチューブ使用時間を監視し、加熱回数が一定数を超えたときに警告してもらうことができます。

オプション	説明
最大加熱回数	チューブの最大加熱回数を入力します 隣のフィールドに現在のチューブの加熱回数が入力されます
リアクション	最大回数を超えたときのリアクションを選択します リアクションなし 回数のモニターをしません。 フラッグ 最大回数を超えるとサンプルテーブルにマークがつきます。 Stop 最大回数がくると測定を停止します。

波長ごとの品質チェックパラメータ

この表には、波長ごとの品質チェックの設定を入力します。それぞれの波長に波長ごとの設定を行うことができます。一つまたはそれ以上の波長でエラーリミットをこえた場合は、選択したリアクションが実行されます。

3.2.11 メソッド / アウトプット 画面 - 結果のアウトプットおよびメモリー内容を指定

メソッド / アウトプット 画面で、メモリー内容、画面表示や印刷時の測定結果の数字の桁数や小数点以下の桁数、印刷の順番などを設定できます。

メソッドの開発を行うときには、ピークを保存したほうがよいです。ピークデータから、マトリックスや干渉の問題などを知ることができます。ピークデータを保存せずに変更したメソッドで再計算をおこなっても、計算済み吸光度値から始めることしかできません。個々のピクセルのデータが残っていないと、バックグラウンド補正ポイントを変更しても変更が計算に反映されません。削除されたルーチンメソッドでは、ピークの保存は通常必要ありません。



ををクリックすると、メソッド / アウトプット 画面が開きます。

- ▶ 対応するオプションをアクティブにすることで、メソッドとピークが測定結果と一緒に保存されます。
- ▶ 以下の表で、吸光度および濃度値を表示および印刷するときの小数点以下の桁数、および測定波長の印刷時の順番を定義します。

ノート

常にピークを保存 オプションが オプション / 測定シーケンス 画面でアクティブになっている場合も、メソッドパラメータでの設定に係わらず、常にピークデータが保存されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- 測定シーケンスのオプション [▶ 162]

4 シーケンス

シーケンスには、測定ルーチン内でサンプルと動作が処理される順序を定義します。またサンプル名やサンプラー上のサンプル位置などのサンプルデータを直接入力できます。サンプル情報を恒久的に保存するには、サンプル情報ファイルに保存する必要があります。

シーケンスは、検量線の種類や統計評価、品質管理等の情報が含まれる、読み込まれたメソッドに基づいています。

4.1 シーケンスの作成、保存、読み込み

メソッドのようにシーケンスもデータベースに保存できます。シーケンスを作成したり、変更したり、保存したり、読み込んだりできます。シーケンスを管理するための詳細機能は、[データ/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](#) [▶ 150]

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動作の新しいシーケンスを指定できます。

▶ [メニューアイテム ファイル | 新規 サンプル](#) を選択します。

▶ または、 をクリックするか、メニューアイテム [メソッド 最適化 | サンプル](#) を使用して、現在のシーケンスパラメータで画面を開きます。

✓ [シーケンス](#) 画面が表示されます。ここで、測定および後続の動作を定義できます。

これについては次のリンクも参照してください：


[シーケンス内の測定と動作の指定](#) [▶ 65]

4.1.2 シーケンスの保存

測定および動作を入力した後に、シーケンスをデータベースに保存します。これによって、このシーケンスを今後の測定で再利用できます。シーケンスは [シーケンス保存](#) 画面でデータベースに保存されます。シーケンスを分類して見つけやすくするために、シーケンスと一緒に追加データを保存できます。

シーケンス保存 画面内の要素

シーケンス保存

名前  Cat.

名前	バージョン	月日	時間	Cat.	オペレーター
Cd, Zn, Cu	1	10.08.2021	16:03	GR	
TestScraper	1	08.01.2021	8:06		admin

並べ替え
 / 昇順 降順
 現在のバージョンのみ

説明

オプション	説明
名前	シーケンス名
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） この項目は任意です。
表	既存のシーケンスの概要
並べ替え	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	オプションで、シーケンス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付きでリストが開きます。これらのコメントはデータ/デフォルト値画面で管理します。

シーケンスの保存


- ▶ シーケンス画面で、**保存** をクリックしてシーケンス保存画面を開きます。
または、メニューアイテム **ファイル|保存|アップル** を選択します。
- ▶ シーケンス保存画面でシーケンスの名前を入力し、その他のパラメータを選択します。
- ▶ **OK** で選択を確定します。
 - ✓ これで、シーケンスはデータベースに保存されます。既存のシーケンスと同じ名前を使用する場合は、新しいバージョンのシーケンスがデータベース内に作成されます。


これについては次のリンクも参照してください：

 [事前定義の備考の作成 \[▶ 157\]](#)

4.1.3 シーケンスの読み込み


保存済みシーケンスを読み込んで、それらに基づいてメソッドと一緒に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、**アップル** 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。

- メニューアイテム **ファイル | 測定シーケンスの読み込み** を選択します。
-  をクリックしてから **開く** をクリックすることで、**シーケンス** 画面を開きます。
- ▶ オプションで、**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。すべてのシーケンスを表示するには、**Cat.** フィールドを消去します。
- ▶ オプションで、最新バージョンのシーケンスだけを表示したい場合は、**現在のバージョンのみ** オプションをアクティブにできます。
- ▶ リストでシーケンスを選択して **OK** をクリックします。
 - ✓ 保存済みパラメータで**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、測定の順序および分析のその他の動作を指定できます。

 をクリックして**シーケンス**画面を開きます。



位置	種類	名前	名前 (2)	元素
1	参照	54		all
2	Cal-ゼロ 1	10		all
3	Cal-Std 1	3		Cd, Cu
4	Cal-Std 2	3		all
5	Cal-Std 3	3		all
6	Cal-Std 4	3		Zn, Cu
7	計算 検量線			
8	サンプル	54		all
9	サンプル	54		all
10	サンプル	54		all
11	サンプル	54		all

サンプルおよび動作シーケンスの表

表には、選択したサンプルおよび動作シーケンスが処理の順序で表示されます。

表カラム	説明
種類	サンプルの種類または分析のステップ。
位置	オートサンプラーのトレイ位置 (サンプラーを使用している場合)。
名前	サンプル名 この項目は任意です。検量線および QC サンプルの場合は、このサンプル名がメソッドから転送されます (サンプル名がそこで指定されていた場合)。測定サンプルの場合、サンプル情報ファイルから名前を転送できます。
名前(2)	サンプル ID の追加名 (オプション)。
元素	複数元素メソッドのみ

表カラム	説明
	サンプル内で測定されるまたは他の動作が実行される元素または元素波長。
	all メソッド中の全元素 / 波長 (初期設定)。
	元素記号 入力した元素のみ。例: Cu、Pb。
	元素記号 + 番号 (1 つの元素で複数波長測定する場合) 選択した波長のみ測定。例: Cu1、Cu2。
	not 元素記号 入力した元素を測定しません。例: not Cu、Pb。
	not 元素記号 + 番号 設定した波長は測定しません。例: not Cu1、Pb2。

ボタン

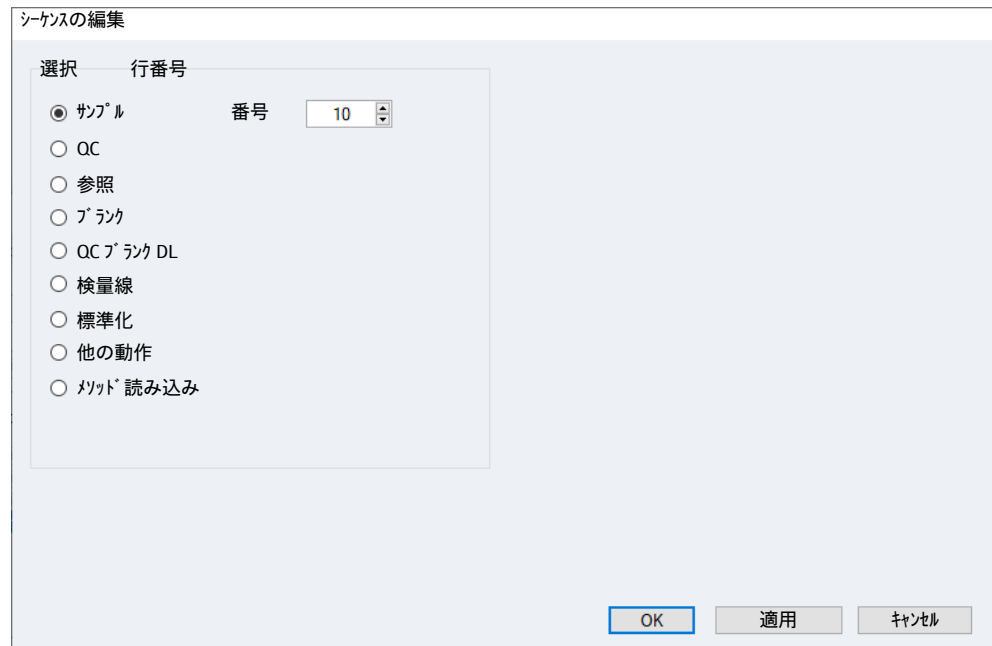
ボタンを使って、測定と動作をシーケンスリストに追加したり、それらを削除したり、既存のサンプル情報データを転送したりできます。

ボタン	説明
追加	リストの最後に新しい行が加わり、 <i>シーケンスの編集</i> 画面が開きます
挿入	選択した場所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	シーケンステーブル全体を削除します
シーケンス<-QC サンプル	QC サンプルの名前およびオートサンプラー内でのそれらの位置についての情報を <i>サンプル ID / QC サンプル情報</i> 画面から転送します。 QC サンプル ID テーブルから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>行から</i> フィールドで設定します。
シーケンス<-サンプル	<i>サンプル ID</i> 画面からサンプル名とサンプラー位置を転送します サンプル ID テーブルから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>行から</i> フィールドで設定します。

その他のボタンおよび入力オプションは、よく使用されるコントロールの概要にあります。

4.3 シーケンス内の測定と動作の指定

シーケンスの編集 画面で、測定の順序および分析の動作を指定できます。画面は、*シーケンス* 画面で **追加** または **挿入** をクリックすると表示されます。



指定できる測定と動作


使用する原子化法およびメソッド内の設定に応じて、分析のためのさまざまな測定および動作を指定できます。

オプション	説明
サンプル	番号 で設定した数のサンプルを測定します。
QC	QCサンプルの測定とメソッドで設定した計算を行います。 メソッド / QCS 画面の設定に従って、QC サンプルがリストから選択できるようになります。QC サンプルのパラメーターは右側の画面に表示されます。
参照	フレーム法のみ 参照サンプルは、常にシーケンス内の最初の測定として定義します。蒸留水は参照として使用されます。
ブランク	ブランクサンプルを検体なしで測定します
QCブランク DL	ブランク試料を測定し、ブランクメソッドによる検出限界および定量限界を求めます
検量線	検体の既知の濃度で標準サンプルを測定し、メソッド内の指定に従って検量線を算出します
標準化	再検量のために標準サンプルを測定し、再検量を算出します
サンプル添加	
添加ブランク	
他の動作	これらの動作は、サンプルの測定に直接影響することはありません (下記参照)。
メソッド読み込み	シーケンス内で別の測定を開始するために、保存済みメソッドを読み込みます


他の動作

以下の他の動作を測定プロセスに挿入することもできます:

オプション	説明
flame-on / flame-off	フレーム法のみ フレームの消火 / 点火
flame-scrubbing	グラファイトファーネス法のみ

オプション	説明
	グラファイトチューブの汚れを落とすための加熱（クリーニング）を行います。グラファイトチューブはあらかじめ設定された温度に加熱されます。この加熱シーケンスの設定は、 メソッド / ファーネス 画面で行います。
チューブ温度/ガス	グラファイトファーネス法のみ グラファイトチューブのフォーム
システムクリーニング	水素化物法 追加のシステムクリーニング このクリーニングのパラメータは、 メソッド / 水素化物 画面で設定します。
システムリセット	水素化物法 再インストールや日常の測定の最後にシステムクリーニングを行っている場合には、チューブが試薬で満たされていない状態になっています。したがって、この動作は、シーケンス内で最初の測定の際に前に実行する必要があります。
ランプ off	キセノンランプをオフにします
スタンバイ	スタンバイモードでキセノンランプを点灯します。
待機時間	測定を開始する前に、テキストボックスに入力した時間(分)待機します
一時停止	測定を停止します その後  をクリックすることで測定を継続できます。
ビープ	ビープ音を鳴らします。例: 検量線作成終了時など。(サウンドボード*とスピーカのインストールが必要です)
繰り返し / While	他の動作 While までシーケンスの一部を繰り返します 停止条件として、ループサイクル数または時間(分)を指定できます。結果ファイルの項目に、停止条件に応じてカウンタまたは日時が追加されます。 オンライン測定の場合は、自動オプションをにアクティブにする必要があります。これによって、マニュアルモード時にサンプルメータリングを確認されなくなります。
検量線を表示	測定シーケンス中に検量線を表示します
計算 検量線	検量線関数を再計算します
コレクターの洗浄	水素化物法/hydrEA 検体残留物を取り除くために金コレクターを加熱します
システムクリーニング	フレーム法 サンプル流路を洗浄します
クリーニング	溶液測定のためにクリーニングコントロールを実行します パラメータは、 メソッド / サンプル導入 画面で指定します。
分光器パージ	contrAA 800 光学パージをオフにします。または空気またはアルゴンによるパージをオンにします この動作は、パージがすでに完了している場合はスキップされます。パージ時間は、 オプション / 分光器パージ 画面から取得されません。

シーケンスの指定

▶  をクリックすると、**シーケンス**画面が開きます。

- ▶ 次に、**追加** をクリックします。現在のメソッドに使用できる測定と動作が表示された **シーケンスの編集** 画面。
- ▶ オプションを順々にアクティブにし、それらをシーケンステーブルに **適用** を使って転送します。
- ▶ 最後のオプションを **OK** で確定し、**シーケンス** 画面に戻ります。
シーケンステーブルには、すべての測定と動作が選択順に含まれます。
- ▶ オプション: 検査する元素を **元素** テーブルカラムに入力します。
- ▶ オートサンプラーを使用する場合:
オートサンプラーのサンプル位置を指定します。標準サンプルと QC サンプルの位置は初期設定としてメソッドから取得されます。位置はここで変更できません。

ノート: 分析するサンプルの名前と位置は **サンプル MID** 画面で入力してから、それらをシーケンステーブルに転送することをお勧めします。

測定ルーチンの通常シーケンス

通常シーケンスには、測定が以下の順序で含まれます:

1. フレーム法: 参照測定
2. 検量線
3. サンプル数


オプションで、QC サンプル、再検量、または回収率の測定をサンプル測定の前後に挿入できます。

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 / 水素化物 画面 \[▶ 37\]](#)
- [メソッド / ファーネス 画面 - グラファイトファーネス内の原子化用パラメータを指定 \[▶ 30\]](#)
- [フレーム法および水素化物法のオートサンプラー用メソッドパラメータ \[▶ 40\]](#)
- [グラファイトファーネス法用オートサンプラーのメソッドパラメータ \(溶液測定\) \[▶ 43\]](#)
- [シーケンス 画面 \[▶ 64\]](#)
- [サンプル MID 画面 \[▶ 69\]](#)


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、現在の測定サンプルおよび QC サンプル固有のデータが含まれます (サンプル名、オートサンプラー上の位置、重量、希釈、濃度単位など)。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テーブルとして CSV フォーマットで保存され、Excel などのスプレッドシートプログラム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。

ツールバーの  をクリックするか、メニューアイテム **ソフト開発 / サンプル ID** で、**サンプル ID** を開きます。

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

- ▶ ツールバーで  をクリックします。
または、メニューコマンド **ソフト最適化 | サンプル ID** または **ファイル | 新規 サンプル情報ファイル** で **サンプル ID** 画面を開きます。
サンプル ID 画面が表示されます。
- ▶ サンプルおよび QC サンプルの設定を指定します。
- ▶ OK または **適用** をクリックすると、データセットがアクティブになります。
 - ✓ サンプル ID がアクティブになり、次の測定で使用されます。サンプル ID を今後の測定のために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** をクリックします。
または、メニューアイテム **ファイル | 保存 | サンプル情報** を選択します。
標準の [Save as (名前を付けて保存)] 画面が表示されます。
- ▶ データセットの名前を [File name (ファイル名)] フィールドに入力します。
- ▶ **保存** をクリックして、サンプル ID を保存します。
 - ✓ サンプル ID は CSV フォーマットで保存されます。今後の測定のためにデータを読み込んだり、スプレッドシートプログラムまたはテキストエディタで編集したりできます。

サンプル情報データを開く

- ▶ サンプル ID を以下の方法のいずれかで開きます:
 - ツールバーで、**サンプル** フィールドの横の  アイコンをクリックします。
 - メニューアイテム **ファイル | サンプル情報ファイルを開く** を選択します。
 - **サンプル ID** 画面で、**開く** をクリックします。
標準の [開く] 画面が表示されます。
- ▶ リストでファイルを選択して [開く (Open)] をクリックします。
 - ✓ 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。

5.2 サンプル ID 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。名前とオートサンプラー上の位置以外に、測定に重要なパラメータを入力できます。



をクリックしてサンプルID画面を開きます。

サンプルID - □ ×

サンプル情報 QC サンプル情報

	位置	名前	Pre-DF	単位	サンプル重量	注入量	名前(2)	AS-DF	ブランク補正	サンプル種類
1	1	Sample 1801	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
2	2	Sample 1802	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
3	3	Sample 1803	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
4	4	Sample 1804	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
5	5	Sample 1805	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
6	6	Sample 1806	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
7	7	Sample 1807	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
8	8	Sample 1808	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
9	9	Sample 1809	1.000	mg/L		100.00		1.00	off	サンプル
									off	サンプル
									off	サンプル

< >

追加
挿入
削除
1
↑
↓
↓

inc.

表の削除

サンプル->シーケンス

サンプル<-シーケンス

1

開く
保存
シーケンス
閉じる

サンプル情報 ページ

このページにはサンプル属性のリストが含まれます。

表カラム	説明
位置	オートサンプラーのサンプル位置
名前	サンプル名 この項目は任意です。最大文字数: 20
Pre-DF	事前希釈倍率は、元のサンプルがオートサンプラーに置かれる前またはオートサンプラーなしでの作業時に原子化ユニットに供給される前に、希釈に使用された倍率です。この倍率は元のサンプルの濃度計算に必要です (結果テーブル上の濃度2)。
単位	サンプルの濃度単位。
サンプル重量	初期重量 (グラム) (溶液測定のみ) この重量の元のサンプルが溶液に注入されました。初期重量は元のサンプルの濃度計算に必要です (濃度2)。 ノート: 溶液測定の場合、既知の初期サンプル重量が結果画面 / 固体に入力されるか、秤量されます。
注入量	この初期重量がこの量 (mL) の溶液で溶解されています。この値は元のサンプルの濃度計算に必要です (結果テーブルの濃度2)。
名前(2)	追加のサンプル名。 この項目は任意です。最大文字数: 20
AS-DF	オートサンプラーの希釈倍率。 ノート: ここで使用される希釈モードは、メソッド / サンプル導入画面で定義します。
ブランク補正	ブランク補正 off ブランク補正をしません。 on サンプル濃度を計算すると k に、シーケンスで最後に測定したブランクの濃度を減算します。

表カラム	説明
	ノート: ブランク補正の手順は オプション / 検量線 画面で指定します。
サンプル種類	<p>サンプル種類の選択 グラフ または サンプル種類</p> <p>サンプル ID のサンプルデータは、サンプル種類に応じてシーケンス内のサンプル順序に割り当てられます。例:</p> <p>サンプル ID 内の 1 番目のブランク値 = シーケンス内の 1 番目のブランク値 サンプル ID 内の 2 番目のブランク値 = シーケンス内の 2 番目のブランク値 サンプル ID 内の 1 番目のサンプル = シーケンス内の 1 番目のサンプル サンプル ID 内の 2 番目のサンプル = シーケンス内の 2 番目のサンプル、など</p>
元素	<p>複数元素メソッドのみ</p> <p>サンプル内で測定されるまたは他の動作が実行される元素または元素波長。</p> <p>all メソッド中の全元素 / 波長 (初期設定)。 元素記号 入力した元素のみ。例: Cu、Pb。 元素記号 + 番号 (1 つの元素で複数波長測定する場合) 選択した波長のみ測定。例: Cu1、Cu2。</p> <p>not 元素記号 入力した元素を測定しません。例: not Cu、Pb。</p> <p>not 元素記号 + 番号 設定した波長は測定しません。例: not Cu1、Pb2。</p>

ボタン

オプション	説明
追加	リストの最後に指定した数の新しい行を挿入します
挿入	選択した場所の前に指定した数の新しい行を挿入します
削除	選択した行を削除します
番号	挿入または削除する行数を入力する入力フィールド
表の削除	サンプル情報を表全体を削除します
QC サンプル<-シーケンス	<p>シーケンスリストへサンプル名とオートサンプラーの位置を転送します</p> <p>シーケンスリストに転送する情報の最初の行を 行から 入力フィールドで定義します。</p>
サンプル<-シーケンス	<p>サンプル名とオートサンプラーの位置をシーケンスリストからサンプル情報テーブルに転送します</p> <p>シーケンスリストに転送する情報の最初の行を 行から 入力フィールドで定義します。</p>

QC サンプル情報 ページ

QC サンプルは、**サンプル情報** ページと同じようにこのページに表示されます。この QC サンプルのテーブルはサンプルテーブルと同様に構築されます。さらに、**種類** カラムには、QC 種類に関する情報が含まれます。**単位** カラムは、単位はすでにメソッドで定義されているため、表示されません。ブランク補正は QC サンプルでは利用できません。

ボタン

オプション	説明
QC サンプル<-シーケンス	シーケンスリストへ QC サンプル名とオートサンプラーの位置を転送します



その他のボタンおよび入力オプションは、よく使用されるコントロールの概要にあります。

これについては次のリンクも参照してください：

- [メット / サンプル導入 画面 - サンプル導入を指定 \[▶ 40\]](#)
- [検量線およびブランク補正のオプション \[▶ 164\]](#)
- [よく使用されるコントロール機能 \[▶ 15\]](#)

5.3 サンプル情報と QC サンプルの指定







サンプルまたは QC サンプルで測定のためのデータ (初期重量や事前希釈倍率など) がさらに必要な場合は、**サンプル ID** 画面でデータを指定する必要があります。そこで入力したデータは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。
- ▶ 測定するサンプル数を **番号** フィールドに入力します。それから、**追加** をクリックしてそれらの行をテーブルに挿入します。
- ▶ 各サンプルに必要な情報をテーブルで入力します。
- ▶ すべての行の項目が同じ場合は、 をクリックして選択したセルの項目を後続のカラムのすべてのセルにコピーできます。
inc. (増分) オプションがアクティブになっている場合は、情報が次の行に転送されるたびに値が 1 ずつ増分します。これによって、簡単にオートサンプラー内のスペースを埋めたり、サンプル名を連続的に番号付けしたりできます。
- ▶ 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ペーストできます。そのためには、通常のキーボードコマンドを使用するか、右クリックしてコンテキストメニューを開きます。
- ▶ すべての情報を入力したら、**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シーケンスの行を入力します。**サンプル->シーケンス** をクリックして情報を転送します。
- ▶ **サンプル ID / QC サンプル情報** 画面で QC サンプル情報を同様に指定します。
✓ このサンプル情報は次の測定で使用されます。

6 測定の実行と結果の計算

6.1 メイン画面で測定を開始するためのメニューコマンドとボタンの概要

測定は、ツールバーのアイコンまたはルーチンメニューで開始されます。

記号	メニューアイテム	機能
	ルーチン 測定開始	測定プロセスを開始します
	ルーチン 測定選択したシーケンスの行...	シーケンス内で選択した行を実行しますCtrl および / または Shift キーとマウスを使用して複数の行をマークできます。
	ルーチン Stop	測定プロセスを直ちに停止します。 停止機能はフレーム法でのみ使用してください。水素化物/hydrEA 法およびグラファイトチューブ法の場合は、直ちに停止するとサンプル残留物がサンプルまたはグラファイトチューブ内に残り、汚染につながる可能性があります。
	ルーチン 一時停止	水素化物/hydrEA 法およびグラファイトファーンセ法用 水素化物プロセスまたはファーンセプログラムの実行時に、プログラム中断をこのボタンで要求できます。この要求が検出された後、ボタンは灰色に変わります。手順は最後まで実行されます。その後、測定プロセスが停止します。
	ルーチン 継続	停止したルーチンを継続します。
	ルーチン 再計算	検量線機能やメソッドなど、元のデータを変更した場合に、結果を再処理します。

6.2 測定ルーチンの開始

メソッド、シーケンス、必要に応じてサンプル情報データを指定すると、測定ルーチンを開始するためのすべての情報がそろいます。

使用する測定法に応じて、contrAA を準備する必要があります:

- キセノンランプが点灯している。
- フレーム法: フレームが点火されていて、指定したウォームアップ時間より長く燃焼している。
- グラファイト法: グラファイトチューブが挿入されていて、ファーンセがフォームされている。
- 水素化物法: セルが予備加熱されている。
- オートサンプラー: サンプルの準備ができていて、トレイ上に置いてある。

測定中に結果を保存する

測定の結果は、測定中にデータベース内の初期設定フォルダーまたはユーザー定義のサブフォルダーに直接保存されます。データは新しいデータベースに保存したり、既存のデータベースに付加したりすることもできます。ただし、結果データベースを同じ名前を選択することで上書きすることはできません。

結果の保存先は、測定ルーチンの開始時に自動的に要求されます。開始シーケンス画面がこのために開きます: シーケンス名と結果ファイルの以下のオプション:

開始 シーケンス

結果ファイル
名前
Result name ...

フォルダ
(標準)

説明
Description ...

新しいファイル/リスト
 ファイル/リストに追加

シーケンス終了後
"結果ファイル名に日/時を加える"がアクティブ ("オプ" ション).

現在のメソッド :
CuCr SW-Test1_PF
バージョン: 1
from データベース


継続 :
CuCr SW-Test1_PF
バージョン: 1

OK キャンセル

オプション	説明
名前	結果データベースのファイル名
フォルダ	結果ファイルの保存パス ファイルを保存するための初期設定フォルダは、オプション/フォルダ 画面に表示されます。
説明	この情報は測定結果と一緒に保存されます。 入力はオプションです。... をクリックしてユーザー定義の説明を選択できます。これらの説明はデータ/デフォルト値 画面で設定できます。
新しいファイル/リスト	アクティブになっているときは、新しいファイルを入力する必要があります。プログラムは同じファイル名が存在しないかチェックします。既存のファイルは上書きできません。
ファイル/リストに追加	既存の結果ファイルに新しい結果を追加保存します。... をクリックすると選択ダイアログが開きます。表示されたリストから既存の結果ファイルを選択します。
シーケンス終了後	終了時または測定が早期に停止した場合に実行される動作が含まれるオプション画面が開きます。表示されるオプションは原子化法によって異なります。 ノート: これらのオプションは、シーケンスがまだ実行中にもアクティブにできます。
OK	測定の開始

ファイルには、測定および評価結果、サンプル ID 情報とメソッドが含まれます。さらに、検量線データを保存したい場合は、メソッドに指定できます。この場合、メソッドデータベースは結果データベースに保存されます。ピークは、ファイル名が同じで拡張子が異なる別個のファイルに保存されます。結果データベースは拡張子 TPS で保存されます。ピークファイルの拡張子は SPK です。

測定ルーチンの開始

- ▶ 原子化法に応じて装置を準備し、サンプルを用意します。
- ▶  をクリックするか、開始シーケンス画面のメニューアイテム **ルーチン/開始** を使って、測定ルーチンを開きます。
- ▶ 結果ファイルのファイル名を入力します。測定結果は、新しいファイルまたは既存のファイルに追加保存することができます。既存のファイルを上書きすることはできません。
- ▶ **OK** をクリックすると、メソッドとシーケンスの設定に基づいて測定ルーチンが開始されます。

- ✓ 自動サンプラーを使用する場合は、測定が自動的に開始されます。オートサンプラーを使用しないマニュアルサンプル供給の場合は、サンプルを提供する手順が画面に表示されます。

測定中の画面表示

サンプル測定中に、測定プロセスや結果がリアルタイムで表示されます。また、以下の画面もスクリーン上に表示できます：

- **シグナル表示**: 測定シグナルカーブ
- **スペクトル表示**: 検体の吸光度波長および同時に記録されたピーク環境
- **棒グラフ**: 測定値 (棒グラフ)
- **フレームウィンドウ**: 現在のフレーム状態およびファーンネス状態
- **検量線グラフとサンプル濃度**: 算出されたサンプル濃度の検量線での位置

これらの画面の表示はオプション / 測定シーケンス画面であらかじめ設定できます。表示画面は、測定中に隠したり開いたりすることもできます：

- **シーケンスオプション**をクリックして、**表示ウィンドウ**画面を開きます。そこで画面オプションをアクティブにし**表示ウィンドウ**をクリックします。
- すべての表示画面は、メニューアイテム **表示 | 表示画面を開く** または F7 キーで開きます。
- すべての表示画面は、メニューアイテム **表示 | 表示画面を閉じる** または F8 キーで閉じます。

結果画面のシーケンスリストでは、測定の進行がわかります。表のカラム内に下記の記号が表示されます：

記号	説明
-	未測定 / 未操作
0	現在測定中
+	測定終了 / 操作終了

また、画面左側の記号バーに、測定中大きなボタンが表示されます：

ボタン	説明
シーケンスオプション	<ul style="list-style-type: none"> ■ シーケンス終了時またはエラーの場合の追加オプションを定義します ■ 表示画面を開きます
メソッド (表示のみ)	<p>メソッド画面を開きます</p> <p>メソッドは読み取りのみ可能で、編集することはできません。</p>
シーケンスサンプル	<p>シーケンス画面を開きます</p> <p>シーケンスは、測定の実行中は延長できます。シーケンス画面には サンプル ID が含まれ、サンプル ID を編集するために使用します。</p>
スクレーパー-使用	スクレーパーが、サンプル統計シリーズ内の 2 つの測定の間にはバーナーヘッドをクリーニングします。
フレームの消火	フレームを直ちに消火します



これについては次のリンクも参照してください：

- 📖 [事前定義の備考の作成 \[▶ 157\]](#)
- 📖 [測定シーケンスのオプション \[▶ 162\]](#)


6.3 測定ルーチンの一時停止、継続、または停止

実行中測定ルーチンを一時停止してから再開できます。ただし、グラファイトファーン法および水素化物法では、実行中サンプル測定は終わりまで継続し、そのときにのみ一時停止してください。この手順は、サンプル残留物がグラファイトチューブまたは水素化物システム内で沈殿するのを防ぐためのものです。フレーム法では、測定はいつでも制限なしで停止できます。

測定ルーチンの開始 / 一時停止


- ▶ 測定ルーチンを直ちに停止するには、 をクリックするか、メニューアイテム **ルーチン | 停止** を使用します。
- ▶ 測定ルーチン内で中断を宣言するには、 をクリックするか、メニューアイテム **ルーチン | 一時停止** を使用します。この要求が検出された後、ボタンは灰色に変わります。現在実行中の水素化物プログラムまたはファーンプログラムが最初に終了します。その後、測定プロセスが停止します。

測定ルーチンの継続

- ▶ 停止 / 一時停止していたルーチンを継続するには、 をクリックするか、メニューアイテム **ルーチン | 継続** を使用します。中断前の動作状態が含まれる **シーケンスの継続** ダイアログボックスが表示されます。
- ▶ 測定を継続するには、いずれかのオプションを選択します。
- ▶ メソッドが変更されている場合は、**修正したメソッドで続ける** オプションをアクティブにします。これによって、結果ファイル内のメソッド項目が更新され、別バージョンのメソッドが保存されます。
- ▶ **OK** をクリックします。
 - ✓ 測定ルーチンが選択したオプションで継続され、結果が結果データベース内で更新されます。

6.4 シーケンスの動作の繰り返し

シーケンス内の個々の動作、統計実行内の個々の測定、または他の動作を繰り返すことができます。

- ▶ **シーケンス** または **シーケンス/結果** タブ内のメイン画面で、繰り返す動作の行を選択します。
- ▶ 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 | 測定選択したシーケンスの行...** を使用します。
- ▶ **開始シーケンス** 画面で、繰り返し測定の結果を保存したいファイル名を選択します。測定結果は、新しいファイルまたは既存のファイルに追加保存することができます。同じファイル名を選択して既存の結果を上書きすることはできません。
- ▶ **OK** をクリックします。
 - ✓ 選択したシーケンス波長の繰り返しが開始されます。

シーケンスまたは個々の行の測定を繰り返すときは、新しいバージョンのメソッドが保存されます。この場合、メソッド内の変更のチェックは実行されません。

6.5 測定結果の再処理


評価条件が変更されるたびに (検量線関数の変更またはメソッド変更など)、結果を再処理して変更を反映する必要があります。同様に、測定結果の出力内のサンプル情報データ (サンプル名、希釈倍率など) を変更して再処理できます。再処理のオプションは、**結果の再計算** 画面で指定します。

結果の再計算 画面内のオプション

オプション	説明
グループ 最初のデータ	
名前	測定結果での元のファイルの名前。
測定値	個々のサンプル値の測定結果は、元のファイルに保存されています。再処理は個々の値に基づいて実行されます。
修正したサンプル情報ファイル	サンプル情報データが変更されたので、再処理で考慮する必要があります。
グループ 再計算エントリ	
to row	結果リストの開始行
行から	結果リストの終了行
現在選択しているメソッドの波長	選択した波長を再処理します
結果ファイル (出力先) グループ	
フォルダ	結果ファイルの保存パス
名前	結果ファイルのファイル名

オプション	説明
	<p>新しいファイルリスト アクティブになっている場合は、新しいファイルを入力する必要があります。プログラムは同じファイル名が存在しないかチェックします。既存のファイルは上書きできません。</p> <p>ファイルリストに追加 アクティブになっている場合は、再処理された値は既存のファイルに追加保存されます。</p>
ピーク保存	個々のサンプル値のピークを新しい測定結果で保存します ピークがソースファイルに保存されている場合は、このオプションのみがアクティブです。
結果プロットのアップデート	表示画面を再処理中にアップデートします
QCチャートに追加	QCチャートがメソッド内で指定されている場合は、QCチャートで再処理された値を入力します。
説明	この追加情報は再処理された測定結果と一緒に保存されます。ユーザー管理オプションがインストールされている場合は、この項目が必須です。ユーザー定義の説明をリストから選択できます。

再処理の実行

- ▶  をクリックするか、メニューアイテム **メソッド | 再計算** を選択します。
結果の再計算 画面が表示されます。
- ▶ オプション指定してファイル名を選択します。
- ▶ **OK** をクリックします。
✓ 再処理が実行されます。


ノート: 再計算された値はオプションで新しいファイルに保存したり、既存の結果ファイルに追加保存したりできます。元のデータの操作はできません。元のファイルが削除されない限り、元の結果はずっと残っています。

これについては次のリンクも参照してください:

 [事前定義の備考の作成 \[▶ 157\]](#)

6.6 測定中に結果の計算をおこなう

測定中には、結果の計算を行うことができません。計算を行いたい場合には、オフラインモードで2つめのソフトウェアプログラムを起動します。このモードではソフトウェアは装置と接続しません。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。

- ▶ メニューアイテム **ファイル | 開始オフライン** を選択します。
2つ目のプログラムが起動します。
- ▶ メニューコマンド **ファイル | 結果ファイルを開く** を使って、測定中に結果を開きます。
結果画面にここまでの測定結果を読み込みます。
- ▶ 測定が終了して新しい結果が読み込めるようになったとき、 をクリックするか、メニューアイテム **ビュー | 結果リストのアップデート** を使って新しい結果を読み込むことができます。
✓ 例えば、サンプルの詳細または検量線関数を開くことで、結果をさらに処理できます。

ノート: 再処理の際、再処理結果は新しいファイルに保存されます。元のファイルにアクセスするには、結果データを再度開く必要があります。

6.7 結果と測定経過の表示

ノート: 選択した測定モードに従って、測定値は、吸光度または炎光度として表示されます。以降の説明では、吸光度のみが言及されます。しかし同じ設定と情報が炎光度にも適用されます。値出力で、吸光度には省略形 **Abs.** が使用され、炎光度には省略形 **Ems** が使用されます。

結果画面に測定結果とシーケンスが表示されます。

結果画面では、測定結果や個々の測定値をそれぞれ違うタブに分けて表示します。

下記のタブがあります:

- **シーケンス/結果**: 1つのタブにシーケンスと結果が含まれています
- **シーケンス**: 測定シーケンスの表示
- **結果**: 測定結果を表示
- **概略**: 測定結果のサマリー
- **固体**

結果画面のステータスバーには、現在の結果ファイルの名前が表示されています。

6.7.1 シーケンス/結果 タブ

シーケンス/結果 タブには、シーケンスタブと結果タブのデータが含まれます。

6.7.2 シーケンスタブ

シーケンスタブには、アクティブなシーケンスとサンプルIDから選択したパラメータが一覧表示されます。測定時は、測定ルーチンの進行状況をここで監視できます。以下の記号が使用されます:

記号	説明
-	未測定 / 未操作
0	現在測定中
+	測定終了 / 操作終了

6.7.3 結果タブ

すべての測定結果と統計評価が結果タブに一覧表示されます。全体像を把握しやすくするために、値は表形式で表示されます。これらの表のインデックスタブは、画面の下辺にあります。

値は、サンプルの測定順に並んでいます。すべてのサンプルで測定された元素が表示されます。

Abs./Time 表

この表示は、吸光度値と指定したメソッド (**メソッド** / 統計画面) に従った統計評価が表示されます。

表カラム	説明
No.	測定シーケンスの番号

表カラム	説明
名前	サンプル名
波長	測定波長
Abs.	個々の吸光度測定値の平均またはメジアン 固体測定の場合: 正規化された吸光度
SD(Abs.)	吸光度値の標準偏差 (平均値統計)
RSD%	相対標準偏差 (平均値統計)
月日 / 時間	測定日時
測定値(Abs.)	個々の吸光度測定値

固体表

表カラム	説明
No.	測定シーケンスの番号
名前	サンプル名
基準.Abs.	正規化された吸光度の平均値 (吸光度 / 初期重量)
SD	濃度 1 の標準偏差 (平均統計)
RSD%	濃度 1 の相対標準偏差 (平均統計)
重量	平均検体重量 (絶対値)
単位	検体の単位 (絶対値)
湿度[%]	サンプルに含まれる水分量 (相対値)
サンプル重量[%]	すべての個々の量の重量
月日 / 時間	測定日時
測定値(Abs.)	個々の吸光度測定値

濃度1表

表 濃度1 では、AAS に導入したサンプルの測定濃度を表示します。

表カラム	説明
No.	測定シーケンスの番号
名前	サンプル名
波長	測定波長
単位	濃度単位
濃度1	サンプルの測定濃度
SD	濃度 1 の標準偏差 (平均統計)
RSD%	濃度 1 の相対標準偏差 (平均統計)
R	濃度 1 の範囲 (平均統計)
R%	濃度 1 の相対範囲 (平均統計)
Cf	信頼区間
注釈	測定ルーチン時のイベントの注釈
DF	濃度が高い場合の希釈倍率 濃度が高い場合、オートサンプラーによる自動希釈を メット / サンプル導入 画面でアクティブにできます。オートサンプラーでの自動希釈の希釈倍率は 濃度 1 の計算で使用されます。
Abs.	個々の吸光度測定値の平均またはメジアン 固体測定の場合: 正規化された吸光度
SD(Abs.)	吸光度値の標準偏差 (平均値統計)
SD(Abs.)	吸光度値の標準偏差 (平均値統計)
月日 / 時間	測定日時

表カラム	説明
測定値(Abs.)	個々の吸光度測定値

濃度2 表

表 濃度 2 は、元のサンプルの濃度を表示します。このサンプル情報データは、濃度 2 の計算で使用されます:

- 予備希釈
- 固体サンプルの量りとり量
- 他の単位への変換

オプション	説明
No.	測定シーケンスの番号
名前	サンプル名
波長	測定波長
単位	濃度単位
濃度 2	サンプル情報データから換算したサンプルの元濃度
SD 2	濃度 2 の標準偏差 (平均統計)
RSD%	濃度 2 の相対標準偏差 (平均統計)
Cf	信頼区間
注釈	測定ルーチン時のイベントの注釈
Abs.	個々の吸光度測定値の平均またはメジアン 固体測定の場合: 正規化された吸光度
月日 / 時間	測定日時
測定値(Abs.)	個々の吸光度測定値

QC Res. 表

表 QC Res. では、QC サンプル測定の結果を表示します: 濃度の設定値と実際の値、回収率 (ブランク以外) と異常値に対するリアクション (ブランク以外のすべて)。

表カラム	説明
No.	測定シーケンスの番号
名前	サンプル名
波長	測定波長
QC 検量線のデータ	R2(adj.) 傾き 特性濃度: 特性濃度
QC QC サンプル、QC ブランクは含まない	濃度 1 名目値: 比率 回収率: 回収率 QC サンプルと QC Std.で、濃度の回収を測定します。QC-ストック、QC-トレンド、QC-マトリックスで、添加した濃度の回収を測定します。
QC ブランクでの検出 限界	SD: ブランク測定の標準偏差。 LOD: 検出限界 LOQ: 定量下限
注釈	測定ルーチン時のイベントの注釈
Abs.	個々の吸光度測定値の平均またはメジアン 固体測定の場合: 正規化された吸光度
SD(Abs.)	吸光度値の標準偏差 (平均値統計)

表カラム	説明
月日 / 時間	測定日時
測定値(Abs.)	個々の吸光度測定値

エラー 表

測定中にエラーが発生すると、該当する測定のすべての表に赤で印をつけます。エラーテーブルでは、それぞれのエラーが文章で表示されます。

測定値 表

測定値表には、個々の繰り返し測定の吸光度値が表示されています。

サンプルID 表

サンプルIDには、サンプルの情報データが表示されます。

表カラム	説明
No.	測定シーケンスの番号
名前	サンプル名
波長	測定波長
位置	オートサンプラーのサンプル位置
Pre-DF	事前希釈倍率は、元のサンプルがオートサンプラーに置かれる前またはオートサンプラーなしでの作業時に原子化ユニットに供給される前に、希釈に使用された倍率です。この倍率は元のサンプルの濃度計算に必要です (結果テーブル上の濃度2)。
サンプル重量	初期重量 (グラム) (溶液測定のみ) この重量の元のサンプルが溶液に注入されました。初期重量は元のサンプルの濃度計算に必要です (濃度2)。 ノート: 溶液測定の場合、既知の初期サンプル重量が結果画面 / 固体に入力されるか、秤量されます。
注入量	この初期重量がこの量 (mL) の溶液で溶解されています。この値は元のサンプルの濃度計算に必要です (結果テーブルの濃度2)。
名前(2)	追加のサンプル名。
AS-DF	オートサンプラーの希釈倍率。 ノート: ここで使用される希釈モードは、メソッド / サンプル導入画面で定義します。
ブランク補正	ブランク補正 off ブランク補正をしません。 on サンプル濃度を計算すると k に、シーケンスで最後に測定したブランクの濃度を減算します。 ノート: ブランク補正の手順はメソッド / 検量線画面で指定します。


ユーザー定義 表

ユーザー定義表で、結果出力のパラメータおよび表内でのそれらの順序を選択できます。

- ▶ 表の右上隅の **カラムの選択** ボタンをクリックします。
- ▶ マウスでクリックして、**カラムの選択** 画面でパラメータを選択します。
- ▶ 表示の順序を変更するには、キーボードの矢印キーを使ってパラメータを選択してリスト内で移動します。同時に複数のパラメータを選択すると、ブロックとして移動します。
 - ✓ メイン画面に戻った後に、結果が表示されます。表カラムの幅は、マウスを表ヘッダーの行に移動して、マウスボタンを押したまま表カラムを目的の幅にドラッグすることで変更できます。

ノート: カラム幅はこの表示に保存されます。メイン画面の他の表の場合は、カラム幅は閉じた後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 :

 値の表示で使用されるマーキングの概要 [▶ 176]


6.7.4 概略タブ

概略タブでは、測定結果を集約しています。さまざまな出力オプションを選択できます。


オプション	説明
濃度1	サンプルの測定濃度
濃度2	サンプル情報データから換算したサンプルの元濃度
Abs.	個々の吸光度測定値の平均またはメジアン 固体測定の場合: 正規化された吸光度
Abs.(RSD / R)	吸光度の相対標準偏差または範囲
SD	濃度1の標準偏差 (平均統計)
RSD%	濃度1の相対標準偏差 (平均統計)
LOD	検出限界
LOQ	定量下限
回収率(名目値)	回収率 (設定値)
R2(adj.)	検量線の相関係数

該当するチェックボックスをアクティブにすることで、以下のサンプル種類を表示できます:

- サンプル
- QC サンプル
- Cal-Std
- その他

 をクリックすると、プリント概略画面が開きます。この画面から、印刷する行とパラメータを指定した後に、印刷を開始できます。接続したプリンターで印刷する以外に、データを TXT、HTML、または PDF ファイルとして保存して対応するアプリケーションで表示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 :

 結果データの印刷 [▶ 146]

6.7.5 固体タブ

固体タブには、固体分析の個々の測定の順序が一覧表示されます。

シーケンス内で定義された検量線およびサンプル測定の順序は、個々の測定およびその初期重量に分割され、空サンプルボートの重量 (tare) と注入状態が表示および入力されます。

これについては次のリンクも参照してください :

 グラファイトファーンネス法による固体測定 [▶ 96]

6.8 結果ファイルを開くまたは表示からそれらを削除する

保存済み測定結果を開いてそれらを再度見ることができます。

結果ファイルを開く

結果ファイルは、原子化法に応じて定義済みフォルダーに保存されます。したがって、**クイックスタート**画面で選択した原子化法と一致するファイルのみを開くことができます。波長ピークには、ピークを含むファイルが結果ファイルと一緒に保存されている場合にのみ、アクセスできます。

- ▶ **メニューアイテム *ファイル | 結果ファイルを開く*** を選択します。
- ▶ ファイルを標準の **[開く>]** 画面で選択します。
結果読み込み画面が開きます。ファイル名以外に、装置名、使用された測定法、ソフトウェアバージョン、オプション説明もここで出力されます。
- ▶ このサンプル情報データが今後の作業ステップで必要な場合は、**サンプル情報の抽出** オプションをアクティブにします。
このサンプル情報は、変更されたサンプル ID で再処理する場合などに必要になります。
- ▶ **OK** をクリックします。
 - ✓ 結果ファイルが読み込まれ、結果画面に表示されます。現在読み込まれている結果ファイルの名前が、ASpect CS ステータスバーに表示されます。

ファイルを再処理したり印刷したりできます。結果ファイルからメソッドを抽出して、今後の測定に使用することもできます。読み込み時にサンプル ID を抽出した場合、このデータは **サンプル ID** 画面に表示されます。

現在の結果リストの表示を削除する

表示された結果リストは、別の結果ファイルを読み込んだときに必ず削除され、新しい結果リストで置き換えられます。現在の表示の結果リストを明示的に削除することもできます。

- ▶ **メニューアイテム *編集 | 結果テーブルの内容を消去*** を選択します。
 - ✓ 結果リストが削除され、空のメイン画面を今後の作業ステップに利用できます。

ノート: このソフトウェアには、結果を印刷するためにさまざまなレポート機能が用意されています。結果をインポートまたはエクスポートすることもできます。個々のサンプルの結果は **データ | 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：

- 📖 [結果データの印刷](#) [▶ 146]
- 📖 [結果データの管理](#) [▶ 152]

6.9 サンプルの詳細とピーク

結果画面では、測定の個々の値 (統計実行) と、結果と一緒に保存されていればピークプロファイルを **測定値** 画面で見ることができます。結果と一緒にピークを保存するには、**ピーク** 画面で設定します。

6.9.1 サンプルの個々の測定値の表示

結果画面では、個々の値 (統計実行) の詳細情報およびサンプル測定のシグナルカーブを **測定値** 画面で表示できます。以下の機能をこの画面で利用することもできます：

- 個々の測定のピークを表示する
- 測定値の計算で個々の測定をアクティブにする / アクティブ解除する
- 個々の領域の評価に積算制限を適合させる

結果テーブル内で対応するサンプル行をダブルクリックすることで、測定値画面を開きます。または、行を選択してメニューアイテムビュー | 結果詳細を選択します。

測定値 - [Sample 1 Cu]

Cu324 No. 51 Abs. 0.45306 月日 16.03.2017
種類 Probe SD 0.00302 時間 15:40
名前 10 ppb zu 30ppt RSD 0.7

No.	Abs.	濃度 1 µg/L	注釈
1	0.45092	9.11	
2	0.45520	9.22	

削除 ピークを参照

OK キャンセル

サンプルデータ

フィールド	説明
波長	測定波長
No.	結果テーブル内での測定の番号
種類	サンプル種類
名前	サンプル名
Abs. / Ems	吸光度 / 発光度 (すべての個々の値の平均)
SD	標準偏差 (平均値統計) このパラメータは、測定で選択した統計メソッドに関係なく表示されます (平均 / メジアン)。
RSD	相対標準偏差 (平均値統計) このパラメータは、測定で選択した統計メソッドに関係なく表示されます (平均 / メジアン)。
月日 / 時間	測定日時







個々の測定値の表示 / 削除

サンプルの個々の繰り返し測定の値がこの表に表示されます。

表カラム	説明
No.	サンプル測定の繰り返し回数
サンプル重量	固体測定のみ 個々のサンプルの重量
Abs.	個々の吸光度値 固体測定の場合: 正規化された吸光度

表カラム	説明
注釈	なし 測定値は、サンプルの平均値の計算に含まれています。 MAN 値はマニュアルでサンプルの値の計算からはずされています。 KOR は、グラフアウトライアテストにより、自動的にサンプルの値の計算から除かれました。


ボタンとオプション

ボタン / オプション	説明
削除 / 反応	個々のサンプル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
ピークを参照	個々のピークが測定と一緒に保存された場合は、再測定モード (メニューアイテム その他 解析モード) がアクティブになります 測定された波長依存ピークの表示。個々のサンプル値が表示されます
入力数値に置き換える	検量線標準のみ 現在のサンプルが、再処理時に結果テーブルの位置番号にあるサンプルで置き換えられます。
	グラフズームをリセットします
	グラフをズームします マウスボタンを押したまま拡大したい領域の周囲のフレームをドラッグします
	シグナルカーブの個々の値を表示します
	テキストフィールドをグラフに挿入します マウスボタンを押したままフレームを描画してからテキストを入力します。
	シグナルの積算制限を設定します
	個々のサンプルの波長を切り替えたり、結果テーブル内でサンプルを切り替えたりします
オーバーラップ	個々のピークはグラフ内で重ね合わせて表示されます。選択した個々のピークは太字で表示されます。

テーブルの右側のグラフにはシグナルカーブが表示されます。グラフファイトファーンネス法の場合は、選択した個々の値の非特異的バックグラウンドのカーブも時系列で表示されます。測定ポイントの数は、測定されたピークの数に対応します。これは測定時間に依存し、各測定波長の **スリット / 波長** 画面で個別に定義します。積算範囲外のシグナル領域は、灰色で強調表示されます。ピークに強い固有の構造が含まれる領域は、**リファレンスあり** 補正手順で黄色で強調表示されます。この場合、**ピークを参照** ボタンを使ってピークベースラインをチェックします。

個々のサンプル値の除外

測定値を平均値計算からマニュアルではずすことができます。

- ▶ テーブルで、計算からはずしたい測定値を選びます。
- ▶ **削除** をクリックします。
注釈 カラム内で測定値に **MAN** マークが付きます。
- ▶  をクリックすると再処理が始まります。


- ✓ データが再処理され、既存の結果がファイルに追加保存されるか、新しいファイルに保存されます。


反応 をクリックすると、選択した個々の値の平均値計算が再度アクティブになります。

ノート: グラブスアウトライアテストをアクティブにしているときは、測定中にアウトライアを検出して自動的に計算からはずしています。

積算制限のリセット

複数の測定波長を同時に測定する場合は (複数波長評価)、主波長の測定波長パラメータがメソッド内のその他の波長にも使用されます。積算シグナル評価 (グラフアイトファーンネス法) では、その他の波長の積算制限を実際のピークカーブに合わせることをお勧めします。

- ▶  をクリックしてから、グラフ内で積算の開始時間をクリックします。縦線が表示されます。
- ▶ ... をクリックして、コンテキストメニューで **積算終了の設定** を選択します。次に、グラフ内で積算の終了時間をクリックします。
- ▶ ... を再度クリックして **現在のメソッドで値を使用** を選択します。シグナル内で考慮されない領域が、グラフ内で色付きで強調表示されます。
- ▶ **OK** をクリックして **測定値** 画面を閉じます。メソッドを再処理できることを示すメッセージが表示されます。

- ▶  をクリックすると再処理が始まります。

- ✓ データが再処理され、既存の結果がファイルに追加保存されるか、新しいファイルに保存されます。現在の値がメソッドに転送され、**シグナル積算** をクリックすることで **メソッド / 測定条件** 画面で表示できます。

6.9.2 ピークの表示と評価

この機能は、個々のピークが測定と一緒に保存され、再測定モード (メニューアイテム **その他 | 解析モード**) がアクティブな場合にのみ利用できます

個々の値の波長ピークは、**測定値** 画面で開くことができます。

- ▶ サンプル波長をメイン画面でダブルクリックします。**測定値** 画面が表示されます。
- ▶ テーブル内で個々の値を選択して **ピークを参照** をクリックします。
✓ **ピーク** 画面が表示されます。

以下の機能を **ピーク** 画面で実行できます:




- 個々のピークを表示する
- バックグラウンド補正を編集する
- ピーク配列を 3D 表示で表示する
- ピークオフセットの補正

ピーク 画面の左側に、個々のサンプル値のピークがさまざまな表示で表示されます。測定値は CCD ラインで記録されるため、波長範囲および時間に応じたシグナル変化の 3D ピーク配列が作成されます。セクションがピーク配列に作成されるため、測定カーブは 2D で表示されます:

- 特定の波長 (ピクセル) のものを時系列で
- 特定の時間のものを波長範囲で

両方の表示をグラフで表示できます。

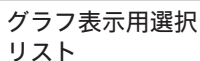








画面内のボタン

ボタン	説明
	バックグラウンド補正やピーク評価の波長パラメータをメソッドから読み込んだり、メソッドにそれらを転送したりします。
	ピークプロットを別画面で開きます
	個々のサンプルの波長を切り替えたり、結果テーブル内でサンプルを切り替えたりします

タブの左側のグラフィカル表示

波長範囲の表示で、ピクセルは横座標として与えられます。3つの赤い波長値は、測定されたピーク範囲の上限と下限、測定ピクセルの位置(元素波長のピーク)を示します。バックグラウンド補正のサポートピクセルは、灰色の線で強調表示されます。測定ピクセルは、赤の実線で強調表示されます。測定ピクセルの領域は、明るい赤で強調表示されます。

バックグラウンド補正メソッド IBC および IBC-m を使用するとき、パーマネントストラクチャーを含む領域(参照ピーク内の吸光度バンド)は、パーマネントストラクチャーの補正がアクティブ解除されているときは自動的にブロックされません。これらの領域は、ピーク表示で灰色で表示されます。

オプション	説明
	吸光度 参照エネルギー - サンプルエネルギー サンプルの吸光度ピーク、参照値のエネルギーピーク(平均のみ)、サンプルのエネルギーピークの表示から選択できます。
	選択した測定のピークを波長範囲で表示します。 矢印キーを使用して、表示する測定の数を選択します。 平均化 すべての測定の平均ピークが表示されます。... をクリックした後に、平均するピークの範囲を制限できます。そのためには、範囲の開始ピークと終了ピークを指定してください。
	選択したピクセルのピークを時系列で表示します 矢印キーを使用して、表示するピクセルの数を選択します。 Eff. 評価ピクセルの積算が表示されます。
	元の座標をズーム後に復元します
	グラフズーム クリック後に、左マウスボタンを押したまま拡大するピークセクションを選択します。
	グラフカーブ上のピクセル位置を表示します カーブ上にマウスを動かすと、マウスが置かれている測定値のデータがグラフの下に表示されます。
	テキストフィールドをグラフに挿入します マウスボタンを押したままテキストボックスのフレームを描画してからテキストを入力します。既存のテキストフィールドをダブルクリックした後にテキストを編集できます。
	波長識別 グラフをクリックした後に、波長データベースから最も近い波長が表示されます。
	バックグラウンド補正のサポートポイントを設定または削除する

オプション	説明
	<p>マウスでクリックすることでバックグラウンド補正ポイントを設定できます。すでに選択されているピクセルをクリックすると、バックグラウンド補正ポイントが削除されます。隣接するピクセルの領域は、マウスをドラッグすることで選択できます。すでに選択されている領域は再度消去されます。</p> <p>... をクリックすると、コンテキストメニューが開きます:</p> <p>バックグラウンド補正ピクセルをマーク ピーク表示内の補間ポイントを縦線で強調表示します</p> <p>バックグラウンド補正位置を消去 選択したすべてのサポートポイントを削除します</p> <p>バックグラウンド補正ピクセルを表示 選択したサポートポイントのピクセル番号のリストを表示します</p>
Y-軸	<p>グラフ拡大縮小</p> <p>auto 自動スケール: ピークが縦座標を最適に拡げて表示されます。</p> <p>by マニュアルスケール: 縦座標制限をフィールドに入力します。</p>

6.9.2.1 バックグラウンド補正と評価ピクセルの指定

バックグラウンド補正と評価ピクセルの選択を **ピーク / 測定条件** 画面で指定します。

バックグラウンド補正 (BGC) の場合は、サポートポイントを再度選択できます。シグナルカーブの変化は、グラフに同時に表示されます。それから、サンプル平均値が同時に、またはデータが大量の場合はコマンドで再計算されます。検出された新しいサポートピクセルは、開いているメソッドに直接転送できます。この方法で、新しいメソッドに最適なバックグラウンド補正が同定されます。

The screenshot displays the '測定条件' (Measurement Conditions) window for 'Cu324'. The main plot shows absorbance versus wavelength (nm) with a peak at 324.7540 nm. The Y-axis is labeled '吸光度' (Absorbance) and the X-axis is '波長 [nm]' (Wavelength [nm]).

On the right, the 'BG パラメータ' (BGC Parameters) section is visible:

- モード: リファレンスあり (Reference present)
- ダイミック BGC
- レンジ (ピクセル): 200 (0.39 nm)
- データ数: 54
- 中心ピクセル: 101
- 測定ピクセル: 3ピクセル
- 減衰: off

Below this, the '補正ピーク' (Correction Peaks) section shows:

- ハーマンベッセル補正
- モデル
- 補正ピーク

The 'Abs.(面積)' (Absorbance (Area)) section shows:

- 平均 Abs (補正): 0.4509
- 平均 Abs (BG): 0.07656

At the bottom, there are navigation buttons and a status bar showing 'Cu324' and '波長パラメータ'.

BG パラメータ 領域

オプション	説明
モード	<p>メソッドで使用しているバックグラウンド補正</p> <p>リファレンスあり</p> <p>リファレンスなし</p>

オプション	説明
	IBC IBC-m
データミック BGC	のみリファレンスあり サポートピクセルを自動的に検出します
レンジ (ピクセル)	評価に含まれるピーク範囲 ピークの評価は、保存された最大ピクセル数を使って実行できます。表示幅を少なくすると、右と左の端から均等にピクセルが減らされていきます。
データ数	個々のサンプル値が形成されたピーク (測定) の数
中心ピクセル	測定ピクセルの表示 測定ピクセルは、受け取り側波長の中心の 101 番ピクセルです。
測定ピクセル	測定シグナルの評価に使用されたピクセルの数。 測定結果を表す積算は、これらのピクセルの測定値から計算されます。
減衰	シグナル減衰の場合は、ピーク最大の左右のピクセルのみがシグナル生成で考慮されます。ピークピクセルの信号と、減衰レベルに応じて、その隣接ピクセルは、「切り取られます」。選択したシグナル減衰のレベルが高いほど、評価されるシグナル領域はピークシグナルから遠くなります。シグナル減衰は検量の測定範囲を広げることができます。評価に使用されるエッジピクセルは、測定ピクセルカラムに表示されます。評価される領域は、グラフの左側で色付きで強調表示されます。

補正ピーク領域

オプション	説明
バックグラウンド補正	バックグラウンド補正用ではありません リファレンスなし 自動的にパーマネントストラクチャーを補正します パーマネントストラクチャーは、リファレンスおよびサンプルで発生する特殊なストラクチャーです (フレームガスの吸光度バンドなど)。完全にこれらの影響が無いかわからない時には、この設定をアクティブにしてください。
モデル	ピーク補正のモデルの選択

Abs. (平均) / Abs. (面積) 領域

吸光度の平均値 **平均 Abs (補正)** がこの領域に表示されます。グラフアイトファーマネス法を **リファレンスあり** バックグラウンド補正と組み合わせて使用するときには、バックグラウンドの吸光度 **平均 Abs (BG)** も出力されます。

波長パラメータの読み込み / 転送

ピーク画面で、メソッドから各測定波長のピーク評価設定を取得したり、変更をメソッドに転送したりできます。

- ▶ **ピーク画面で、波長パラメータをクリックします。**
波長パラメータ / 測定条件 画面が表示されます。
- ▶ **波長テーブルで、パラメータをメソッドに転送する、またはメソッドからパラメータを取得する波長を選択します。**
- ▶ **動作オプションをアクティブにします:**
メソッド / 波長から **北** -- メソッドからオリジナルパラメータを読み込みます
メソッド / 波長へ **北** -- 変更したパラメータを更新します
- ▶ **OK をクリックします。**
✓ 設定に応じて、変更したパラメータがメソッドに転送されるか、オリジナルパラメータがメソッドから読み込まれます。

これについては次のリンクも参照してください：

📖 ピークバックグラウンド補正に使用するアルゴリズムについて [▶ 176]

6.9.2.2 ピーク補正用補正モデルの作成

このルーチンでは、干渉なしで測定する波長またはバックグラウンドの補正が簡単な波長を選択します。選択できない場合は、補正ピークを使って不連続の干渉を取り除くことができます (例: 1 つ以上のマトリックス元素による波長オーバーレイによるもの)。マトリックスの補正ピークはそれぞれモデル内で組み合わされているため、メソッド内で波長にリンクできます。

測定波長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. 可能な干渉を識別します。
2. 補正ピークを作成して保存します。
3. 補正モデルを作成します。
4. 測定波長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

- ▶ 測定波長でメソッドを作成します。メソッド内で以下のパラメータを選択します:

メソッド /	アクティブにするオプション
測定条件	BGC モード: リアルタイムあり BG 補正法: 自動
アウトプット	結果と保存: メソッド および スペクトル オプションをアクティブにします

- ▶ マトリックス内で検体を測定します。
- ▶ 結果画面で、サンプル波長をダブルクリックします。測定値画面が表示されます。
- ▶ それから、**ピークを参照** をクリックします。ピーク画面が表示されます。
- ▶ **ピーク / 波長識別** 画面で、マトリックス元素または分子吸光の波長オーバーレイが原因で発生する可能性がある検体の干渉を識別します。

ノート: 干渉している可能性のある元素または分子バンドは Welz et. al: "High-Resolution Continuum Source AAS" で見つかります。

ステップ 2: 補正ピークを記録して保存

ノート: マトリックス成分の濃度はサンプル内でこれらと一致する必要はありませんが、ピークの強度値を明確にするために十分に高い濃度である必要があります。正しくピーク補正するために、一度に 1 つの成分のみを純粋な物質として測定してください。

- ▶ ピークオーバーラップを引き起こす干渉マトリックス成分の測定をシーケンスに追加します。これらの成分を個々の元素溶液で測定します。
- ▶ マトリックス成分のピークを **ピーク / 測定条件** 画面に読み込みます (ステップ 1 を参照)。
- ▶ **補正ピーク** をクリックします。補正ピークを保存するためのデータベース画面が開きます。
- ▶ ピークの名前を入力し、**保存** をクリックすることでプロセスを完了します。
- ▶ 他のマトリックス成分のピークを同様に保存します。

ステップ 3: 補正モデルを作成

- ▶ マトリックス内の検体でサンプルのピーク表示を開きます (ステップ 1 を参照)。
- ▶ ピーク / 測定条件 画面で、**モデル** チェックボックスにチェックマークを付けます。
- ▶ **モデル新規作成/修正** をクリックします。
補正ピーク画面が表示されます。
- ▶ **追加** をクリックすると、すでに保存されている補正ピークの一覧が開きます。
- ▶ 補正ピークを選択して **読み込み** をクリックします。
ピークが補正ピーク画面に読み込まれます。
- ▶ 他の補正ピークを同様に読み込みます。
- ▶ **補正ピークを強調** オプションをアクティブにして、結果のサンプルピークのオーバーレイが解消されているかどうかをチェックします。
- ▶ **マスク** をクリックした後に、マウスボタンを押したままにして、補正モデルの計算に使用されない領域をマスクできます。
初期設定で、測定波長の領域 (± 9 ピクセル) はあらかじめマスクされています。純粋な物質を記録に利用できなかったため、これらの汚染がさまざまな比率で発生している可能性がある場合は、マスク範囲の追加が必要な場合があります。
- ▶ 補正モデルを保存するには、**保存** をクリックしてモデルの名前を入力します。
保存 をクリックしてプロセスを完了します。
- ▶ **閉じる** をクリックして補正ピーク画面を閉じ、ピーク / 測定条件 画面に戻ります。

測定波長を補正モデルと一緒にメソッドに転送

設定をピーク / 測定条件 画面からメソッドにコピーできます。

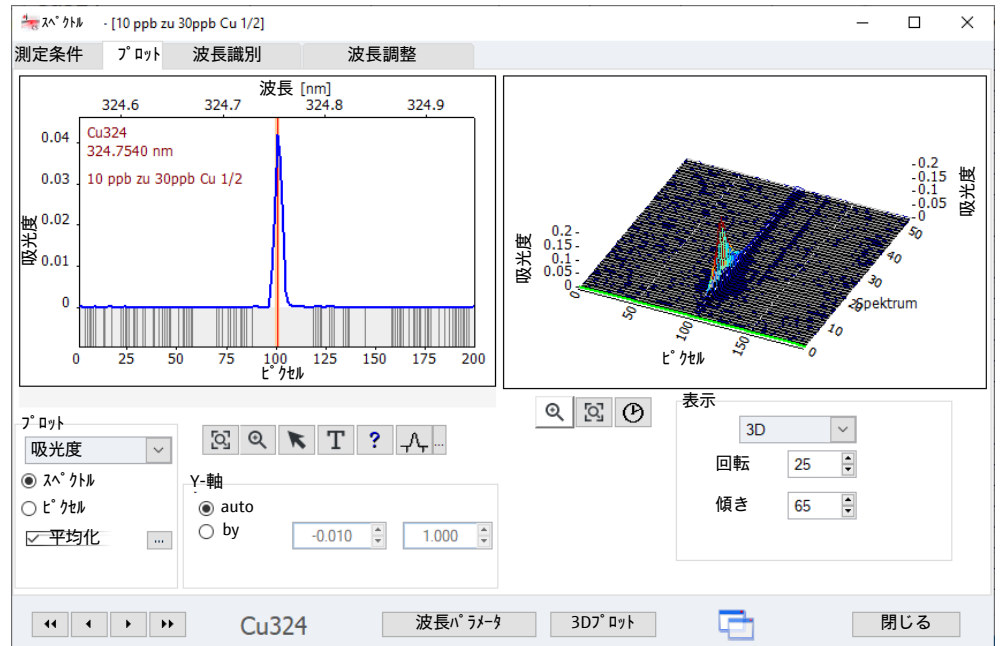
- ▶ ピーク / 測定条件 画面で、**波長パラメータ** をクリックします。**波長パラメータ/測定条件** 画面が表示されます。
- ▶ そこで **メソッド / 波長へコピー** オプションをアクティブにし、**OK** をクリックします。
✓ **メソッド / 測定条件** 画面で、**補正ピーク** ボタンの横にモデルが表示されます。

これについては次のリンクも参照してください：




- [メソッド / 測定条件 画面 - ピーク範囲とバックグラウンド補正を指定](#) [▶ 47]
- [ピーク減算 \(パーマネントストラクチャーの補正\)](#) [▶ 178]

6.9.2.3 ピークの 3D 表示

個々のサンプル値のピーク配列は、ピーク / プロット 画面で 3D 表示で表示されます。

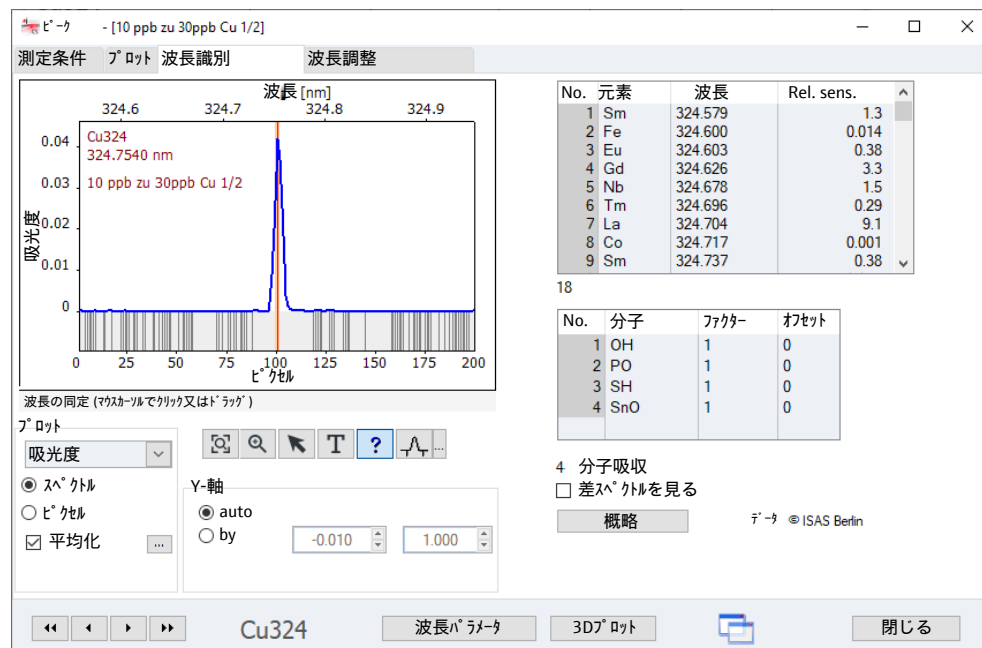


ピーク配列のプロットが、画面の右側にさまざまなグラデーションで3D表示されます。左側のグラフで選択したピーク/ピクセルは、プロットで明るい緑で強調表示されます。

オプション	説明
	グラフをズームします
	グラフをリセットします
	ピーク配列のプロットをさまざまな速度で構築します。
表示	プロット表示の選択

6.9.2.4 波長識別

ピークと分子バンドは、ピークおよび波長データベースに基づいて測定データ内で識別できます。この識別は、ピーク/波長識別画面で行います。



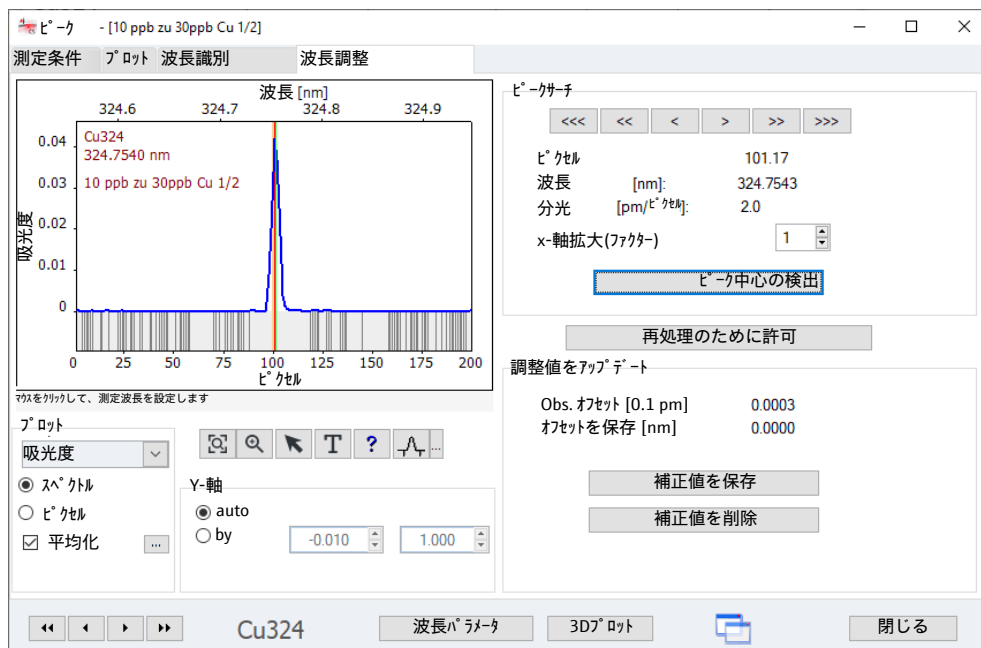
一番上のリストには、現在のピーク範囲で検出された波長データベース項目が表示されます。波長を選択すると、グラフカーソルが波長に設定されます。

マウスでクリックまたはドラッグすると、波長データベースで選択した波長位置の元素波長が検索されます。元素記号がマウスの横に表示され、対応するリスト項目が強調表示されます。

一番下のリストには、表示されているピーク領域で検出された分子バンドが表示されます。リストで波長を選択すると、対応する分子波長が表示されます。表示されたピークに乗算するための倍率を「ファクター」表カラムで入力できます。分子バンドピークはそれに応じて圧縮または伸長されます。「オフセット」の値だけY軸方向にピークがシフトされます。「差分スペクトルを見る」オプションによって、複数のピークの合計を表示する追加リストカラムが有効になります。これは、複雑なバックグラウンドピークを説明するために使用することもできます。

6.9.2.5 ピークオフセットの補正

contrAA は納品時に事前調整されます。例えば、測定頻度の高い波長は、工場チェック後出荷されます。あまり一般的でない波長を使用する場合は、ピーク/波長調整画面で測定波長の正確さをチェックできます。ピーク位置をサブピクセルレンジで補正できます。サブピクセルは、1ピクセルより小さい値です。



補正ファクターを設定したら、元素/波長ファイルに保存します。この後の測定は補正したファクターで測定されます。ただし、入力した補正ファクターをこのファイルから削除することもできます。

ピークサーチ

オプション	説明
矢印キー	波長を移動させます
ピクセル	現在選択しているピクセル
波長	現在の測定波長
分光	1ピクセルあたりのピコメーターでの分解能
x-軸拡大(ファクター)	ピークを伸ばします
ピーク中心の検出	自動でピークを探し、オフセット値を補正します
再処理のために許可	再処理時にピーク位置を計算するときに、変更した波長オフセットが考慮されます。

波長オフセット

オプション	説明
Obs. オフセット [0.1 pm]	新しく同定したオフセット
オフセットを保存 [nm]	以前に保存されたオフセット
補正値を保存	新しいオフセットを波長ファイルに保存します このファイルに保存した値がこの後の測定に使用されます。 ノート: 補正値を保存 ボタンは1回のみクリックしてください。
補正値を削除	現在の測定波長の項目を波長ファイルで削除します。

ピークオフセットのチェックと再測定

- ▶ 測定波長を分光器/パラメータ画面で設定してピークの測定を開始します。測定結果は、ピーク/波長調整画面に表示されます。
- ▶ x-軸拡大(ファクター) フィールドにファクターを入力することで、ピークカーブがわかりやすく表示されるまで、ピークを伸ばできます。
- ▶ ピークが101番ピクセルにあるのなら(赤い縦線がピークと一致している)、ピークの位置は正しいです。この場合これ以下の作業をする必要はありません。

- ▶ ピークが赤い線の横にある場合は、**ピーク中心の検出** をクリックします。または、矢印キーで赤い線をピークに動かします。
- ▶ **補正値を保存** をクリックして、新しいピークオフセットを保存します。(ボタンは1回のみクリックしてください！)
- ▶ 測定波長の測定を **分光器 / パラメータ** 画面に開始します。
- ▶ **ピーク / 波長調整** 画面表示で、ピークは測定ピクセル 101 番の中央にある必要があります。
 - ✓ 新しいデータは波長ファイルに保存され、今後の測定に使用されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- [波長ファイルのエクスポート](#) [▶ 154]
- [選択した波長でのピークの測定](#) [▶ 111]

6.10 グラファイトファーンレス法による固体測定

固体測定では、固定されたサンプルがグラファイトサンプルポート上のグラファイトチューブに導入されて、原子化されます。サンプル消化は省略できます。溶液測定と比較して、固体測定では追加の準備またはサンプル指定が必要です：

- サンプルポートへのサンプルの注入
- サンプルサンプルポートへの溶液成分のピペッティング
- 量りとり量の確立
- 空焼きによるサンプルサンプルポートのクリーニング
- サンプルポートの空サンプルポートの重量 (tare) を確立するのに適した場所

量りとり量を同定し、サンプルサンプルポートを読み込むためのこうした準備は、マニュアルで実行したり、SSA 600 使用時に自動的に処理したりできます。溶液注入ユニットで SSA 600 を使用するときは、サンプラーによってモディファイアと標準がピペッティングされます。

上記の動作がシーケンス開始前に実行された場合は、シーケンスは中断なしで自動的に実行されます。

6.10.1 固体 タブ上の機能

固体測定のサンプル準備は、メイン画面の **固体** タブで行います。このタブには実行する測定のリストが表示されます。標準サンプルおよびシーケンスに定義されたサンプルの測定が、ここで個々の測定 (統計実行) に分類され、サンプルポートへのサンプルの分配が定義されます。

表の項目

表には以下の項目が含まれます：

オプション	説明
No.	個々の測定の番号
シーケンス/行	シーケンス内の行番号
深さ修正位置	SSA 600 トレイ上のサンプルサンプルポートの位置 トレイが 1 枚の場合は 1 ~ 42、トレイが 2 枚の場合は 1 ~ 84 ノート: サンプルポートの位置は、ソフトウェアが設定します。 サンプルはこの設定に従っておかなければなりません。
種類	このサンプルポート上のサンプルのサンプル種類
名前	サンプル天秤

オプション	説明
波長	測定波長
#	統計実行の数
サンプル重量	サンプル重量 (mg) このカラムで項目「-----」が見つかった場合は、サンプルは溶液成分のみを含むため、秤量されません (溶液標準など)。 ノート: 量りとり量の同定前に、サンプルサンプルボートの空サンプルボートの重量 (tare) を確立する必要があります。
オートゼロ	空のサンプルボートの重量 (mg) 秤量されないサンプルの場合は、項目「-----」がここにも表示されます。
Dos.	「*」マークが付いていない場合、サンプルはサンプルボートに置かれています。
Std./Mod.	「*」マークが付いている場合、サンプルボートに溶液 (標準またはモディファイア) を注入する必要があることを示しています。
前処理	熱前処理がメソッド内で定義されているばあいのみ 「*」マークが付いている場合、サンプルボートの熱前処理が実行されています。

もしわかっていれば、下記の設定はサンプルテーブルに直接入力することができます:

- 量りとり量 (サンプルを単独の天秤で秤量した場合)
- 空サンプルボートの重量 (tare)
- サンプルサンプルボートにサンプルを乗せたときのマーク
- ピペッティングされたモディファイアのマーク
- 熱前処理のマーク

サンプル準備のボタン

ボタン	説明
オートゼロ	選択したトレイ位置の空のサンプルボートの重量を量ります そのために、サンプルボートを天秤に運び、秤量後、その位置に戻します。同定された重量はオートゼロカラムに入力します。
サンプルリフト	選択した位置のサンプルボートを注入位置に順々に移動します どのサンプルを注入するかの情報が含まれる注入画面が表示されます。選択したオプションに従ってサンプルの前と後に必要な処理ができます。表がすでに入力されている場合は、該当する準備は抜かします。操作の順番: 空サンプルボート秤量 - サンプリング - 秤量 - (サンプリング) - (秤量) - モディファイア / 標準注入。 オート 注入前に、空のサンプルボートの重量を量ります。 重量を測る サンプリング後重量を量ります。 Mod./Std.注入 秤量後、サンプルボートを溶液注入場所に移動します。 重量確認あり オプションが メソッド / サンプル導入 画面で設定されている場合は、「注入」および「秤量」ステップを必要に応じて繰り返すことができます。 3つのオプションすべてを設定していると、このシーケンスで完全にサンプル前処理を行います。これを行うと、サンプルトレイには前処理をおこなったサンプルが並ぶこととなります。1つでも前処理操作を行わないと、この処理は測定中に行うこととなります。
重量確認なし	注入済みサンプルボートを秤量します
読み込み/保存	選択した行の重量とサンプリングデータの保存と読み込み

ボタン	説明
	シーケンスまたはメソッドの変更を行ったときは、サンプルテーブルを 固体 タブで再作成します。すでにある項目は消去されます。この機能は、データの復元に使用できます。
Std./Mod.	溶液注入のために、選択したサンプルポートを液体注入位置に移動します 液体注入のための画面が表示されます。この画面には、注入する液体とその量が表示されます。
準備	サンプルポートの空焼きを行います サンプルポートをファーンেস内に置き、空焼きを行った後、ファーンেস冷却後にサンプルポートをトレイに戻します。 熱前処理時に、適切なモディファイアが最初にサンプルポートにピベッティングされます。ファーンেসプログラムは、ステップ「E/P」まで実行されます。ファーンেসが冷却したら、サンプルポートをトレイに戻します。 オートゼロオプションがアクティブになっている場合は、空のサンプルポートを秤量し、その重量を空サンプルポート重量カラムに入力します。

サンプルの再測定 / 重量項目の補正

ボタン	説明
測定行	サンプル内の元素を再評価したり、メソッド開発でシーケンスを行単位で測定したりします サンプル順序を行単位で測定するときは必ず、統計実行 1 で開始するか、最後に測定した統計実行の後続実行で開始する必要があります。
再測定準備	結果テーブル内で選択した再測定用の項目から、再測定する統計実行の 固体 タブを作成します。この後に、これらのサンプルサンプルポートに応じて、注入および秤量できます。
再測定	固体 機能で選択したサンプルの測定を開始します。
入力を消去	選択したテーブル行について、カラム サンプル重量 で始まるカラム内のすべての項目が削除されます。

6.10.2 固体サンプルの測定

マニュアル固体測定

マニュアルオートサンプラー SSA 6 (z) を利用してサンプルをグラファイトチューブに置いた場合、量りとり量は別個の天秤で同定する必要があります: この場合、重量は **固体** タブでマニュアルで入力します。

非タイムクリティカルサンプルの自動固体測定



非タイムクリティカルサンプルの場合は、多くの準備ステップを組み合わせられることができます。非タイムクリティカルサンプルの処理は、**メソッド / サンプル導入** 画面の **タイムクリティカルサンプルワークフロー** オプションをアクティブ解除することで指定します。

自動液体注入付きの SSA 600 を使用しているときは、モディファイアや標準液の注入は、シーケンスの処理時に実行でき、マニュアルで準備する必要はありません。SSA600 には、最大 4 個の標準と 3 個のモディファイアを置くことができます。これ以上の標準やモディファイアが必要な場合は、マニュアルで注入する必要があります。熱前処理時は、モディファイアは液体注入ユニットで自動的にサンプルポートに適用されてから、グラファイトファーンেসでの測定用に準備されます。

オペレーターの介入なしの自動測定には、個々の測定ごとのサンプルサンプルポートが必要です。


総サンプルサンプルポート数 = 測定サンプル数 × 測定波長数 × 統計実行数

サンプルポートの数を測定サンプル数が越えてしまった場合は、測定後のサンプルポートが再利用されます。

- ▶ メソッドとシーケンスを作成してアクティブにします。
- ▶ メイン画面で **固体** タブに切り替えます。
位置 カラムに、オートサンプラートレイ上のサンプルの割り当てが表示されません。サンプルトレイ位置はソフトウェアが自動設定します。変更はできません。
- ▶ ツールバーで  をクリックしてメソッドルーチンをアクティブにします。
- ▶ サンプルサンプルポートをプログラムの指示に従って準備します。サンプルを置いて液体成分をピペティングします。
すべてのサンプルが準備されるか、メソッドで定義された数のサンプルサンプルポートが満たされると、測定が始まります。
- ▶ 最初の測定実行後にまだサンプルが残っている場合は、マウスでシーケンス内の対応するサンプル行を選択します。Shift または Ctrl キーを押したまま複数の行を選択します。
- ▶  をクリックして測定を継続します。開始 サンプル画面の **ファイルリストに追加 オプション** をアクティブにすることで、結果を既存の結果に付加します。
- ▶ サンプルサンプルポートをプログラムの指示に従って再度準備します。すると、測定が自動的に始まります。
✓ 測定結果がメイン画面の結果タブに表示されます。

タイムクリティカルサンプルの自動固体測定

簡単に揮発したり、粘着性が高いためにサンプルポートから「動いて」サンプルポートの端とハンドルを湿らせてしまうサンプルには、サンプル適用後にサンプルポートを迅速に処理する必要があります。タイムクリティカルサンプルの処理は、**メソッド / サンプル導入** 画面の **タイムクリティカルサンプル用ワークフロー** オプションをアクティブにすることで指定します。

- ▶ メソッドとシーケンスを作成してアクティブにします。
- ▶ メイン画面で **固体** タブに切り替えます。
位置 カラムに、オートサンプラートレイ上のサンプルの割り当てが表示されません。サンプルトレイ位置はソフトウェアが自動設定します。変更はできません。
- ▶ ツールバーで  をクリックしてメソッドルーチンをアクティブにします。
- ▶ 画面のサンプル準備指示に従います。サンプルが測定および測定されます。その後、すべてのサンプルが準備されるまで、次のサンプルサンプルポートの準備を求められます。

タイムクリティカルサンプルの測定手順では、オペレーターが常時介在する必要があります。

これについては次のリンクも参照してください：

- 固体測定のためのオートサンプラー用メソッドパラメータ [▶ 45]

6.10.3 以前に準備したサンプルのデータの保存

シーケンスやメソッドを修正したとき、固体テーブルは再設定され、サンプルがサンプルポートに再度割り当てられます。既存の重量データが失われることを回避するために、これらのデータを保存できます。これを回避するために、これらのデータを保存できます。このために、リンクされたブロックに2つのストレージ領域を利用できます。

- ▶ すでに準備されたサンプルを選択します。
サンプルは隣接するブロックにある必要があります。
- ▶ 固体 タブで **読み込み/保存** をクリックします。
ロード / 保存SSA600テーブル 画面が表示されます。
- ▶ そこで2つのストレージ場所のいずれかを選択します。
- ▶ 選択した**エントリを保存** をクリックしてから、**OK** をクリックして後続メッセージを確定します。
- ▶ **閉じる** をクリックして **ロード / 保存SSA600テーブル** 画面を閉じます。
- ▶ 固体テーブルの再構築後、メイン画面で **読み込み/保存** を再度クリックします。
- ▶ **ロード / 保存SSA600テーブル** 画面でストレージ場所を選択します。
- ▶ リストフィールドで、データブロック挿入元の固体テーブルの行番号を入力します。
- ▶ **列から開始をロード** をクリックします。
✓ 指定した行から始まるデータブロックが固体テーブルに挿入されます。
固体テーブルに従って、サンプルトレイ上のサンプルポートを並べ替えます。

6.10.4 固体測定用サンプルの再測定

固体測定の場合、個々のサンプルと個々の元素を再測定できます。

個々の測定の繰り返し (統計実行)

再測定時に、固定テーブルは **固体** タブで再構築されます。既存の注入項目は削除されます。必要に応じて、事前に準備済みのサンプルを保存してください。

- ▶ メイン画面で **結果** タブに切り替えます。
- ▶ アウトライアを含むサンプルを **測定値** 画面でダブルクリックします。
- ▶ テーブル内でアウトライアをマークします。
- ▶ **再測定をマーク** をクリックします。
- ▶ **測定値** 画面を閉じます。
- ▶ 同様に、他のサンプルのアウトライアをすべてマークします。
- ▶ **固体** タブに戻ります。
- ▶ **再測定準備** をクリックします。
処理する固体テーブルが作成されます。
- ▶ 測定のサンプルポート割り当てに従ってサンプルを準備します。
- ▶ **再測定** をクリックして測定を開始します。
✓ **結果** タブで、再測定したアウトライアに基づいて再処理されたサンプル結果がテーブルの最後に付加されます。

すべてのサンプルの再測定

- ▶ 固体テーブルに含まれるサンプル元素のすべての個々の測定を選択します。
- ▶ **測定行** をクリックします。
- ▶ **開始シーケンス** 画面で、新しいファイル名を入力するか、**ファイル/リストに追加** オプションをアクティブにします。
- ▶ **OK** をクリックして測定を開始します。

固体テーブルを行ごとに測定 (メソッド処理)

- メソッド開発時に、固体テーブルを行ごとに処理できます。
- ▶ 固体テーブルに含まれるサンプル元素の個々の測定を選択します。
 - ▶ **測定行** をクリックします。

- ▶ **開始** シークス画面で、新しいファイル名を入力するか、**ファイルリスト**に追加 オプションをアクティブにします。
- ▶ **OK** をクリックして測定を開始します。

ノート: サンプルの元素の測定は、必ず実行 1 または最後に実行された統計実行の後続の実行で開始する必要があります。

これについては次のリンクも参照してください :

📖 以前に準備したサンプルのデータの保存 [▶ 99]

6.11 システムの洗浄

さまざまなシステムの洗浄ステップは、**ルーフ | 洗浄** メニューアイテムで開始します。また、洗浄コマンドは、オートサンプラーや水素化物システムなどのそれぞれの測定法の固有の画面でアクセスできます。

フレーム法

サンプラーチューブは洗浄位置で浸液されていて、プローブを洗浄します。インジェクションスイッチを使用している場合には、スイッチは開いています。これはサンプル流路を確実に洗浄するためです。リンスポンプは洗浄液を供給し続けます。

水素化物法 / HydrEA 法

水素化物システムは、酸 (または必要な場合は還元剤) で洗浄します。水素化物システムの洗浄パラメータは、**メソッド / 水素化物** 画面で設定します。

7 検量線

指定したメソッドパラメータの指定に従って、測定中に検量線の作成を行います。検量線の曲線と機能は測定後に表示して編集することができます。



をクリックするか、メニューアイテム **メソッド開発 / 検量線** で、**検量線** 画面を開きます。

The screenshot shows the '検量線' (Calibration Curve) window. On the left is a graph with '吸光度 [吸光度]' on the y-axis and 'Konz. [µg/L]' on the x-axis. A linear curve is plotted with three data points labeled 1, 2, and 3. The graph title is 'Cu 324.754 nm Fläche'. Below the graph are controls for 'lin' (checked), '波長' (Cu324), '検量線機能' (nonlin. ratio), and '減衰' (off). On the right is a table with columns '種類', '濃度 [µg/L]', 'Abs.', and '注釈'. The table contains four rows of calibration data. Below the table are checkboxes for 'SD' and 'RSD', and a '標準の削除' button. At the bottom right, there are radio buttons for '検量線' (selected) and '再検量', and an 'OK' button.

検量線 画面には以下の情報が含まれています:

- 検量線のグラフィカル表現
- 検量線テーブル
- パラメータ
- 誤差
- 検出限界 (LOD) と定量下限 (LOQ)

検量線 画面内の選択フィールド

オプション	説明
波長	検量線を表示する測定波長を選択します
検量線機能	使用する検量線関数 検量線関数は、 メソッド / 検量線 画面で元素波長ごとに個別に設定します。関数はリストボックスで再選択でき、結果はそれに応じて再処理されます。
減衰	シグナル減衰は検量線範囲を広げることができます。シグナル減衰は メソッド / 測定条件 画面で定義し、ここで変更できます。
削除された標準を含む範囲を表示します	標準をマニュアルで削除すると、検量線が新しい範囲で調整されます。このオプションがアクティブになっている場合は、検量線範囲全体が表示されます。

これについては次のリンクも参照してください：

- **メソッド / 検量線 画面 - 検量線を指定** [▶ 49]
- **メソッド / 測定条件 画面 - ピーク範囲とバックグラウンド補正を指定** [▶ 47]

7.1 検量線の表示

グラフでは、測定ポイント、検量線カーブ、誤差が表示されます。測定ポイントの数はテーブルタブで使用されるものに対応しています。検量線ゼロポイントはZ (ゼロ) で識別されています。

色マーク

測定ポイントは以下のようにマークされています:

色	意味
黒	通常の測定ポイント
明るい灰色	アウトライアとして削除された点 (検量線に含まれていない)
青	アウトライアの疑いのある点 (検量線に含まれています)



検量線も色で強調表示されます:

グラフの色	意味
黒	有効な範囲の検量線
青	有効な範囲以外の検量線
緑	予測した有効な範囲の上限と下限範囲
明るい灰色	予測した有効な範囲の上限と下限を超えた範囲

予測範囲または信頼範囲について


予測範囲は、選択した統計確立範囲に従っています。それは検量線の「品質」の測定であり、また、測定サンプルの測定の統計的な確実性は結局、検量線の正確性によります。一方、予測範囲は、検量線のポイントの中で疑われたアウトライアを特定するのに役立ちます。信頼区間は **メット** / **統計** 画面で選択します。予測または信頼区間は **オプション** / **検量線** 画面で選択します。

検量線グラフの拡大

 をクリックした後に、左マウスボタンを押したままにすることで、検量線の一部を拡大できます。 をクリックすると、拡大がリセットされます。


注釈の挿入

注釈のテキストフィールドをグラフに挿入できます。



- ▶  をクリックしたまま、グラフ上でテキストフィールドのフレームをドラッグします。
- ▶ 入力画面でテキストを入力し、OK 画面で確定します。
 - ✓ テキストがグラフで表示されます。

既存のテキストフィールドをダブルクリックした後にテキストを編集できます。

検量線グラフの印刷

 をクリックすると、検量線および検量線データが印刷されます。

これについては次のリンクも参照してください:

-  [メット / 統計 画面 - 統計パラメータを指定](#) [▶ 55]
-  [検量線およびブランク補正のオプション](#) [▶ 164]

7.2 検量線結果の表示

測定結果は **検量線** 画面の右側の 3 つのタブに表示されます。

検量線標準の測定値の出力 -
テーブルタブ

標準の値ペア (入力した濃度 / 測定値) は **検量線** 画面の **テーブル** タブに出力されます。

統計評価がメソッド内で指定されている場合は、標準偏差 (SD)、相対標準偏差 (RSD)、範囲 (R)、相対範囲 (R%) をそれぞれの値のチェックボックスをアクティブにすることで出力できます。

個々の検量線の標準を検量線に入れないようにするには、表で検量線を点をマウスで選択したのちに、標準の削除をクリックします。複数波長メソッドでは、すべての波長でまたは現在の波長でのみ標準を削除または再度アクティブにするかどうかを確認されます。

測定は削除としてマークされるだけで、いつでも検量線に加えることができます。

このタブでは 検量線データの詳細を示します。

パラメータ	説明
R2(adj.)	相関係数
傾き	検量線の傾き
メソッド SD	メソッドの標準偏差
特性濃度 / 特性質量	特性濃度または質量 (特性濃度、または質量は 1% 吸収するのに必要な元素の濃度や質量 - 1% 吸収は約 0.0044 吸光度に相当)

誤差 タブ

誤差 タブのグラフは作成した検量線からの測定ポイントの誤差と予測区間を示しています。

検量線の検出限界と定量下限 - LOD タブ LOQ

原子吸光の検出限界と定量下限は、検量線の結果から算出することが可能です。このエリアでは、検量線が既に計算されているとブランクメソッドと検量線メソッドの値が表示されます。

パラメータ	説明
検出限界	信頼区間で算出した測定目的元素の検出可能な質量 (濃度)。
定量下限	信頼水準によって定義された重みで算出した、測定目的元素の最小質量 (濃度)。
SD ブランク (DL)	ブランクメソッドのみ 測定したブランクの標準偏差 (IDL サンプル)
演算	検量線の変更後に、このボタンで検出限界と定量下限の計算を開始します。

検量線グラフのメソッド

検出限界と定量下限の計算には、検量線のグラフが線形でなければなりません。検量線は、低い濃度レベルで測定する必要があります。検量線のパラメータは下記の項目を含んでいます。

- 検量線ポイントの数と位置
- 標準ごとの繰り返し回数
- 回帰計数
- 検量線の傾き
- 相対的な統計的確立性 (信頼レベル)

検量線が低濃度域で測定された場合のみ検量線グラフメソッドからのこれらの値が役に立つと考えられます。

ブランクメソッド

ブランクの標準偏差をサンプル測定中に測定します。このために ブランクの測定 (QC ブランク DL) をシーケンスの中に入れます。

ブランク計算のための初期設定計算式:

ブランクは 11 回測定します。得られた値からブランクの標準偏差を求めます。下記の計算で検出限界と定量下限を求めます:

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

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

測定繰り返しの数、検出限界 / 定量下限を計算するための倍率は、**オプション / 検量線** 画面で編集できます。

これについては次のリンクも参照してください :

- シーケンス内の測定と動作の指定 [▶ 65]
- 検量線およびブランク補正のオプション [▶ 164]


7.3 検量線の編集

検量線の編集は、検量線画面で以下によって行うことができます:

- 使用する検量線関数を変更する
- 標準を削除する / 有効にする

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。

計算から標準を削除するには、**テーブル** タブ上で標準を選択して、次に **標準の削除** をクリックします。測定は削除としてマークされるだけで、いつでも検量線に加えることができます。



プログラムは再計算し、変更した検量線を表示します。ツールバーで  をクリックして再処理を開始すると、変更した検量線パラメータは結果に適用されます。

これについては次のリンクも参照してください :

- 測定結果の再処理 [▶ 77]

7.4 検量線標準を再測定で置き換える

検量線内のアウトライアを、そのシーケンス行を再度測定し、該当の行を置き換えて結果を再処理することで、置き換えることができます。

- ▶ 測定する新しい標準を提供します。オートサンプラー使用時に、シーケンスで指定した位置に標準を設定します。
- ▶  をクリックして、シーケンス内で該当する標準とそのシーケンス行の測定を開始します。
新しく測定された標準の値がサンプルテーブルの最後に表示されます。
- ▶ 置き換えたい標準をダブルクリックします。
測定値画面が表示されます。
- ▶ **入力数値に置き換える** オプションをアクティブにし、再測定した値の行番号を入力フィールドに入力します。
- ▶ **OK** をクリックして **測定値** 画面を閉じます。
- ▶  をクリックして再計算を開始し、再計算する必要がある行を入力します。
 - ✓ 検量線を計算すると、該当する検量線が新しい値で置き換えられます。検量線再計算後のすべての計算で、新しい検量線が適用されます。

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。このために、数種類の QC サンプルをメソッドで選択し、測定に含めることができます。QC のサンプルを評価するとき、結果は前の QC のサンプルで得られたものと比較されます。

評価は、品質管理チャート (QC チャート) で表示され、メソッドと一緒に保存されます。QC チャートはメソッドを読みだすことに使用でき、次に測定されたときにアップデートされます。

メソッド / QCS 画面および測定シリーズ内で QC サンプルを実行するシーケンスで、QC サンプルの種類とパラメータを設定できます。


QC 画面で読み込んだ (アクティブな) メソッドの QC チャートを見ることができます。また、パラメータや設定の確認をすることもできます。



をクリックするか、メニューアイテム **メソッド 開発 / QC** で、QC 画面を開きます。

8.1 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。それぞれがメソッドで定義されたすべての QC サンプル種類とそこで指定されたあらゆる元素波長のために別々のチャートが作成されます。

オプション	説明
種類	ここで、表示したい QC 種類を選択します。
波長	表示したい波長を選択します
表示した数値	表示する値の数と表示する最初と最後のデータの日付。
入力	QC チャート上の全項目数と、最初と最後の値の日付。
x(max)	グラフ上に表示する項目の数の選択。
	数値データや測定値を含めた、QC グラフの印刷。

グラフ領域

色	説明
黄色の範囲	準備期間
灰色の横線	準備期間で計算された平均値
赤い横線	上方管理限界と下方管理限界 (C)。準備期間より算出された 3σ 値。
緑の横線。	計算された危険範囲 (W; 2σ)。
黒丸	測定ポイント

グラフ上の測定値をクリックすると、この測定に関する下記の情報の画面が開きます。

オプション	説明
数	QC シリーズでのこの測定値の番号
値	測定値 (QC チャートのプレゼンテーション種類に従って、変換されます)
月日/時間	測定日時

オプション	説明
オペレーター	測定時にログインしているオペレーター
バージョン	使用されるメソッドのバージョン
入力の消去 / 入力の有効化	測定値を削除として選択するか、再度アクティブにします
コメント入力	測定ポイントのコメントを入力します (削除の理由など)

8.2 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チャートのパラメータ**画面で定義します。

チャートの種類

以下の評価を QC サンプル種類に選択できます：

QC サンプル種類	QC 評価の種類
QC サンプル	平均チャート
QC std.	平均チャート (norm.) 回収率
QC トレンド	トレンド
QC マトリックス	レンジ 正確さ
QC ブランク	選択はありません。ブランク吸光度が表示されます。

QCチャート チャート種類 (プロセス管理チャート) の場合は、ターゲットパラメータと管理 (C) および警告 (W) 限界が前の期間の平均値と値の分散から同定されます。**ターゲット値チャート** 種類の場合は、ターゲット値と除外限界が **メソッド / QCS** 画面で指定された品質管理サンプルの期待値および限界から同定されます。

グラフィック設定

このフィールドで、グラフで使用するポイントサイズ、グラフの点が線でつなげ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	個々のポイントが丸として表示されます。大きい丸にするには、大きいポイントサイズを選択します。
接点	グラフポイントをポリゴンの流れでつなぎます。

8.3 QC チャートの項目と限界

QC チャートの内容は、**QC / 入力 および 限界** 画面で定義し、各ラボの項目の使用頻度に関する要件に合わせて調整できます。

オプション	説明
入力図	QC チャートに転送する値の選択 全数値 実行する各 QC を入力します。 1数値/day 1日の最後の QC チェックのみを入力します。 2数値/day 1日の最初と最後の QC チェックのみを入力します。

オプション	説明
	「1日」の認識: 「1日」は、PCの時計の1日に従っています。1日の間に、QCチャートの前の項目は新しいQC値によって上書きされます。新しい日が始まる時、新しい項目は発生します。
周期数	コントロールチャート(プロセス管理チャート)のみ 前の期間は、管理(C)および警告(W)限界の計算に使用されるいくつかのQCチャート項目です。準備期間は常に古いチャート項目を含みます。0とセットすると(準備期間無し)、すべての入力されたQCデータは管理限界とエラー限界の計算に含まれます。
ファクター	のみターゲット値チャート 除外限界は、倍率(初期設定は1)で乗算された品質管理サンプルに指定された限界から計算されます。

チャートの更新

表示されたチャートが(ほとんど)一杯のときは(最大項目数に達した、など)、更新できます。いくつかの方法で前の期間を更新してチャートを管理できます。


オプション	説明
周期設定を適用、残りを削除	アプリケーションのために古いチャートの準備期間に新しいチャートを受け入れて、残っていた値を削除します。
最後の数値->新しい周期設定	最後に測定された古いチャートの値は新しいチャートの準備期間を表します;すべての他の値はチャートから削除されます。新しい測定値は新しく作成された準備期間に基づいて評価されます。
全て削除、新しい周期設定	すべての値を削除します。新しい測定値が準備期間となります。
プロセ	選択したオプションに従ってチャートを更新します

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

分光器画面で、光学機器機能をチェックし、ソフトウェアで分光器を調整できます（オフセットを補正）。以下のパラメータを設定または出力できます：

- 装置データ
- キセノンランプのオン/オフ
- 波長補正のテスト
- CCDの読み出しパラメータの表示
- 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
- ピークオフセットの補正

 をクリックするか、メニューアイテム **Menu** 最適化 / 分光器 で、分光器画面を開きます。

9.1.1 contrAA の装置機能テスト

分光器 / パラメータ画面で、基本的な装置の機能チェックと、選択した波長でのテスト測定を行うことができます。

基本的に、装置が起動して初期化されたら、すべてのインジケータランプはアクティブでグリーンになっていなければなりません。ボタンをクリックすると、対応する装置機能がテストされます。テストに成功すると、インジケータライトはグリーンになります。

 をクリックすると、分光器 / パラメータ画面が開きます。



装置データ

接続している装置とソフトウェアバージョンの表示。

波長 / 補正

オプション / ボタン	説明
波長	選択した波長を表示します ... をクリックすると、波長設定のための 元素/波長選択 画面が開きます。 設定 をクリックすると、モノクロメータが選択した波長に移動します。
プリズム補正	プリズム位置をチェックし、必要に応じて自動的に調整します
Ne補正	ネオン波長で測定補正をチェックします

分光器ページ

contrAA 800 のみ

ページの進捗 をクリックすると、ガスページ (空気またはアルゴンページ) の状態がチェックされます。測定結果の信頼性を高めるために、ページを完了する必要があります (グリーンステータス LED)。このボタンがアクティブなのは、**オプション/分光器ページ** 画面で光学ページがアクティブになっている場合にのみです。

ランプ

オプション	説明
ランプ off / ランプ on	キセノンランプのオン / オフを切り替えます
シャッター開 / シャッター閉	シャッターを開いたり閉じたりします
ホットスポット	ホットスポットを追跡するためにシステムを再度初期化します
スタンバイ	アクティブになっているときは、ランプがスタンバイモードになります。これによって、ランプの寿命が延びます。
電流	ランプ電流を変更します このパラメータは、必ずサービス部門に問い合わせしてから変更してください。初期設定のランプ電流は、点火信頼性および寿命に最適化されています。
ランプ ID	ランプ識別コード
使用時間	保証された 1000 時間の操作時間を超えると、対応するメッセージが表示されます。
設置日	ランプの最終変更日 ランプが変更されていない場合は、ここに日付は表示されません。

ノート: 取り付けられたランプに関する情報は、**オプション/ビュー** 画面で **ランプ寿命を見る(分光器)** オプションがアクティブになっている場合にのみ表示されます。

測定


オプション	説明
読み取り時間	ピーク測定の合計時間
常にシャッターを開く	アクティブになっているときは、 分光器 画面の測定が必ずシャッターが開いている状態で実行されます。シャッターを閉じた状態でシステムをテストする場合は (例: 暗電流を測定するとき)、このオプションはアクティブ解除する必要があります。 ノート: この画面のシャッター設定は、この画面外での測定には影響しません。他のすべての場合では、シャッターは自動的に制御されます。
炎光測定	アクティブになっているときは、強度ピークが測定されます。この機能がアクティブ解除されている場合は、吸光度ピークが表示されます。
常に参照を測定する	ピーク測定前に参照測定を実行します。
ピークの記録	設定したパラメータでピークの測定を開始します

これについては次のリンクも参照してください：

- [光学ページのオプション \[▶ 163\]](#)
- [表示のオプション \[▶ 159\]](#)
- [測定波長を波長表に挿入 \[▶ 26\]](#)

9.1.2 選択した波長でのピークの測定

選択した波長でテスト測定を **分光器 / パラメータ** 画面で開始できます。

- ▶ 参照溶液とテスト溶液を検体に提供します。
テスト溶液の指示はクックブックを参照してください。
- ▶  をクリックすると、**分光器 / パラメータ** 画面が開きます。
- ▶ **波長** で、**...** をクリックして **元素 / 波長選択** 画面で波長を選択します。
または、波長の値を入力フィールドに直接入力します
- ▶ **設定** をクリックして波長を設定します。
設定が完了すると、設定の横にあるマーカーが緑になります。
- ▶ 合計測定時間を **読み取り時間** フィールドに設定します。
- ▶ **常に参照を測定する** オプションをアクティブにします。
- ▶ **ピークの記録** をクリックして、参照測定および後続のサンプル測定の指示に従います。
✓ 測定結果が **ピーク** 画面に表示されます。

ピーク / 波長調整 画面で、ピークオフセットを補正できます。

これについては次のリンクも参照してください：

- [contrAA の装置機能テスト \[▶ 109\]](#)
- [ピークオフセットの補正 \[▶ 94\]](#)

9.1.3 連続測定

分光器 / スペクトル 画面で、指定した波長の連続測定を開始します。連続測定は、サービスタイムの装置の最適化に使用します。



をクリックして **分光器 / スペクトル** 画面を開きます。


分光器 / スペクトル 画面のグラフィカル表示とデジタル評価

オプション	説明
表示	ピーク表示の種類
	エネルギー ランプエネルギーを表示。測定単位: cts (カウント) ノイズができるだけ低い状態になるように、CCD への積算時間が選択されます。最大のエネルギーは約 30000cts です。
	吸光度 吸光度ピークの表示
	強度 単位時間当たりのエネルギー値を表示。測定単位: Mccts/s (メガカウント/秒) 出力された強度によって、積算時間の如何にかかわらず、吸光度に関してさまざまなピークを比較できます。

オプション	説明
中心ピクセル	このピクセルの値が、選択した表示に応じて連続して表示されます。 最大, 最小, 平均 および SD フィールドには、連続測定の結果が表示されます。
バーナー高さ	フレーム法 バーナー高さ設定
測定ピクセルにマーク	グラフ内の測定ピクセルを赤い縦線で選択します
マークモード	グラフ内の各ピクセルの測定値をドットで選択します
グラフ拡大縮小	縦座標および横座標の開始および終了ポイントを軸の入力フィールドに入力します。または、ズームモードをアクティブにした後に、左マウスボタンを押したままにすることで表示する領域を選択します。 拡大縮小を元に戻すには、 auto オプションをアクティブにします
[参照スペクトル]	参照ピークを記録します
[Start]	連続測定を開始します


連続測定の開始

測定は、オートサンプラーなしでマニュアルで実行されます。サンプル導入管をネブライザープローブに装着します。

- ▶ 参照溶液とテスト溶液を検体に提供します。
テスト溶液の指示はクックブックを参照してください。
- ▶  をクリックすると、分光器画面が開きます。
- ▶ 波長をパラメータタブで設定します。
- ▶ スペクトルタブに切り替えます。
- ▶ [参照スペクトル] をクリックして参照測定を参照溶液で開始します。
参照ピークがすでにある場合は、インジケータランプはグリーンです。
- ▶ サンプル導入管をテスト溶液に浸液します。[Start] をクリックします。
✓ 測定は [Stop] を押すまで連続して実行されます。

9.2 フレーム


フレーム画面で、バーナー / チャンバー / ネブライザーシステムの個々の機能をチェックし、個々の元素を測定するためのパラメータを設定します。

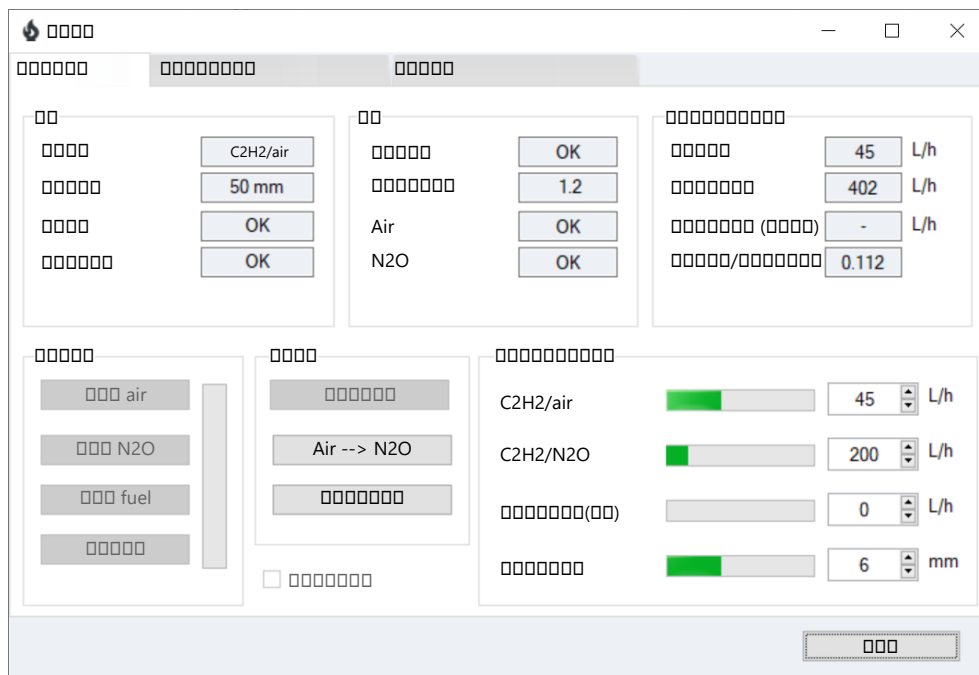
 をクリックするか、メニューアイテム **メソッド最適化 / フレーム** で、フレーム画面を開きます。

9.2.1 フレーム機能のテスト

フレーム / コントロール画面には以下の機能が含まれています:

- フレームを点火 / 消火する
- オキシダントとしての空気または亜酸化窒素を切り替える
- ガス圧力とガス流量の表示
- スクレーパーをアクティブにする
- ガス流量の設定

 をクリックしてフレーム / コントロール画面を開きます。



状態

オプション	説明
flame	<p>off: フレームが点火していません。</p> <p>C2H2/air: アセチレン / 空気フレーム燃焼中。</p> <p>C2H2/N2O: アセチレン / 亜酸化窒素フレーム燃焼中。</p>
burner	<p>バーナーヘッドの種類</p> <p>!-: バーナーヘッドが取り付けられていないか、センサーで検出されませんでした。</p>
silencer	<p>チャンバーサイホンのレベル。チャンバーから原子化されていない排液が排出され、監視されます。サイホンは、フレームの逆流を防ぐために、常に排液で一杯になっている必要があります (特に、亜酸化窒素フレーム)。</p> <p>OK: サイホンがオーバーフローまで排液で一杯です。</p> <p>!-: サイホンのレベルが十分ではありません。サイホンを超純水でオーバーフローまで満たしてください。バーナーを取り外し、水を排水ホースに排水されるまでバーナーに慎重に注いでください。</p>

圧力

オプション	説明
fuel	装置入り口でのフェューエルガス圧
nebulizer	測定中のネブライザーガス圧
Air	<p>空気入口圧の状態</p> <p>この状態は、空気を使用しているときのみ表示されます。</p>
N2O	<p>亜酸化窒素入口圧の状態</p> <p>この状態は、亜酸化窒素を使用しているときのみ表示されます。</p>

現在のfuel流量

オプション	説明
fuel	フェューエルガス流量 (C ₂ H ₂)
nebulizer	ネブライザーを通るオキシダント流量

オプション	説明
柱シグナル (トータル)	トータルオキシダント流量 (オキシダント + 補助オキシダント) この値は、補助ガスを使用しているときのみ表示されます。
フェーイル/柱シグナル	フェーイル流量とオキシダント流量の比率

機能テスト

機能テストは、フレームが消火中のみ行うことができます。テストできる項目は、その時の装置の状態によって異なります。

ボタン	説明
テスト air	空気のバルブを開きます 前提条件: 空気入口圧とフェーイルガスが検出されている。 補助オキシダントが メット / フレーム 画面でアクティブになっている場合は、ネブライザー圧力、オキシダントフロー、トータルオキシダントが表示されています。
テスト N2O	50 mm バーナーではアセチレン亜酸化窒素フレームのみ 亜酸化窒素ガスのバルブを開きます 前提条件: 亜酸化窒素入口圧とフェーイルガスが検出されている。 ネブライザー圧力、オキシダントフロー、トータルオキシダントが表示されます (補助オキシダントがアクティブになっているとき)。
テスト fuel	ターゲットガス流量を設定します (比率バルブ) アセチレン-空気フレーム (テスト air) またはアセチレン / 亜酸化窒素フレーム (テスト N2O) でのフェーイルガス流量が表示されます。 テスト fuel をクリックする前に、テスト air またはテスト N2O がアクティブになっている必要があります。
テスト終了	機能テストを終了します

フレーム / スクレーパー

オプション	説明
フレーム点火	空気 / アセチレンフレームを点火します <ul style="list-style-type: none"> ■ 点火アームが回転してきます。フィラメントが明るくなります。 ■ ネブライザー圧とオキシダントフローが設定値に達すると、アセチレンターゲットガス流量 (比率バルブ) が調整されます。 ■ 10 秒以内にフレームが点火しない場合は、点火は中止されます。 ■ フレームが点火すると、フレームの消火 がアクティブになります。
Air --> N2O	アセチレン-空気フレームからアセチレン-亜酸化窒素フレームに切り替えます。 <ul style="list-style-type: none"> ■ オキシダントバルブ (3/2 ソレノイドバルブ) が、空気から亜酸化窒素に切り替わります ■ アセチレン亜酸化窒素フレーム (比率バルブ) 用のフェーイルガス流量が設定されます。 ■ ボタンが N2O --> air に変わります。
N2O --> air	アセチレン-亜酸化窒素フレームからアセチレン-空気フレームに切り替わります。 <ul style="list-style-type: none"> ■ アセチレン空気フレーム (比率バルブ) 用のフェーイルガス流量が設定されます。 ■ ボタンが Air --> N2O に変わります。
フレームの消火	フレームの消火

オプション	説明
	<ul style="list-style-type: none"> アセチレン-亜酸化窒素フレーム燃焼時には、2、3秒アセチレン-空気フレームに切り替わります。 フューエルガス流量 (比率バルブ) を閉じます。 2、3秒後に (チャンバーとバーナーからフューエルガスが抜けるのを待つため)、空気 (ソレノイドバルブ) が閉じます。
スクレーパー	スクレーパーを装着した 50 mm バーナーで、アセチレン-亜酸化窒素フレームを使用しているときのみ バーナーヘッドをスクレーパーで掃除します


設定

ガス流量を **設定** グループで編集できます。

オプション	説明
C2H2/air	アセチレン-空気フレーム (フューエルガス流量 = 40-120 NL/h)
C2H2/N2O	アセチレン-亜酸化窒素フレーム (フューエルガス流量 = 120-315 NL/h)
補助オキシダント(補助)	補助オキシダント流量の設定
バーナー高さ	光路からのバーナーの高さ

ノート: 装着しているバーナーをセンサーで自動認識します。50 mm バーナーを使用し、バーナー点火中のみ、C2H2/air と C2H2/N2O の切り替えができます。

これについては次のリンクも参照してください：

 [メソッド / フレーム 画面 - フレームパラメータを指定 \[▶ 29\]](#)

9.2.2 フレームの最適化

最適なバーナー高さとフレームのガス成分は、検体に強く依存します。したがって、クックブックから提供される値は、元素ごとに微調整することをお勧めします。最適化は、パラメータを変更してシグナルカーブを観測することで、マニュアルで実行できます。メソッド内で補助オキシダントをアクティブにした場合でも、マニュアル最適化を使用してください。補助オキシダントを使用しない場合は、フレームパラメータを自動的に最適化できます。

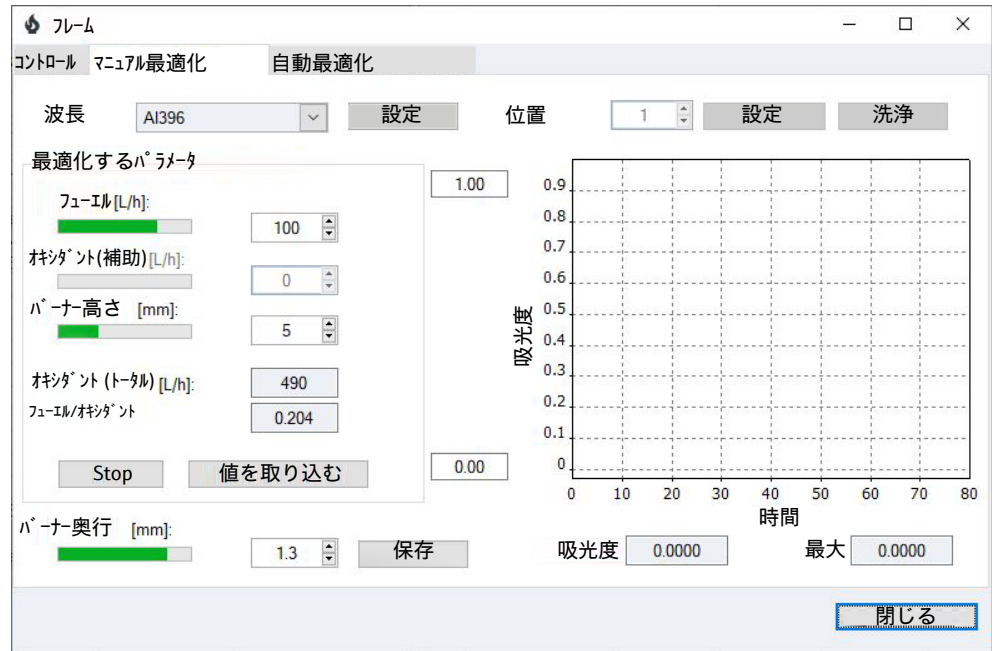
9.2.2.1 マニュアルでのフレーム最適化

現在メソッドの測定波長のマニュアルフレーム最適化は **フレーム / マニュアル最適化** 画面で実行できます。マニュアル最適化は以下の状況で必要になります：

- 補助オキシダントの使用
- システムクリーニング後のバーナー / チャンバー / ネブライザーシステムの最適化



をクリックすると、**フレーム / マニュアル最適化** 画面が開きます。



オプション	説明
波長	メソッドの測定波長を選択します
設定	選択した測定波長を設定します
位置	テストサンプルのオートサンプラー上の位置。
設定	オートサンプラーのプロープをテストサンプルに浸液します
洗浄	クリーニング液を洗浄カップから採取します
フューエル	フューエルガス流量を調整します
バーナー高さ	バーナー高さをランプの光路に対して調整します
オキシダント(補助)	補助オキシダント流量を設定します 空気: 75 / 150 / 225 NL/h N ₂ O: 60 / 120 / 180 NL/h
オキシダント(トータル)	トータルオキシダント流量の表示
フューエル/オキシダント	フューエルガス流量とオキシダント流量の比率の表示
バーナー奥行	contrAA 800 Dのみ バーナー奥行を調整します
Start	測定を開始してシグナルを連続的に記録します
Stop	測定を終了します
値を取り込む	同定された測定波長のフレームパラメータをメソッドに転送します
グラフ	シグナルカーブの表示
吸光度	現在の吸光度値
最大	現在の測定での最大吸光度値


補助オキシダントの設定での
マニュアル最適化

- ▶ テスト溶液を準備します。
適切なテスト溶液の指示はクックブックを参照してください。そこで示されているテスト濃度では、吸光度は約 0.1 になります。最適化のために、2 ~ 3 倍の濃度を使用してください。
- ▶ 波長 リストから測定波長を選択します。
- ▶ 設定 をクリックすると、モノクロメータがその波長に移動します。

- ▶ ネブライザーのサンプル導入管をテスト溶液に浸液します。
- ▶ オートサンプラーを使用している場合は、サンプルをオートサンプラー上に置いて、位置フィールドに位置を入力します。それから **設定** をクリックします。
プローブがテスト溶液に浸液され、サンプルが注入されます。
- ▶ **Start** をクリックして測定を開始します。
- ▶ 最適化ステップを実行します。
ノート: パラメータを変更してからシグナルはすぐに変化が表れません。数秒たってからシグナルは変わります。
 - 矢印キーを使用してフューエルガス設定を変更し、グラフと **吸光度** フィールドでシグナルカーブを観測します。最大吸光度を設定します。
 - 最大吸光度が見つかるまで、バーナー高さを同様に変更します。
 - 補助オキシダントを使用している場合は、最大シグナルがここで設定されるまで **シグナル(補助)** パラメータを変更します。
 - contrAA 800 D のみ: さらに、バーナーの奥行設定を **バーナー奥行** フィールドで最適化できます。
- ▶ 8. シグナルをこれ以上高くできないところまで、最適化ステップを繰り返します。
- ▶ **Stop** をクリックして測定を終了します。
- ▶ **値を取り込む** をクリックします。
 - ✓ 選択した測定波長のパラメータがメソッドに転送されます。

同様に、メソッド内のすべての波長の最適なパラメータを探してください。

これについては次のリンクも参照してください：

 [メソッド / フレーム画面 - フレームパラメータを指定 \[▶ 29\]](#)

9.2.2.2 自動フレーム最適化

自動フレーム最適化は、**フレーム / 自動最適化** 画面で実行します。使用する最適化アルゴリズムによって、有効なシグナルを取得するために、フューエルガス流量とバーナー高さの設定が変化します。これは、最大値に到達するか、パラメータを変更しても有効なシグナルの取得に効果がなくなるまで、繰り返されます。同定されたフレームパラメータをメソッドに転送したり、保存して将来に他のメソッドで使用したりできます。



をクリックして **フレーム / 自動最適化** 画面を開きます。

フレーム

コントロール マニュアル最適化 自動最適化

波長 Cu324 位置 1

波長	ステップ	パラメーター		フェール/オキダント	シグナル
		ガスフロー	バーナー高さ		
Cu324	8	100	4	0.577	0.6400
Cu324	9	110	4	0.577	0.5400
Cu324	10	100	5	0.577	0.7500
Cu324	11	100	6	0.577	0.8400
Cu324	12	100	7	0.577	0.9100
Cu324	13	100	8	0.577	0.9600
Cu324	14	100	9	0.577	0.9900
Cu324	15	100	10	0.577	1.0000
Cu324	16	100	11	0.577	0.9900
Cu324	17	95	10	0.577	0.9500
Cu324	18	105	10	0.577	0.9500
Cu324	19	100	10	0.577	1.0000

Start 全ての波長 削除 読み込み 値を取り込む 保存 閉じる


オプション	説明
波長	メソッドの測定波長を選択します
位置	テストサンプルのオートサンプラー上の位置
Start	測定を開始してシグナルを連続的に記録します
全ての波長 / 全主波長	あるサンプル溶液で、メソッドの全波長の最適化を実行します この場合、サンプル溶液にはメソッドのすべての元素が含まれている必要があります。メソッドに同時に測定された元素波長が含まれている場合は (メソッド / 波長 画面で指定した主波長)、最適化する波長の選択を 全主波長 に制限できます。
削除	同定された値を削除します
読み込み	保存したフレームパラメータを読み込みます
保存	最適化したフレームパラメータを保存します
値を取り込む	設定済み元素波長で同定されたフレームパラメータをメソッドに転送します
表	最適化の値を表示します。
グラフ	シグナルカーブの表示

手順

- ▶ テスト溶液を準備します。
適切なテスト溶液の指示はクックブックを参照してください。そこで示されているテスト濃度では、吸光度は約 0.1 になります。最適化のために、2 ~ 3 倍の濃度を使用してください。すべての測定波長 / 主波長を自動的に最適化した場合は、テスト溶液にこれらの元素が含まれている必要があります。
- ▶ 波長 リストから測定波長を選択するか、全ての波長 / 全主波長 オプションをアクティブにします。
- ▶ オートサンプラーを使用する場合: テスト溶液をオートサンプラー上に置いて、位置 フィールドに位置を入力します。
マニュアル測定の場合: ネブライザーのサンプル導入管をテスト溶液に浸液します。
- ▶ Start をクリックします。
自動最適化 画面が表示されます。

- ▶ 必要に応じて、以下のオプションをアクティブにします:
最適化データを自動保存: アクティブになっている場合は、ファイル名を **ファイル名** フィールドに入力します。
追加の波長の測定: 複数元素評価の場合のみ。このオプションがアクティブになっている場合は、測定する波長以外に主波長も表示されます。ただし、メソッドに転送できるのは、主波長の最適化パラメータだけです。
現在のメソッドに自動的に最適化した値を設定します。: メソッドのすべての波長を自動的に最適化するときは、このオプションをアクティブにしてください。最適化が完了した後に利用できるのは、最後の波長のデータだけであるためです。
- ▶ **OK** で選択を確定します。
- ▶ 個々の波長を最適化する場合: 最適化前に指定しなかった場合は、**値を取り込む** をクリックすることで、最適化完了後にその波長のパラメータをメソッドに転送します。
 - ✓ フレームパラメータが最適化されて、同定された値がメソッド内で更新されています。保存した値を後で読み込んで、それらを別のメソッドに転送できます。

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 / フレーム 画面 - フレームパラメータを指定 \[▶ 29\]](#)

9.3 ファーネス

ファーネス画面で、以下のパラメータを設定したり、ファーネス機能をモニターしたりします:

- メソッド内で使用するファーネスプログラムのパラメータ
- モディファイアの選択
- メソッド開発時に原子化および灰化温度の最適化
- グラファイトチューブのコーティング (hydrEA 法)
- ファーネスプログラムのグラフィカル表現
- ファーネス機能のチェック



をクリックするか、メニューアイテム **メソッド 最適化 / ファーネス** で、**ファーネス** 画面を開きます。

画面内のボタン **ファーネス**

オプション	説明
波長	このリストフィールドで、ファーネスパラメータを表示 / 変更する測定波長を選択します。
[メソッドパラメータフィット]	測定波長のファーネスパラメータへの変更をメソッドに転送します。

9.3.1 ファーネスプログラムの表示

波長固有のファーネスプログラムが **ファーネス / ファーネスプログラム** 画面に表示されます。波長を画面の下部で選択します。ファーネスプログラムは **メソッド / ファーネス** 画面で作成し、ここで編集できます。



をクリックして **ファーネス / ファーネスプログラム** 画面を開きます。

表示されるパラメータ:

オプション	説明
ステップ	ファーンеспログラム内のステップ番号
*	このフィールドには現在のところ機能が割り当てられていません。
名前	ファーンеспログラムステップの名前
温度	プログラムステップのターゲット温度
昇温	設定した温度まで加熱 / 冷却する速度
保持	設定した温度で保持する時間
時間	ステップの総合時間
ガス	パージガス (P-ジ) とアディショナルガス (添加) の流量。設定可能な段階: Stop: ガスを流しません Min: 最小流入 (パージガスのみ) Max: 最大流量
注入	このステップ後に、サンプルをファーンেসに注入します。
E/P	個々の成分の濃縮 (E = 濃縮) ステップまたは熱前処理 (P = 前処理) ステップ

フィックス ボタンを使用して、プログラムを実行できなくするプログラムエラーをチェックします。プログラムが正しい場合は、ボタンの横のインジケータランプはグリーンに点灯します。そうでない場合は、正しくないステップを示すエラーメッセージ。

これについては次のリンクも参照してください：

 [ファーンеспログラムの編集 \[▶ 32\]](#)

9.3.2 マトリックスモディファイア、濃縮、前処理の表示

ファーンেস / モディファイアと濃縮 で、グラフィットファーンেস内の原子化に関する以下の波長固有パラメータを表示できます：

- マトリックスモディファイアの使用と量
- ピペッティングと乾燥の繰り返しによるグラフィットチューブでの濃縮
- サンプルの熱前処理



をクリックすると、マトリックスモディファイアが表示されるファーンেস / モディファイアと濃縮 画面が開きます。

これについては次のリンクも参照してください：

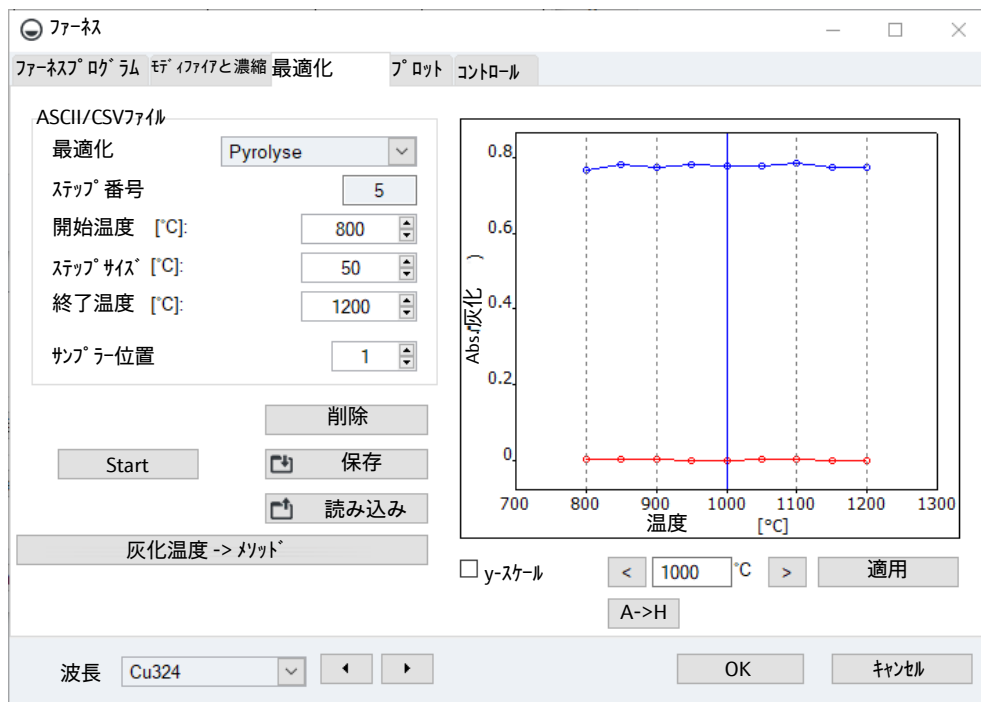
 [マトリックスモディファイア、濃縮、前処理を指定 \[▶ 34\]](#)

9.3.3 ファーンеспログラムの最適化

ファーンেস / 最適化 画面で、ステップ終了温度を上げていく一連の測定を実行することで、元素波長の最適な灰化および原子化温度を同定および設定します。原子化および灰化温度のファーンেসパラメータ設定が最適化されたら、保存して他のメソッドに読み込むことができます。



をクリックしてファーンেস / 最適化 画面を開きます。



パラメータとコントロールボタン

オプション	説明
最適化	最適化のパラメータを選択します: 灰化 または 原子化
ステップ番号	ファーンレスプログラム内で選択したステップの番号
開始温度	測定シリーズ内で最適化するファーンレスプログラムステップの最も低い終了温度。
ステップサイズ	最適化するステップの温度が、測定実行ごとにこの量ずつ増分されます。
終了温度	測定シリーズ内で最適化するステップの最も高い最終温度 ノート: 選択できるパラメータは、特定のファーンレスプログラムで意味を持つパラメータのみです。
サンプラー位置	最適化を実行するパラメータをオートサンプラーのこの位置に置きます。
Start / Stop	最適化測定のシーケンスを自動的に作成します 最適化を開始 / 終了します
削除	同定された値を削除します
保存	最適化されたファーンレスパラメータを保存します
読み込み	保存したファーンレスパラメータを読み込みます
灰化温度 -> メット / 原子化温度 -> メット	取得した値を検証して、現在選択しているファーンレスプログラムに転送します。

結果表示

最適化の結果は、結果画面に表示されます。

最適化の進行状況をグラフィカルに表現したものが、画面の右側に表示されます。オートゼロ値と吸光度のカーブが表示されます。


オプション	説明
赤線	灰化または原子化温度に依存するバックグラウンドシグナル
青線	灰化または原子化温度に依存する固有の吸光度
縦カーソル	ユーザーの選択した、最適灰化または原子化温度

オプション	説明
y-スケール	表示をバックグラウンドシグナルにスケールします
A->H/H->A	表示をシグナル面積 (A = 面積) とシグナル高さ (H = 高さ) で切り替えます
</>	灰化または原子化温度の縦カーソルを左右に移動して、目的の最適なファーンレス温度に設定します

最適化手順

この測定には、オートサンプラーが必要です。

プログラムステップ	最適化のゴール
灰化温度	具体的な吸光度損失がなく、バックグラウンドシグナルが最小
原子化温度	一定の吸光度

- ▶ ファーンレスプログラムで測定波長のメソッドを作成して保存します。
- ▶  をクリックすると、ファーンレス / 最適化画面が開きます。
- ▶ 最適化パラメータを入力します (上記を参照)。
- ▶ オートサンプラーにサンプル液を用意します。
- ▶ **Start** をクリックして最適化を開始します。
最適化は自動で行われます。
測定結果はメイン画面に表示され、ファーンレス / 最適化画面にグラフィカルに表示されます。
- ▶ 個々のサンプル値を表示するには、グラフで測定ポイントをクリックするか、メイン画面でサンプル波長をダブルクリックします。
- ▶ </> ボタンまたは矢印キーを使用して、縦カーソルを最適な温度に移動します。
- ▶ **適用** をクリックします。
✓ 最適化された温度がファーンレスプログラムに転送されます。

現在のメソッドに設定しているすべての測定波長でこの手順を繰り返します。

9.3.4 ファーンレスプログラムのグラフィカル表示とグラフタイトチューブのコーティング

ファーンレス / プロット画面には以下の機能が含まれています:

- ファーンレスプログラムのグラフィカル表現
- 現在のファーンレスプログラムのモニターの実行
- hydrEA 法のためにイリジウムまたは金でグラフタイトチューブをコーティング

ファーンレスプログラムのグラフィカル表現

ファーンレスプログラムが、温度-時間座標系でグラフとして表示されます。

オプション	説明
黒線	設定した温度-時間グラフ
赤線	ファーンレスプログラムの処理済み部分のテスト中、赤線 (実現された温度-時間実行) が黒線に重ね合わされます。
注入	インジェクションステップがグラフ上でフラグ注入でマークされます。
緑のバー	濃縮フェーズは緑の水平バーで表示されます。
黄褐色バー	オートゼロ (AZ*) は黄褐色のバーで表示されます。

オプション	説明
明るいピンクのバー	測定ステップ (読み取りステップ) は明るいピンクの縦線で表示されます。

テストファーンエスラン

現在のファーンエスプログラムの実行をテストランでチェックし、昇温の様子をグラフィカルに表示します。テストランを行うと、温度と時間の値が表示されます。サンプルは注入しません。

- ▶ **Start** をクリックしてテストランを開始します。
ランはグラフに表示されます。以下の値を含む **ファーンエスプログラム** 画面も表示されます:

オプション	説明
ステップ	実行中のファーンエスステップ
温度	現在のファーンエス温度
時間	プログラム開始からの経過時間
昇温	現在の昇温速度
ガス	現在のガスフロー

グラファイトチューブのコーティング

HydEA 法では、グラファイトチューブをイリジウムまたは金コーティングする必要があります。コーティングの方法は、**ファーンエスプログラム** 画面でコントロールします。

チューブコーティング チェックボックスにチェックを入れると、この手順用の入力パラメータが有効になります。

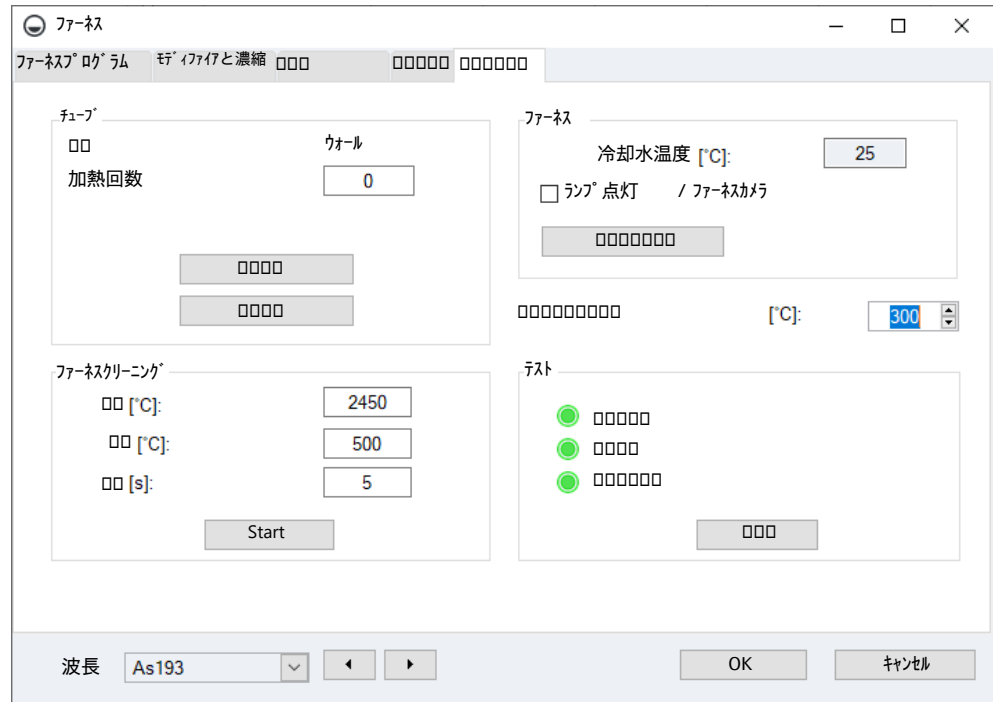
オプション	説明
サイクル	コーティングのために溶液を注入・濃縮する回数
位置	コーティングに使用する溶液のオートサンプラートレイ位置
注入量	コーティング溶液の量。濃縮回数分インジェクションされます。
元素	コーティング素材の選択 水素化物生成元素測定の場合はイリジウム (Ir)、水銀測定の場合は金 (Au) を使用します。
Start	コーティングを開始します

ノート: コーティングプロセスの詳細は、「HS 60 モジュール構成」および「HS 55 モジュール構成」の作業指示を参照してください。

9.3.5 その他のファーンエス機能

ファーンエスコントロール 画面には以下の機能が含まれています:

- グラファイトチューブに関する情報
- グラファイトチューブのフォーム
- グラファイトチューブのクリーニング
- グラファイトチューブを開く / 閉じる
- 冷却循環水の温度インジケータ



グラフィットチューブデータ **チューブ** 領域にはグラフィットチューブに関する情報が含まれます。この情報は、チューブを変えたときに入力され、自動的にアップデートされます。

オプション	説明
種類	チューブの種類 (画面での設定に基づく) クイックスタート
最大加熱回数	チューブの加熱回数

ノート: まだ使用できるグラフィットチューブを取り出す場合は、データをメモしておき、再度挿入するときそのデータを入力してください。データは自動的にアップデートできます。新しいチューブを挿入したら、**リセット** をクリックしてデータをリセットしてください。

グラフィットチューブのフォーム

グラフィットチューブフォームは下記の事を行います:

- ファーンズから空気や酸素を排除して、ファーンズパーツをグラフィットコンタクトになじませます
- ファーンズ温度の再検量
- 新しいグラフィットチューブのフォーミング
- 中断後のファーンズのクリーニング

フォームは以下の場合に実行する必要があります:

- 分光器の電源を入れた後
- ■ ファーンズの開閉を行った後

▶ フォームは、**フォーム** をクリックして開始します。

- ✓ **チューブ 温度/ガス** 画面が開き、現在測定されているファーンズデータが表示されます。9段階の温度 (300 - 1500 - 300 - 1500 - 300 - 1000 - 1600 - 2000 - 2400 °C) でチューブを加熱し、チューブ内部の温度を測定します。最後のステップが終了すると、フォームファクター値が表示され、温度のキャリブレーションデータが保存されます。

ファーンズのクリーニング

チューブは、ファーンズプログラムステップでの測定後に、検体残留物を取り除くために必ず加熱されます。加熱はここで開始することもできます。加熱は1ステップのクリーニングプログラムで、チューブが最大ガス流量でパージされません。

オプション	説明
温度	クリーニングの温度
昇温	加熱速度
保持	設定した温度での保持時間
Start	加熱プロセスを開始します メニュー画面が開き、現在測定されているファーンステータが表示されます。

その他のファーンステータ機能


オプション	説明
冷却水温度	冷却循環水の温度
ランプ点灯/ファーンカメラ	ファーンカメラとLEDをオンにします グラファイトチューブの画像を含む画面が表示されます。サンプル注入およびサンプル乾燥を観察できます。初期設定として、ファーンカメラは常時オンになっています。このためのオプションは、オプション/測定シーケンス画面にあります。
ファーン開く / ファーン閉じる	グラファイトファーンを開いたり閉じたりします
シャッター閉鎖温度	このファーン温度でファーンカメラはオフになり、分光器のシャッターが開きます。キセノンランプの高エネルギー照射がグラファイトチューブを通過し、測定を開始できます。

ファーンステータテスト

テストグループで、ファーンセンタをチェックできます。テストに成功すると、画面上のランプがグリーンになります。テストに失敗する(エラーが検出される)と、画面上のランプは赤になります。エラーの場合は、対応するエラーメッセージが出力されます。

- ▶ センサーテストは、テストをクリックして開始します。

これについては次のリンクも参照してください：

 測定シーケンスのオプション [▶ 162]

9.4 水素化物システム

Hg/水素化物システム 画面には以下の機能が含まれています：

- 水素化物システムの状態のチェック
- システム機能のエラーのテスト
- 水素化物システムの再初期化
- 測定前に、試薬をチューブに導入する
- システムの洗浄、たとえば測定の終了後のクリーニングなど

Hy をクリックするか、メニューアイテム **リセット最適化 / Hg/水素化物システム** で、水素化物画面を開きます。

水素化物システムの初期化

水素化物システムは、AASでの作業開始時に必ず初期化されます。AASとの接続が中断された場合に、再初期化が必要な場合があります。

- ▶ **Hg/水素化物システム** 画面で、**初期化** をクリックします。
✓ オートサンプラー、AAS、PCとの通信が確立します。

水素化物システムの取り込み

試薬の取り込みは、測定の開始前、新規設置後、または水素化物システムのクリーニング後に必要になります。

- ▶ **Hg/水素化物システム** 画面で、**システムド** をクリックします。
 - ✓ 水素化物システムのチューブに試薬が導入されます。

水素化物システムの排出

水素化物システムは、システム内の残留物を取り除くために、酸または還元剤で排出できます。関連するパラメータは、**メソッド / 水素化物** 画面で指定します。

- ▶ **Hg/水素化物システム** 画面で、**システムクリーニング** をクリックします。
 - ✓ 水素化物システムが排出されます。

これについては次のリンクも参照してください：

📖 **メソッド / 水素化物** 画面 [▶ 37]

9.4.1 水素化物システムの機能のチェック

Hg/水素化物システム / コントロール 画面には、水素化物システムのモジュールの状態が表示されます。

Hy をクリックして **Hg/水素化物システム / コントロール** 画面を開きます。

ポンプの管理

この機能では、ポンプのオン / オフを切り替えます。

オプション	説明
4チャンネルポンプ	4チャンネルポンプは試薬および水素化物システムの廃棄物を送液します。
サンプルポンプ	サンプルポンプは液体測定サンプルを送液します。

ノート: 2つのポンプのうち1つがオンのときにバルブ3と4のどちらもアクティブでない場合は、バルブ3が液体の逆流を防ぐために自動的にオンになります。サンプルポンプがアクティブなときは、気液分離器での液体ブロックを防ぐために、4チャンネルポンプもアクティブになります。

ガス流路のコントロール

ガス経路 領域では、アルゴンガス流量の流路のうち、測定プロセスに関連するすべての流路を、ソレノイドバルブグループのバルブを使って切り替えることができます。

ガス->バルブ2->セル オプションは、このセルに向かわないガス流路について、大きなガス流量をこのセルに直接切り替えるために使用します。これによってバルブ2が開きます。

ガスフロー内のバルブ

この機能は、バルブを切り替えるために使用できます。

バルブ1 バッチモジュールのチップへのガスのオン、オフ。

バルブ3 セット流路に 6 L/h アルゴンを切り替え。

バルブ4 セット流路に 25 L/h アルゴンを切り替え。

セルのチェック

オプション	説明
セル高さ	光路へのセル高さの調整
加熱 on	セル加熱 この機能は、セルの予備加熱に使用します。 ターゲット フィールドの温度にセルを加熱します。セル加熱のオン・オフ後、 現在 フィールドに温度が表示されます。

サンプルバルブの切り替え

サンプルバルブ 領域では、ソレノイドバルブペア (V6, V7) を使用して、サンプル流路を廃棄物または反応器に切り替えることができます。

金コレクターの加熱

濃縮付き Hg/水素化物システムのみ

コレクター領域で、金コレクター設定を表示して編集できます。

オプション	説明
off	金コレクターの加熱冷却のオフ
加熱 on	金コレクターの加熱をオンにします
冷却 on	金コレクターのファンをオンにします 金コレクターは冷却されます。
加熱値	金コレクターの加熱温度のパラメータ。 値は、メーカーで設定済みです。変更が必要なのは、コレクターの加熱部分を交換した場合のみです。値を大きくすると、クリーニング温度も高くなります。 設定をクリックすると、変更した水素化物システム値が保存されます。

バブルセンサーのクリーニング

HS 60 および HS 60 モジュール構成のみ

バブルセンサーは、気液分離器の後のガス流路に液体が入った場合にシグナルを出します。水素化物システム障害テストまたは測定中にバブルセンサーによってこの障害が報告された場合は、バブルセンサーのガス流路をアディショナルガス流量でクリーニングする必要があります。30 秒間ガス流路でバブルが検出されなければ、クリーニングプロセスは正常に完了しています。

オプション	説明
バブルセンサー	バブルセンサーのクリーニング時は、このインジケータランプのみがアクティブです。 赤: バブルがガス流路 (液体) で検出されています。 緑: ガス流路にバブルがありません。
Start	クリーニングプロセスを開始します

9.4.2 水素化物システムのエラーテスト

水素化物システムの現在の状態を **Hg/水素化物システム / エラーテスト** 画面でチェックできます。各測定シーケンスは、ここで一覧表示する障害状態のいずれかが発生するとすぐに停止して、関連する障害レポートが画面で提供されます。

Hy をクリックすると、**Hg/水素化物システム / エラーテスト** 画面が開きます。

接続している水素化物システム

オプション	説明
種類	接続または初期化している水素化物システム
バージョン	水素化物システムのファームウェアバージョン
ライン周波数	50 または 60 Hz が表示されます。プラスマイナス 2 Hz 以上のぶれがあると、エラーメッセージ「ライン周波数」が出力されます。

障害テスト

障害テストは、**テスト** をクリックして開始できます。テストの結果がインジケータランプの緑 (テストに成功) と赤 (否定的なテスト結果) で表示されます。エラーの原因は下記の内容になります:

オプション	説明
ガス圧	アルゴンガス圧力が示されません。

オプション	説明
+24 V	+24 V の操作電圧が示されません。
セーフティリレー	セーフティリレーがオンになっていません。
トランス温度	トランス温度が高い、またはセンサーの故障。
コレクター温度	金コレクターの温度が高い、またはセンサーの故障。
金コレクター加熱時間	金コレクターターゲット温度に指定時間内に到達しませんでした。
セル温度	セルが熱すぎるまたは熱電対の故障。
セル加熱時間	セルターゲット温度に指定時間内に到達しませんでした。
ライン周波数	商用電源周波数が 50Hz でも 60 Hz でもない。
バブルセンサー	液体が、気液分離器の後のガスラインに検出された。
セル温度センサー	セル内の温度センサーが故障。

9.5 オートサンプラーパラメータ

9.5.1 フレーム法のオートサンプラー

このソフトウェアは、以下のフレーム法向けオートサンプラーをサポートします:

- AS-F および AS-FD
- AS 51s
- AS 52s

このオートサンプラーは、フレーム法向けのオプションアクセサリーです。オートサンプラーは、装置初期化時に識別されます。

オートサンプラー画面には以下の機能が含まれています:

- 接続しているオートサンプラーモデル
- オートサンプラーの調整
- オートサンプラーの追加洗浄 / 再初期化
- 機能テストの実行
- サンプル割り当ての表示
- 試薬の追加

測定に直接かかわるパラメータ (サンプルトレイの割り当て、希釈、混合、洗浄ステップ) は、メソッド、シーケンス、サンプル ID で指定します。



をクリックするか、メニューアイテム **メソッド最適化 / オートサンプラー** で、**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、常に **クイックスタート** で、AAS で作業を開始する際に初期化されます。オートサンプラーに問題が起きた場合は (例: 機械的な衝撃によって)、再初期化が必要な場合があります。

- ▶ **オートサンプラー** 画面で、**初期化** をクリックします。

✓ オートサンプラー、AAS、PC との接続は初期化によって確立されます。

サンプル流路の洗浄

オートサンプラーからフレームへのサンプル流路は、オートサンプラーの洗浄液で洗浄できます。洗浄ポンプが新しい洗浄液を供給しているとき、プローブは洗浄カップに浸液されます。SFS 6 インジェクションモジュールが接続されているときは、サンプル流路が開いて、サンプル流路全体が洗浄されます。

- ▶ **オートサンプラー** 画面で、**洗浄** をクリックするか、メニューアイテム **ルーチン | 洗浄** を選択します。

✓ サンプル流路が洗浄されます。



注意

オートサンプラーの接続が正しくないことによる装置のショート

AAS 装置をオフにしてから、オートサンプラーを AAS 装置に接続してください。そうしないと、通信エラーまたはインターフェイスの破壊が発生する場合があります。

9.5.1.1 フレーム法用オートサンプラーの指定

以下の設定は、オートサンプラー / パラメーター 画面で表示され、指定します:

- オートサンプラー種類
- 洗浄パラメータ
- クリーニングコントロールの設定オプション
- ミックスカップ洗浄の機能 (希釈機能つきオートサンプラーのみ)

洗浄 および クリーニング コントロール パラメータは現在のメソッドから取得されます。オートサンプラー / パラメーター 画面で変更すると、逆にメソッド内の項目が更新されます。

▶  をクリックすると、オートサンプラー / パラメーター 画面が開きます。

オートサンプラー

オプション	説明
種類	接続しているオートサンプラーの表示 「-」: オートサンプラーは接続されていません。 AS-F / AS 51s: 希釈機能なしのオートサンプラー AS-FD / AS 52s: 希釈機能付きのオートサンプラー
トレイ (AS-F / AS-FD)	「-」: トレイがありません 139 Pos.: 129 個の 15 mL 容器と 10 個の 30 mL 容器用のトレイ 54 Pos.: 54 個の 50 mL 容器用のトレイ
トレイ (AS 51s / AS 52s)	「-」: トレイがありません 87 pos.: 77 個の 15mL 容器と 10 個の 30mL 容器用のトレイ 49 pos.: 49 個の 30 mL 容器用のトレイ 30 Pos.: 30 個の 50 mL 容器用のトレイ
バージョン	オートサンプラーファームウェアのバージョン

洗浄

オプション	説明
洗浄モード	off 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 洗浄カップ	洗浄液が洗浄カップから注入される時間 洗浄液がネブライザー / チャンバー / バーナーシステムを通してプローブからフレームに注入され、サンプル流路全体が洗浄されます。
ミックスカップ サイクル	ミックスカップの洗浄回数 ミックスカップに洗浄液または希釈液を満たして、排水するまでが 1 サイクルです。

クリーニングコントロール

オプション	説明
クリーニングコントロール	濃度が高い場合にクリーニングコントロールをアクティブにします クリーニング進行状況は繰り返し測定中にチェックします。
コントロールリミット(Abs)	希釈されたサンプルまたは低濃度のサンプルが測定される前に、シグナルレベルがこの値に戻る必要があります。

特殊機能

ミックスカップが実行中シーケンス時に自動的に洗浄されます。ミックスカップの洗浄プロセスはマニュアルで開始できます。例: 測定終了後にカップをクリーニングするため。

オプション	説明
容量	クリーニングのための溶液量。
Start	洗浄サイクルを開始します。

9.5.1.2 フレーム法用オートサンプラーの動作パラメータ

オートサンプラー / 動作パラメータ画面で、以下のパラメータを指定します:

- さまざまなカップでのプローブの浸液深さ
- シリンジのサンプル吸引速度の設定
- オートサンプラーアームの位置調整



をクリックしてオートサンプラー / 動作パラメータ画面を開きます。

個々のカップ種類について、以下の動作が考慮されます:

カップ	動作
サンプルヴィアル	サンプラーのチューブやネブライザーチューブ（フレーム法）、ポンプチューブ（水素化物）でのサンプル導入
スペシャルカップ	標準やモディファイア等の採取や吸引。
ミックスカップ	検体および希釈溶液の注入、および希釈の後のサンプルの採取
洗浄カップ	サンプルプローブとサンプル流路の洗浄
試薬の追加	プログラムされたサンプルへの試薬の追加

動作テーブルの要素

カラム	説明
動作	可能な動作 吸引 ミックスカップに注入またはフレームに導入するためのカップからのサンプル採取 注入 ミックスカップへのサンプル注入 洗浄 洗浄溶液の採取
種類	接続しているオートサンプラーモデル
位置	動作を行うカップの位置。
深さ	サンプラーチューブの深さ (1 mm 単位)
スピードレベル	シリンジのサンプル吸引速度の設定 大きい値にすると速度が速く、小さい値で速度は遅くなります。 推奨値: サンプル吸引: 平均速度レベル

コラム	説明
	ミックスカップへの注入: 2つの最高レベルのいずれか。早く注入する方が完全に混合されます。また、ミックスカップからのサンプル吸引の待ち時間も、完全な混合には重要です。 希釈溶液の吸引速度は変更できません。

テーブル領域

テーブル領域のコントロールを使って、選択した行のパラメータを変更します。


オプション	説明
速さ	サンプルシリンジのシリンダー速度
深さ	プローブ / 注入チューブの浸液深さ 深さはアームの最高位置からの深さになります。
深さ修正位置	スペシャルカップまたはサンプルカップはこの位置でチェックされます。
設定	オートサンプラーアームをカップ方向に移動します。 チェックを入れていないと、サンプラーアームを動かさずに、設定の変更ができます。

これについては次のリンクも参照してください：

 オートサンプラーの浸液深さと注入速度の設定 [▶ 131]


9.5.1.3 オートサンプラーの浸液深さと注入速度の設定

フレーム法およびグラフィットファーンエス法のオートサンプラーの場合は、プローブ / 注入チューブの浸液深さとさまざまなカップでの溶液注入速度を最適化できます。

- ▶  をクリックすると、オートサンプラー / 動作パラメータ画面が開きます。
- ▶ 動作表で行を選択します。
- ▶ 深さ修正位置 でサンプルまたはスペシャルカップを指定したときは、サンプルトレイの位置を調整します。
- ▶ AS-GF および MPE 60/2 のみ: サンプルカップでの希釈がミッド / サンプル導入画面でアクティブになっている場合は、ミックスカップの位置を設定します。
- ▶ 設定 ボックスにチェックを入れると、サンプラーアームがカップ位置に動きません。
- ▶ オートサンプラーアームの動きを観測しながら、結果が得られるまで速さおよび深さパラメータを変更します。

速度の設定については、オートサンプラー / 画面の説明を参照してください。動作パラメータ

これについては次のリンクも参照してください：

 グラフィットファーンエス法用オートサンプラーの動作パラメータ [▶ 137]

 フレーム法用オートサンプラーの動作パラメータ [▶ 130]

9.5.1.4 フレーム法用オートサンプラーの機能テスト

接続されているオートサンプラーの機能を オートサンプラー / 機能テスト 画面でテストできます。



をクリックしてオートサンプラー / 機能テスト画面を開きます。

トラック/回転

オートサンプラーアームがオートサンプラーのさまざまな位置に動きます。

オプション	説明
カップ番号	リストボックスで選択したサンプルカップに移動します
洗浄位置	洗浄カップに移動します
ミックスカップ位置	希釈機能付きオートサンプラーのみ ミックスカップに移動します

ピペッター

希釈機能付きオートサンプラーのみ

これらのテストでは、希釈ユニット (流体素子モジュール) の機能がチェックされます。

オプション	説明
速さ	注入速度
容量	採取するピペッティング量
吸引	この設定量を設定注入速度で採取します。
注入	この量を注入速度で注入します。
バルブをボトル側へ	バルブは希釈液とサンプル間の流れを切り替えます。スイッチが入るとバルブの切り替え音が聞こえます。
リセット	量設定をリセットします。

ピペットアーム

オートサンプラーアームがトラック/回転で選択した位置に下がります。

▶ 深さ フィールドで、オートサンプラーアームが下がる深さ (mm) を設定します。

ポンプ

チェックボックスをアクティブまたはアクティブ解除することで、オートサンプラーのポンプを切り替えます。

オプション	説明
洗浄ポンプ	洗浄カップに供給するためのポンプ
ミックスカップポンプ	希釈機能付きオートサンプラーのみ ミックスカップから排液するためのポンプ

テストプログラム

これらのテストは、事前に設定された運転試験テストプログラムで実行されません。テストで使用するカップは空である必要があります。テストプログラムが終了すると、テスト終了のメッセージが出ます。

選択したテストプログラムは、**Start** をクリックして開始します。

オプション	説明
テストプログラム 1	位置 1 にアームが動き、チューブがカップに入る 洗浄 位置 33 にアームが動き、チューブがカップに入る 洗浄 位置 42 にアームが動き、チューブがカップに入る 洗浄
テストプログラム 2	テストプログラム 1 を行う。

オプション	説明
	ミックスカップに希釈液を 5 mL 注入する 洗浄 ミックスカップから排液 ミックスカップに希釈液を 5 mL 注入する 洗浄 ミックスカップから排液
テストプログラム 3 AS-F および AS-FD のみ	すべての位置で浸液します

エラーテスト

オートサンプラーのセンサーエラーがチェックされます。1 つでもエラーが発生すると、すべての測定は停止します (同時にエラーメッセージが画面に表示されます)。エラーテストは、テストで開始します。テストに成功すると、画面のボタンは緑になります。問題が見つかったら、赤になります。


テストの失敗の原因は、下記の内容になります:

エラー	説明
洗浄ボトルレベル	AS 51s / AS 52s のみ 洗浄ボトルの洗浄液が少ない
希釈ボトルレベル	AS 52s のみ 希釈液量が少ない
トラック/回転	サンプルアームの回転とトレイの回転の故障。
トレイ種類	サンプルトレイが検出できない。
ピペッター (移動)	注入ユニットエラー
ピペッター (容量)	ピペッターの取り量が大きすぎる。

カップ位置調整

カップ位置調整 をクリックすると、オートサンプラーを再調整するための画面が開きます。

これについては次のリンクも参照してください:

 オートサンプラーの調整 [▶ 133](#)

9.5.1.5 オートサンプラーの調整

オートサンプラーは出荷時に調整してあります。まれに (不適切な輸送後など) サンプラーアームが正しくカップに入らない場合は、調整を実行する必要があります。再調整は **カップ位置調整** 画面でのコンピューターコントロールで行います。**カップ位置調整** 画面には以下のオプションとボタンが含まれます。

調整位置

オートサンプラーアームは、以下の位置に調整できます:

オプション	説明
ミックス位置	希釈機能付きオートサンプラーのみ ミックスカップ
トレイ	サンプルトレイ上の位置 1
洗浄位置	洗浄カップ

調整

位置を調整するためのカスタマイズされたオプションが用意されています。


オプション	説明
深さ	このフィールドはプローブを下げてカップから出し入れするために使用します。これによって、カップの中心からの相対位置をより適切に評価できます。 浸液深さパラメータは洗浄位置にのみ最適化できます。
ピペットアーム	ボタンをクリックすると、オートサンプラーアームの位置が回転します または、キーボードの左 / 右矢印を使用して、アームを動かします。
サンプルトレイ	ボタンをクリックすると、サンプルトレイが回転します。 または、キーボードの上 / 下矢印キーを使ってトレイを動かします。
ステップ	
保存	選択した位置の新しいパラメータを保存します。

洗浄ポンプ

新しいバージョンのファームウェアを搭載したオートサンプラーのみここで、ポンプが洗浄カップに溶液を供給する速度を設定できます。

- ▶ **パル**リストで速度 (1 ~ 24) を選択します。
- ▶ **保存** をクリックして設定を受け入れます。
✓ 設定が恒久的に保存されます。

オートサンプラーの調整

- ▶ サンプルカップをサンプルトレイの位置 1 に置きます。
- ▶  をクリックすると、**オートサンプラー / 機能リスト** 画面が開きます。次に、**サンプル位置調整** をクリックします。
- ▶ 調整位置を選択します。
- ▶ カップへの位置を簡単に評価できるように、浸液深さを調整します。
- ▶ ボタンを使ってオートサンプラーの位置を再調整します。
- ▶ **トレイ** でも行います: ボタンを使ってサンプルトレイの位置を再調整します。
- ▶ オートサンプラーのファームウェアで **保存** をクリックして、位置の新しいパラメータを受け入れます。
- ▶ まだ調整していない位置について、上記の手順を繰り返します。
✓ 新しい位置が恒久的にオートサンプラーファームウェアに保存されます。

9.5.1.6 フレーム法用サンプラーの位置概要

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るサンプルトレイ位置が表示されます。


 をクリックすると、**オートサンプラー / 位置** 画面が開きます。

その表示の **すべての位置** または **スペシャル位置のみ** を選択できます。

ノート: この画面を表示するには、少なくとも 1 行が現在のメソッドに読み込まれている必要があります。

9.5.1.7 サンプルへの試薬の供給

オートサンプラー / 酸化干渉抑制剤の添加画面で、オートサンプラーを使ってサンプルに試薬を自動的にピペティングできます。試薬がサンプルカップ内またはサンプルトレイ上に準備されている必要があります。酸化干渉抑制剤の添加タブは、メソッドおよび関連付けられたシーケンスがアクティブになっている場合にのみ表示されます。

- ▶ シーケンスに従ってサンプルが含まれるサンプルトレイを導入します。試薬を空のトレイ位置に置きます。
- ▶  をクリックすると、オートサンプラー / 酸化干渉抑制剤の添加画面が開きます。
- ▶ **位置. シーケンスから** をクリックします。
サンプル位置がシーケンスから画面のサンプル表に転送されます。
- ▶ 試薬の名前を **名前** フィールドに、トレイ位置を **位置** フィールドに入力します。
- ▶ 試薬の添加をサンプルの希釈倍率で考慮する場合は、**ファクター** オプションをアクティブにします。
- ▶ 試薬を添加するサンプルについては、サンプル量と試薬添加量をサンプル表に入力します。
- ▶ マウスでクリックしてサンプル表でサンプルを選択します。Shift キーまたは Alt キーを押したままにすることで、複数のアイテムを選択できます。
- ▶ **添加開始** をクリックして試薬の添加を開始します。
 - ✓ 試薬が添加されます。処理済みサンプルはすべて「*」でマークされます。


9.5.2 グラファイトファーンネス法用オートサンプラー

このソフトウェアは、以下のグラファイトファーンネス法向けオートサンプラーをサポートします:

- AS-GF: 希釈機能なしのオートサンプラー
- MPE 60: 希釈機能付きのオートサンプラー
- MPE 60/1: 希釈機能なしのオートサンプラー

グラファイトファーンネス法ではオートサンプラーが必須です。接続されているオートサンプラーは、装置初期化時に検出されます。


測定に直接かわるパラメータ (サンプルトレイの割り当て、希釈、混合、洗浄ステップ) は、メソッド、シーケンス、サンプル ID で指定します。

 をクリックするか、メニューアイテム **メソッド最適化 / オートサンプラー** で、**オートサンプラー** -画面を開きます。

オートサンプラー画面には以下の機能が含まれています:

- 接続しているオートサンプラーモデル
- オートサンプラーの調整
- オートサンプラーの追加洗浄 / 再初期化
- 機能テストの実行
- サンプル割り当ての表示
- 試薬の追加

測定に直接かわるパラメータ (サンプルトレイの割り当て、希釈、混合、洗浄ステップ) は、メソッド、シーケンス、サンプル ID で指定します。

 をクリックするか、メニューアイテム **メソッド最適化 / オートサンプラー** で、**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、常に **クイックスタート** で、AAS で作業を開始する際に初期化されます。オートサンプラーに問題が起きた場合は (例: 機械的な衝撃によって)、再初期化が必要な場合があります。
- ▶ **オートサンプラー** 画面で、**初期化** をクリックします。
 - ✓ オートサンプラー、AAS、PC との接続は初期化によって確立されます。
- サンプルチューブのクリーニング 洗浄液が、オートサンプラーの注入ユニットでサンプルチューブに供給され、洗浄カップに注入されます。
- ▶ **オートサンプラー** 画面で、**洗浄** をクリックするか、メニューアイテム **ルックアップ | 洗浄** を選択します。
 - ✓ サンプルチューブが洗浄されます。



注意

オートサンプラーの接続が正しくないことによる装置のショート

AAS 装置をオフにしてから、オートサンプラーを AAS 装置に接続してください。そうしないと、通信エラーまたはインターフェイスの破壊が発生する場合があります。

9.5.2.1 グラファイトファーンエス法向け接続済みオートサンプラーの指定

以下の設定は、**オートサンプラー / パラメータ** 画面で表示され、指定します:

- オートサンプラー種類
- 洗浄パラメータ
- クリーニングコントロールの設定オプション
- ミックスカップ洗浄の機能 (希釈機能つきオートサンプラーのみ)

洗浄 および **クリーニングコントロール** パラメータは現在のメソッドから取得されます。 **オートサンプラー / パラメータ** 画面で変更すると、逆にメソッド内の項目が更新されます。

- ▶  をクリックすると、**オートサンプラー / パラメータ** 画面が開きます。

オートサンプラー

オプション	説明
種類	接続しているオートサンプラーの表示 「-」: オートサンプラーは接続されていません AS-GF / MPE 60: グラファイトファーンエス法用オートサンプラー
トイ	「-」: トレイがありません 89 pos.: MPE の場合 77 個のサンプルカップ (V = 2 mL)、4 個のスペシャルサンプルカップ (V = 5 mL)、および 8 個のスペシャルサンプルカップ (V = 2 mL) 用のトレイ 108 Pos.: AS-GF の場合 100 個のサンプルカップ (V = 1.5 mL) および希釈液、8 個のスペシャルサンプル、標準、モディファイアなど用中央カップ (V = 5 mL)
バージョン	オートサンプラーファームウェアのバージョン

洗浄

オプション	説明
洗浄モード	off 洗浄モードがオフになります。自動洗浄しません。

オプション	説明
	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
	測定間 測定ごとに洗浄します。統計シリーズ内を含みます
	成分間 各成分 (モディファイア、標準、サンプルなど) をグラフィイトチューブに転送後に洗浄
洗浄サイクル 洗浄カップ	洗浄ごとの洗浄回数、1 から 5

クリーニングコントロール

オプション	説明
クリーニングコントロール	濃度が高い場合にクリーニングコントロールをアクティブにします クリーニング進行状況は繰り返し測定中にチェックします。
コントロールリミット(Abs)	希釈されたサンプルまたは低濃度のサンプルが測定される前に、シグナルレベルがこの値に戻る必要があります。

MPE 60 ミックスカップの洗浄

希釈機能付き MPE 60 オートサンプラーでは、ミックスカップを洗浄できます。

オプション	説明
ミックスカップ	ミックスカップを測定を実行していないときに別個に洗浄します。
容量	洗浄溶液の量
ミックスカップ サイクル	ミックスカップの洗浄サイクルの数
Start	ミックスカップを洗浄します

9.5.2.2 グラフィイトファーマス法用オートサンプラーの動作パラメータ

オートサンプラー / 動作パラメータ画面で、以下のパラメータを指定します:

- さまざまなカップでのプローブの浸液深さ
- シリンジのサンプル吸引速度の設定
- オートサンプラーアームの位置調整
- 測定時に量を減らすための自動深さ調整
- オートサンプラーの位置をグラフィイトファーマスに合わせる



をクリックすると、オートサンプラー / 動作パラメータ画面が開きます。

個々のカップ種類について、以下の動作が考慮されます:

オプション	説明
サンプルヴィアル	注入ユニットでのサンプル採取
スペシャルカップ	スペシャルサンプルの採取
ミックスカップ	検体および希釈溶液の注入、および希釈の後のサンプルの採取
グラフィイトチューブ	サンプルまたはスペシャルサンプルをグラフィイトチューブに注入します

動作テーブルの要素

コラム	説明
動作	可能な動作:

カラム	説明
	吸引 サンプルカップ、スペシャルカップ、ミックスカップからのサンプル採取 注入 ミックスカップへのサンプル注入 サンプル注入 / スペシャル注入 サンプルまたはスペシャルサンプルをグラファイトチューブに注入します。
種類	接続しているオートサンプラーモデル
位置	動作を行うカップの位置。
スピードレベル	シリンジのサンプル吸引速度の設定 大きい値にすると速度が速く、小さい値で速度は遅くなります。 推奨値: サンプル吸引: 3 ミックスカップへの注入: 9 グラファイトチューブへの注入: 1 希釈液と液を分ける空気の吸引は、変更できません。

テーブル領域

テーブル領域のコントロールを使って、選択した行のパラメータを変更します。

オプション	説明
速さ	サンプルシリンジのシリンダー速度
深さ	プローブ / 注入チューブの浸液深さ 深さはアームの最高位置からの深さになります。
深さ修正位置	スペシャルカップまたはサンプルカップはこの位置でチェックされます。
設定	オートサンプラーアームをカップ方向に移動します。 チェックを入れていないと、サンプラーアームを動かさずに、設定の変更ができます。

自動深さ補正

自動深さ調整では、サンプルカップおよびスペシャルカップ内の注入チューブの浸液深さがサンプリング後に自動的に新しい量に調整されます。これによって、注入チューブがカップ内の充填レベルに応じて最適に浸液されるため、サンプルが汚染されるリスクが軽減されます。

オプション	説明
自動深さ補正	注入チューブの浸液深さを自動的にカップ内の充填レベルに調整します。
サンプルカップ	サンプル位置、容量、深さ画面を開き、個々のカップのずれているカップジオメトリと量を設定します。これらの設定は、自動深さ調整時に考慮されます。

その他の機能

オプション	説明
ミックスカップの排液	MPE 60/2 および AS-GF のみ このボタンは、サンプル導入画面でサンプルカップがミックスカップとして定義されている場合にアクティブになります。ボタンをクリックすると、これらの位置が解放されて再利用可能になります。

オプション	説明
ファーンを開く / ファーンを閉じる	グラファイトチューブを変更するためにファーンを開いたり閉じたりします
ファーンにサンプラーを合わせる	ソフトウェアを使ってオートサンプラーの位置をグラファイトファーンに合わせる操作を開始します

これについては次のリンクも参照してください：


- オートサンプラーの浸液深さと注入速度の設定 [▶ 131]
- グラファイトファーン法オートサンプラーの自動深さ調整 [▶ 139]
- オートサンプラーの位置をグラファイトファーンに合わせる [▶ 140]

9.5.2.3 グラファイトファーン法オートサンプラーの自動深さ調整

サンプルカップおよびスペシャルカップ内の注入チューブの浸液深さを自動的に調整することで、注入チューブが予期せず汚染されることを防ぐことができます。サンプル量を求めるために、注入チューブがそのために必要な深さだけサンプルカップに浸液されます。合計量が減っていくにつれて、浸液深さが自動的に補正されます。

オートサンプラー / 動作パラメータ画面で設定されたサンプルカップまたはスペシャルカップの浸液深さは、最初はサンプルトレイのすべてのカップに適用されます。

標準カップの容量またはカップサイズの違いを別々に設定できるようになっており、正確に自動深さ補正ができるようになっています。

- ▶  をクリックすると、オートサンプラー / 動作パラメータ画面が開きます。
- ▶ 自動深さ補正 オプションをアクティブにし、サンプルカップ をクリックします。サンプラー位置、容量、深さ 画面が表示されます。
- ▶ サンプルカップまたはスペシャルカップごとに別々の設定を行います。
- ▶ OK で画面を終了します。
 - ✓ すべての設定が保存され、次のシーケンス開始時に考慮されます。

個々のスペシャルカップまたはサンプルカップについて、以下のパラメータを指定できます：

オプション	説明
位置	サンプルトレイ上のカップ位置を調整します 設定は、それぞれのサンプルカップ個別にしなければなりません。
容量	カップから採取済みのサンプル量を表示します カップが一杯でない場合は、足りないサンプル量を入力できません。 値は、各サンプリング後にプログラムによって更新されます。
深さ	すでに採取したサンプル量に対応する追加深さを表示します。この値は、各サンプル採取シーケンス後に再計算されます。合計の浸液深さは、指定した浸液深さ (オートサンプラー 動作パラメータ画面) とここで表示される追加深さの合計です。この値は、求められた量に基づいて、深さ計算の入力として使用されます。
直径	カップの直径を表示します カップ直径が表示されている値と異なる場合は、直径 チェックボックスを選択してこのフィールドに値を入力してください。
容量を削除	すべてのスペシャルカップまたはサンプルカップの容量を「0」にリセットします。


オプション	説明
リセット	すべてのカップの容量と深さを 0 に設定し、直径を最後に保存した値にリセットします。 OK

最大浸液深さ (自動調整)

注入チューブがカップの底にあたって、ねじれるのを防ぐために、許容される最大浸液深さを指定できます。


オプション	説明
サンプルカップ	この最大浸液深さ設定がサンプルカップおよびスペシャルカップに適用されます。
深さ	サンプルカップまたはスペシャルカップの最大浸液深さ
位置	このサンプルトレイ位置は、選択したカップ種類の浸液深さをテストするために使用されます。
設定	深さ で設定されている深さに応じて、注入チューブがカップに浸液されます。浸液深さを視覚的にチェックできます。 重要: 設定 チェックボックスがアクティブになっている場合は、注入チューブが注入チューブに直接浸液されます。オートサンプラー流路が妨げられていないことを確認してください。
保存	このカップ種類の変更済み浸液深さを保存します。

これについては次のリンクも参照してください：

 [グラフィットファーンネス法用オートサンプラーの動作パラメータ \[▶ 137\]](#)

9.5.2.4 オートサンプラーの位置をグラフィットファーンネスに合わせる

ソフトウェアを使って AS-GF の位置をファーンネスに合わせます。オートサンプラーの位置は、注入部に触れずに注入チューブがサンプルをグラフィットチューブに注入できるように調整されます。サンプルの注入深さは同じプロセスで設定されます。

- ▶  をクリックすると、オートサンプラー / 動作パラメータ画面が開きます。
- ▶ [ファーンネスにサンプラーを合わせる](#) をクリックします。
 - ✓ オートサンプラー位置調整指示が始まります。画面の詳細指示に従ってください。

9.5.2.5 グラフィットファーンネス法用オートサンプラーの機能テスト

接続されているオートサンプラーの機能を [オートサンプラー / 機能テスト](#) 画面でテストできます。

 をクリックして [オートサンプラー / 機能テスト](#) 画面を開きます。

トラッカー/回転

オートサンプラーアームがオートサンプラーのさまざまな位置に動きます。

オプション	説明
カップ番号	リストボックスで選択したサンプルカップに移動します
洗浄位置	洗浄カップに移動します
ミックスカップ位置	希釈機能付きオートサンプラーのみ ミックスカップに移動します
チューブ位置	グラフィットファーンネスを起動します

ピペッター

このテストは注入チューブをチェックします。

オプション	説明
速度	注入速度
容量	採取するピペティング量
吸引	この設定量を設定注入速度で採取します。
注入	この量を注入速度で注入します。
バルブをボトル側へ	バルブは希釈液とサンプル間の流れを切り替えます。スイッチが入るとバルブの切り替え音が聞こえます。
リセット	量設定をリセットします。

ピペッターアーム

オートサンプラーアームがトラッカー/回転で選択した位置に下がります。

- ▶ 深さ フィールドで、オートサンプラーアームが下がる深さ (mm) を設定します。

テストプログラム

これらのテストは、事前に設定された運転試験テストプログラムで実行されます。テストで使用するカップは空である必要があります。テストプログラムが終了すると、テスト終了のメッセージが出ます。

選択したテストプログラムは、**Start** をクリックして開始します。

プログラム	説明
テストプログラム 1	<ul style="list-style-type: none"> 位置 1 で吸引 位置 41 で吸引 グラファイトチューブに放出 注入チューブを 2 回洗浄
テストプログラム 2	希釈機能付きオートサンプラーのみ <ul style="list-style-type: none"> 希釈溶液を廃液ボトルから吸引 位置 10 で吸引 ミックスカップに放出 ミックスカップで吸引 グラファイトチューブに放出 注入チューブをパージ ミックスカップから排液 ミックスカップの洗浄と排液
テストプログラム 3	すべての位置で浸液します

エラーテスト

オートサンプラーのセンサーエラーがチェックされます。1 つでもエラーが発生すると、すべての測定は停止します (同時にエラーメッセージが画面に表示されます)。エラーテストは、**テスト** で開始します。テストに成功すると、画面のボタンは緑になります。問題が見つかると、赤になります。

テストの失敗の原因は、下記の内容になります:

エラー	説明
洗浄ボトルバル	MPE 60 のみ 洗浄ボトルの洗浄液が少ない
希釈ボトルバル	MPE 60 のみ 希釈液量が少ない
トラッカー/回転	サンプルアームの回転とトレイの回転の故障。
トレイ種類	サンプルトレイが検出できない。
ピペッター (移動)	注入ユニットエラー
ピペッター (容量)	ピペッターの取り量が大きすぎる。

サンプラー位置調整 **サンプラー位置調整** をクリックすると、オートサンプラーを再調整するための画面が開きます。

これについては次のリンクも参照してください：

 オートサンプラーの調整 [▶ 133]

9.5.2.6 グラファイトファーンエス法用オートサンプラーの位置概要

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るサンプルトレイ位置が表示されます。



をクリックすると、オートサンプラー / 位置 画面が開きます。

その表示の **すべての位置** または **スペシャル位置のみ** を選択できます。

ノート: この画面を表示するには、少なくとも 1 行が現在のメソッドに読み込まれている必要があります。

9.5.3 固体オートサンプラー

SSA 600 固体オートサンプラーは、自動化された固体測定で使用されます。固体サンプラー 画面には以下の機能が含まれています：

- 機能テスト
- 位置をグラファイトファーンエスに合わせる

固体サンプラーは、液体を注入する場合もしない場合も使用できるため、機能テストおよび調整はメソッドで指定したオートサンプラーに基づきます。



をクリックするか、メニューアイテム **メソッド最適化 / 固体サンプラー** で、オートサンプラー 画面を開きます。

サンプルサンプルポートを戻す オートサンプラーの異なる位置またはグラファイトファーンエスにあるすべてのサンプルサンプルポートをサンプルトレイに戻すことができます。

- ▶ オートサンプラー 画面で、**リセット** をクリックします。
 - ✓ サンプルポートがサンプルトレイのそれぞれの場所に戻ります。

オートサンプラーの初期化 オートサンプラーは、常に **クイックスタート** で、AAS で作業を開始する際に初期化されます。オートサンプラーに問題が起きた場合は (例: 機械的な衝撃によって、またはオートサンプラーの停止ボタンを押すことで)、再初期化が必要な場合があります。

- ▶ オートサンプラー 画面で、**初期化** をクリックします。
 - ✓ オートサンプラー、AAS、PC との接続は初期化によって確立されます。

グリッパーの位置をグラファイトファーンエスに合わせる オートサンプラーのグリッパーの位置は、ソフトウェアを使ってファーンエスに合わせる必要があります。そのためには、オートサンプラーに付属の調整ソフトウェアが必要です。

- ▶ オートサンプラー 画面で、**調整** をクリックして画面の指示に従います。
 - ✓ 調整ルーチンが完了すると、オートサンプラーの位置がファーンエスに合わせられています。

調整手順の詳細は、「SSA 600 固体オートサンプラー」の作業指示を参照してください。



注意

オートサンプラーの接続が正しくないことによる装置のショート

AAS 装置をオフにしてから、オートサンプラーを AAS 装置に接続してください。そうしないと、通信エラーまたはインターフェイスの破壊が発生する場合があります。

9.5.3.1 固体サンプラーの機能テスト

接続されているオートサンプラーの機能を **オートサンプラー / 機能テスト** 画面でテストできます。



をクリックして **オートサンプラー / 機能テスト** 画面を開きます。

機能テストでは以下のオプションを利用できます：

オプション	説明
状態/ボタン	オートサンプラーの状態および最後に確認してからオートサンプラーで押されたボタンを色 (緑、オレンジ、赤) で表示します。再度状態を確認する、またはボタン表示を更新するには、 アップ ボタンを押します。
移動先	[位置] リストで位置を選択し、そこに移動します。サンプルポートは採取または注入されません。
トレイ回転	サンプルトレイを選択した位置に回転します
転送	サンプルポートを開始位置 (from) からターゲット位置 (to) に転送します。 ポートを取る がアクティブになっている場合は、グリッパーがサンプルポートを取ります。 ポートを置く がアクティブになっている場合は、グリッパーがサンプルポートをターゲット場所に置きます。
グリッパー	グリッパーを開いたり閉じたりします プローブを下げます
天秤	トレイの設定位置 (位置) のサンプルポートの重量を量ります。 風袋込み重量 サンプルポートを秤量する前に、空天秤を秤量します。#1 は空天秤の重さを示します。#2 はサンプルポートの重さを含みます (該当する場合は、サンプルがポートに乗っている状態)。 内部較正 この検量時に、天秤の内部検量線が再度同定されます。そのためには、まず天秤をリセットし、0 位置を検出し、内部分銅の重量が量られます。0 位置と内部分銅の重量値は、天秤検量グラフを同定するための入力になります。
ループ	オートサンプラーは、2 個のサンプルポート (位置 1 と 2) をサンプルトレイ、天秤、ファーンエス間で転送します。転送数を サイクル フィールドに入力できます。

9.5.3.2 固体オートサンプラーの調整

固体サンプラー / 調整 画面には以下の機能が含まれています：

- 個々の位置への移動をチェックおよび調整する
- オートサンプラーの位置をグラフィットファーンエスに合わせる

- 注入ユニット付きオートサンプラー: マトリックスモディファイアおよび液体スペシャル採取の自動深さ調整
- 液体注入のテスト



をクリックすると、**固体サンプラー / 調整** 画面が開きます。

以下のオプションをこの画面で利用できます:

オプション	説明
調整位置	オートサンプラー上の位置の選択
グループ内のボタン位置調整	グリッパーの位置を設定位置に合わせる
グリッパー-開/グリッパー-閉	グリッパーをソフトウェア制御で開いたり閉じたりします。例: グリッパーの先端を変更するため

液体注入付きオートサンプラーのみ:

オプション	説明
ピペットを下げる	プローブを下げます
グループ自動深さ補正	サンプルカップでの浸液のための自動深さ調整
洗浄	をクリックして確定された設定済み洗浄サイクル数で、注入チューブを洗浄します。
溶液注入テスト	液体注入をチェックします
ディスプレイシリンジの交換	注入シリンジのピストンを交換するために下方向に動かします

個々の位置のモニターと位置調整

- ▶ **調整位置** リストで位置を選択します。
- ▶ **位置調整** グループで **移動元** をクリックします。オートサンプラーが選択した位置に動きます。
- ▶ サンプルポートをこの位置に置き、サンプルポートの位置をチェックします。
- ▶ **位置調整** グループのボタンで位置を補正します。
- ▶ **保存** をクリックして変更した位置を保存します。

グリッパーの位置をグラフィットファーンエスに合わせる

オートサンプラーのグリッパーの位置は、ソフトウェアを使ってファーンエスに合わせる必要があります。そのためには、オートサンプラーに付属の調整ソフトウェアが必要です。

- ▶ **オートサンプラー** 画面で、**調整** をクリックして画面の指示に従います。
 - ✓ 調整ルーチンが完了すると、オートサンプラーの位置がファーンエスに合わせてられています。

調整手順の詳細は、「SSA 600 固体オートサンプラー」の作業指示を参照してください。

システムの洗浄

液体注入付きオートサンプラーのみ:

システムを洗浄するときは、希釈液が供給ボトルから採取されて、注入装置によって流路全体を通過して注入チューブに供給され、洗浄カップに注入されます。

- ▶ 繰り返し数を **洗浄サイクル** 入力フィールドに入力します。
- ▶ をクリックして項目を保存します。
- ▶ **洗浄** プロセスを **洗浄** をクリックして開始します。

注入ユニットの自動深さ補正 一般的に、固体サンプラーの深さは自動的に調整されます。例: 浸潤深さは、追加のサンプルが注入ユニットのカップから注入されると再調整されます。開始量は、メソッドで設定されたもの以外は、この画面で補正できます。設定は、グラフィットファーンエス法向けオートサンプラーの場合と同様に行います。

これについては次のリンクも参照してください：

■ [グラフィットファーンエス法オートサンプラーの自動深さ調整](#) [▶ 139]

10 データ管理

このセクションでは、以下のトピックについて説明します：

- 印刷機能
- メソッド、シーケンス、およびサンプル ID の管理
- 装置固有ファイルの管理
- 濃度と内容の単位の定義
- よく使用されるストック溶液と QC サンプルの管理

10.1 印刷機能の情報

このソフトウェアには、データ出力のために多数の出力フォーマットが用意されています。プリンターに出力する以外に、データを Excel、PDF、HTML、XML またはテキストフォーマットにエクスポートしたり、ビットマップまたは拡大縮小可能なグラフィックスとして保存したりできます。

レポートテンプレートを使用して、測定結果または画面内容を出力できます。レポートテンプレートセットが初期設定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デザイナー「レポート / 印刷モジュール リスト & ラベル (Report-/Print module List & Label)」で個別に調整できます。


10.1.1 結果データの印刷

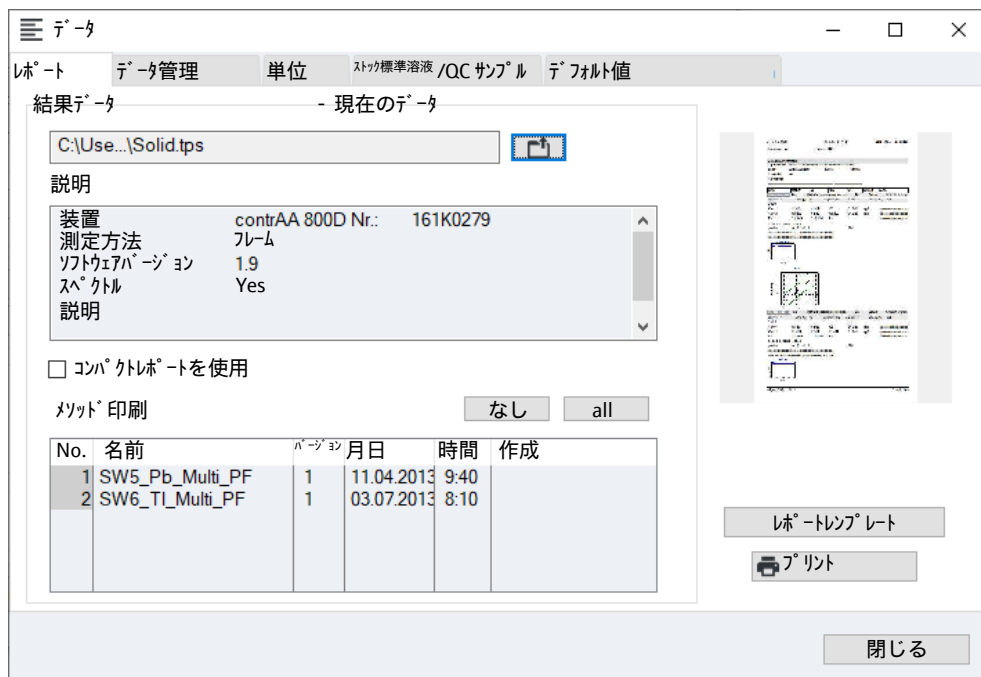
このソフトウェアには、結果データを印刷するためにさまざまな機能が用意されています：


- コンプリートレコードを印刷する。測定のコンプリートレコードには、メソッドパラメータ、個々のサンプル値 (統計実行) による検量線および測定結果が含まれます。メイン画面の現在の結果および保存済みデータのレポートを印刷できます。
- 現在の結果を印刷する。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、コンプリート印刷およびコンパクト印刷を切り替えることができます。
- 概略タブから選択したデータを印刷する。この印刷では、ダイアログ画面で測定波長および結果を選択できます。

コンプリートレコードを印刷する

測定のコンプリートレコードには、メソッドパラメータ、個々のサンプル値 (統計実行) による検量線および測定結果が含まれます。メイン画面の結果または保存済みファイルのコンプリートレコードを印刷できます。

- ▶  をクリックすると、データ/レポート画面が開きます。
または、メニューアイテム **その他 | データまたはファイル | 印刷 | レポート** で画面を開きます。
 - ✓ 現在のファイルの名前、ファイル情報 (説明リスト)、現在の結果ファイルの生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。



- ▶ 保存済みファイルを印刷するには、 をクリックして標準の [開く] 画面で目的のファイルを選択します。
- ▶ 表で、マウスでクリックして、印刷したいメソッドバージョンをすべて選択します。
マウスをクリックして、Shift または Ctrl キーを押したまま複数のメソッドバージョンを選択します。all をクリックすると、すべてのバージョンが選択されます。なし をクリックすると、すべての選択が解除されます。
- ▶ 印刷 をクリックすると、ASpect CS レポート画面が開きます。
- ▶ [出力先 (Output to)] リストで出力フォーマットを選択します。[オプション (Options)] をクリックして、出力フォーマット固有のパラメータを設定します。
- ▶ 選択した出力メディアをこの印刷テンプレートの初期設定にしたい場合は、[設定を恒久的に保存 (Save settings permanently)] チェックボックスを選択します。
- ▶ [開始 (Start)] をクリックすると、印刷が始まります。
✓ 出力が選択したメディアに送られます。

ノート:

印刷の [プレビュー (Preview)] 設定を使用します。[開始 (Start)] をクリックすると、印刷するページがまず印刷プレビューに表示されます。これによって、必要なすべてのデータが出力されていること、または不必要なデータが出力されているかどうかを、それらがプリンターに送られる前にチェックできます。


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。

- ▶ メイン画面で、印刷したい結果タブを選択します。
- ▶ メニューアイテム **ファイル | 印刷 | アクティブウィンドウ** を選択します。
結果レポートフォーム画面が表示されます。
- ▶ 印刷のサイズを選択します。
全出力: シグナルグラフを含む結果
コンパクト: コンパクト概要内の結果
- ▶ 上記の「コンプリートレポートを印刷する」の説明に従って進めます。

ノート: 結果レポート形式画面のこの結果レポート種類を常に使用 チェックボックスをアクティブにすると、次回結果を印刷するときこの画面は表示されなくなり、前回の結果レポート種類が自動的に使用されます。この設定は、オプション/ビ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 **概略** タブを選択します。
- ▶ このタブの下部セクションで、 をクリックするか、メニューアイテム **ファイル | 印刷 | アクティブ ウィンドウ** を選択します。
- ▶ 印刷 / 概略 画面が表示されます。
- ▶ 印刷したいすべての行およびパラメータをマウスでクリックして選択し、**OK** で選択を確定します。
ASpect CS レポート画面が表示されます。
- ▶ 上記の「コンプリートレポートを印刷する」の説明に従って進めます。

これについては次のリンクも参照してください：


 表示のオプション [▶ 159]

10.1.2 その他の測定パラメータおよび設定の印刷

測定の以下のパラメータと設定を印刷できます：

- メソッド
- シーケンス
- 結果データおよび結果概要
- サンプル ID
- QC (品質管理チャート)
- 検量線
- オートサンプラー位置

パラメータの印刷はそれぞれの画面から実行します。

- ▶ ソフトウェアのワークスペースで画面をアクティブにします / 開きます。
- ▶ 画面で  をクリックします。
または、メニューコマンド **ファイル | 印刷 | アクティブ ウィンドウ** を選択します。
✓ ASpect CS レポート画面が開きます。
- ▶ **[出力先 (Output to)]** リストで出力フォーマットを選択します。オプションをクリックして、出力フォーマットのその他のパラメータを設定します。
- ▶ **[開始 (Start)]** をクリックすると、印刷が始まります。

10.1.3 レポートテンプレートの調整

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。

- ▶ メニューアイテム **ファイル | レポートデザイナー** を選択します。
- ▶ 変更したいレポートテンプレートの画面を開きます。
- ▶ メニューアイテム **ファイル | 印刷 | アクティブ ウィンドウ** を選択します。
✓ レポートデザイナーが開きます。
- ▶ 変更を行い、レポートテンプレートを保存します。
✓ テンプレートが保存され、対応する印刷内容にリンクする必要があります (以下の「レポートテンプレートの管理」を参照)。

レポートデザイナーの簡単な説明

レポートテンプレートの個々の構成要素は、オブジェクトと呼ばれます。例えば、表は、ヘッダー、リストの値、およびグラフについてそれぞれ1オブジェクトで構成されます。

さらに、これらのオブジェクトには印刷可能な情報が含まれ、フォント、配置、改行、色などのレイアウト属性が関連付けられています。

レポートデザイナーではさまざまな種類のオブジェクトを利用できます (例: テキストオブジェクト、グラフ、バーコード)。これらは作業領域に自由に配置でき、サイズを変更できます。オブジェクトの種類によっては、さまざまな情報を提示したり、さまざまな特性を割り当てたりできます。


必要なオブジェクトは一般的に、マウスで作業領域に取得してから、関連する内容およびレイアウト特性を割り当てます。また、変数を変数リストから作業領域に「ドラッグアンドドロップ」で取得することもできます。ターゲット位置にオブジェクトがまだない場合は、自動的に作成され、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処理するには、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。オブジェクトを選択したことは強調表示されたフレームでわかります。新しいオブジェクトを作成した場合は、自動的に選択され、サイズと位置について直接変更できます。ダイアログ画面がダブルクリックで開始され、そこで詳細設定を変更できます。

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。

レポート画面

レポート画面は、テンプレートを編集し、それらをソフトウェアの画面に割り当てる場所です。複数のシートをファイルマスクを使って1つの画面に割り当てることができます。そこから、目的のレポートを印刷開始時に選択します。提供したフォーマットテンプレートの名前を、ワイルドカードで入力するなどの方法で選択する必要があります。


- ▶  をクリックすると、データ/レポート画面が開きます。
 - ▶ レポートテンプレートをクリックすると、同じ名前の画面が開きます。
- 以下の画面では、レポートテンプレートを利用できるはずで:

名前	説明
結果	メイン画面の結果 タブの内容
外部出力	
結果 (概略)	
検量線	検量線 画面: 測定の検量線
メソッド	メソッド 画面: メソッドパラメータ
メソッド / 結果	すべてのレポート
サンプルID	サンプルID / サンプル情報 画面: サンプル情報データ
オートサンプラー位置	オートサンプラー / 位置 画面: オートサンプラーの割り当て
QC チャート	QC: 品質管理チャートデータ
QC サンプル情報	オートサンプラー / QC サンプル情報 画面: QC サンプルの情報データ
SSA600テンプレート	メイン画面の 固体 タブの内容
シーケンス	シーケンス 画面: シーケンス順序

変更割り当て

新規 / 編集済みレポートテンプレートは、対応する印刷機能に再度割り当てる必要があります。

- ▶ リストで、変更したいレポートテンプレートの画面を選択します。

- ▶ **変更** をクリックすると、ファイルを割り当てるためのダイアログボックスが開きます。
- ▶ レポートテンプレートを1つのみ割り当てる: **レポートファイルの使用 (*.lst)** オプションをアクティブにし、 をクリックしてテンプレートファイルを選択します。
- ▶ 印刷時に同時に複数のテンプレートを提供する: ファイル選択を許可するオプションをアクティブにし、ワイルドカードを使って入力フィールドにマスク名を入力します。
- ▶ **OK** で選択を確定します。
 - ✓ 新しいレポートテンプレートが **レポート** 画面に表示されます。

レポートテンプレートの編集 ここでレポートテンプレートを選択してレポートデザイナーで編集できます。

- ▶ レポートテンプレートをリストでマウスクリックで選択します。
- ▶ **編集** をクリックすると、レポートデザイナー画面が開きます。
 - ✓ レポートテンプレートを編集できます。レポートデザイナーの詳細は、インストール CD の「Designer.pdf」ファイルを参照してください。


初期設定の復元 プログラムインストールに応じて設定を復元できます。

- ▶ **初期設定** をクリックします。

10.2 すべてのファイル種類の管理

以下のデータがソフトウェアで生成されます:

- メソッド
- シーケンス
- 結果ファイル
- 波長ファイル
- 補正モデル
- 補正ピーク
- レポートテンプレート
- ワークシート

上記のデータは **データ/データ管理** 画面で整理されています。この画面は、 をクリックするか、メニューアイテム **その他 | データ** を選択すると表示されます。

10.2.1 メソッドとシーケンスの管理

メソッドとシーケンスはデータベースに別々に保存されます。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。このセクションの説明では、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。

データベース画面内の要素 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には、対応する要素のデータベース画面が開きます。

メソッドを保存

名前 Cat.

名前	バージョン	月日	時間	Cat.	オペレーター
Ground Cd Zn Cu	1	27.07.2021	14:39	KK	
SW-Test_Scraper		08.01.2021	8:34	KK	admin

並べ替え
 名前 / バージョン 昇順 降順

現在のバージョンのみ
 検量線データの保存

説明

OK キャンセル

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前の項目または表示。
Cat.	データベースでメソッド / シーケンスを検索するための追加属性カテゴリー名として、3桁までを入力できます。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レコードを表示したい場合は、Cat. フィールドの項目を消去します。
レコードのリスト	名前、バージョン、日付、時間、カテゴリー、オペレータを含む保存済みレコード
並べ替え	さまざまな属性に基づいてリストを並べ替えます 選択したオプションに応じて、昇順または降順で並べ替えることができます。
説明	追加ノートを入力または表示します。例: レコードの使用について。 定義済みノートをデータ/デフォルト値画面で作成できます。
現在のバージョンのみ	複数バージョンのメソッド / シーケンスを同じ名前で作成した場合は、バージョン番号が最も高いメソッド / シーケンスのみが表示されます。


このソフトウェアでは、同じ名前のメソッド / シーケンスは上書きされませんが、別のバージョンが作成されてバージョン番号が1つ増分されます。

データベースにも、個々のメソッドまたはシーケンスを対応するデータベースからインポート、エクスポート、削除する機能が用意されています。

ノート

データベース画面で複数のレコードを選択するには、Ctrl または Shift キーを押したまま選択します。

データ管理を開く

- ▶  をクリックすると、データ/データ管理画面が開きます。
- ▶ 種類 リストで編集したいレコード種類を選択します。メソッドまたはシーケンス。

データレコードのエクスポート

エクスポート機能を使って、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します。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は、下記の拡張子が付きます: メソッドデータレコード - 「.MET」、シーケンスデータレコード - 「.seq」。

- ▶ **エクスポート** をクリックすると、データベース画面が開きます。
- ▶ レコードをマウスクリックで選択してから、**エクスポート** をクリックします。
- ▶ 標準の [名前を付けて保存 (Save as)] 画面で、ファイル名を入力するか、**保存** をクリックします。
エクスポートしたファイルを含むデータベース画面が表示されます。
- ▶ **閉じる** でデータベース画面を終了します。

データレコードのインポート

インポート機能を使って、データレコードを他の装置 / コンピューターからデータベースに読み込むことができます。インポートファイルに複数のレコードを含めて、そこから読み込みたいレコードを選択できるようにすることもできます。

- ▶ **インポート** をクリックすると、**インポートするファイルを選択 (Select file to import)** 画面が開きます。
- ▶ インポートするファイルを選択して [開く (Open)] をクリックします。
ファイルに含まれるデータレコードの名前、作成日、カテゴリーが表示されたデータベース画面が開きます。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、インポートしたいレコードを選択して **インポート** をクリックします。
レコードがデータベースにインポートされます。同じ名前のメソッド / シーケンスがすでに存在する場合は、新しいバージョンのレコードが作成されます。データベース画面には、現在のバージョンの利用可能なデータレコードが表示されます。
- ▶ **閉じる** でデータベース画面を終了します。
✓ インポートしたレコードはこのソフトウェアで使用できます。

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** をクリックすると、データベース画面が開きます。
- ▶ 削除したい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 減分されます。


ファイルメニューからのレコードの削除

データベース画面を開いて、メニューアイテム **ファイル | 削除 | メソッド** または **ファイル | 削除 | サンプル** を使ってレコードを削除することもできます。それから、上で説明した手順に従ってください。

10.2.2 結果データの管理

結果データは、測定中に常にデータベースに保存されます。新しいデータベースファイルがシーケンスが始まるたびに作成されますが、測定をすでに存在する既存のファイルに追加保存することもできます。結果データは拡張子 TPS で保存されます。

さらに、TPS ファイルと同じ名前の拡張子が SPK のピークファイルが、測定で生成されます。このファイルには測定されたピークが含まれ、**ピーク** 画面でピークを表示および評価するときにこのファイルが必要になります。測定および評価に必要な他のすべての情報は、TPS ファイルに保存されます。測定が既存の TPS ファイルに追加保存される場合は、ピークも対応する SPK ファイルに追加されます。データで管理する際は、TPS ファイルが SPK ファイルと同時にインポート、コピー、または削除されます。

- ▶  をクリックすると、データ/データ管理画面が開きます。
- ▶ 種類 リストから 結果 オプションを選択します。

結果データのインポート

結果データをソフトウェアにインポートできます。この処理では、データは、ソフトウェアのファイル構造内のアクティブな原子化法の結果結果フォルダーに置かれます。

- ▶ クイックスタート画面で、データをインポートする原子化法を選択します。
- ▶ データ/データ画面で、インポートをクリックします。
結果ファイルの選択画面が表示されます。
- ▶ TPS ファイルをマウスクリックで選択してから、開く をクリックします。
- ▶ 結果を保存したいサブフォルダーを選択して OK をクリックします。
✓ TPS ファイルと関連付けられた SPK ファイル (該当する場合) が、アクティブな原子化法の結果フォルダーにコピーされます。

結果データのエクスポート

1つ以上の結果ファイルを別のフォルダーにコピーには、このコマンドを使用します。

- ▶ データ/データ画面で、エクスポートをクリックします。
既存の TPS ファイルの概要が含まれる エクスポート画面が表示されます。ファイルが、名前、サイズ、最終変更日時と一緒に一覧表示されます。
- ▶ マウスでクリックして TPS ファイルを選択します。
- ▶ エクスポートを使用して [フォルダーを検索 (Find folder)] 画面を開きます。
- ▶ 宛先フォルダーを選択し、OK をクリックして確定します。
✓ TPS ファイルと SPK ファイルが宛先フォルダーにコピーされます。

結果ファイルの削除

結果データを恒久的に削除できます。

- ▶ データ/データ画面で、削除をクリックします。
既存の結果データベースの概要が含まれる エクスポート画面が表示されます。
- ▶ マウスでクリックして TPS ファイルを選択します。
- ▶ 削除をクリックしてから、OK をクリックしてファイル削除の後続確認メッセージを確定します。
✓ 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

個々のサンプルをデータベース内の既知のサンプル名で検索できます。

- ▶ データ/データ画面で、[サンプルの検索] をクリックします。
または、メニューアイテム その他 | サンプルの検索 を選択します。
この サンプルの検索画面が表示されます。
- ▶ サンプル名を サンプル種類 フィールドに入力します。
入力した文字列が名前の一部である場合は、部分検索 チェックボックスを選択します。
- ▶ 月日 チェックボックスをアクティブにして測定時間を絞り込みます。
- ▶ Start をクリックします。
入力したサンプル名のサンプルを含むすべての結果が、表に表示されます。
- ▶ 表示された結果ファイルのいずれかを開くには、リストでファイルを選択して開く 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 波長ファイルのエクスポート

測定波長および保存済みピークを含む波長ファイルは、装置固有です。分析装置を制御するために使用するコンピューターに保存されます。波長ファイルを別のコンピューターで使用するには、これらの手順に従ってください:

- ▶  をクリックすると、**データ/データ管理** 画面が開きます。
- ▶ **種類** リストで、**波長ファイル** オプションを選択して **エクスポート** をクリックします。
- ▶ ファイルを保存したいフォルダーを選択して **OK** をクリックします。
 - ✓ ファイルが選択したフォルダーに名前「lines.dat」で保存されます。

10.2.4 補正モデルの管理

補正モデルは、マトリックス成分で検体ピークオーバーレイをバックグラウンド補正するために使用します。ある装置の補正モデルを別の装置に転送できます。補正モデルファイルの拡張子は MOD です。

- ▶  をクリックすると、**データ/データ管理** 画面が開きます。
- ▶ **種類** リストから **補正モデル** 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、補正モデルをソフトウェアにインポートします。

- ▶ **インポート** をクリックします。
- ▶ 補正モデル MOD を選択して **開く** をクリックします。
インポート/補正モデル画面が表示されます。
- ▶ **インポート** をクリックします。
 - ✓ 補正モデルがソフトウェアのデータベースに転送されます。

補正モデルのエクスポート

このコマンドで、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。

- ▶ **エクスポートスペクトラ** をクリックします。
- ▶ **エクスポート** 画面で、マウスで **補正モデル** 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 (Save as)] 画面で、名前と保存パスを入力して [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。

補正モデルの削除

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。




注意

補正モデルを削除することで、メソッドを使用不可にできます。その補正モデルがメソッド内で使用されるかどうかはチェックされません。

- ▶ **削除** をクリックします。
- ▶ **補正モデル** 画面で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。


10.2.5 補正ピークの削除

必要でなくなった補正ピークをデータベースから削除できます。

- ▶  をクリックすると、データ/データ管理画面が開きます。
- ▶ 種類リストで、補正ピークオプションを選択して削除をクリックします。
- ▶ 補正ピークデータベース画面で、ピークを選択して削除をクリックします。
 - ✓ そのピークが補正モデル内で使用されるかどうかチェックされます。該当しない場合は、その補正ピークが削除されます。

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用テンプレートは、データ管理でソフトウェアにインポートする必要があります。


- ▶  をクリックすると、データ/データ管理画面が開きます。
- ▶ 種類リストで、レポートオプションを選択して [インポート] をクリックします。
- ▶ 開く画面で、レポートファイル LST を選択して開くをクリックします。
 - ✓ レポートテンプレートがソフトウェアにインポートされます。このレポートテンプレートをデータ/レポート画面で印刷内容に割り当ててください。

これについては次のリンクも参照してください：

- レポートテンプレートの調整 [▶ 148]

10.2.7 ワークシートの管理

ワークシートはデータ/データ管理画面で管理します。ワークシートをソフトウェアに対してインポート/エクスポートできます。オプションで、保存済みメソッドとシーケンスを指定できます。必要でなくなったワークシートは削除できます。ワークシートの拡張子は WST です。

- ▶  をクリックすると、データ/データ管理画面が開きます。
- ▶ 種類リストからワークシートオプションを選択します。

ワークシートのインポート

- ▶ インポートをクリックします。
- ▶ ワークシートをインポート画面で、インポートをクリックします。メソッドとシーケンスを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アクティブにします。
- ▶ ワークシートをインポート画面で、ワークシートを選択して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。

ワークシートのエクスポート


- ▶ エクスポートをクリックします。
- ▶ ワークシートをエクスポート画面で、マウスクリックでワークシートを選択します。メソッドとシーケンスを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アクティブにします。
- ▶ エクスポートをクリックします。
- ▶ [名前を付けて保存 (Save as)] 画面で、フォルダーおよびエクスポートファイルの名前を入力して [保存 (Save)] をクリックします。
 - ✓ ワークシートがエクスポートされます。

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て **削除** をクリックします。
✓ ワークシートが削除されます。

10.3 単位の管理

データ/単位画面で、プログラムで利用できる単位を管理できます。3つの優先バージョン (溶液の場合: mg/L、 μ g/L、ng/L。固体サンプルの場合: mg/kg、 μ g/kg、ng/kg) が利用できます。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。

- ▶  をクリックすると、データ/単位画面が開きます。

この表には、利用可能な単位の概要が含まれています。


表カラム	説明
単位	単位名 (最大 10 文字)
コメント	単位の説明 (最大 20 文字)
ファクター	ファクター 1 は 1 μ g/L または μ g/kg に相当します。ファクター 1000 は 1 ng/L または ng/kg に相当します ファクターは、自分で入力した単位の場合に入力する必要があります:
種類	固体: 固体サンプルに関連する単位 溶液: 液体サンプルに関連する単位

独自の項目を管理するには、これらのボタンを使用します。

ボタン	説明
追加	リストの最後に新しい行を挿入します
挿入	リストで選択した行の上に行を挿入します
削除	カスタム単位のみを削除します。優先単位は削除できません。
保存	変更および項目を保存します

10.4 ストックおよび QC サンプル用データベースの管理

よく使用されるストック標準および QC サンプルを含むデータベースは、データ/ストック標準溶液/QC サンプル画面で管理します。データベースで項目を追加したり、削除したり、編集したりできます。ストック標準と QC サンプルはメソッド開発で使用できます。

- ▶  をクリックすると、データ/ストック標準溶液/QC サンプル画面が開きます。
- ▶ オプションストック標準 または QC サンプルを選択します。
- ▶ この表内のストック標準のパラメータを入力または編集します:

カラム	説明
名前	ストック標準/QC サンプルの名前 最大 20 文字
単位	標準/QC サンプルの単位

カラム	説明
元素と濃度	元素濃度は、「元素記号 濃度」フォーマットで、選択した単位で入力します。例: Fe 0.5、Cu 10、Co 0.005。 または、濃度をクリックして同じ名前の画面を開き、そこで濃度を各元素に割り当てます。

項目を管理するには、これらのボタンを使用します:

ボタン	説明
追加	リストの最後に新しい行を挿入します
挿入	リストで選択した行の上に行を挿入します
削除	選択した行を削除します
保存	変更および項目を保存します
濃度	選択した行の元素および濃度の入力画面を開きます。


10.5 事前定義の備考の作成

以下の操作についてユーザー定義の備考を定義できます:

- 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

ユーザー定義の備考は、対応する画面の備考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。

よく使用される備考はあらかじめソフトウェアに保存されています。備考は作成、編集、削除できます。

- ▶  をクリックすると、データ/デフォルト値画面が開きます。
- ▶ カテゴリを選択 リストで処理を選択します。
- ▶ 編集テンプレートをクリックすると、備考のリストが開きます。
- ▶ 新しい備考を新規をクリックして作成します。
新しい備考をデフォルト値の入力画面で入力します。
名前フィールド: この備考はこの名前で選択できます。
テキストフィールド: 実際の備考を入力します
- ▶ 備考は、変更をクリックして編集したり、削除をクリックして選択リストから削除したりできます。

10.6 Windows クリップボードの使用

クリップボードに結果をコピーする

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して、それらの他の Windows アプリケーションからアクセス可能にすることができます。このためのコマンドは編集メニューにあります。

編集	
Ctrl + 表示列のみ	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。

編集	
行タイトル	アクティブになっている場合は (チェックマーク)、コピーアクションでカラムヘッダーが取り込まれます。

- ▶ 結果リストのテーブルでサンプルを選択します。
Ctrl または Shift キーを押したまま、それぞれの行でマウスクリックでサンプルを選択します。
すべてのサンプル行をメニューアイテム **編集 | すべて選択** で選択します。
- ▶ タイトル行もコピーする場合は、メニューアイテム **編集 | 行タイトル** をアクティブにします。
- ▶ 対応するメニューアイテムを選択すると、クリップボードに結果がコピーされます。
✓ 結果をアプリケーション (スプレッドシートプログラムなど) にペーストできます。

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

グラフ画面、検量線のグラフ、吸光度シグナル、炎光度シグナルは、クリップボードにスクリーンショットとしてコピーできます。

- ▶ グラフを右クリックします。
2つのコピーコマンドを含むサブメニューが開きます。
- ▶ 目的のオブジェクトをコピーするコピーコマンド (グラフのみをコピーまたは表示されている画面全体をコピー) を選択します。
✓ 選択したオブジェクトが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できます。

11 オプション – ASpect CS のカスタマイズ

以下の設定は、オプション画面で構成し、ソフトウェアのすべての操作で有効です:

- 表示のオプション
- ファイルの保存パス
- データエクスポートのパラメータ
- 測定シーケンス全般に適用される設定

これらの設定は、ソフトウェアを終了および再起動した後も保持されます。

メニューアイテム **その他** | オプションでオプション画面を開きます。

設定のリセット

初期設定 ボタンで、すべてのオプションおよび保存済み画面位置が初期設定値にリセットされます。

11.1 表示のオプション

オプション/ビュー画面で、ワークスペースで表示される機能を定義できます。

メニューアイテム **その他** | オプションでオプション/ビュー画面を開きます。

画面 オプション/内の要素 ビュー

オプション	説明
ツールバーを表示	測定ルーチンのボタンが含まれるツールバーを表示します。
アイコンを表示	ツールバー位置にすばやくアクセスして選択するための大きなアイコンが含まれるツールバーを表示します。 ツールバーの位置は、マウスでドラッグして変更することもできます。設定は次のプログラム起動まで保存されません。
イベントウィンドウをかくす	イベント画面を表示しません (遅延時間など)。これの代わりに、メッセージがメイン画面のステータスバーに表示されます。
検量線テーブル元素縦列	標準を定義するための検量線テーブルを入れ替えます。個々の検量線標準がカラムに配置され、選択した測定波長が行に配置されます。
自動的に結果ウィンドウを隠す	画面が重なるのを回避するために、サブ画面 (例: メット画面) が開いているときに結果画面が隠されます。サブ画面を閉じた後に、結果画面が再度表示されます。
ランプ寿命を見る (分光器)	XBO ランプの動作時間が分光器画面に表示されます (ランプ電力がバージョン 4 から供給されている場合のみ)。プログラム起動時に、保証されているランプ動作時間 (1000 時間) を超えている場合は、メッセージが表示されます。
推奨されるフレーム種類に関する説明を表示 (Display note on recommended flame type)	フレーム法: メソッドパラメータチェック時に、クックブックで推奨されるフレーム種類が元素の測定で使用されているかどうかチェックされます。フレーム種類が異なる場合にメッセージが表示されます。
ヒントの表示	小さなヘルプテキスト (ツールチップ) がボタンの上、およびテーブルのカラムタイトルの上に表示されます。
シグナルおよびバックグラウンド	グラフ表示のシグナル色を選択します。... をクリックすると、色選択画面が開きます。
解析モード	ピーク表示をアクティブにします。このオプションがアクティブ解除されている場合は、ピークデータを表示および編集する機能にアクセスできません。

オプション	説明
スクリーンセーバー許可	入力一時停止中に Windows スクリーンセーバーをオンにします。
メニューから印刷時、結果レポートの種類(コパ外かコンパクト)を確認	メニューアイテム ファイル 印刷 アクティブウィンドウ で結果画面を印刷するときに、コンパクトまたはコンパクトレポートを切り替えることができます。このボタンをクリックすると、この結果レポート種類を常に使用 選択がリセットされ、レポート種類を再度選択できます。

11.2 保存パス

インストール時に、データの保存パスを定義します。それらは **オプション/フォルダ** 画面に表示され、ここで一部を編集できます。

メニューアイテム **その他 | オプション** で **オプション/フォルダ** 画面を開きます。

オプション/フォルダ 画面内の機能

フォルダー	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	オペレーターデータのディレクトリ 作業ディレクトリにはサブフォルダーが含まれています。インストール時またはオプションのユーザー管理で定義します。
一時アプリケーション	一時アプリケーションファイルのディレクトリ。
サンプル情報/レポート	サンプル情報ファイルを開いて保存するための初期設定パス このパスは変更できます。新しいフォルダーを選択するには ... をクリックします。 サンプル情報ファイルを開いて保存するときに、異なるパスを選択することもできます。
サンプル情報	メソッドとシーケンスデータをエクスポートおよびインポートし、結果データを CSV ファイルとしてエクスポートするための初期設定パス このパスは変更できます。新しいフォルダーを選択するには ... をクリックします。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	結果データのディレクトリ この初期設定ディレクトリには、結果を保存するためのサブフォルダーを含めることができます。これらのフォルダーは、測定の開始時にファイルを保存するために利用できます。
アプリケーションデータ	内部プログラムデータのディレクトリ

追加 ボタンを押すと、結果フォルダーの下に、結果を保存するための新しいサブフォルダーが作成されます。さらに、ここで空のフォルダーを削除したり、名称変更したりできます。

11.3 ASCII/CSV エクスポートのオプション

オプション/ASCII/CSV 結果レポート 画面で、結果データの ASCII エクスポートのパラメータを定義できます。このパラメータは、自動連続データエクスポートとマニュアルデータエクスポートに適用されます。

メニューアイテム **その他 | オプション** で **オプション/ASCII/CSV 結果レポート** 画面を開きます。

オプション / ASCII/CSV エクスポート画面内の機能

オプション	説明
小数点	10 進数の区切り文字を定義します。
リスト区切り	リストの個々の元素を区切る文字を定義します。
結果エクスポート	all 結果テーブル全体をエクスポートします。 選択したフィールドのみ カスタム結果エクスポート。... をクリックして、マウスを使ってフィールド選択画面でエクスポートしたいすべてのフィールド / カラムを選択します。

メール通知

E-mail 通知 ボタンを押すと、メールインターフェイスの構成画面が開きます。これによって、測定実行が終了したときまたは測定実行がエラーで中止されたときに、メールが自動的に送信されます。

オプション	説明
サーバ - (SMTP)	SMTP サーバーの名前またはアドレス
ポート	SMTP に使用されるポート番号 (通常はポート 465 または 587)。
E-Mail アドレス	完全なメールアドレス
アカウント名	SMTP サーバーにログオンするためのユーザー名
パスワード	SMTP サーバーにログオンするためのパスワード。パスワードは暗号化された形式で保存されます。
受信者アドレス	3 つまでのメールアドレスを入力できます。
メール通知を起動	アクティブになっている場合は、測定実行が終了した後またはエラーが発生した場合にのみ、入力したメール受取人にメールが必ず送信されます。エラーによって途中で中止された場合は、中止の原因になったエラーがこの通知で示されます。
テスト e-mail の送信	テストメールが入力したメール受取人に送信されます。

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、測定実行時に結果データの自動エクスポートをアクティブにできます。エクスポートファイルは、プロセスや結果画面に新しいデータが 1 行追加されるごとにアップデートされます。結果データは既存のファイルに追加されていきます。

詳細な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。

メニューアイテム **その他** | オプションでオプション / ASCII/CSV エクスポート画面を開きます。

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 チェックボックスによって、エクスポート機能がアクティブになります。データは、エクスポート / インポートの初期設定パス (オプション / フォルダ画面) に保存されます。

以下のファイル名を選択できます:

オプション	説明
"メソッド名".csv	ファイル名は、メソッド名と同じになります。データは、エクスポート / インポートの初期設定パス (オプション / フォルダ画面) に保存されます。

オプション	説明
"結果ファイル名".csv	ファイル名は結果ファイルと同じ名前になります。データは、エクスポート / インポートの初期設定パス (オプション / フォルダ 画面) に保存されます。
その他	ファイル名や保存パスを任意に設定できます。データは、新しい名前が割り当てられるか、別の名前付けオプションが選択されるまで、常にこのファイルに書き込まれます。 ... アイコンをクリックして、[名前を付けて保存 (Save as)] 画面で宛先フォルダーとファイル名を入力します。
個々のサンプルにファイルを作成(結果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とサンプル名が付加されます。許可されない文字は下線に置き換えられます (Test method-001 QC 1 mg_L.csv)。

ピークエクスポート

ピークエクスポートの場合は、**ピークの連続エクスポート(CSV)** オプションをアクティブにして保存パスを選択します。

ピークは、特定のエクスポートパスに CSVファイルとして追加でエクスポートされます。ファイル名は、スキーマ「ListRow-SampleName-LineName-RepeatMeasurement」に基づいて生成されます (例: 0007-Sample-A1309-02.csv)。

11.5 測定シーケンスのオプション

オプション / 測定シーケンス 画面で、測定手順で一般的に有効な設定を定義します。
メニューアイテム **その他** | オプション でオプション / 測定シーケンス 画面を開きます。

以下のエラー後にシーケンスを中止する

測定は以下のエラーについて監視され、これらのエラーが発生した場合はキャンセルできます:

オプション	説明
波長構成システムのオセット	波長構成 (補正なし) に問題がある場合は停止します。
無効な検量線機能	検量線関数を計算できない場合は停止します。

追加のエラーチェック

オプション	説明
検量線ポイントのモニタリング	検量線ポイントのモニタリングをテストします。モニタリングテストは、検量線の濃度と測定値の関係のモニターで、正しく作成できるかを判定します。

表示画面

測定プロセス時に、シグナルカーブと測定の詳細情報が含まれる表示画面を表示できます。

オプション	説明
シグナル表示	時間依存測定シグナルカーブ
スペクトル表示	記録されたピーク範囲
棒グラフ	測定された吸光度または発光度値の棒グラフ
最大シグナル値のスケール	シグナルカーブを表示する測定値軸の最大値を設定します。 この設定は、ビュー スケール (Abs) メニュー機能を使って行うこともできます。
レポートウィンドウ	使用された原子化部に関する状態情報

オプション	説明
検量線グラフとサンプル濃度	現在の検量線および再検量線 サンプル測定後に吸光度や炎光度から赤い補助線を引いて濃度を表示します。標準添加法の場合は、変換した検量線を表示します。
ファーンカメラ	ファーンカメラの図とグラフィイトチューブ画像 サンプル注入や乾燥の様子を直接監視することができます。シャッターが開く温度に達すると、ファーンカメラがオフになります。

その他

オプション	説明
常にピークを保存	ピークデータが、メソッドパラメータ (メソッド / アウトプット画面) に関係なく測定時に常に保存されます。
結果ファイル名に日/時を加える	測定開始時に、現在の日付と PC 時間が結果ファイルの名前に自動的に付加されます。
再計算中もエクスポートを続ける	再処理後、結果が自動的にエクスポートされます。
再計算時に時間は更新しません	結果の再処理後、元の測定時間が保持されます。
冷却中に試料をとる	グラフィイトチューブの冷却中に、オートサンプラーで次のサンプルを採取します。このオプションは、シーケンス測定を加速するために使用できます。
冷却の終了後に音を鳴らす	グラフィイトチューブの冷却が終了すると、音を鳴らします。
トランス過熱後停止	有効: グラフィイトファーン法用トランスが過熱した場合に、測定プログラムが停止し、再開しません。 無効: トランスが過熱した場合に、プログラムが中断されます。トランスの温度が下がると、プログラムは再開します。
毎測定後に波長を調整	各測定の前に波長がリセットされます。これによって再現性が向上します (初期設定: 有効)。
ファーンを開けた後はフォームが必要です	測定シーケンス開始時に、ファーンを開いた後または装置をオンにした後に、フォームが実行されていないことを示すメッセージが表示されます。
以下の波長に迷光データを更新	シーケンス開始時に、選択した波長の下の波長の分散光レベルが 1 日に 1 回更新されます。 次の測定開始時に分散光値をマニュアルで記録することもできます。そのためには、[値のリセット] ボタンをクリックしてください。
フレーム消火時にミッシングチャンバーを洗浄	フレームが消火したら、チャンバーが洗浄されます。
チューブと乾燥検出を有効にしてください (再起動後)	ファーンカメラによって、チューブの種類および乾燥段階の完了が検出されます。このオプションをアクティブにするには、ソフトウェアを再起動する必要があります。

11.6 光学パージのオプション

contrAA 800 のみ

オプション / 分光器パージ画面で、contrAA 800 の分光器をパージするためのパラメータを定義します。光学パージによって分光器が汚染から保護されます。アルゴンガスでパージすることで、短波紫外線領域での検出限界も向上します。

メニューアイテム その他 | オプションで オプション / 分光器パージ画面を開きます。

オプション	説明
分光器パージ	off: 光学パージなし。 Air: 空気によるパージ アルゴン: アルゴンガスによるパージ
アルゴン安定時間	分光器はアルゴンガスでパージされます。この時間は、アルゴンパージを開始してから、分光器内の空気がアルゴンガスに置き換わり、安定した光学的状態が確立されるまで必要な時間です。
アルゴンドライブアウトタイム	分光器は空気でパージされます。この時間は、アルゴンガスを分光器から排出するために必要な時間です。
ソフトウェアスタートアップで現在の分光器のパージを設定します	光学パージは、装置をオンにするときに必ず開始されます。

光学パージがオンになると、光学パージとパージが安定するまでの残り時間を示すメッセージがメイン画面のツールバーに表示されます。測定ルーチン(シーケンス)が現在の安定時間に開始された場合は、パージがまだ実行中であることを示すメッセージが表示されます。

11.7 検量線およびブランク補正のオプション

検量線

このグループでは、検量線の基本設定を構成します。すべてのチェックボックスは初期設定で無効になっています。

オプション	説明
R2(adj.)の代わりにRを表示	有効になっている場合は、相関係数が表示されます。初期設定では、同定の補正済み(調整済み)係数が提供されます。
信頼区間の代わりに予測を示します	有効になっている場合は、検量線の予測区間が表示されます。信頼区間は初期設定で提供されます。
"オート"は有理関数の代わりに2次と比較します	「オート」は、検量線関数の自動選択を示します。有効になっている場合は、2次関数が比較に使用されます。初期設定は断続有理関数です。
0でなく平均濃度の傾きを計算する	有効になっている場合は、検量線グラフの傾きは、検量線範囲の平均濃度のために計算されます。初期設定では、傾きは0濃度のために計算されます。



注意

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の互換性のために有効にする必要があります。

ブランク補正

ブランク補正のために、2つの異なる計算メソッドを切り替えることができます: Conc.1 ベースまたは Conc.2 ベース。

Conc.2 ベース計算では、ブランクのオリジナル濃度 (Conc2_{BV}) が、ブランクのサンプル ID に基づいて最初に計算されます。Conc2_{BV} は、サンプルの Conc.2 を同定する際に考慮されます。

Conc.1 ベース計算では、サンプルから直接同定されたブランク濃度 (Conc1_{blank}) がサンプル濃度を計算するために使用されます。このメソッドは、サンプル ID データ (希釈など) がブランク溶液の濃度にあまり影響しないため、サンプル ID データがブランク用に入力されない場合に、使用できます。

事前希釈付き液体オリジナルサンプルの計算例:

- 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: $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} * \text{DF}_{\text{Sample}}) - \text{Conc2}_{\text{Blank}}$

$\text{Conc1}_{\text{Sample}}$	サンプル ID の情報を考慮しないサンプルの濃度
$\text{Conc2}_{\text{Sample}}$	サンプルのオリジナル濃度
$\text{Conc1}_{\text{Blank}}$	サンプル ID の情報を考慮しないブランクの濃度
$\text{Conc2}_{\text{Blank}}$	オリジナルブランク
$\text{DF}_{\text{Sample}}$	サンプルの希釈倍率

ブランク補正の初期設定は、Conc.2 ベースメソッドです。ブランク値のサンプル ID を考慮しない短い Conc.1 ベースに戻りたい場合は、**濃度1に基づくブランク補正** オプションをアクティブにします。

検出 / 定量の限界

検出 / 定量の限界のために、繰り返し測定 of 倍率と数を編集できます。計算された検出 / 定量限界は、**検量線** 画面に表示されます。この設定を既存の結果に適用する場合は、結果を再処理する必要があります。繰り返し測定 of 倍率と数は、**検量線** 画面、および**検量線**および**結果 / ブランク測定**の印刷に出力されます。

検出 / 定量の限界を編集するには、**LOD / LOQ** をクリックします。以下の初期設定が提供されます:

パラメータ	値
ファクタ- LOD	3
ファクタ- LOQ	9
繰り返し	11

12 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 CS のオプション FDA 21 CFR パート 11 コンプライアンスモジュールには、FDA Requirements for Electronic Records and Electronic Signatures (21 CFR Part 11) に基づく以下の関数が含まれています:

- 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

ユーザー管理は、1 管理者レベルおよび 4 ユーザーレベルに対応します。以下の機能には、管理者権限を持つユーザーがアクセスできます:

- 柔軟なシステム構成 (パスワードおよびログインポリシー、監査証跡、署名。データディレクトリ)
- 段階状のユーザー権限を持つユーザーレベルのユーザーの作成
- パスワードの割り当て
- メソッド、シーケンス、および結果ごとの作業ディレクトリをユーザーに割り当て
- 生成された監査証跡 (イベントレポート) を表示およびエクスポート

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 CS の **システム** メニューアイテムがアクティブになっています。ここから、ユーザー管理の機能にアクセスできます。

ユーザーデータへの変更は、対応する画面を終了するときに、暗号化されたデータベースに恒久的に保存されます。

ノート: 安全要件を満たすために、オペレーティングシステムとして Microsoft Windows を適切な構成オプションで使用する必要があります。これは、アクセス権と他の設定動作の適用は、承認済みシステム管理者が実行する必要がある、ファイルアクセス権およびその他の設定アクションに適用されます。

12.1 ユーザー管理

12.1.1 階層構造と機能へのアクセス

ユーザー管理は、1 管理者レベルおよび 4 ユーザーレベルに対応します。

ユーザーレベルの階層構造は次のとおりです:

管理者 > レベル 1 > レベル 2 > レベル 3 > レベル 4。

以下の機能が、個々のユーザーレベルに割り当てられます

管理者レベル	このユーザーには、ASpect PQ およびユーザー管理のすべての機能へのフルアクセス権が付与されます。
レベル 1	レベル 1 ユーザーには、Aspect PQ 機能への無制限のアクセス権が付与されますが、ユーザー管理へのアクセスは拒否されます。
レベル 2	以下を除いてレベル 1 と同じ: <ul style="list-style-type: none"> ■ メソッドの削除 (M1 ID コード) ■ シーケンスの削除 (P1 ID コード) ■ QC ルールタブの削除 (Q1 ID コード) ■ 結果ファイルの削除 (R1 ID コード)

レベル 3

以下を除いてレベル 2 と同じ:

- メソッドの保存 (メソッドデータベースでのメソッドの作成) (M2 ID コード)
- シーケンスの保存 (シーケンスデータベースでのシーケンスの作成) (P2 ID コード)
- ピークオフセットの受け入れ (W1 ID コード)

レベル 4

以下を除いてレベル 3 と同じ:

- メソッドパラメータの変更 (E1 ID コード)

このカテゴリのユーザーに許可されるのは、以前に作成されたメソッドおよびシーケンスを読み込んで、測定を実行することだけです。

機能	ID コード *	管理者	レベル 1	レベル 2	レベル 3	レベル 4
ユーザー管理で作業		+	-	-	-	-
メソッドの削除	M1	+	+	-	-	-
シーケンスの削除	P1	+	+	-	-	-
QC ルールタブの削除	Q1	+	+	-	-	-
結果ファイルの削除	R1	+	+	-	-	-
メソッドの保存	M2	+	+	+	-	-
シーケンスの保存	P2	+	+	+	-	-
ピークオフセットの変更	W1	+	+	+	-	-
レポートテンプレートの変更	L1	+	+	-	-	-
メソッドの変更	E1	+	+	+	+	-
メソッドとシーケンスの読み込み		+	+	+	+	+
測定の実行		+	+	+	+	+

*ID コードは操作アドバイスに使用されます。

12.1.2 ユーザー管理 – 表示および設定

ユーザー管理設定は、管理者権限を持つユーザーが、ユーザー管理パッケージの初期インストールの一部としてまたはその後任意の時点で行うことができます。

アカウントは各ユーザーに作成します。アカウントには、付与されたユーザープロフィールが含まれます。必要がなくなったユーザーアカウントは、無効にしたり禁止したりできます。ユーザーアカウントは削除できません。

- ▶ メニューアイテム **システム | ユーザー管理** を選択するか、Windows スタートメニューの項目でユーザー管理を起動します。
- ▶ 管理者プロフィールでログインします。
 - ✓ **User Management** 画面が表示されます。

User Management 画面

この画面には、登録されたユーザー名とそれに対応するフルネームのリストが含まれます。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。

インジケータとコントロール要素

オプション	説明
User ID	ユーザーのログイン名
Full name	ユーザーのフルネーム
User level	管理者、レベル 1 からレベル 4
E-signature	Yes: ユーザーは結果データに電子署名することが承認されています。 No: ユーザーは電子署名が承認されていません。
Status	アクティブ: 使用が許可されているユーザー名 (緑の丸)。 無効: ユーザー名は無効になっていて、使用できません (赤の丸)。
Passwd. protect.	アクティブ: ユーザーログインにパスワード (鍵) が必要です。 非アクティブ: パスワードなし (斜線入りの鍵) で許可されるユーザーログイン
Valid until:	Indefinitely: パスワードが期限切れになりません。 Date/ days: ユーザーは指定された期間で期限切れになったパスワードを変更する必要があります。

ボタン

ボタン	説明
New ...	新しいユーザーを作成します Add user data 画面が表示されます。
Modify ...	選択した行のユーザーデータを編集します 選択したユーザーの 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することで開くこともできます。
Preferences	ユーザー管理構成を変更します
Audit trail	イベントレポートを開きます
?	ヘルプを開きます
Exit	アプリケーションを終了します

12.1.3 ユーザー管理の一般設定の構成

Preferences 画面で、以下のオプションでユーザー管理一般を構成できます:

- パスワードポリシー
- ログインと監査証跡
- 署名の意味
- 使用するデータディレクトリ

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う必要があります。

- ▶ **ASpect CS / User Management** 画面で、**Preferences** をクリックします。
Preferences 画面が表示されます。
- ▶ 左側で、変更したいオプショングループを選択します。
- ▶ 構成を実行します。
Default settings をクリックすると、選択したオプショングループの初期設定が復元されます。他のグループの設定には影響がありません。
- ▶ **OK** をクリックすると設定を適用されます。

がわ

ログインおよびパスワードポリシーの設定

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)。 この数を超えた場合は、待機期間後に ASpect CS 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。項目 (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超えたユーザーはブロックされます。
Minium user name length:	文字と数字で構成されるパスワードのみを割り当てることができます。 最大文字数: 10
Enforce login with password	新しく作成したユーザー名にパスワードを割り当てなくてはなりません。
Password and user ID must be different	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	その時間制限が期限切れになると、ユーザーはログイン時にパスワードを変更することを求められます。それから、ポリシーに設定されている期間、パスワードが延長されます。この値は、他の個々のユーザー向けの変更可能なテンプレートとして認められます (最大 999 日)。
Minium password length:	新しく作成するパスワードの最大文字数 3 ~ 10

Folders

Aspect 作業ディレクトリおよび監査証跡用のディレクトリを指定できます。

オプション	説明
ASpect working directory	ASpect CS の作業ディレクトリ この作業ディレクトリには、メソッドおよびシーケンスデータベースと、結果ファイルが含まれます。作業ディレクトリは ASpect CS 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 このパスは変更できます。

オプション	説明
User database	ユーザーデータベースのパス このパスは、インストールプログラムでのみ変更できます。
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って、保護が強化されます。これによって、故意および過失のデータ改ざんからファイルが保護されます (例: データの削除または変更)。 AJ ファイル保護がインストールされている場合は、このボタンがアクティブになり、マーカーで保護状態が示されます。緑 - ファイル保護がアクティブです。赤 - ファイル保護がアクティブではありません。このボタンをクリックすると、保護されているディレクトリのリストを含む画面が表示されます。

Audit trail

このアクショングループで、監査証跡のアクティベーション、メソッドの使用、検量線の基本有効期間を指定します。

オプション	説明
Inactive (no entries)	項目が監査証跡ファイルに追加されません。
Active	項目が監査証跡ファイルに追加されます。
Allow measuring only with saved methods	アクティブになっている場合は、メソッドが読み込まれ、このメソッドが最後に保存されてから変更されていない場合にのみ、測定を開始できます。
Calibration validity period [h:mm]:	アクティブになっている場合は、検量線の有効期間を指定できます。ユーザーレベル 3 または 4 の場合は、測定開始前に検量線を更新する必要があります。他のレベルの場合は、メッセージが表示されます。

Signatures

このリストには、署名の意味と、署名時に選択できる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、そこで新しい署名の意味と有効なユーザーレベルを選択します。
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

12.1.4 新しいユーザーアカウントの作成

管理者アクセス権を持つユーザーのみが新しいユーザーアカウントを作成できます。新しいユーザーは、**Add user data** 画面の対応する権限で構成します。

Add user data 画面内のオプション

オプション	説明
User ID	ユーザーはこの名前でもログインします。 大文字小文字は区別されません。最小長は、ユーザー管理の一般構成に依存します。
Full name	ユーザーのフルネーム この名前は、電子署名の一部として使用されます。 最大文字数: 32
Description	説明のためのフィールド 入力はオプションです。

オプション	説明
User level	対応する権限を持つユーザーレベルの選択
Password ...	パスワードを設定します パスワードでは、大文字小文字が区別されます。このパスワード設定ダイアログがパスワード入力なしで承認された場合は、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構成で指定します。 最大パスワード長: 20 文字
南京錠記号	パスワード保護がアクティブです。
南京錠記号を開く	このユーザーはパスワードを使用しません。
Password never expires	このボックスがアクティブの場合は、パスワードは無期限に有効になります。 無効にされている場合は、あらかじめ設定した期限でパスワードの期限が切れます。 指定されている値はパスワードポリシーから供給されます。ユーザーはあらかじめパスワードを延長することもできます。
User-specific working directory	ユーザー専用の作業ディレクトリが、以下のスキーマに基づいて設定されます: \ASpect-Working directory\ユーザー名。ディレクトリ構造は、ユーザーが最初にログオンしたときに作成されます。
Use e-signature	ユーザーは、測定結果を電子的に署名することが許可されます。自分のユーザーレベルおよびそれより下のユーザーレベルの署名を利用できます。
View audit trail	ユーザーは、イベントレポートを開くことができます。
Disable user ID	ユーザーアカウントを無効にします ユーザー名を一時的に無効にできます。ユーザーアカウントを削除するのではなく無効にすることで、ユーザー名が新しく作成されたユーザーに再割り当てされることがなくなります。
User must change password at next login	このユーザーが再度ログオンすると、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。
- ▶ フィールドおよびオプションの設定を構成し、**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 CS 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](#) [▶ 168]
- 📖 [階層構造と機能へのアクセス](#) [▶ 166]

12.1.5 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属性を変更できます。

- ▶ **User Management** 画面で、ユーザーアカウントを先手くして **Modify ...** をクリックします。そのアカウント設定を含む **Modify user data** 画面が表示されます。
- ▶ 設定を構成して **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 \[▶ 170\]](#)

12.1.6 パスワードの変更

ユーザーアカウントでの指定に応じて、ユーザーは割り当てられたパスワードを定期的に変更する必要があります。

- ▶ **ASpect CS** で、メニューアイテム **システム | パスワードの変更** を選択します。
パスワードの変更 画面が表示されます。
- ▶ 古いパスワードを入力し、新しいパスワードを 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、**パスワードを変更します!** メッセージが表示されます。

12.2 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、システムイベントとすべての警告および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許可が付与されている必要があります。

監査証跡は、メニューアイテム **システム | 監査証跡** またはユーザー管理で **Audit Trail** をクリックすることで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
- 更新
- 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)

以下のパラメータが監査証跡ファイルで文書化されます：

表カラム	説明
種類	イベント種類を表示します 以下のイベント種類が監査証跡に記録され、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
月日/時間	項目の日時 (PC クロック) 項目を時間または日付の昇順および降順で並べ替えるには、表ヘッダーの両方のカラムの [+] および [-] ボタンを使用します。
Time zone	項目を参照した時間のタイムゾーンを示します (Windows システム制御)
Name	イベントの名前。詳細はフィールドを参照 Description
Category	イベントのカテゴリー 「USRMGMENT」は、ユーザー管理からのすべての項目を識別するカテゴリーです。その他のすべてのカテゴリーは ASpect CS で入力します。
User	入力時にログイン状態のユーザーを示します。
Description	選択した項目の理由に関する詳細情報

監査証跡のアップデート

Refresh をクリックすると、監査証跡項目リストが更新されます。この操作は、以前に作成した監査証跡表示に項目が追加された場合に必要になります。

監査証跡のエクスポート

管理者権限が付与されている場合は、監査証跡項目を CSV ファイルに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のみ利用できます。

- ▶ **Export** をクリックすると、名前を付けて保存 (**Save as**) 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。

監査証跡のフィルタリング 監査証跡を特定のラベル、カテゴリ、またはユーザーでフィルタリングして、項目の期間を絞り込むことができます。

- ▶ **Filter** をクリックして、Filter audit trail 画面で検索フィルターを指定します。
- ▶ **Reset filter** をクリックすると、フィルターで適用した制限が解除されます。

監査証跡の印刷

監査証跡を印刷できます。項目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項目のみが印刷されます。

- ▶ 現在の監査証跡表示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。
- ▶ 出力フォーマットを **Direct to** リストで選択します。
- ▶ **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フォーマットで出力されます。

12.3 電子署名

結果データに ASpect CS で電子的に署名できます。署名をすることで特定のファイルでの作業がクローズし、この時点以降にこのファイルで変更を加えても、無効な署名状態になります。署名の意味は、ユーザー管理の一般設定で作成します。署名ユーザーには、ユーザーアカウントで適切な許可が付与されている必要があります。

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。

ファイルは複数のユーザーが署名してもかまいません。

12.3.1 測定結果の署名

測定結果ファイルは、測定後または適切な権限を持つユーザーによってファイルが測定後に読み込まれた後に、**サイン** 画面の電子署名付きで提供できます。

サイン 画面内のオプション

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 ユーザー名は変更できます。これによって、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
署名の意味	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	オプションのコメント用 (最大 256 文字)
サイン	上記の設定で文書に署名します

結果の署名

- ▶ 署名する測定結果をソフトウェアのメイン画面で表示します。
- ▶ メニューアイテム **システム | サイン結果** 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** をクリックします。
 - ✓ 署名を付与するかまたはプロセスを取り消すかを確認されます。署名の付与が完了したことが確定されます。

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 \[▶ 168\]](#)

12.3.2 署名の表示

署名済み結果データをプレビューまたは印刷すると、**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フルネームとログイン名
Signed on	署名付与の日時
Status	この署名状態には以下の意味があります： Valid 署名と結果データが揃っていて、正しいです。ファイルの計算済みチェックサムと、署名時点で署名ファイルに保存されたチェックサムに違いが見られません。 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) 結果がファイルが署名後に変更されました。新しく計算されたチェックサムと以前に保存されたチェックサムを比較すると、差異が見られます。 Invalid (SPK data) 生ピークデータを含むファイルが署名後に変更されました。新しく計算されたチェックサムと以前に保存されたチェックサムを比較すると、差異が見られます。
Meaning	署名の意味
Comment	署名内のオプションのコメント

12.4 AJ ファイル保護

オプションの AJ ファイル保護によって、故意および過失のデータ改ざんからファイルが保護されます (例: データの削除または変更)。フィルタードライバーによって、承認されたアプリケーションからのディレクトリアクセスが許可され、他のアプリケーションからのアクセスはブロックされます。ウィルススキャナー、および業務用複製、同期、またはデータバックアップソフトウェアの機能は、Microsoft 標準に準拠している場合は、損なわれることはありません。

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構成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。

このソフトウェアのインストールおよび構成の詳細は、インストール CD を参照してください。

AJ ファイル保護は、自動的に保存およびエクスポートするための別個の権限と組み合わせることで、メソッド作成、データ取得および評価、アーカイブについてデータプライバシーが完全に保護されることが保証されます。

13 付録

13.1 値の表示で使用されるマーキングの概要

コメント	意味	値	エディション
> Cal	平均値が検量線の作業範囲より大きい。	平均値	プロセスおよび結果画面
< Cal	平均値が検量線の作業範囲より小さい。	平均値	プロセスおよび結果画面
< LOD	値が検出限界より小さい。	平均値	プロセスおよび結果画面
< LOQ	サンプル値が、定量下限より小さく、検出限界より大きい。	平均値	プロセスおよび結果画面
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。	平均値	プロセスおよび結果画面
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範囲外。	平均値	プロセスおよび結果画面
ファクター!	検量線の再検量ファクターの限界を超えました。	検量線	プロセスおよび結果画面
R2(adj.) または R	検量線の回帰 R ² (adj.) または R (オプション / 検量線画面での選択に依存) の同定の係数が、指定された値を下回っています	検量線	プロセスおよび結果画面 検量線画面
MAN	個々のサンプル値または個々の標準値が、サンプル平均の計算からマニュアルで除外されました	個々の値	個々のサンプル値画面
KOR	個々のサンプル値または個々の標準値が、グラフアウトライアテストによってサンプル平均の計算から自動的に除外されました。	個々の値	個々のサンプル値画面

13.2 ピークバックグラウンド補正に使用するアルゴリズムについて

ピークバックグラウンド補正は、個々のピークごとに別個で実行されます。時間分解吸光度シグナルは、測定時間に依存する多数の吸光度値で取得されます。個々の吸光度値は、評価ピクセル (メット / 測定条件画面、測定ピクセルカラム) ごとに計算され、評価ピクセルの数で合計されます。AAS法に基づいて、高さ、面積、または平均値が吸光度シグナルから計算されます。

13.2.1 "リファレンスなし" バックグラウンド補正

リファレンス値の計算 リファレンス値は、測定範囲の静的に設定されたピクセルを平均することで形成されます。静的ピクセルが設定されていない場合は、測定ピクセル周囲の +/-10 ピクセルを除いた範囲のすべてのピクセルが平均されます。別個に記録された参照ピークは必要ありません。

吸光度ピークの計算 $Abcorr = \lg(I_0/I_{peak})$

I_0 測定ピクセル +/- 10 ピクセルを除いた、スリット内ピクセルの平均
 I_{peak} 測定ピクセル

制限 別個の参照ピークで検出されるフレームおよびその他の分子構造は、補正されません。不均一な CCD 照射のため、吸光度ピークでベースラインが上下することがあります。

この補正は、波長 AAS のブロードバンド D2 補正に対応します。

13.2.2 "リファレンスあり" バックグラウンド補正

リファレンス値の計算 個々の吸収度ピークは、サンプルの個々のピークと正規化された平均参照ピークから計算されます。正規化された平均参照ピークは、個々の参照ピークの面積 (合計) を平均参照ピークのアreasで除算 (正規化) することで取得されます。それから、正規化された個々のピークが再度平均されます。

吸光度ピークの計算 光源と原子化部の変動により、得られた吸光度スペクトルは多かれ少なかれ強く傾斜し、異なるオフセット値を持つ湾曲した基線を持ちます。したがって、次のステップで、個々のピークごとにベースラインを調整します。そのために、サポートポイント (BGC ポイント) を設定し、それによって多項式を適用します。最適な多項式は最大で 2 次多項式です。次元は、サポートポイントの数と分散によって同定されます。そのため、距離が 10 ピクセル未満のサポートポイントは、グループに結合されます。

最適なベースラインが吸光度ピークから減算されます。吸光度値は直接同定できます。

BGC ポイントは静的または動的に (自動的に) 設定できます。

静的: BGC ポイントは、マニュアルで、または測定範囲 +/-0.5 ピクセルの範囲のリストから設定します。

動的: BGC ポイントはアルゴリズムで検索されます。

- ターゲット: ベースラインノイズとあまり異ならないピクセルを識別します。そのために、周囲の +/-3 ピクセルを考慮してピクセルのグラデーションが計算されて、グラデーションの変化がテストされます。
- 個々のピークの BGC ポイントが結合されます。特定の BGC ピクセルが定義済みの頻度で検出された場合は、そのピクセルが平均ピークの BGC ポイントとして採用されます。
- 制約: すべての BGC ポイントが測定ピクセルの片側にある場合は、エラーが発行されます。補正が偏っている場合は、多項式の外挿が原因で大きなエラーになる場合があります。隣接する 4 ピクセルの吸光度の違いが一定量 ($>2E-4$ /ピクセル) を超えるときのみ、検索アルゴリズムがグラデーションを検出します。
- 測定ピクセルの +/- 10 ピクセルの範囲は、検索から除外されます。

制限 ピークギャップの範囲全体で構造が重なっている場合、アルゴリズムで大きな問題が発生し、それ以降ベースラインノイズによって領域が占有されなくなります。この場合、頻度が動的に調整されます(決定条件が次第に緩和されます)。これによってBGCポイントが十分な数にならない場合は、静的ピクセルが設定され、それらが初期設定として波長テーブルに保存されます。

13.2.3 「IBC」および「IBC-m」バックグラウンド補正

IBCバックグラウンド補正(IBC=反復ベースライン補正)は強度ピークの反復フィルタリングに基づいています。検体ピークより拾いバックグラウンド構造は除外されます。このアルゴリズムは複雑なピークバックグラウンドに適しています。

IBC-mは、ブロードバンド分子構造を同定するための、特殊な反復フィルターアルゴリズムです。

13.2.4 ピーク減算(パーマネントストラクチャーの補正)

使い方 フレーム構造およびその他の干渉の多変量補正は、さまざまな強度のリファレンスおよびサンプルピークで使用します。

前提

- 合計ピークは、純粋な物質とノイズのピークを重み付けしたものです。
- 他の波長範囲(例:補正ピーク内には存在しない追加検体バンド)は提示されないか、マスクされます。
- どの波長もシフトされないか、とても小さな波長がサンプルピークと補正ピークの間でシフトされるため、アーティファクトが発生します。

フレーム構造ピークは、 $Abs_{corr} = \lg(I_0 / I_{0-Offset})$ に従って参照ピークから計算されません。さらに分子補正するには、純粋な物質のピークが必要です。

計算のベースは、従来の多変量検量線です:

$$y = X \cdot b + e$$

m - 波長 / ピクセルの数

n - 純粋な物質のピークの数

y - 合計ピーク (mx1)

X - 純粋な物質ピークのマトリックス (mxn)

b - 係数ベクトル

$b(\text{推定}) = X + y \text{ where } X + = (X^* X)^{-1} X^* y$ (擬似逆行列)

次に、純粋な物質ピークと係数の積をサンプルピークから除算できます:

$y_N = x_N \cdot \sum(b_i, x_i)$, $i = 1 \dots N$ を除く(該当するピークのインデックス)

これについては次のリンクも参照してください:

📖 [ピーク補正用補正モデルの作成 \[▶ 91\]](#)

13.3 ASpect CS ファイルの保存場所

ファイルを保存するために使用するフォルダーは、インストールオプションと使用しているWindowsバージョンに応じて異なります。初期設定で使用されるフォルダーを以下に示します。現在のインストールで使用されるフォルダーは、オプション/フォルダ画面に表示されます。

作業ディレクトリとサブフォルダー ドライブ:>User>Public>Documents>Analytik Jena>ASpect CS

種類	フォルダー	ファイル
結果	C: \User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\ <technique>\results< td=""> <td>*.tps – 結果リスト *.spk – ピークデータ</td> </technique>\results<>	*.tps – 結果リスト *.spk – ピークデータ
メソッド、シーケンス、および補正ピークデータ	C: \User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\ <technique>\meth< td=""> <td>*.tps</td> </technique>\meth<>	*.tps
最適化結果 (例: ファーネプログラム最適化)	C: \User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\ <technique>\opt< td=""> <td>*.tps</td> </technique>\opt<>	*.tps
初期設定パラメータ	C: \User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\ <technique>\tables< td=""> <td>*.dat</td> </technique>\tables<>	*.dat
サンプル ID ファイル、単位ファイル、エクスポートされたファイル (*.csv)	C: \User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\user	*.tps、*.csv
レポートテンプレート	C: \User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\user\Reports	*.lst – テンプレート *.jpg – プレビューファイル
オプションおよび調整値	C: \User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS	*.cfg、*.ini

アプリケーションデータ (サブフォルダー) ドライブ:>ProgramData>Analytik Jena>AspectCS

種類	フォルダー	ファイル
波長リスト	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS\ <technique>\tables< td=""> <td>Lines.dat</td> </technique>\tables<>	Lines.dat
装置結果および定義済みコメント	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS	*.dat: *.tps
ユーザー管理データと監査証跡データ	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS\UserMgmt	Usrlrv.tps – ユーザーデータベース Eventlog*.tps – 監査証跡

プログラム ドライブ:>ProgramData>Analytik Jena>ASpect CS または
ドライブ:>Program Files (x86)>Analytik Jena>AspectCS

種類	フォルダー	ファイル
装置およびシステム構成	C:\Program Files (x86)\ASpectCS	ASpectCS.ini

法: FL – フレーム、EA – グラファイトファーネス、EAS – 固体グラファイトファーネス、HS – 水素化物、HF – HydrEA

完全復元前に (アプリケーションとデータ)、ASpect CS インストールも実行する必要があります。

フォルダーおよびファイル名
拡張子の表示に関する情報

一部のフォルダーは非表示フォルダーの場合があります。ファイル名拡張子の表示をオフにすることもできます。非表示のファイル、フォルダー、拡張子を表示するには、Windows エクスプローラーで [表示] を選択してください。