

thermo scientific

OMNIC Paradigm

分光ソフトウェア

バージョン2.3

ユーザーガイド

269-335813

改定A

5月 2023

ThermoFisher
SCIENTIFIC

© 2023 サーマフィッシャーサイエンティフィック 無断複写・転載を禁じます。

Microsoft、Windows、Excelは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における商標または登録商標です。その他のすべての商標は、サーモフィッシャーサイエンティフィック およびその子会社の所有物です。

技術サポートについては、www.thermofisher.comにお問い合わせください。

サーモフィッシャーサイエンティフィックは、製品をご購入いただいたお客様が製品の操作に使用することを目的として本書を提供しています。本書は著作権法で保護されており、サーモフィッシャーサイエンティフィックの書面による承諾なしにその全部もしくは一部を複製することは固く禁じられています。

本書の内容は予告なく変更されることがあります。本書のすべての技術情報は参照のみを目的としています。本書のシステム構成と仕様は、購入者が以前に受け取ったすべての情報に優先します。

サーモフィッシャーサイエンティフィックは、本書の完全性、正確性、または誤りがないことを保証するものではなく、本書の情報に正しく従った場合であっても、本書の使用に起因する可能性のある過失、不作為、損傷または損失について一切の責任を負わないものとします。

本書は、サーモフィッシャーサイエンティフィックと購入者との間における売買契約の一部をなすものではありません。本書に基づいて売買条件が決定または変更されることは一切ないものとし、2つの文書の間で矛盾する情報についてはすべての場合において売買契約書に記載された売買条件が優先されるものとします。

1. 目次

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の使用を開始	4
1.1 OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) へようこそ	5
1.2 OMNIC Paradigmバージョン2.3の新機能	8
1.3 重要な概念と機能	15
2. お使いのシステムを構成	24
2.1 スペクトロメーターに接続	25
2.2 機器をThermo Fisher Connect Account(接続アカウント) に接続	33
2.3 お使いのデータベースを構成	36
2.4 OMNIC Paradigmオプションを設定	37
2.5 適格性基準の管理	39
3. チュートリアルとチュートリアル	42
3.1 ATRで不明のサンプルを分析	42
3.2 透過で不明のサンプルを分析	54
3.3 QCheck(Qチェック) でサンプル組成を検証	66
3.4 サンプル組成の定量	71
3.5 1次ワークフローの作成と実行	74
4. ハウツーガイド	94
4.1 データの管理	94
4.2 分光	107
4.3 タイムシリーズ測定	158
4.4 顕微分光法	171
4.5 ワークフローを使用	194
4.6 カスタムソリューション	225
4.7 データを保護	234

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の使用を開始

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) へようこそソフトウェアをインストールおよびアップデートする方法、ソフトウェアオプションを調べる方法、およびOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) を使用してスペクトルを測定および分析するための基本を学びます。

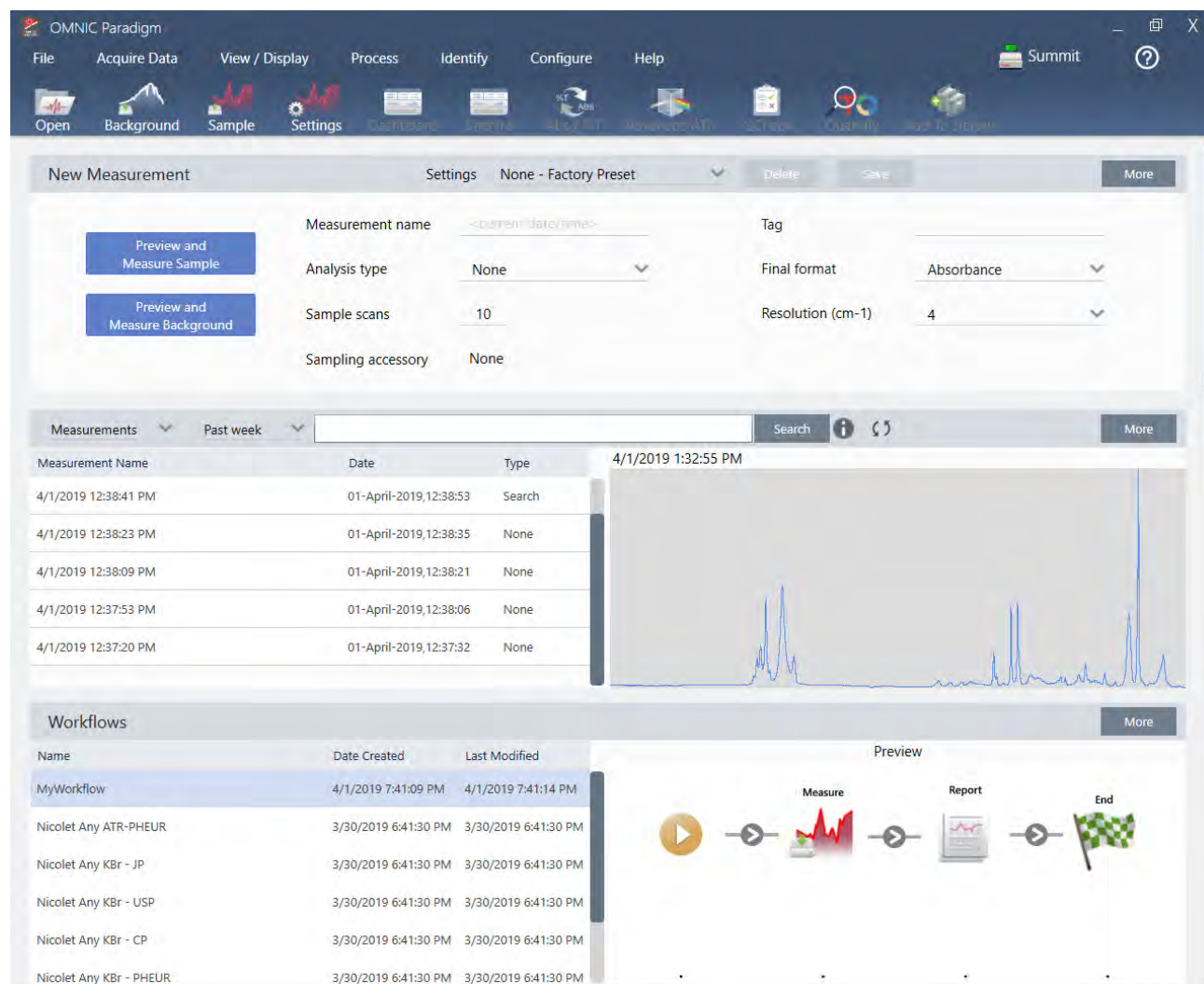
このセクションでは以下について説明します:

1.1 OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) へようこそ	5
1.2 OMNIC Paradigmバージョン2.3の新機能	8
1.3 重要な概念と機能	15

1.1 OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) へようこそ

デスクトップおよびタッチスクリーンモード用のThermo Scientific™ OMNIC™ Paradigmソフトウェアは、FTIR分光法および顕微鏡用の高度なソフトウェアパッケージであり、データ取得、処理、および解釈の方法を簡素化し、リモートでの作業や世界中の同僚との共同作業を支援するように設計されています。

1.1.1 ダッシュボードから新規および最近の作業を管理



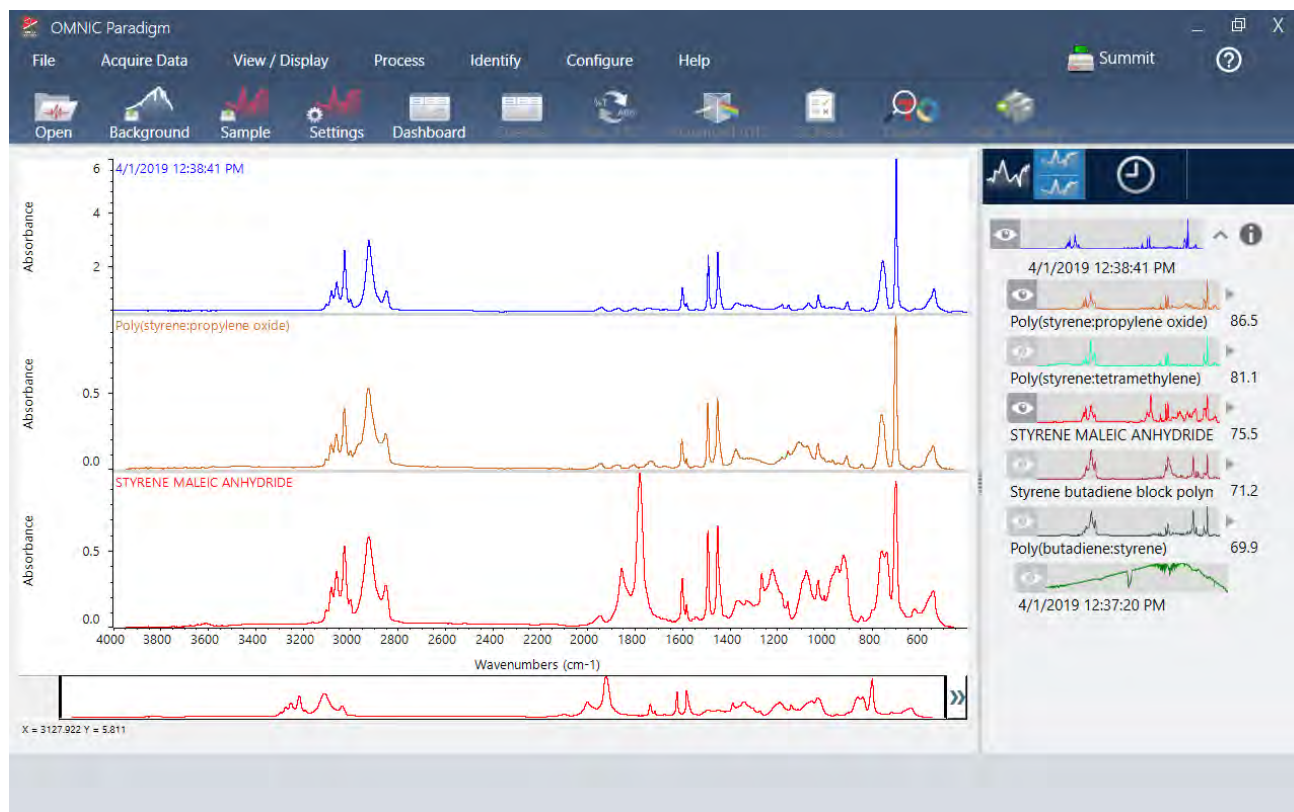
OMNIC Paradigmソフトウェアの新規ダッシュボードを使用すると、測定条件設定を設定して保存したり、新規サンプル測定を行ったり、最近の作業を再開したり、自動化されたワークフローをすべて同じ便利な画面から実行することができます。

タッチスクリーンインターフェースでは、ホーム画面がこれらの同じツールと機能の多くをさらに合理化された直感的なインターフェースで提供するため、オペレーターは自分の作業と必要なツールに集中できます。

詳細を学ぶ

- ["測定オプションの設定と保存"](#)
- ["サンプル測定"](#)
- ["1次ワークフローの作成と実行"](#)

1.1.2 Spectra View(スペクトルビュー) でスペクトルを処理、分析、調査



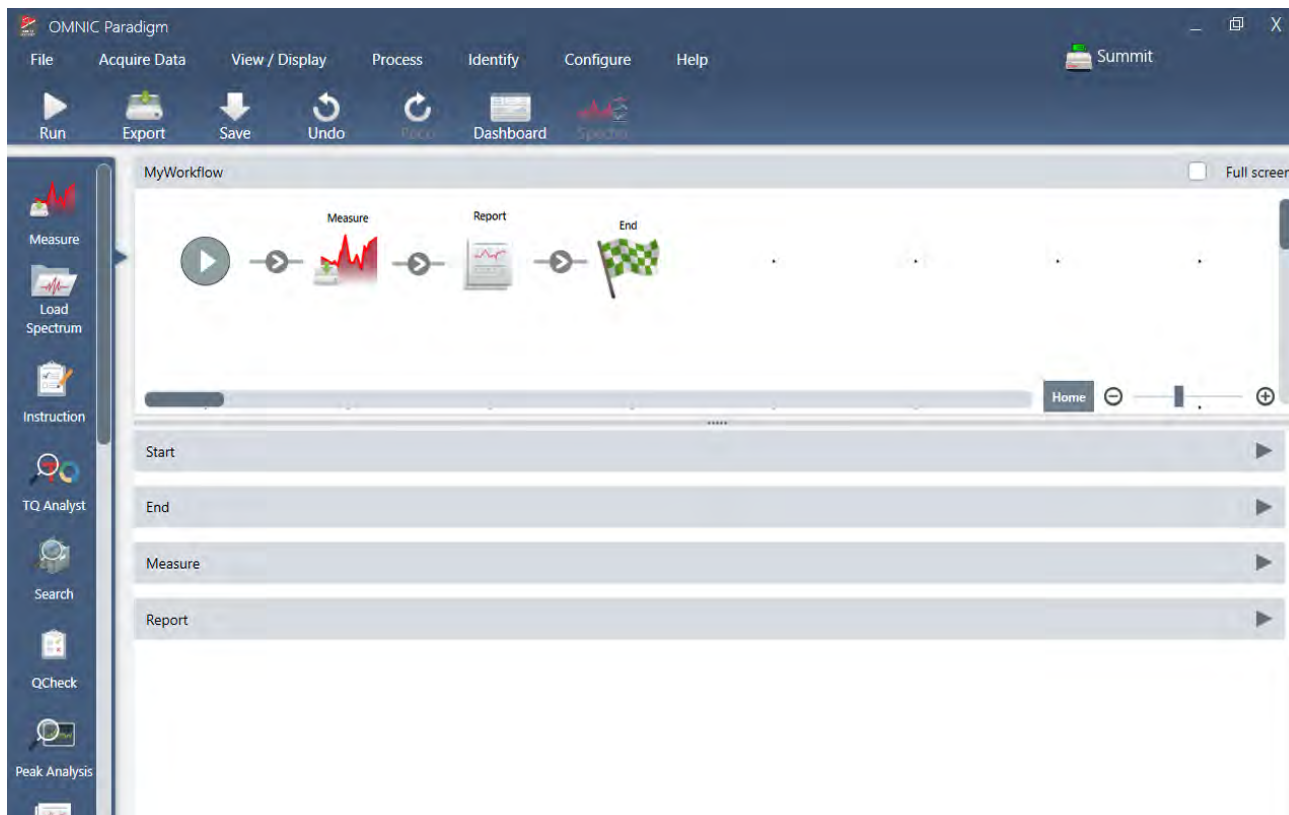
Spectra(スペクトル) ビューを使用して、データを詳細に処理、分析、または調査します。ここでは、データ処理、ピーク検出を行い、ラベルを付け、ビューを最適化して、スペクトルをさらに簡単に比較したり分析できるようにします。

結果ペインでは、メインビューからスペクトルをすばやく追加または削除したり、各スペクトルの詳細を調べたり、選択したスペクトルの変更履歴をレビューすることができます。

詳細を学ぶ

- ["ATRで不明のサンプルを分析"](#)
- ["透過で不明のサンプルを分析"](#)

1.1.3 ワークフローを使用して反復タスクを自動化



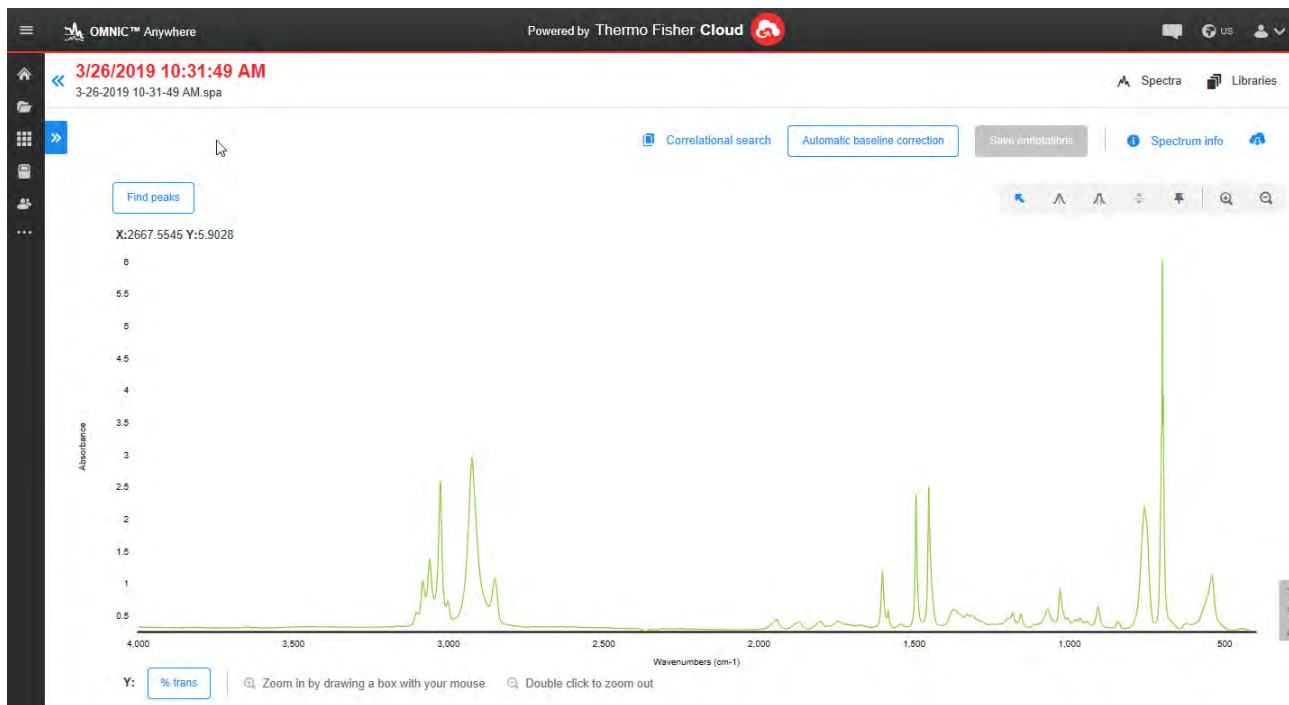
ワークフローを使用してタスクを自動化し、測定値が毎回まったく同じ方法で収集および処理されるようにします。Workflow Editor(ワークフローエディタ)でタイルをドラッグアンドドロップするだけでワークフローをEdit(編集)または作成し、ボタンをクリックするだけでワークフローを実行できます。

タッチスクリーンモードにParadigmを使用しているオペレーターは、工場でインストールされたパフォーマンステストの一つ、またはカスタムワークフローをホーム画面から直接インポートして実行できます。

詳細を学ぶ

- ["1次ワークフローの作成と実行"](#)
- ["ワークフロータイルリファレンス"](#)

1.1.4 あなたの仕事をリモートで共有



データをクラウドにアップロードし、OMNIC Anywhereを使用して、接続済みのPC、Appleコンピュータ、Android、またはiOSデバイスを使用してデータを表示、分析、または共有します。

無料のConnect(接続)アカウントを使用して、教室またはラボでサンプル測定を行い、データをConnect(接続)アカウントにアップロードして、あなたの寮や作業スペース内の別のデバイスでデータを表示、検討、または共有します。

詳細を学ぶ

- [OMNIC Anywhereアプリで自身のデータを見る](#)

1.2 OMNIC Paradigmバージョン2.3の新機能

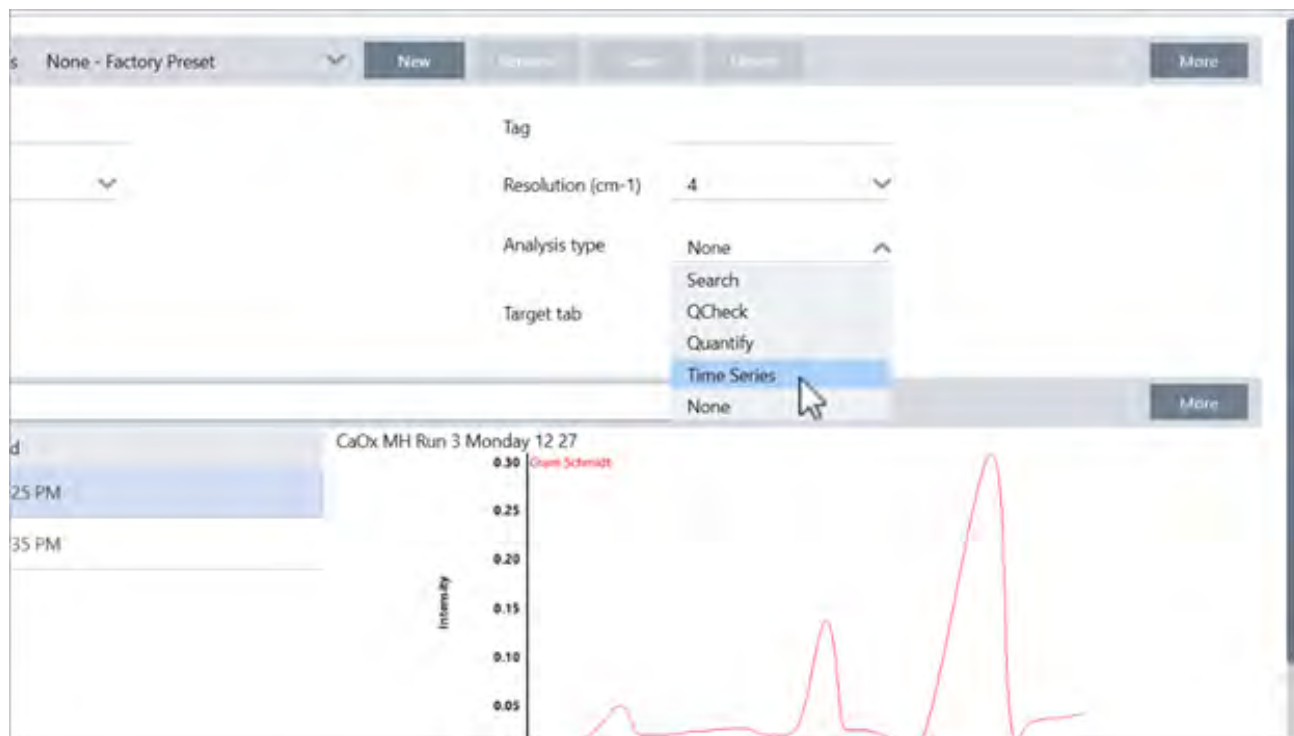
OMNIC Paradigmソフトウェアバージョン2.3のTime Seriesパッケージをお持ちであれば、時系列データを収集してサンプルに含まれる成分を迅速に特定したり、TA Instruments機器のデータをインポートしてサンプルに関するさらに重要な情報を得たりできます。この新しい処理ツールは、データを詳細に調査するより多くの方法を提供します。

すべての新機能の一覧と解決される問題については、[リリースノート](#)を参照してください。

1.2.1 時系列データの収集

時系列分析は、TGA分析やGC分析のように、一連のデータを測定して経時変化を識別し、分析することができます。

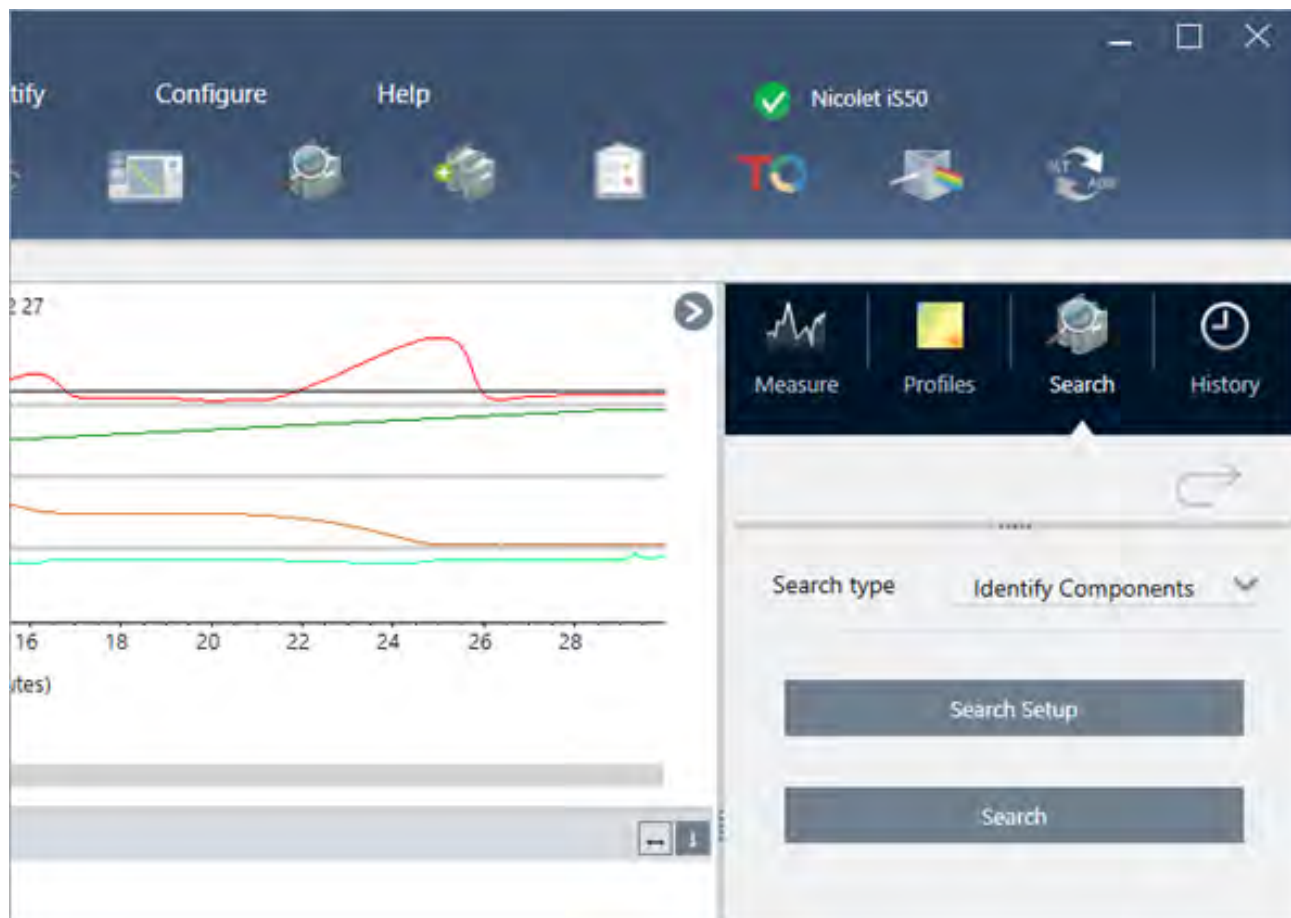
1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)の使用を開始



1.2.2 時系列データの成分識別

データに含まれる成分を識別するには、Time Series(時系列)分析からSearch(サーチ)を選択します。このサーチは、OMNICソフトウェアのMercury TGA機能と似ており、MCRおよび多成分サーチを使用して、分析中にいつ、どのような成分が確認されたかを表示します。

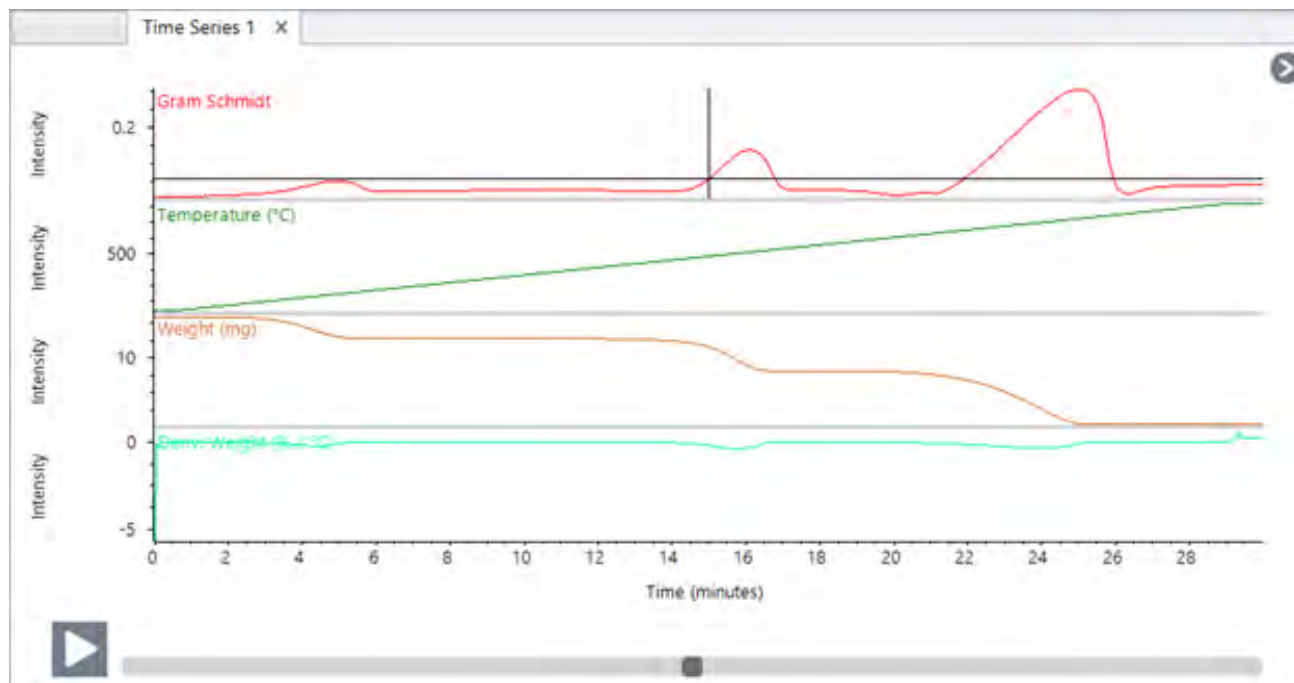
1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)の使用を開始



1.2.3 TGAデータのインポート

TA Instruments製分析計を使用してTGAデータを収集する場合は、TGAファイルをインポートして、重量、温度、および微分重量をプロフィールに追加できます。

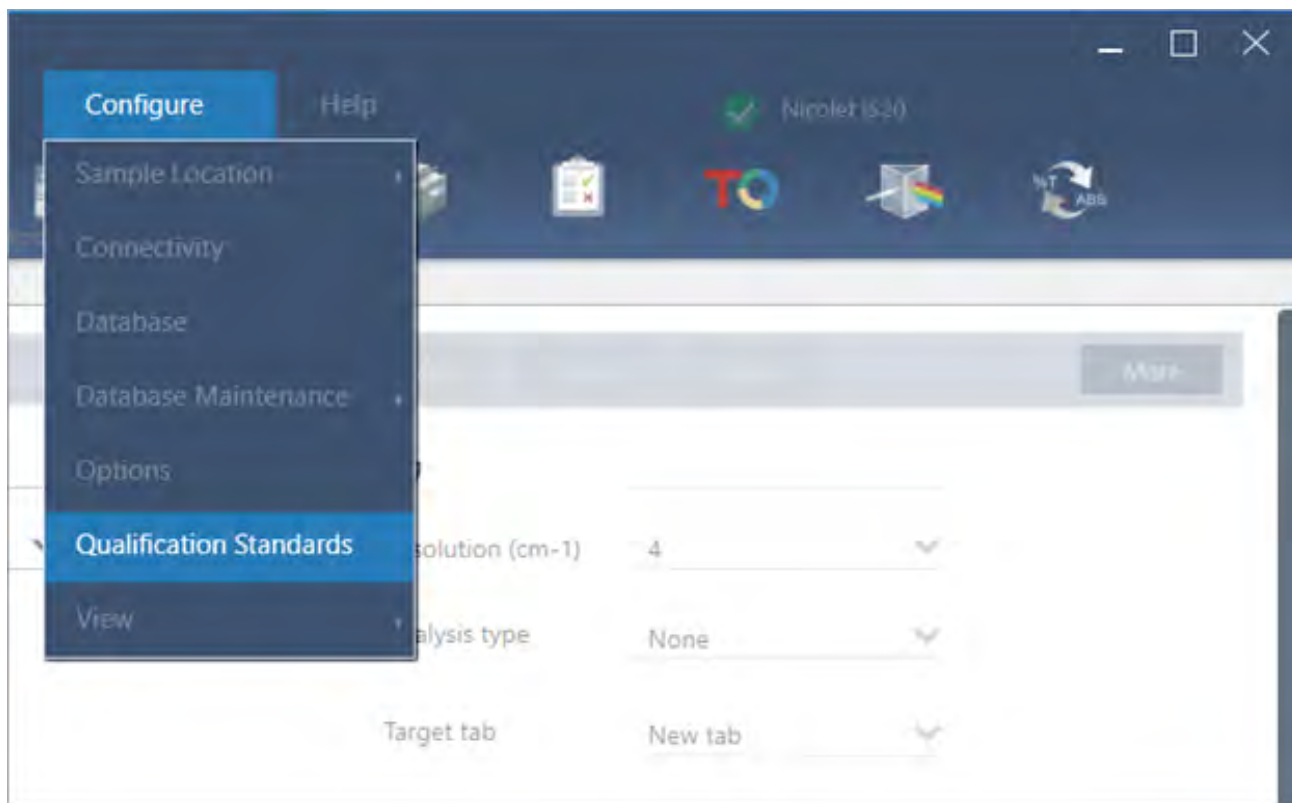
1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)の使用を開始



1.2.4 適格性基準のインポート

新しい適格性基準ツールを使用することで、DSTおよびQDF基準ファイルのインポートや、基準の有効期日およびシリアル番号などの重要事項の追跡管理を簡単に実行できます。

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の使用を開始



1.2.5 直線

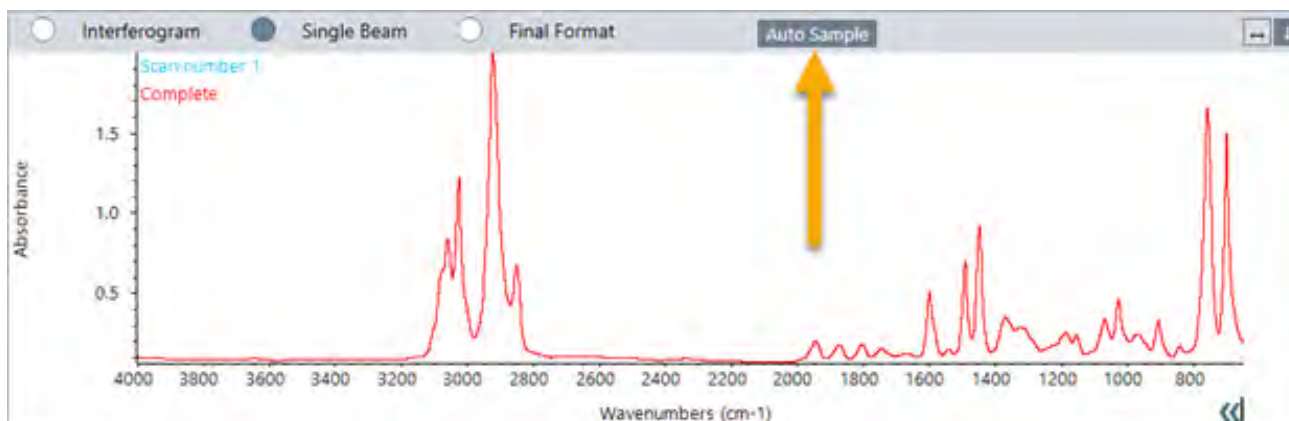
Processing(処理) メニューの直線ツールを使用して、スペクトル領域を直線に置き換えることができます。領域のブランク化ツールと同様に、スペクトルから不要な特性を除去できるという点で有用です。

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)の使用を開始



1.2.6 顕微鏡ビューでの一点測定値の収集

Microscopy(顕微鏡)ビューを使用する際に、Auto Sample(自動サンプル)機能を使用して、ライブビューで表示されている点のデータを収集します。新規の測定値がダッシュボードの測定値リストに自動で追加されます。



1.2.7 データ収集後の大気補正の実行

一点測定の場合、測定完了後に大気補正を実行できます。これまでは、データ測定前にしか補正を実行できませんでした。

1.2.8 ライブラリに1度に多数のスペクトルを追加する

カスタムライブラリに1度に多数のスペクトルを追加できます。これまでは、1度に1つのスペクトルしかライブラリに追加できませんでした。

1.3 重要な概念と機能

このセクションでは、OMNIC Paradigmソフトウェアを使用するためのコアコンセプトを紹介します。このセクションの情報は、OMNIC Paradigmソフトウェアの基本的な理解を深め、すべての機能とツールを活用してサンプルを分析できるようにするのに役立ちます。

1.3.1 OMNIC Paradigmソフトウェアの基本

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)の使用のコアコンセプトを理解すると、スペクトルデータをさらに効率的、効果的に収集、分析、およびレポートするのに役立ちます。

以下のプロセスのすべての手順を常に行うことができるわけではありません。OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)を特定のニーズに合わせてカスタマイズできますが、一般的には、一般的なプロセスに従う可能性があります。



あなたのプロジェクトを計画



本ソフトウェアを使い始める前に、プロジェクトの目標を検討することが重要です。事前に計画を策定すると、作業に適したデータ処理と分析のタイプ、最適なデータが得られる測定条件設定、および手順を最も効率的に実行する方法を決定する上で役立ちます。

データを取得する前に、以下の質問に答えることができる必要があります。

- **プロジェクトの私の目標は何ですか?**

例えば、不明のサンプルを分析するか、サンプルが基準を満たしていることを検証しますか。OMNIC Paradigm software (OMNIC Paradigmソフトウェア)を使用すると、データの使用方法に応じて、さまざまなプロセスと分析手順を実行できます。一般的な目標は以下のとおりです。

- 純粋なサンプルをIdentify(分析)
- 混合物の成分をIdentify(分析)
- サンプルが仕様を満たしていることを検証する
- サンプルの成分をQuantify(定量)

- **サンプル測定方法を教えていただけますか?**

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の使用を開始

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) は、さまざまなスペクトロメーターサンプリングアクセサリと測定技術をサポートしています。

特定の作業に最適な測定コレクションの選択に関する詳細については、FTIR分光アカデミーの「[FTIR Sample Handling Techniques\(サンプル処理技術\)](#)」を参照してください。

• 数回の測定のみを計画していますか、それともこれは日常的な繰り返しの手順ですか?

日常的な手順を自動化したい場合は、ワークフローを作成できます。ワークフローでは、データコレクションの設定を指定し、オペレーターに指示を与え、データ処理、レポート、およびアーカイブを事前に定義します。その後、あなたまたは他のオペレーターは、ワークフローを使用して、毎回まったく同じ手順が実行されることを認識した上で手順を実行できます。

新規ワークフローの作成に関するステップバイステップガイドについては、「[ワークフローについて](#)」を参照してください。

データ取得



データの収集と操作の計画ができたなら、サンプル測定を開始する準備が整います。通常、サンプル測定を行い、データを収集するには、次の手順に従います。

1. スペクトロメーター、サンプリングアクセサリ、および測定するサンプルを準備します。

通常始める前に、スペクトロメーター、サンプリングアクセサリ、およびサンプルの準備ができていることを確認する必要があります。これは、スペクトロメーターがウォームアップされて正常に機能していること、サンプリングアクセサリが取り付けられていること、およびサンプルが準備されていることを確認することを意味します。

スペクトロメーターとアクセサリを設定するための具体的な手順は、機器とサンプルに応じて異なります。スペクトロメーターの準備の詳細については、お使いの機器のユーザーガイドとチュートリアルを参照してください。または、サンプルの取り扱いと測定の詳細については、FTIR分光アカデミーを参照してください。

サンプルが存在しない状態でバックグラウンドを測定する必要があることに注意してください。バックグラウンドスペクトルを収集するのに最適な時間は、測定するサンプルタイプに応じて異なります。

2. 測定条件設定を選択または編集します。

機器の準備ができたなら、本ソフトウェアがデータを収集および処理する方法とスペクトロメーターの設定の両方の設定を調整できます。ダッシュボードのメニューから保存した設定を選択するか、または単一測定で設定を個別に編集します。

測定条件設定を編集および保存する方法については、「[測定オプションの設定と保存](#)」を参照してください。

3. バックグラウンドを測定します。

サンプル測定を行うと、スペクトロメーターはサンプルとスペクトロメーターの環境からのデータを記録します。サンプルスペクトルがサンプルのみを表し、バックグラウンド環境からのデータがないことを確認するには、バックグラウンドを測定する必要があります。次に、バックグラウンドスペクトルがサンプルスペクトルと比較(または比率付け)され、バックグラウンドからのデータがすべて考慮され、サンプルのみからのデータが残ります。

バックグラウンドスペクトルを測定取得するタイミングと方法の詳細については、「[バックグラウンドを測定](#)」を参照してください。

4. サンプルを測定します。

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の使用を開始

最後に、サンプル測定を行うことができます。測定中に、続行する前にスペクトルをプレビューし、測定条件設定を調整できます。設定で分析タイプを指定した場合、データは収集後に自動的に処理されます。

データが収集されると、Spectral(スペクトル) ビューでスペクトルを表示および探索できるようになります。

プロセスデータ



サンプル測定後には、他のスペクトルの分析や比較を容易にするために、データを処理すると役立つことがよくあります。OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) が補正に役立つ一般的なスペクトルの問題には、以下があります。

- 傾斜、湾曲、シフト、またはその他の望ましくないベースライン
- データ内のノイズによって隠されたピーク
- ATR測定による浸透深度の変動
- 厚すぎるサンプルからの完全吸収ピーク
- 大気中のCO₂またはH₂Oによって生じる問題

サンプルの分析



OMNIC Paradigmソフトウェアには、一般的な分析を実行し、スペクトルデータを詳細に調査するのに役立つように設計されたツールがあります。一般的なタイプの分析には、以下があります。

• 不明のサンプルまたは混合物を分析

不明のサンプルまたは混合物の成分を分析するには、サンプルのスペクトルを、スペクトルライブラリに保存されているリファレンススペクトルと比較します。スペクトルライブラリはスペクトルのコレクションであり、通常、保存されている化合物に関する追加情報が含まれています。ライブラリを作成することも、購入することもできます。コリレーションサーチまたは多成分サーチを実行すると、本ソフトウェアは保存されているライブラリをサーチし、サンプルスペクトルに類似したスペクトルを見つけて、スペクトルがどの程度マッチしているかを示します。

スペクトルライブラリの詳細については、["スペクトルライブラリの管理"](#)を参照してください。

不明なサンプル分析の詳細については、["ATRで不明のサンプルを分析"](#)を参照してください。

• サンプルの組成を検証

QCheck(Qチェック)を使用すると、サンプルが仕様を満たしていることをすばやく検証できます。QCheck(Qチェック)を使用すると、選択した2つのスペクトルを比較したり、一つまたは複数のスペクトルをリファレンススペクトルまたはスペクトルグループと比較することができます。QCheck(Qチェック)の結果は、スペクトル間の類似度を0.0(類似性なし) から1.0(スペクトルが同一) までのマッチ率として示しています。

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の使用を開始

- サンプル中の成分の濃度を見つける

TQ Analystソフトウェアで作成した定量メソッドタイトルは、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) で利用できます。これらの定量化方法を選択し、OMNIC Paradigmダッシュボードから定量化分析を実行できます。

- カスタムで詳細な分析を実行する

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) は、スペクトルをさらに調査するのに役立つ多くのツールを備えています。例えば、Find Peaks(ピーク検出) ツールを使用すると、ピークをすばやく分析してラベルを付けることができます。また、Spectral Math(スペクトル演算) を使用して、一つのスペクトルを別のスペクトルから減算したり、他の操作を実行することができます。

レポート生成とデータの保存



データを収集、処理、または分析したら、データを保存または共有することをお勧めします。OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) を使用すると、データの保存方法またはエクスポート方法をカスタマイズできます。

- レポートのエクスポート

データを共有する時は、テンプレートを使用してレポートを自動的に生成できます。テンプレートには、ライブラリサーチ、QCheck(Qチェック)、定量化方法など多くの結果を含めることができます。また、テンプレートを使用して、Microsoft Word、Excel、またはPowerPointにデータを直接送信することもできます。

- データの保存

規定では、本ソフトウェアはMariaDB Serverデータベースにデータを格納するように構成されていますが、Oracle Database (オラクルデータベース) やMicrosoft SQL Server((Microsoft SQL サーバー) などの他のデータベース用にソフトウェアを構成することもできます。

さらに、設定、スペクトル、およびワークフローは、バックアップ、保存、または共有できるファイルとしてエクスポートできます。

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) のデータセキュリティオプションの説明については、「21 CFR Part 11 Compliance」を参照してください。

1.3.2 次の手順

このガイドで説明されているプロセスのすべての手順を常に実行できるとは限りませんが、一般に、OMNIC Paradigmソフトウェアを使用する全体的なプロセスと機能を理解することで、より良い結果を得ることができます。

次に、最初のサンプル測定、スペクトロメーターの設定のレビューを行うか、またはルーチン手順を自動化するワークフローを作成することから始めます。

1.3.3 OMNIC Paradigmソフトウェアオプション

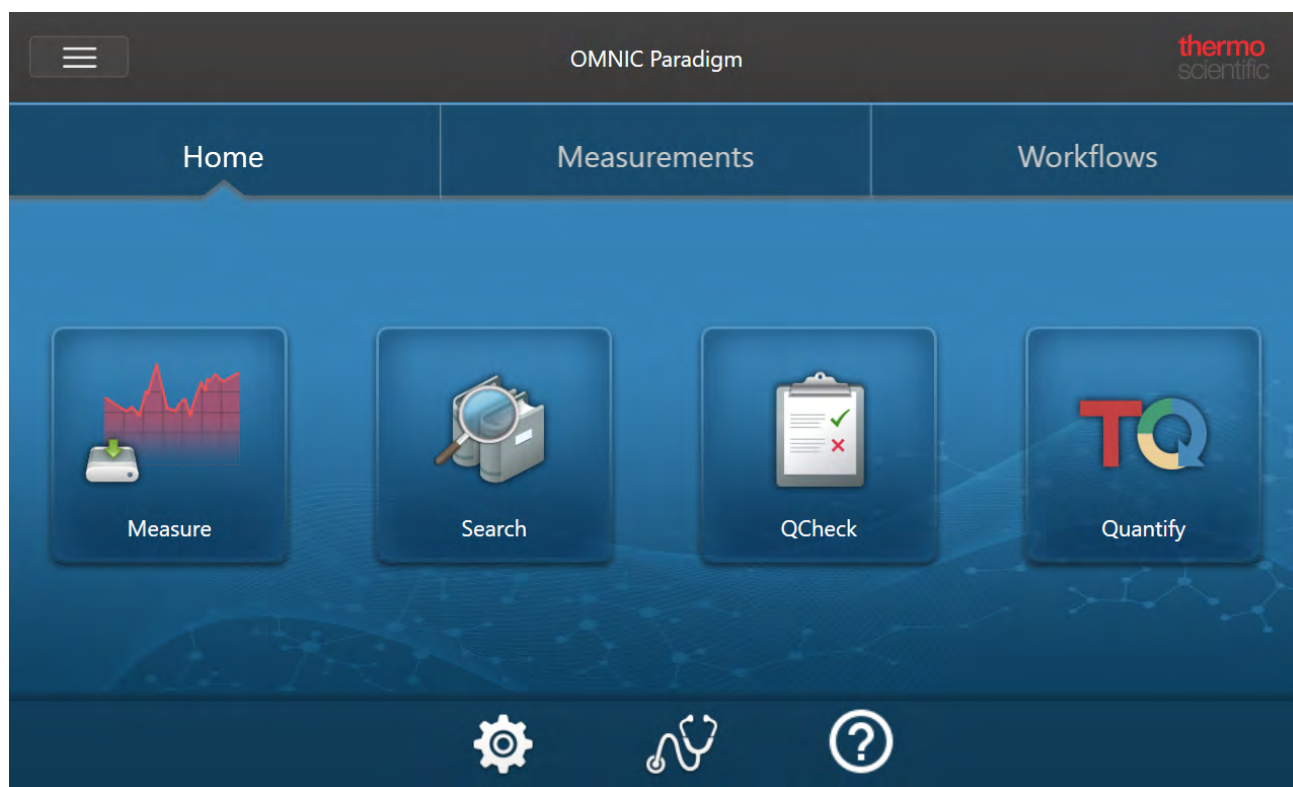
OMNIC Paradigmソフトウェアは、お使いのデバイスまたはタスクに合わせて3つのインターフェースを備え、他のThermo Scientificソフトウェアとペアリングして、定量化方法の開発と実行、またはデータの保護と監査を可能にします。

OMNIC Paradigmソフトウェアインターフェース

お使いのデバイスと目標に最適なように、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) のタッチスクリーンインターフェースとデスクトップインターフェースをいつでも切り替えられます。

タッチスクリーンインターフェース

図 1-1: タッチスクリーンインターフェースは、合理化された分析のための簡素化されたインターフェースを備えています。



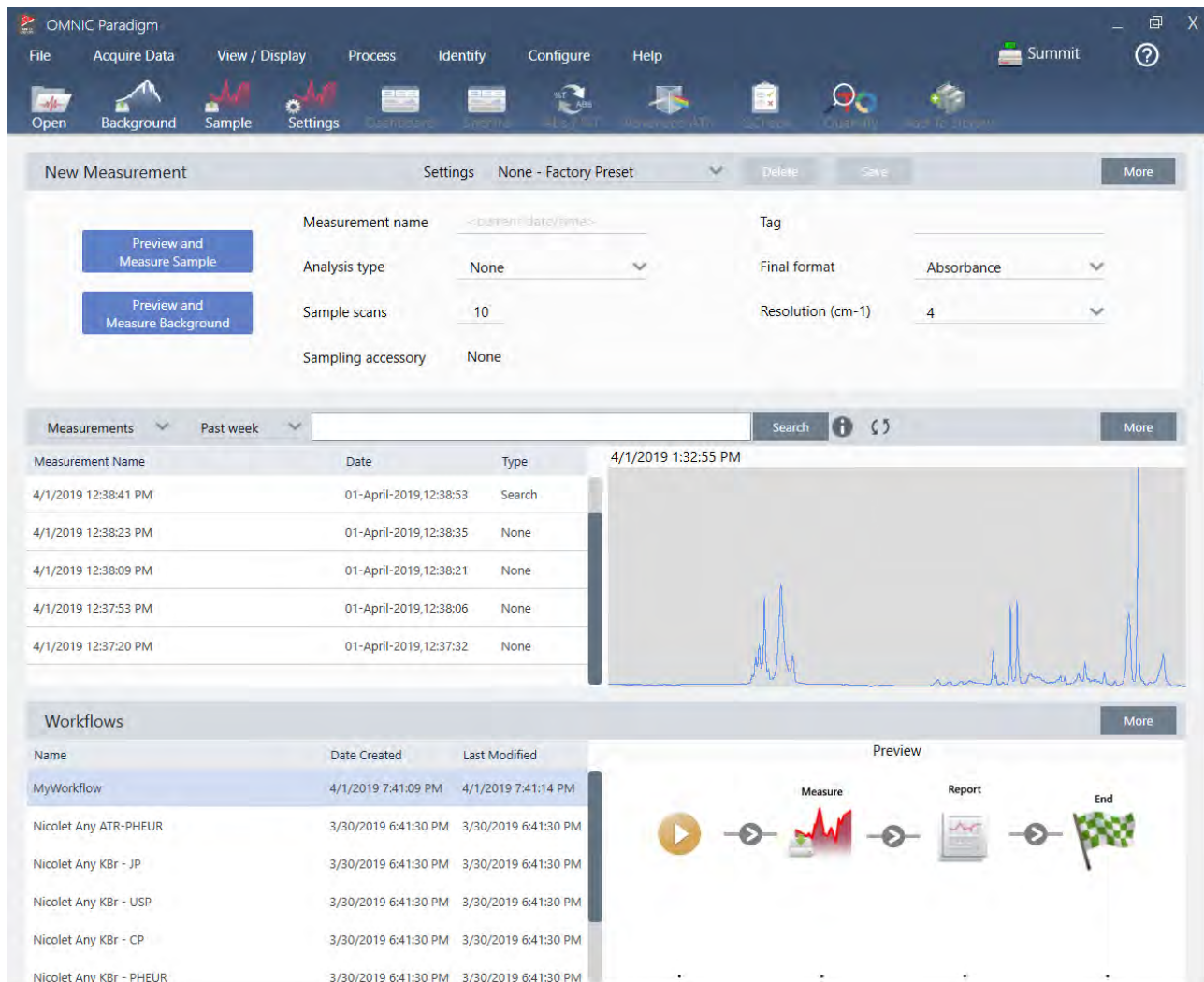
タッチスクリーンインターフェースは、Thermo Scientific™ Nicolet™ Summitスペクトロメーターのオプションのタッチスクリーンモードデバイスなどの小さな画面用に最適化されています。

タッチスクリーンインターフェースを使用して、サンプル測定と分析を行うか、または合理化され、簡素化されたインターフェースでのワークフローを実行します。

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の使用を開始

Desktop Interface(デスクトップインターフェイス)

図 1-2: デスクトップインターフェイスには、さらに複雑な測定と分析のための幅広い機能とツールが含まれています。



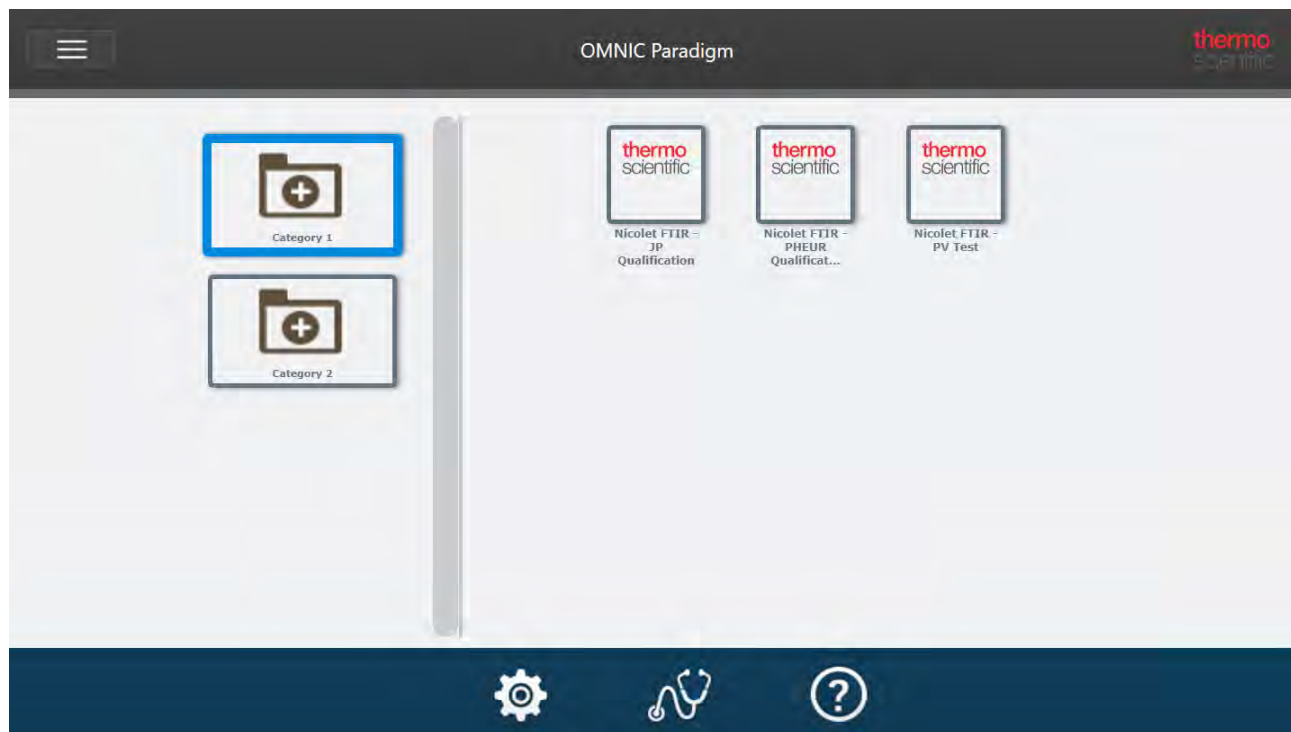
大画面で作業する場合や、Workflow Editor(ワークフローエディタ) や選択したスペクトルデータ処理および分析ツールなど、タッチスクリーンインターフェイスでは利用できない追加機能が必要な場合は、デスクトップインターフェイスを使用します。

Summitスペクトロメーターを外部モニターとUSBマウスおよびキーボードに接続して、デスクトップインターフェイスを使用して最高のエクスペリエンスを実現します。

Operator(オペレーター) インターフェイス

Operator(オペレーター) インターフェイスは、パッケージから開かれた作動中のワークフローとパッケージの管理に使用されます。パッケージを開いた後、オペレーターには、パッケージワークフローを実行するように設計された簡略化されたインターフェイスが表示されます。

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)の使用を開始



Operator(オペレーター)インターフェースの使用とカスタムソリューションの開発の詳細については、["カスタムソリューション"](#)を参照してください。

インターフェース間の切り替え

デスクトップソフトウェアとタッチスクリーンモードソフトウェアはさまざまなタスクやデバイス用に最適化されていますが、いつでもインターフェースを切り替えることができます。

◆ タッチスクリーンモードとデスクトップインターフェースを切り替えるには

- デスクトップからタッチスクリーンに切り替えるには、**Configure(構成) > View(ビュー / 表示) > Touchscreen(タッチスクリーン)**を選択します。
本ソフトウェアは一時的に閉じ、タッチスクリーンインターフェースで再び開きます。
- タッチスクリーンモードからデスクトップに切り替えるには、ホーム画面のメニューから**Switch to Desktop(デスクトップに切り替える)**を選択します。
本ソフトウェアが短時間閉じて、デスクトップインターフェースで再び開きます。

OMNIC Paradigmと他のThermo Scientificソフトウェアのペアリング

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) は、他のThermo Scientificソフトウェアと互換性があり、柔軟性が追加され、定量分析とデータセキュリティが実現します。

定量分析ソフトウェア

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) をTQ Analyst™ソフトウェアバージョン9.8以降と組み合わせて、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) で使用できる定量メソッドタイトルを開発および実行します。

- TQ Analyst EZ版
- TQ Analystプロフェッショナル版

詳細については、thermofisher.comの「TQ Analyst™ Pro Editionソフトウェア」を参照してください。

データセキュリティソフトウェア

Thermo Scientific™ OMNIC™ Security Suite(セキュリティスイート) ソフトウェアバージョン2.2以降を使用して、データのセキュリティと整合性を確保します。Security Suite(セキュリティスイート) ソフトウェアは、21CFR Part 11に準拠していることを保証し、以下が含まれています。

- システムアクセスの制御、セキュリティポリシーの処理、および責任とデータ整合性のためのデジタル署名の設定のための Security Administration(セキュリティ管理)
- 完全な監査証跡を作成および管理するためのAudit Manager(監査マネージャー)
- セキュリティインストールを検証するためのThermoソフトウェアIQツール

【このページは意図的に空白にしています】

2. お使いのシステムを構成

OMNIC Paradigmソフトウェアでは、機器接続とデータベースを構成し、データベースのバックアップスケジュールを設定し、お使いのソフトウェアをアップデートしたり、表示設定やその他のオプションをカスタマイズすることができます。

このセクションでは以下について説明します：

2.1 スペクトロメーターに接続	25
2.2 機器をThermo Fisher Connect Account(接続アカウント)に接続	33
2.3 お使いのデータベースを構成	36
2.4 OMNIC Paradigmオプションを設定	37
2.5 適格性基準の管理	39

2.1 スペクトロメーターに接続

お使いのラップトップまたはその他のデバイスをスペクトロメーターに接続する方法は3種類あります。選択する接続方法は機器によって決まります。

- USB
- ネットワーク接続
 - ローカルエリアネットワーク
 - ワイヤレスネットワーク
- 直接イーサネット接続

設定、インストール、および他のデバイスへの接続に関する詳細については、お使いの機器のユーザーガイドおよびヘルプ内容を参照してください。

2.1.1 USB接続を用いて機器に接続

一部の機器はUSB接続を用いて接続可能です。例えば、Nicolet iS5スペクトロメーターやNicolet Summit LITEスペクトロメーターはこのタイプの接続を使用します。

◆ USB接続を用いて機器に接続するには

1. USBケーブルを用いて、スペクトロメーターを作動中のOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)をお使いのコンピュータに接続します。
2. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)で、Configure(構成)に移動し、Connectivity(接続)を選択します。
3. 機器リストからスペクトロメーターを選択し、Connect(接続)をクリックします。

2.1.2 イーサネット接続またはワイヤレスネットワーク接続を用いて機器に接続します

イーサネットまたはワイヤレスネットワーク接続を用いて、Nicolet Summit、Summit PRO、またはSummit OAスペクトロメーターに接続できます。機器に接続する前に、データベース利用法とユーザー認証を理解していることを確認してください。

データベース利用法

機器に接続するときは、常にクライアントシステムで構成されたデータベースを使用することになります。

例えば、ラップトップでOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)を使用していて、Summitスペクトロメーターに接続する場合、ラップトップのソフトウェアで構成されたデータベースを引き続き使用することになります。スペクトロメーターの接続を切断しても、ラップトップのソフトウェアは、スペクトロメーターとの接続中に収集されたデータを示します。その場合、Summitスペクトロメーターで直接作業しても、ラップトップで収集されたデータは示されません。

2. お使いのシステムを構成

共有リモートデータベースを用いるときに表示されるデータは、使用しているシステムによって異なります。例えば、複数のSummitスペクトロメーターが、ラップトップで実行されているOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) とリモートデータベースを共有している場合、ラップトップを使用して、任意の機器によって収集されたデータを表示することができます。しかしながら、任意の個々のスペクトロメーターには、その機械で収集されたデータのみが表示され、その他のいかなるスペクトロメーターから取得されたデータも表示されません。

データベースの構成の詳細情報については、"[お使いのデータベースを構成](#)"を参照してください。

ユーザ認証

Summitスペクトロメーターは、あなたが接続するときに、お使いのデバイスを確認・認証して、その接続が安全かつ信頼できることを確認する必要があります。

多くの組織はWindowsドメインを使用することで、デバイス間の認証を管理しています。ドメインは、ユーザーアカウント情報とセキュリティ設定を共有する一群のコンピュータのグループです。ドメインにより、管理者は、ドメインコントローラーと呼ばれる単一のサーバーから多くのデバイス、アカウント、およびポリシーを管理することができます。これにより、多くの場合、同じユーザー名とパスワードを用いてドメイン上の多くのデバイスにログインすることが可能です。

お使いのラップトップからスペクトロメーターに接続すると、スペクトロメーターとそのラップトップとがともにドメインコントローラーと通信して、その接続が安全で信頼できるものであることを確認します。いずれかのデバイスがドメイン上にない場合は、接続を確立することはできません。

両デバイスが同じドメインで管理されている場合には、ローカルネットワーク接続またはワイヤレスネットワーク接続を使用してスペクトロメーターに接続します。

◆ ローカルエリアネットワークまたはワイヤレスネットワーク上のNicolet Summitスペクトロメーターに接続するには

お使いのコンピュータとスペクトロメーターが共有ドメインの一部である場合(推奨)、WiFiまたはイーサネットを用いて接続します。始める前に、Summitスペクトロメーターとコンピュータが同じイーサネットまたはWiFiネットワーク上にあることを確認してください。

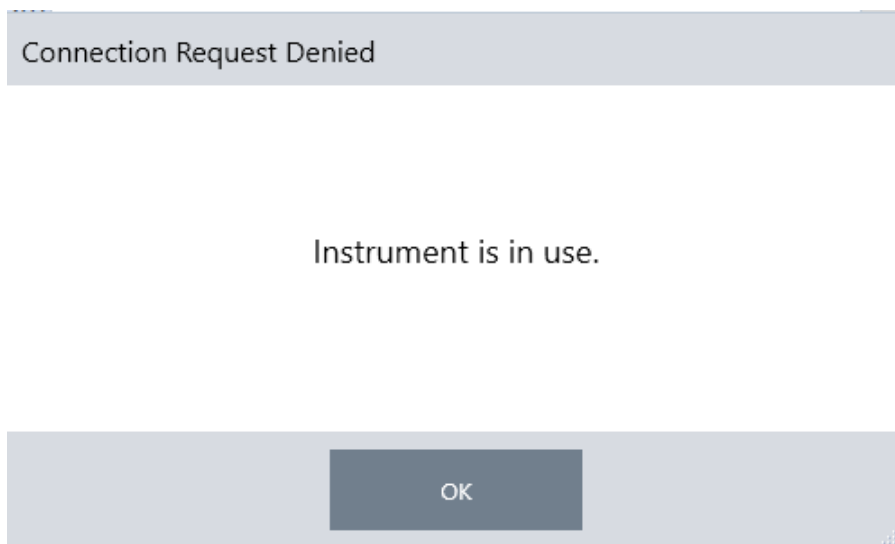
1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) で、Configure(構成) に移動し、Connectivity(接続) を選択します。
2. スペクトロメーターを選択し、Connect(接続) をクリックします。

お使いのスペクトロメーターが利用可能な機器リストに表示されない場合は、機器のIPアドレスまたはホスト名を入力して、Connect(接続) をクリックすることもできます。

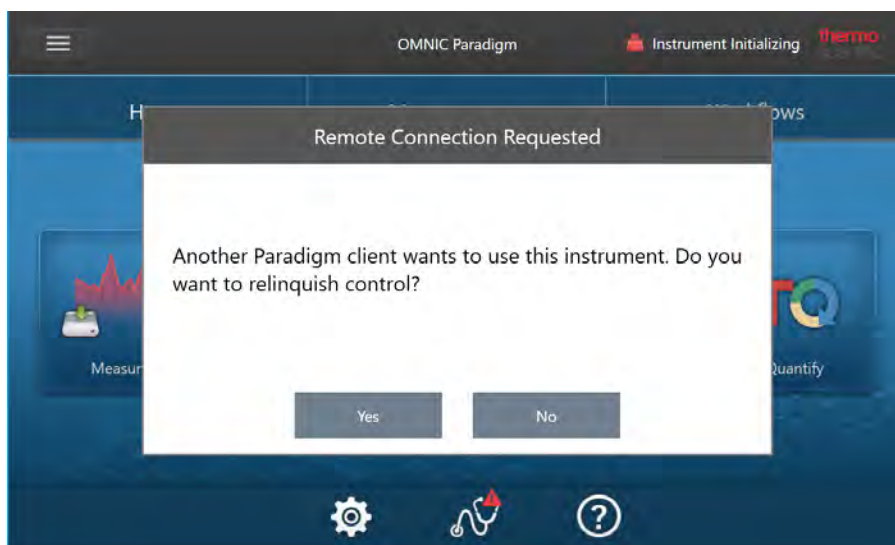
接続しようとしたときにスペクトロメーターがすでに使用中の場合は、接続が拒否される場合があります。接続リクエストは以下の2つの理由で拒否される可能性があります：

2. お使いのシステムを構成

- 当該機器がサンプル測定中またはデータ処理に使用中であり、中断することはできない場合。



- 別のユーザーが機器を操作していて、制御を放棄しないことを選択した場合。



現ユーザーが接続リクエストから30秒以内に回答しない場合、接続は自動的に許可されます。

接続リクエストが自動的に拒否された場合や現ユーザーによって拒否された場合は、Workstation(ワークステーション)モードに戻る、別の機器に接続する、または接続を再試行することができます。

2.1.3 イーサネットケーブルで機器に直接接続

イーサネットケーブルを用いてスペクトロメーターに直接接続することも可能です。

2. お使いのシステムを構成

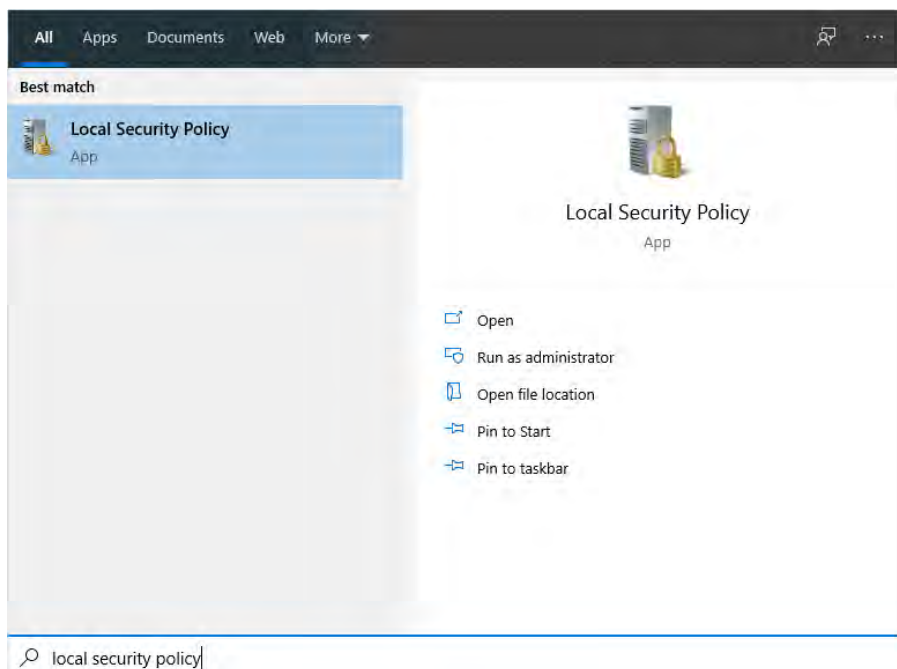
直接接続を使用するには、スペクトロメーターのローカルのセキュリティポリシーを編集する必要があります。この構成を使用していると、機器はユーザー認証用のドメインコントローラーと通信できないため、機器とお使いのコンピュータ間の通信を可能にするようにセキュリティポリシーを変更する必要があります。

注記 セキュリティポリシーを変更すると、貴組織にセキュリティリスクが生じる可能性があります。貴組織のセキュリティポリシーに従ってください。

◆ 直接接続を使用するには

1. 機器のセキュリティポリシーをModify(変更修正)

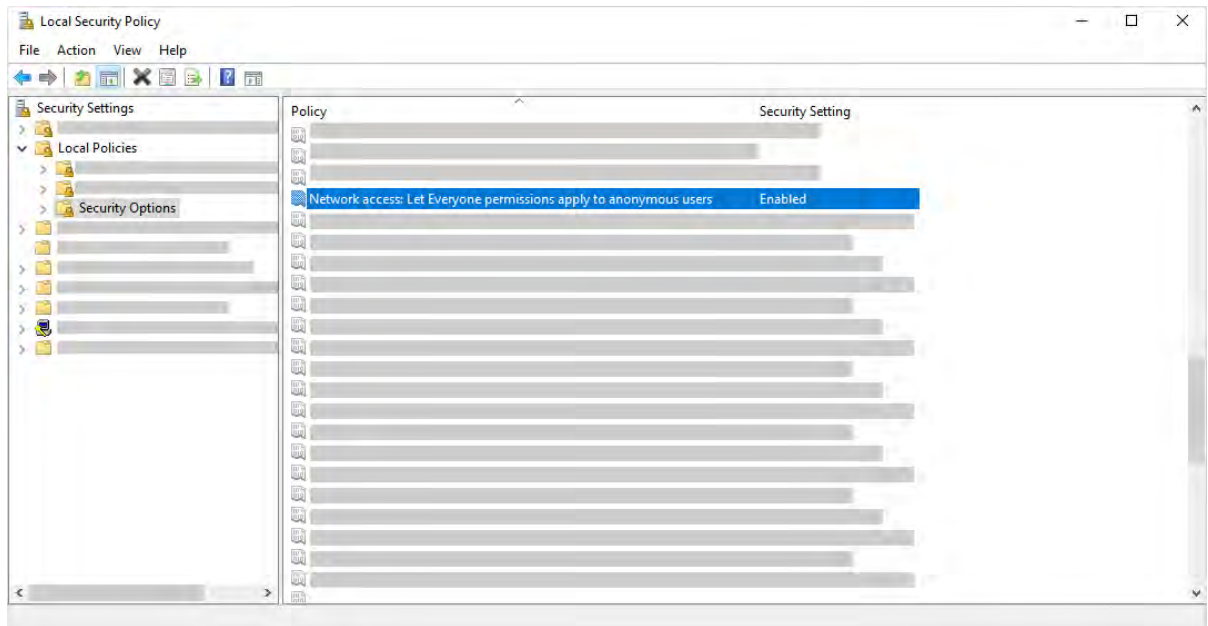
- a. Nicolet Summitスペクトロメーターで、ローカルのSecurity Policies(セキュリティポリシー)アプリケーションを開きます。



- b. Security Settings(セキュリティ設定) > Local Policies(ローカルポリシー) > Security Options(セキュリティオプション) に移動します。
- c. Network access: Let Everyone permissions apply to anonymous users(ネットワークアクセス: 全員の権限を匿名ユー

2. お使いのシステムを構成

ザーに適用)をEnabled.(有効)にします。



- イーサネットケーブルを使用して、コンピュータをスペクトロメーターに直接接続します。
- OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)で、本ソフトウェアが機器を自動的に認識しない場合は、Configure(構成)>Connectivity(接続)に移動して、スペクトロメーターに接続します。

セキュリティ対策が施されていないデバイスからの接続の防止

スペクトロメーターがThermo Scientific Security Suite(セキュリティスイート)ソフトウェアを使用してデータを保護し安全な状態に保っている場合は、セキュリティ対策が施されていないデバイスからの接続を防止することをお勧めします。例えば、default(初期)設定では、Security Administration(セキュリティ管理)ソフトウェアとAudit Manager(監査マネージャー)ソフトウェアによって管理されていないラップトップが安全なスペクトロメーターに接続されている場合、ラップトップでの処理は管理またはログに記録されません。

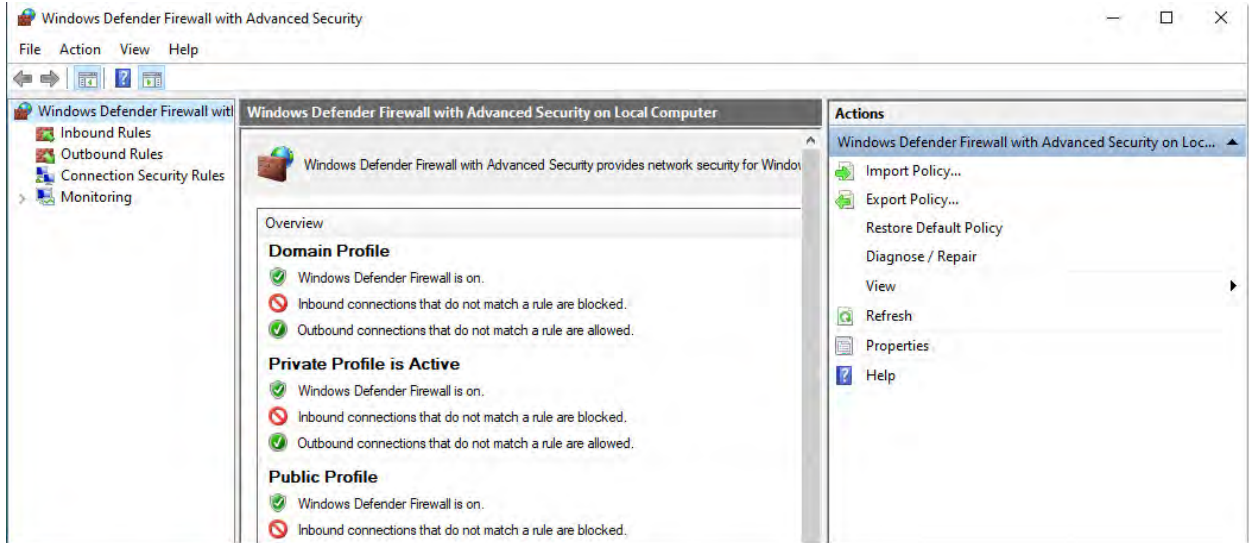
セキュリティ対策が施されていないデバイスからの接続を防ぐには、安全なスペクトロメーターでファイアウォール設定を編集する必要があります。**RabbitMQ**グループまたは**OMNIC Paradigm**グループに属するすべてのインバウンドルールを無効にします。これらのルールの追加詳細については、"[ファイアウォール設定](#)"を参照してください。

以下の手順では、Windows Defenderファイアウォールでインバウンドルールを無効にする方法について説明します。貴組織では、別のアプリケーションを使用してファイアウォール設定を管理している可能性があります。

◆ Windows Defenderファイアウォールでインバウンドルールを無効にするには

- Windows Defender Firewall with Advanced Security(高度なセキュリティを利用したWindows Defenderファイアウォール)を開きます。

2. お使いのシステムを構成



2. 左側のペインで、**Inbound Rules(インバウンドルール)**に移動します。
3. 一次ペインで、Inbound Rules(インバウンドルール)下で、無効にするルールを選択します。
4. Actions(処理)ウィンドウで、**Disable Rule(ルールを無効にする)**をクリックします。

選択したルールのEnabled(使用可能)列がNo(いいえ)に変更されます。

このルールを再度有効にするには、Actions(処理)列のEnable Rule(ルールを有効にする)をクリックします。

トラブルシューティング

機器がAvailable Connections(利用可能な接続)に表示されない

Configure(構成) > Connectivity(接続)に移動したときに、利用可能な機器リストにスペクトロメーターが自動的に表示されない場合は、ネットワーク接続を確認してください。

機器名が機器リストに表示されるためには、スペクトロメーターと接続を行うコンピュータが同じネットワーク上にある必要があります。例えば、貴組織に複数のワイヤレスネットワークがある場合は、スペクトロメーターとコンピュータが同じネットワーク上にあることを確認してください。

スペクトロメーターの名前が機器リストに表示されない場合は、スペクトロメーターのIPアドレスを入力して接続を試みるができます。

コンピュータ名を変更後サービスと通信しない

コンピュータ名を変更後、システムがどのサービスとも通信しないとSystem Status(システムステータス)ダイアログに表示されたら、OMNIC Paradigm Prerequisites(OMNIC Paradigm 必要条件)のインストールを修復する必要があります。

インストールを修復する方法は、MicrosoftのWindowsでのアプリとプログラムを修復する方法に関するサポート情報を参照ください。指示に従って、OMNIC Paradigm Prerequisites(OMNIC Paradigm 必要条件)を修復してください。

高度なトラブルシューティング

スペクトロメーターに接続できない場合は、ファイアウォールの設定を確認する必要があります。貴組織のIT管理者またはネットワーク管理者のみがファイアウォール設定を編集する必要があります。

ファイアウォール設定

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) がインストールされると、ファイアウォール設定がアップデートされ、スペクトロメーターとOMNIC Paradigm Workstation(OMNIC Paradigmワークステーション) ソフトウェア間の接続が可能になります。お使いの接続に問題が発生した場合は、スペクトロメーターと接続しているコンピュータの両方でファイアウォール設定をチェックして、以下のポートがトラフィックを許可していることを確認してください。

下表は、Windows Defenderファイアウォールで設定されているインバウンドルールを反映しています。利用可能なフィールドは、貴組織がネットワークファイアウォール設定を管理するために使用するアプリケーションによって異なる場合があります。

表2-1:必須インバウンドルール

名前	説明と使用されるポート
Password Management(パスワード管理) (NB-Name-In)	説明: NetBIOS名前解決を許可するPassword Management(パスワード管理) のインバウンドルール。 グループ: Thermo Scientific Password Management(パスワード管理) プログラム: システム ポート: UDP 137 処理: Allow(許可) プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック
Password Management(パスワード管理) (NB-Session-In)	説明: NetBIOSセッションサービス接続を許可するためのPassword Management(パスワード管理) のインバウンドルール。 グループ: Thermo Scientific Password Management(パスワード管理) プログラム: システム ポート: TCP 139 処理: Allow(許可) プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック
Password Management(パスワード管理) (SMB-In)	説明: 名前付きパイプを介したServer Message Block(サーバーメッセージブロック) の送受信を許可するPassword Management(パスワード管理) のインバウンドルール。 グループ: Thermo Scientific Password Management(パスワード管理) プログラム: システム ポート: TCP 445 処理: Allow(許可) プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック

2. お使いのシステムを構成

名前	説明と使用されるポート
Thermo Scientific Instrument Discovery (Thermo Scientific機器検出)	<p>説明: クライアントがこの機器を検出できるようにします</p> <p>グループ: OMNIC Paradigm</p> <p>プログラム: C:\Program Files\Thermo Scientific\IR Instrument Engine\Instrument.IR.Engine.Service.exe</p> <p>ポート: UDP 50123</p> <p>処理: Allow(許可)</p> <p>プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック</p>
Thermo Scientific Web API Server (Thermo ScientificウェブAPIサーバー)	<p>説明: クライアントがウェブAPIにアクセスできるようにします</p> <p>グループ: OMNIC Paradigm</p> <p>プログラム: システム</p> <p>ポート: TCP 9004</p> <p>処理: Allow(許可)</p> <p>プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック</p>
RabbitMQ - Peer Discovery (RabbitMQ - ピアディスカバリー) (EPMD)	<p>グループ: RabbitMQ</p> <p>プログラム: C:\Program Files\erl9.3\erts-9.3\bin\epmd.exe</p> <p>ポート: TCP 4369</p> <p>処理: Allow(許可)</p> <p>プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック</p>
RabbitMQ - Client Connection (RabbitMQ - クライアント関係) (erl)	<p>グループ: RabbitMQ</p> <p>プログラム: C:\Program Files\erl9.3\erts-9.3\bin\erl.exe</p> <p>ポート: TCP 5671、TCP 5672</p> <p>処理: Allow(許可)</p> <p>プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック</p>
RabbitMQ - Management Console (RabbitMQ - マネージメントコンソール) (erl)	<p>グループ: RabbitMQ</p> <p>プログラム:</p> <p>C:\Program Files\erl9.3\erts-9.3\bin\erl.exe</p> <p>C:\Program Files\erl9.3\bin\erl.exe</p> <p>ポート: TCP 15672</p> <p>処理: Allow(許可)</p> <p>プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック</p>

2. お使いのシステムを構成

名前	説明と使用されるポート
Thermo Scientific History WebAPI(履歴ウェブAPI)	グループ: OMNIC Paradigm プログラム: システム ポート: TCP 9002 処理: Allow(許可) プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック
Thermo Scientific Workflow Engine (Thermo Scientificワークフローエンジン)	グループ: Thermo Scientificワークフローエンジン プログラム: システム ポート: TCP 9090 処理: Allow(許可) プロファイル: ドメイン、プライベート、パブリック

2.2 機器をThermo Fisher Connect Account(接続アカウント)に接続

お使いの機器をあなたのThermo Fisher Connect Account(接続アカウント)に接続して、お使いの機器とデータをリモートで表示および管理します。

Thermo Fisher Connectと接続された機器の管理の詳細情報については、Thermo Fisher Connectアプリケーションのヘルプガイドを参照してください。

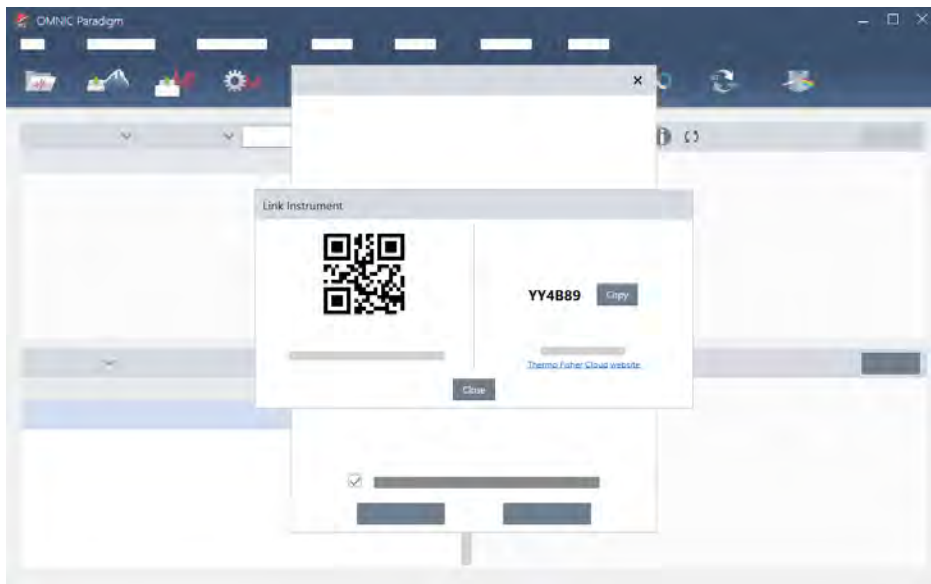
始める前に

お使いの機器をThermo Fisher Connectに接続するには、Thermo Fisher Connect Account(接続アカウント)が必要です。アカウントを作成するには、<https://www.thermofisher.com/us/en/home/digital-science/thermo-fisher-connect.html>にアクセスしてください。

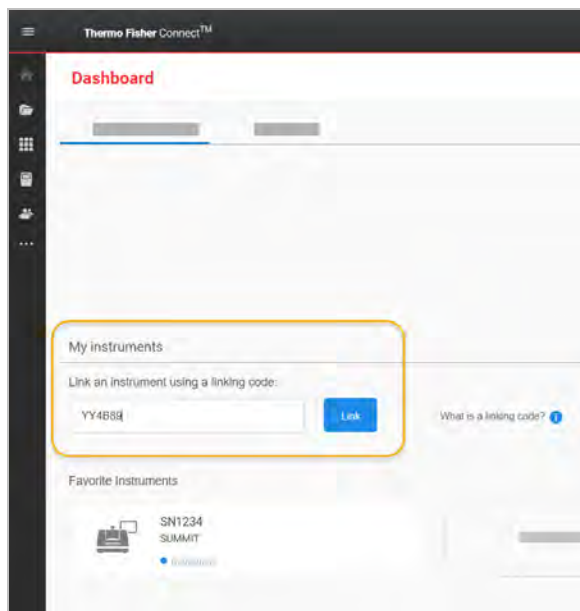
◆ お使いの機器をThermo Fisher Connect Account(接続アカウント)に接続するには

1. ダッシュボードからOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のDesktop(デスクトップ)インターフェースを使用して、Acquire Data(データ取得) > Diagnostics(診断) > Instrument Health(機器健全性)に移動します。
2. オプション: 機器健全性データの共有をオプトインします。
3. Link Instrument(装置接続)をクリックします。
4. 接続を完了するには、お使いのモバイルデバイスのThermo Fisher Instrument Connectアプリを使用してQRコードをスキャンするか、6桁のコードを使用します。

2. お使いのシステムを構成



- 6桁のコードを使用するには
 - a. **Copy(コピー)**をクリックして、コードをクリップボードにコピーします。
 - b. お使いのウェブブラウザでThermo Fisher Connectに移動します。
 - c. Thermo Fisher ConnectウェブアプリケーションのダッシュボードのMy Instruments(マイインスツルメント)で、6桁のコードを貼り付けるか入力して、**Link(リンク)**をクリックします。



その機器は、Thermo Fisher ConnectのInstrumentConnectセクションに表示されるようになります。

- QRコードをスキャンするには

2. お使いのシステムを構成

- a. お使いのモバイルデバイスでInstrument Connectアプリを開きます。
- b. 画面の右上隅にある+アイコンをタッチして、機器を追加します。
- c. **QR Code(QRコード)**を選択します。
- d. お使いのデバイスを使用してQRコードをスキャンします。

その機器はリンクされ、モバイルアプリとオンラインに表示されます。

2.3 お使いのデータベースを構成

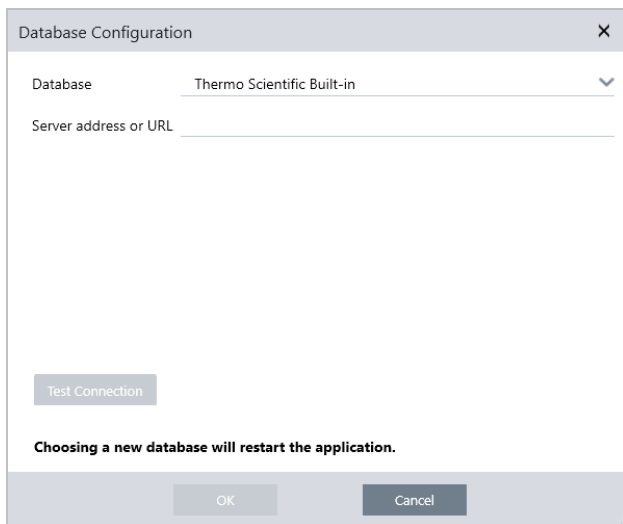
OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) を最初にインストールすると、default(規定) のデータベースがローカルデバイスに設定され、すぐ使えるようになります。このローカルデータベースを継続して使用することも、お使いのネットワーク上の別の場所にあるリモートデータベースに接続することもできます。リモートデータベースを使用すると、測定の履歴、設定、およびその他のデータをデバイス間で簡単に共有できます。

2.3.1 リモートのDatabase(データベース) に接続

リモートデータベースに接続すると、測定の履歴、設定、およびその他のデータをデバイス間で簡単に共有できます。データベースの構成はあなたの作業に合わせていつでも変更できます。

◆ リモートデータベースに接続するには

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) のデスクトップインターフェースを使用して、**Configure(構成)** に移動し、**Database(データベース)** を選択します。



2. Database(データベース) リストからデータベースの種類を選択します。規定の選択はThermo Scientific Built-inです。カスタムデータベースに接続するには、データベースの種類、バージョン、名前、およびポートをタイプ入力します。また、ユーザー名とパスワードの入力が必要になる場合もあります。
3. データベースサーバーのIPアドレスまたはURLを入力します。
4. **Test Connection(接続テスト)** をクリックして、本ソフトウェアがサーバーに接続できるかどうかを確認します。
5. テストが有効な接続をレポートした場合は、**OK** をクリックしてリモートデータベースに接続します。

本ソフトウェアは接続中にリスタートします。

ダッシュボードのMeasurements(測定) グループをチェックして、リモートのデータベースからのデータが表示されていることを確認するか、Configure(構成) > Database menu(データベース) メニューに戻って現在の接続先を表示します。

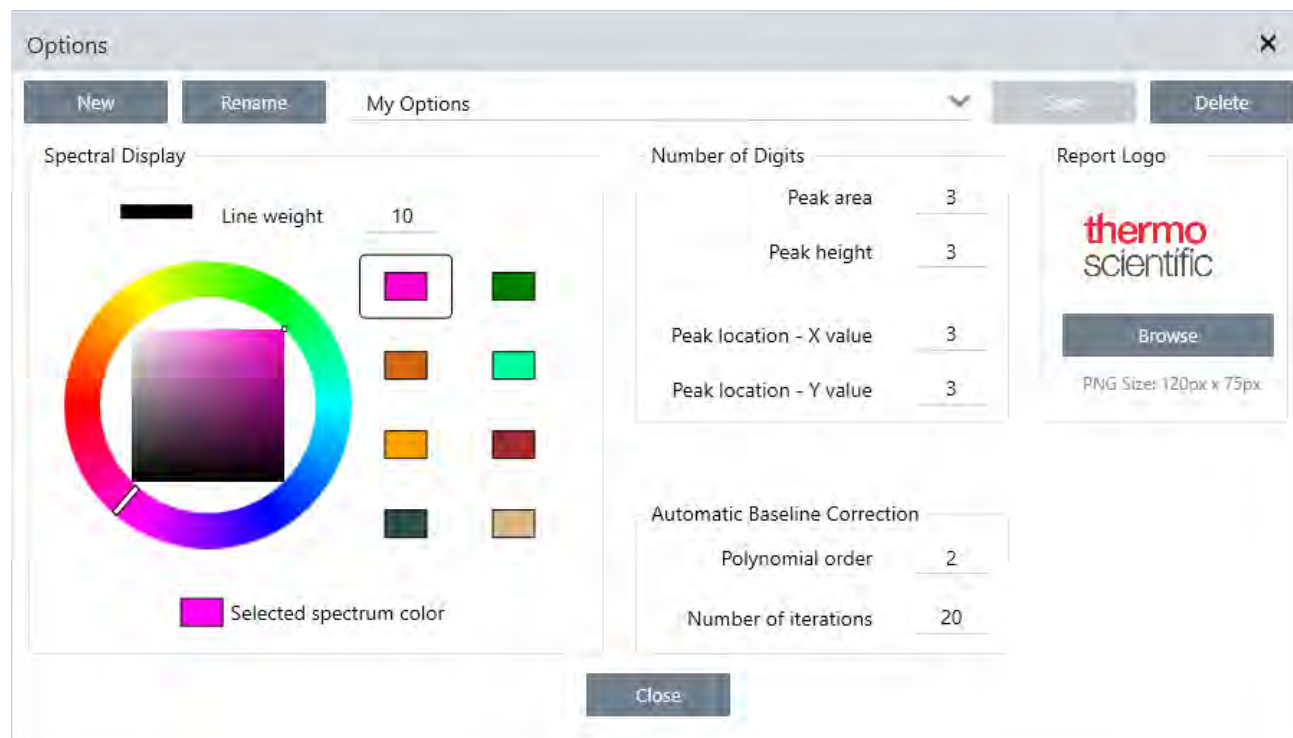
2.4 OMNIC Paradigmオプションを設定

Options(オプション) ダイアログを使用して、スペクトル表示をカスタマイズし、ピーク面積、ピーク高さ、および位置に使用される桁数を設定し、自動ベースライン補正を構成します。

◆ OMNIC Paradigmオプションを設定および保存するには

- Options(オプション) ダイアログを開きます。
 - Desktop(デスクトップ) インターフェース: **Configure(構成)** メニューを開き、**Options(オプション)** を選択します。
 - Touchscreen(タッチスクリーン) インターフェース: 設定を開き、**Options(オプション)** タブに移動します。
- New(新規)** を選択します。
- 新規オプション名を入力し、**Save(保存)** をクリックします。
- あなたの設定を編集します。
- 設定の編集が終了したら、**Save(保存)** を選択して変更を保存します。
- 以前の画面に戻るには、**Close(閉じる)** を選択します。

図2-1: Options(オプション) ダイアログ



2.4.1 スペクトル表示設定をカスタマイズ

Spectral Display(スペクトル表示) グループは、Spectra(スペクトル) ビューのスペクトルの色と線幅を設定するために使用されます。

- **Line Weight(線幅)** : スペクトルを描くのに使用される線幅を決定します。Spectra(スペクトル) ビューに表示されるすべてのスペクトルに適用されます。
- **Selected Spectrum Color(選択スペクトルの色)** : 現在選択されているスペクトルを強調表示するために使用される色を決定します。

追加の色は選択されていないスペクトルの色を設定します。

2.4.2 桁数を設定

Number of Digits(桁数) グループを使用して、小数点記号の後の桁数制限を設定します。この制限は以下に適用されます：

- Peak area(ピーク面積)
- Peak height(ピーク高さ)
- Peak location - X value(ピーク位置 - X値)
- Peak location - Y value(ピーク位置 - Y値)

この設定は設定調整後に実行される操作にのみ適用されることに留意してください。スペクトル情報の数字は、情報記録時に使用された設定を維持し、新規設定を反映するようにアップデートされません。例えば、3桁の数字を指定した設定でピーク検出操作を実行すると、スペクトル情報には3桁の数字が表示されます。その後、小数点以下の桁数設定を1桁に変更した場合でも、以前のピーク検出操作のスペクトル情報には、引き続き3桁の数字が表示されます。

2.4.3 Automatic Baseline Correction(自動ベースライン補正) を構成

Process(プロセス) メニューのAutomatic Baseline Correction(自動ベースライン補正) を使用して、傾斜または湾曲したベースラインを自動的に補正します。

多項式の次数と繰り返し回数を設定して、ベースラインを自動的に補正するために使用する方程式の次数と繰り返し回数を指定します。

2.4.4 カスタムロゴをレポートに追加する

レポートとテンプレートレポートにロゴを使用します。イメージは、標準レポートおよびワークフローのTemplate Report(テンプレートレポート) を使用して作成したレポートに表示されます。

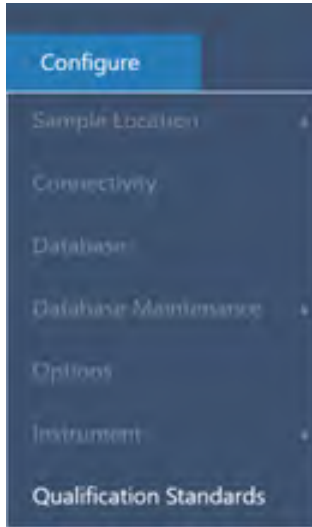
レポートイメージは、PNGファイルを使用し、自動的に120 px X 75 px にリサイズされます。

2.5 適格性基準の管理

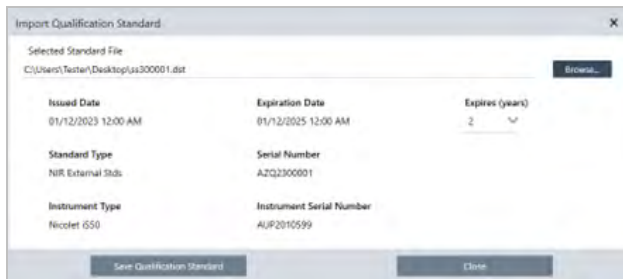
適格性基準ツールを使用して、システムに実装されている適格性基準を管理します。このツールを使用して、QDFおよびDST基準ファイルのインポートと有効期日、シリアル番号などの追跡管理ができます。

◆ 適格性基準を追加するには

1. デスクトップ画面から、Configure(構成)メニューに移動し、Qualification Standards(適格性基準)を選択します。



2. Import Qualification Standards(適格性基準のインポート)を選択します。
3. Browse(参照)をクリックして、QDFまたはDST基準ファイルを選択します。Open(開く)を選択して、基準からデータをロードします。



4. Expires(有効期限)リストから値(年数)を選択して、基準がいつ失効するかを選択します。選択した有効期限の値に合わせて、有効期日が更新されていることを確認します。
5. Save Qualification Standard(適格性基準を保存)を選択します。保存した基準は確定され、編集や削除はできません。有効期日を変更したい場合は、再度、基準をインポートして保存する必要があります。これにより、新しい有効期日が追加されます。最初の基準が差し替えられたり削除されたりすることはありません。
6. ダイアログを閉じます。新しい基準をテーブルで確認できます。

2. お使いのシステムを構成

ヒントテーブルをソートするには、列の見出しをクリックします。たとえば、Expiration Date(有効期日)の見出しをクリックすると、有効期日が近い順に基準が表示されます。

【このページは意図的に空白にしています】

3. チュートリアルとチュートリアル

このセクションのチュートリアルでは、サンプルの識別、定量化、検証、ワークフローの作成と実行など、OMNIC Paradigmソフトウェアで使用される最も一般的な手法のいくつかを紹介します。

これらのチュートリアルは、OMNIC Paradigmソフトウェアを初めて使用する個人ができるだけアクセスできるようにすることを目的としています。独自で開始したい場合は、"[バックグラウンドを測定](#)"を参照してサンプル測定を開始してください。さらに概要の説明が必要な場合は、"[重要な概念と機能](#)"を参照してください。

このセクションでは以下について説明します：

3.1 ATRで不明のサンプルを分析	42
3.2 透過で不明のサンプルを分析	54
3.3 QCheck(Qチェック) でサンプル組成を検証	66
3.4 サンプル組成の定量	71
3.5 1次ワークフローの作成と実行	74

3.1 ATRで不明のサンプルを分析

FTIRスペクトロメーターとOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) は、不明のサンプルに含まれるものを特定するのに役立ちます。この項では、減衰全反射(またはATR) サンプリング手法を使用してサンプル測定方法とメソッドタイトルについて説明します。これは、サンプル材料からFTIRデータを取得するための一般的で「混乱のない」手法です。この項には、分析結果の解釈に自信を構築するのに役立ついくつかの例が含まれています。

次の方法を学習します：

- ATRアクセサリーを準備します
- 分析を設定して実行し、
- 結果を評価して確認する

これらの手順に従って、ATRサンプリング手法を使用して不明の純粋なサンプルを測定、分析します。

3.1.1 ATRアクセサリーを準備します

まず、ATRアクセサリーがスペクトロメーターのサンプルコンパートメントに挿入され、適切なクリスタルが取り付けられていることを確認します。各クリスタル材料は、より広いスペクトル領域、より高いエネルギースループット、またはより高い耐久性など、ある種のサンプリングの利点を提供します。正しい選択は、利用可能なクリスタル、サンプル材料に最適なクリスタル、および必要な情報を生成するクリスタルに応じて異なります。詳細情報については、ATRアクセサリーに付属の情報を参照してください。

これは、Nicolet™ Summit FTIRスペクトロメーターに取り付けられたダイヤモンドクリスタルを備えたThermo Scientific™ Everest ATRアクセサリーです。

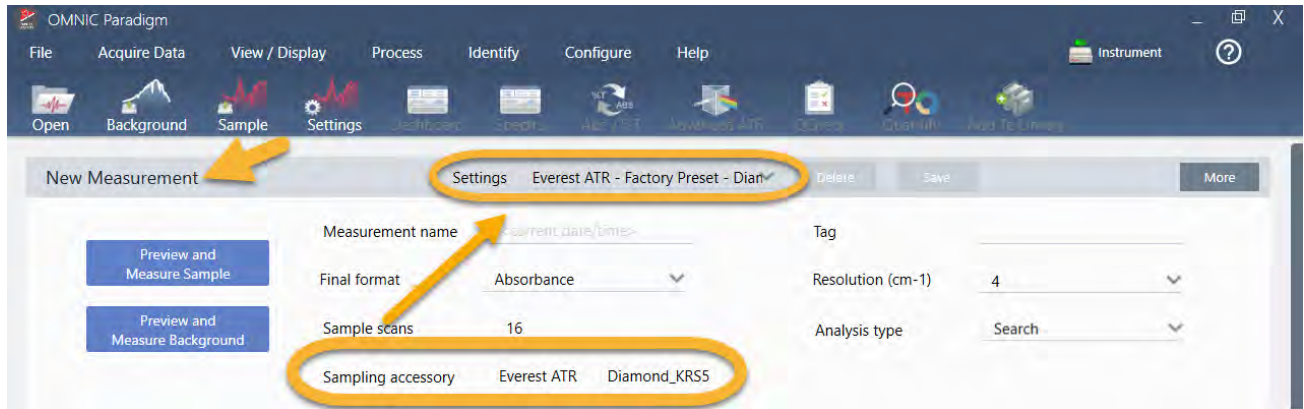


スペクトロメーターが準備ができたときに正確なバックグラウンド測定を行えるように、クリスタルがきれいであることを確認してください。クリスタルをきれいにするには、柔らかい布で軽くたたきます。クリスタルをさらに厳密にクリーニングする必要がある場合は、ATRアクセサリーに付属のユーザーガイドを確認してください。このガイドには、各クリスタルタイプに適した洗浄溶剤が一覧表示されている必要があります。

3.1.2 分析を設定する

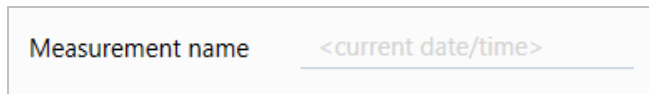
次の手順は、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の設定手順です。本ソフトウェアを開くと、メインウィンドウにダッシュボードが表示されます。重要な測定条件設定は上部にあります。

3. チュートリアルとチュートリアル



最初に、Sampling Accessory(サンプリングアクセサリ)の読み取り値に、取り付けられているアクセサリが表示されていることを確認します。そうでない場合は、アクセサリを取り付け直します。そのアクセサリの出荷時の初期設定が「Settings(設定)」の下に表示されていることに注意してください。

次に、測定名を入力するか、測定の正確な日付と時間である提案された名前を残すことができます。



次に、Analysis Type(分析タイプ)がSearch(サーチ)に設定されていることを確認します。これにより、サンプルスペクトルとFTIRライブラリスペクトルのポイントごとの比較が実行されます。出力の品質は、選択したライブラリ数のスペクトルのソース / 光源と品質に応じて異なります。



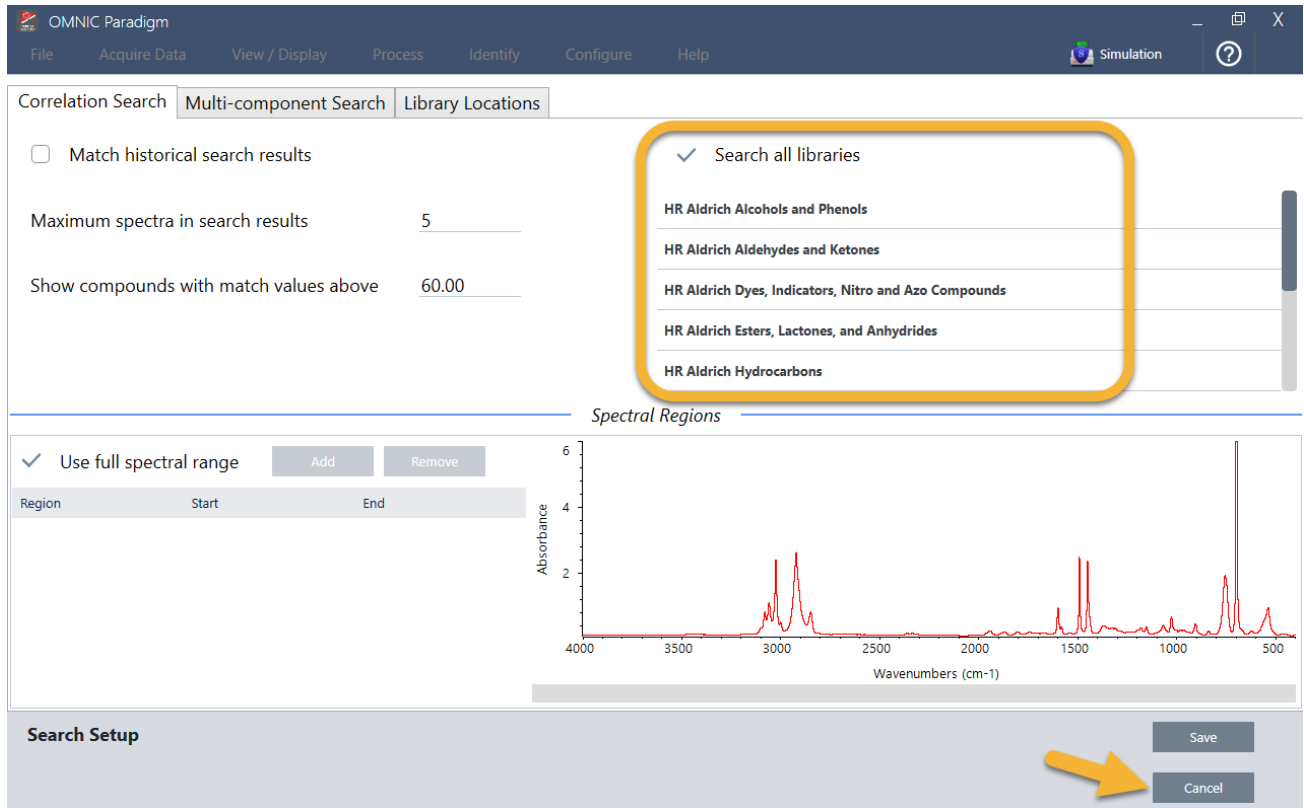
最後に、取得設定(サンプルスキャン回数、分解能、出力フォーマット)を確認します。上記の設定はすべてこの分析の適切な開始値です。

取得するサンプルデータの品質が分析結果に影響を与えることに注意することが重要です。例えば、測定するスキャン回数を減らして分析を高速化したり、分解能を下げたりすると、分析結果の確実性が低下する可能性があります。

3.1.3 スペクトルライブラリを検討

規定では、既存のすべてのスペクトルライブラリが自動的に選択されます。ライブラリの選択肢を表示または変更するには、Identify(分析)メニューのSearch Setup(サーチ設定)を選択します。

3. チュートリアルとチュートリアル



このデモンストレーションでは、OMNIC Paradigmソフトウェアで提供される無料のライブラリを使用しています。

Cancel(キャンセル)を選択して、Search Setup(サーチ設定)ウィンドウを閉じます。

同じメニューでLibrary Manager(ライブラリマネージャー)を使用して、スペクトルライブラリを簡単に作成することもできます。作成するライブラリは、不明のサンプルで見つかる予想されるものを表す純粋なマテリアルから作成する必要があります。

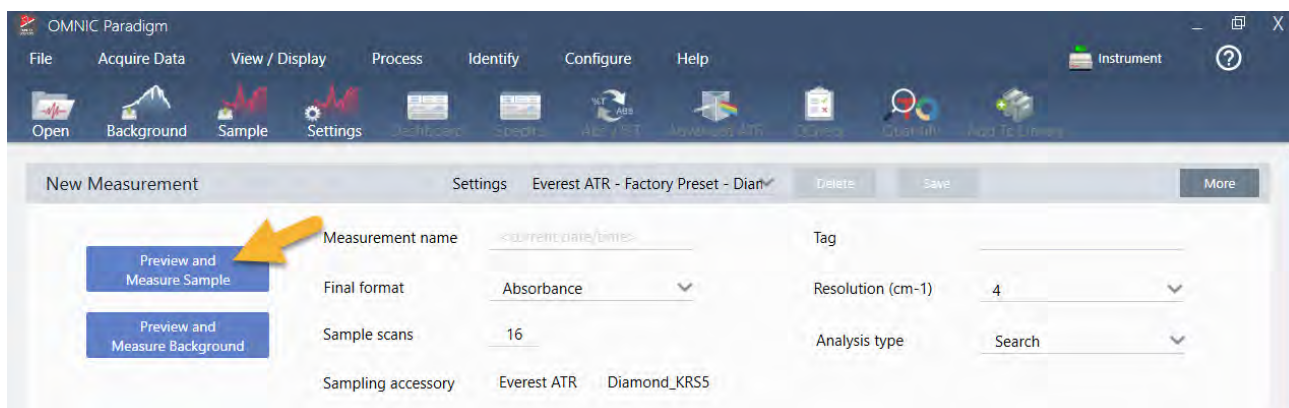
ライブラリスpekトルは通常、サンプルspekトルと同じかそれ以上の品質です。同じサンプリング手法(この場合はATR)を使用して取得した場合にも役立ちます。ライブラリスpekトルが透過技術を使用して取得された場合、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)には、結果を改善するためにサンプルspekトルに適用できる補正があります。これについては、この項の後半で詳細に説明します。

サーチを実行する前に、サンプルデータに対して出力フォーマット、分解能、spekトル領域などの変換を実行する必要はありません。本ソフトウェアが自動的に変換を実行します。

3.1.4 サンプル測定と分析

分析を開始するには、**Preview and Measure Sample(プレビューとサンプル測定)**をクリックします。

3. チュートリアルとチュートリアル



この分析は、バックグラウンド測定から始まります。ATRバックグラウンドの唯一の要件は、クリスタルがきれいであることを確認することです。バックグラウンドスペクトルは、スペクトロメーター、ATRクリスタル、またはバックグラウンド環境に起因するサンプルデータ内の信号を除去するために使用されます。

本ソフトウェアは、スペクトルペインに現在のバックグラウンドスペクトルのプレビューを表示します。以下に示すバックグラウンド形状は、ダイヤモンドクリスタルの典型的なものです。



Start Background Measurement (バックグラウンド測定の開始) をクリックします。

バックグラウンド測定が完了すると、そのイメージが結果パネルとスペクトルペインに表示されます。

3. チュートリアルとチュートリアル



サンプルが液体の場合は、圧力塔を上げて邪魔にならないように回転させます。きれいなピペットを使用して、クリスタルに一滴落します。クリスタルの各タイプはサイズが異なり、より多くのサンプルが必要な場合があることに注意してください。クリスタルを完全に覆うのに十分なサンプルを使用してください。

図3-1: ATRで液体を測定

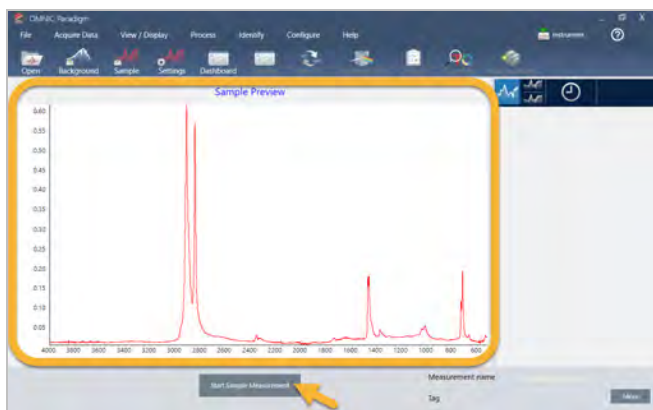


固体サンプルの場合は、圧力塔のノブを反時計回りに回してアームを上げます。次に、サンプルをクリスタルに置き、ノブを時計回りに回してアームを下げます。カチツと音がするまでノブを回し続けます。このデモンストレーションでは、プラスチックカードを測定しています。

図3-2: ATRで固体を測定



サンプルを配置したら、**Preview Sample(サンプルプレビュー)**をクリックして、スペクトルペインでサンプルデータをプレビューします。プレビュースペクトルのピークが非常に小さい場合は、さらに濃縮された液体サンプルを使用してください。固体を測定している場合は、サンプルをATRクリスタル上に再配置し、圧力を再適用します。



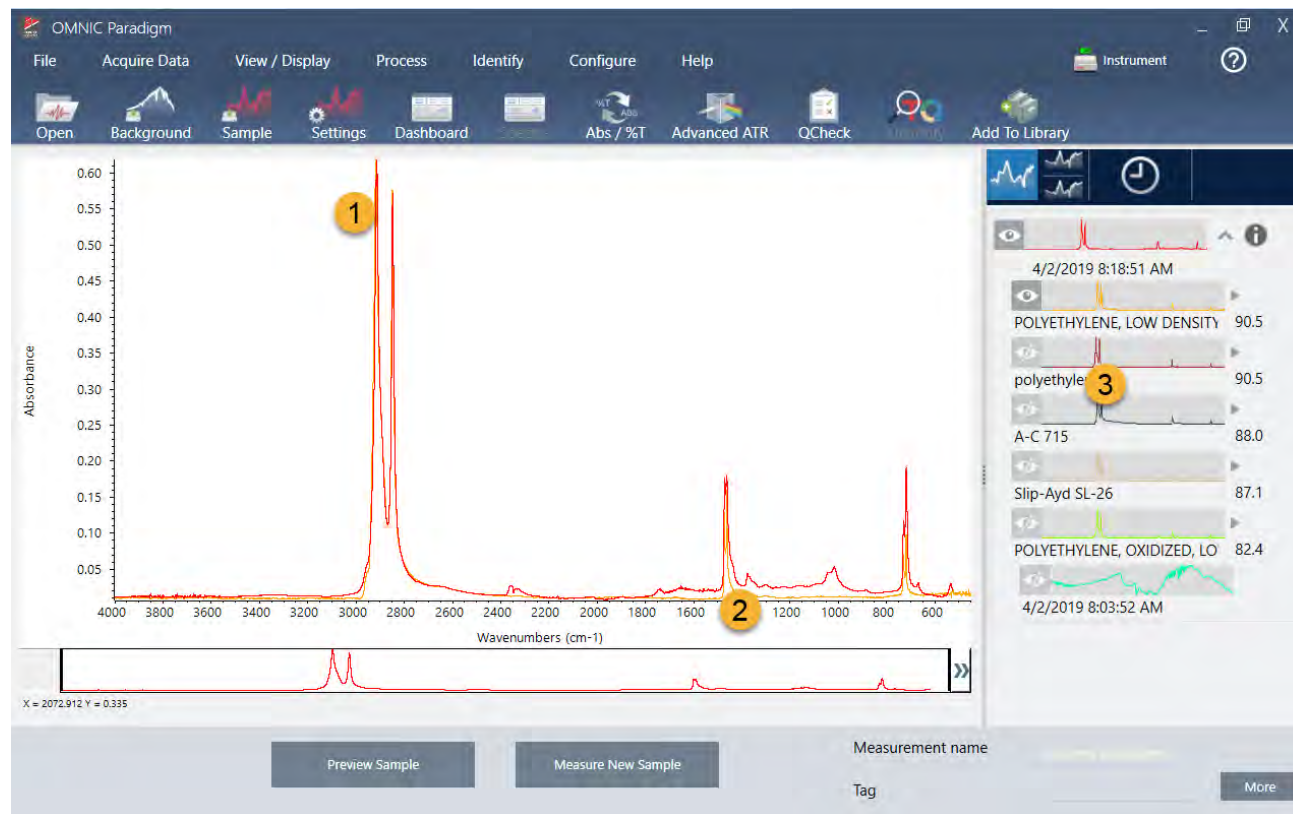
スペクトルにサンプルピークがない場合は、サンプル材料が光スペクトルの赤外領域のエネルギーを吸収することを確認してください。スペクトルに余分なピークが見られる場合は、クリスタルがきれいであることを確認してください。

続行する準備ができたなら、**Start Sample Measurement(サンプル測定 の開始)**を選択し(以前のイメージを参照)、進行状況バーが完了するのを待ちます。本ソフトウェアは、サンプルスペクトルを選択したライブラリスペクトルとすばやく比較し、結果を表示します。

3.1.5 自分のサンプルには何が含まれていますか？

スペクトルペインには、選択したライブラリからの最適なスペクトルとともにサンプルスペクトルが表示されます。2つのスペクトルは、同じY軸スケールでオーバーレイされるため、結果を視覚的に比較できます。(この場合のように、スペクトルが非常に類似している場合は、違いを強調する他のビューがあります。これについては後で詳細に説明します。) 結果パネルには、もっともマッチする5つのスペクトルのリストとそれらのマッチ率が表示されます。

図3-3: 同じY軸スケールを使用して一緒に表示されるサンプルとトップサーチ結果



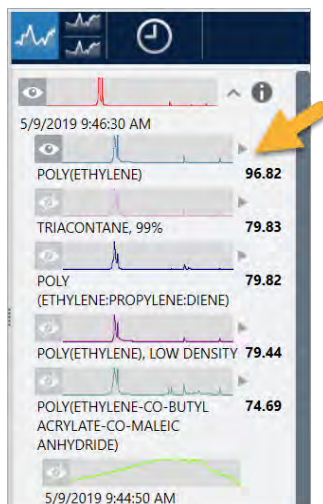
1. サンプルスペクトル (赤色)
2. ベストマッチ (黄色)
3. 結果パネル

マッチ率は、各ライブラリスペクトルが不明のサンプルとどの程度マッチしているかを示します。この値が100に近いほど、マッチ度は高くなります。

この例では、トップマッチのマッチ率が90を超えており、これは適切なマッチを示しています。リスト内の次のスペクトルのマッチ率は、それをはるかに下回っています。

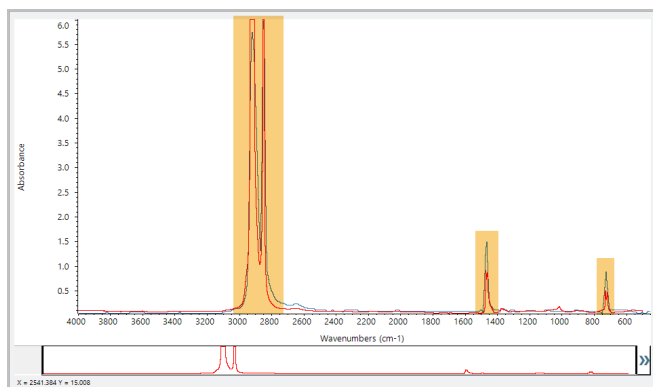
3. チュートリアルとチュートリアル

図3-4: 明確な最良のマッチを示すマッチ率



スペクトルペインでオーバーレイされたスペクトルを見ると、メインピークの位置がX軸に沿って並んでおり、ピーク高のみが異なります。

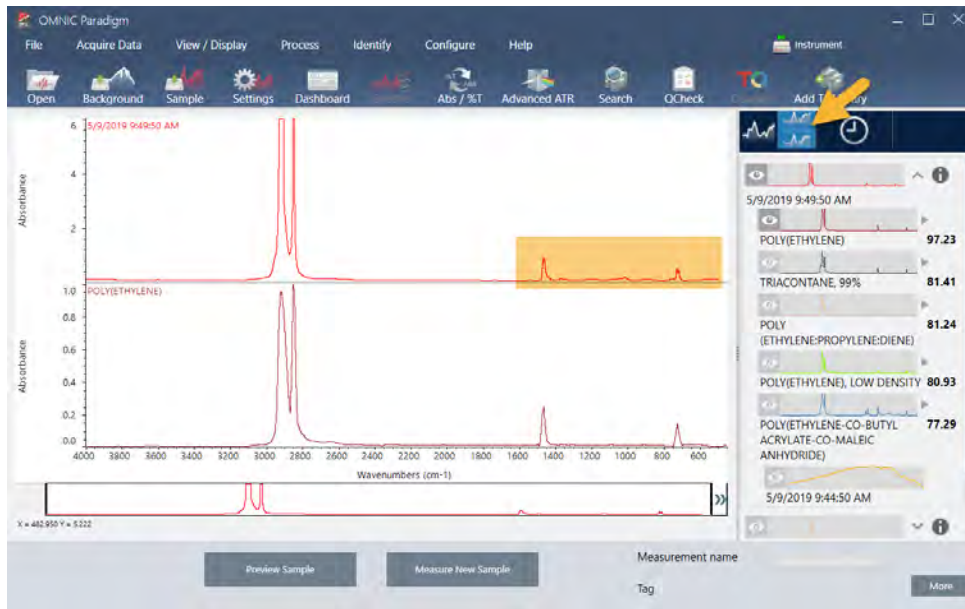
図3-5: 明確なマッチを示すオーバーレイされたスペクトル



Stack(スタック) ボタンをクリックして、各Y軸を埋めるように拡大縮小された2つのスペクトルを確認します。この場合も、サンプルスペクトルの低周波数領域でベースラインがわずかに上昇していることを除いて、スペクトルはよくマッチしています。その結果、サンプルはポリエチレンであり、分析は完了していると結論付けることができます。

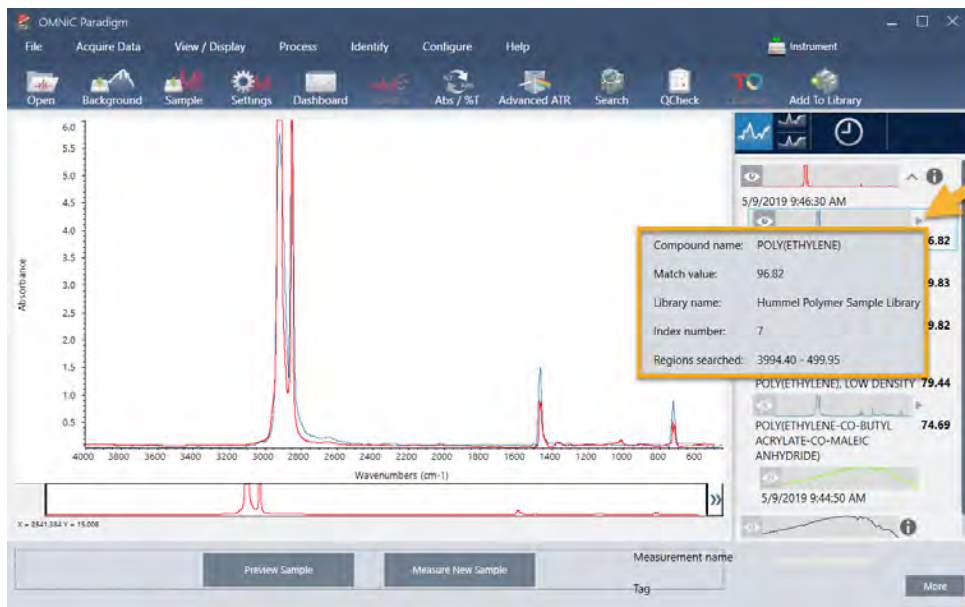
3. チュートリアルとチュートリアル

図3-6: 低周波数領域のわずかな違いを示すスタックスペクトル



マッチリスト内のスペクトルに関する詳細情報(取得元のライブラリや識別番号など)を取得するには、結果パネルのスペクトルの灰色の矢印にカーソルを合わせます。

図3-7: ライブラリスペクトルのInformation(情報)ボタン



3.1.6 明確な(単一の)マッチがない場合はどうなりますか?

この例のように、分析結果にすべて類似したマッチ率を持つ複数のマッチが表示された場合は、Shiftキーを押しながら結果パネルの3つのマッチをクリックして、3つのスペクトルすべてをスペクトルペインに追加します。

3. チュートリアルとチュートリアル

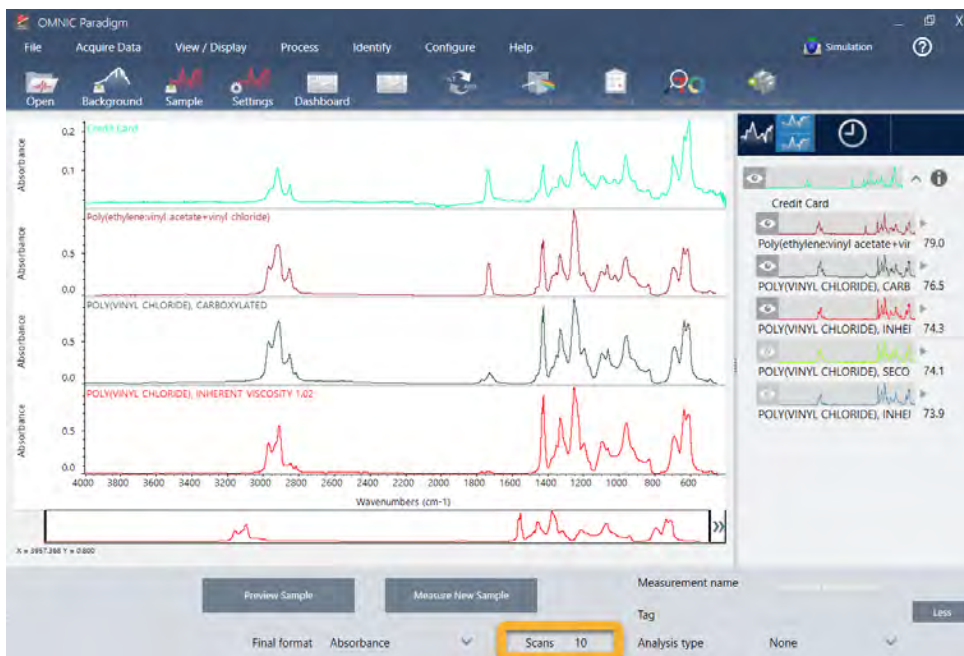
図3-8: いくつかの類似したマッチを示す積み重ねられたスペクトル



3.1.7 どうすれば分析結果を改善できますか?

明確なマッチが表示されない場合は、結果を改善する可能性のある考慮すべきオプションがいくつかあります。(一部の設定調整には、新規バックグラウンド測定が必要になります。)

図3-9: 変更可能な測定条件設定が表示されたサーチ結果



3. チュートリアルとチュートリアル

手始めに、ダッシュボードに戻って、不明なサンプルのResolution(分解能)設定を調整できます。例えば、低いResolution(分解能)設定を使用することで、より高い分解能でスペクトルを取得できます。サンプルピークがより鋭い場合や多数の場合、より良い分析結果が得られる可能性があります。

より多くのスキャン回数を取得して(上のイメージを参照)、結果に影響を与える可能性のあるスペクトルノイズを減らすこともできます。次に、Identify(分析)(メニュー)>Correlation Search(コリレーションサーチ)を選択するか、ツールバーのSearch(サーチ)ボタンをクリックして、分析をリスタートします。

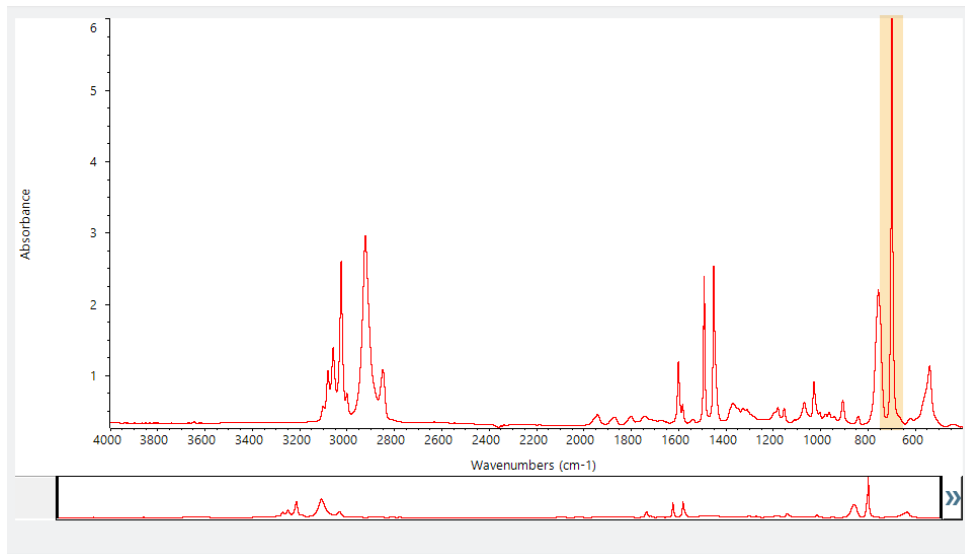
サンプルスペクトルのベースラインが傾斜または湾曲している場合は、サンプルスペクトルにAutomatic Baseline Correction(自動ベースライン補正)(Process(プロセス)メニュー)を適用してから、分析をリスタートしてください。

透過スペクトルをサーチする必要がある場合は、Advanced ATR Correction(アドバンスドATR補正)(Process(プロセス)メニュー)を使用して、分析をリポートしてください。この補正により、ATRスペクトルが調整され、さらに透過スペクトルのように見えます。これにより、結果を改善できます。

3.1.8 分析用のスペクトル領域を指定する方法

サンプルスペクトルのピークが非常に大きく、Y軸のスケールから外れている場合は、そのピークを分析から除外することをお勧めします。次に例を示します。

図3-10: 完全吸収ピーク例



これらの「フラットトップ」ピークは「完全吸収」と呼ばれ、分析結果に影響を与える過度のスペクトルノイズを含む可能性があります。完全吸収ピークを除外するには、サーチ設定を開き、Use full spectral range(全スペクトル領域を使用)の選択を解除して、完全に吸収する領域を除外するサーチ領域を指定します。

3.2 透過で不明のサンプルを分析

FTIRスペクトロメーターとThermo Scientific™ OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) は、不明のサンプルの化学組成を分析するのに役立ちます。この項では、赤外線透過を用いるサンプル測定方法とメソッドタイトルについて説明します。「透過」とは、赤外線ビームがサンプルを直接通過することを意味します。透過はFTIRデータを取得するための一般的な手法です。この項には、分析結果の解釈に自信を構築するのに役立ついくつかの例が含まれています。

次の方法を学習します：

- 透過アクセサリーを準備する
- 分析を設定して実行し、
- 結果を評価して確認する

3.2.1 透過アクセサリーを準備する

まず、透過アクセサリーまたはサンプルホルダーがスペクトロメーターのサンプルコンパートメントに挿入されていることを確認します。これが、Nicolet™ Summit FTIRスペクトロメーターのThermo Scientific™ iD1透過アクセサリーです。

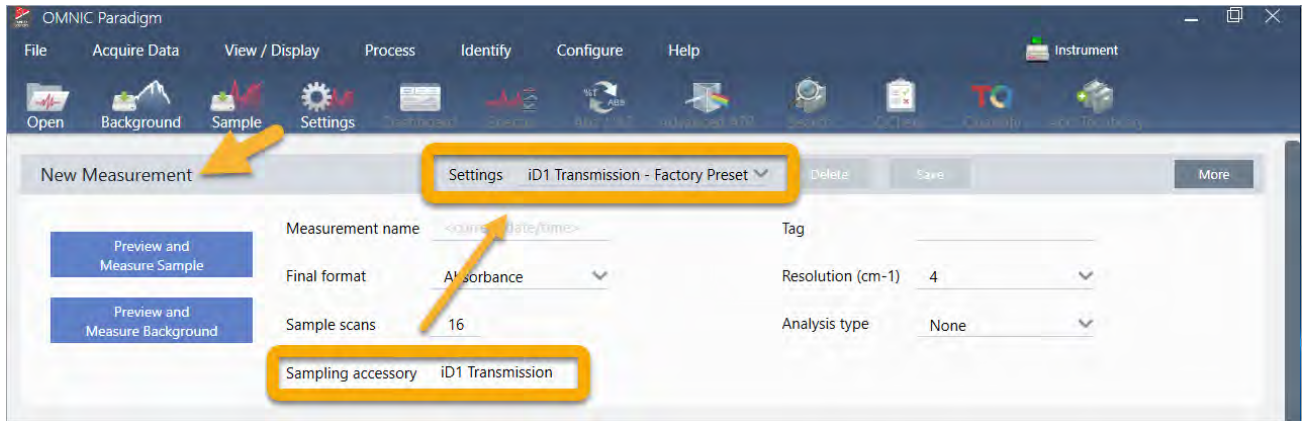


スペクトロメーターが準備ができたときに正確なバックグラウンド測定を行えるように、アクセサリーまたはサンプルホルダーからサンプルをすべて削除します。iD1アクセサリーカバーは開閉できます。(透過アクセサリーが乾燥空気または窒素でパージされている場合は、サンプルを追加または削除する場合を除いて、カバーを閉じたままにしてください。)

3.2.2 分析を設定する

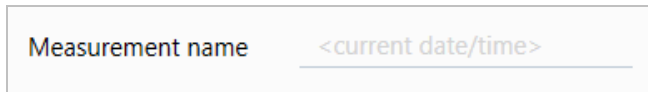
次の手順は、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) の設定手順です。本ソフトウェアを開くと、メインウィンドウにダッシュボードが表示されます。重要な測定条件設定は上部にあります。

3. チュートリアルとチュートリアル

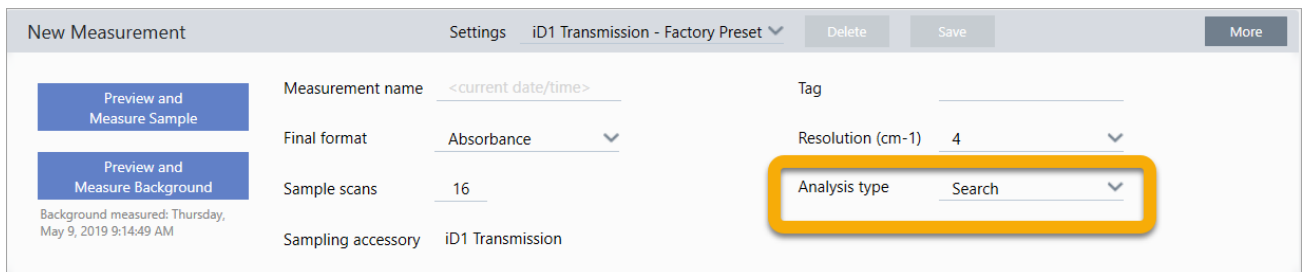


最初に、Sampling Accessory(サンプリグアクセサリ) の読み取り値に、取り付けられているアクセサリが表示されていることを確認します。そうでない場合は、アクセサリを取り付け直します。そのアクセサリの出荷時の初期設定が「Settings(設定) 」の下に表示されていることに注意してください。

次に、測定名を入力するか、測定の正確な日付と時間である提案された名前を残すことができます。



次に、Analysis Type(分析タイプ) がSearch(サーチ) に設定されていることを確認します。



これにより、サンプルスペクトルとFTIRライブラリスペクトルのポイントごとの比較が実行されます。出力の品質は、選択したライブラリ数のスペクトルのソース / 光源と品質に応じて異なります。

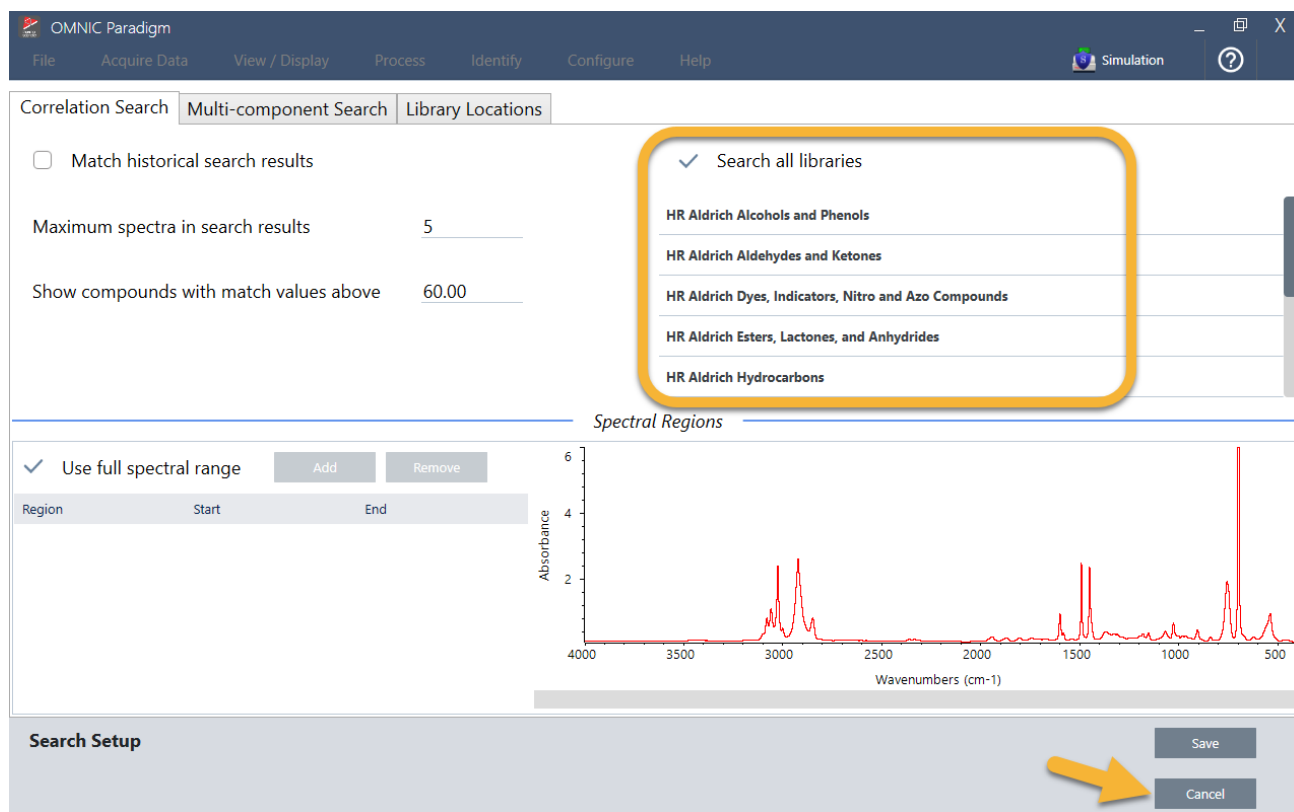
最後に、取得設定(サンプルスキャン回数、分解能、出力フォーマット)を確認します。上記の設定はすべてこの分析の適切な開始値です。

取得するサンプルデータの品質が分析結果に影響を与えることに注意することが重要です。例えば、測定するスキャン回数を減らして分析を高速化したり、分解能を下げたりすると、分析結果の確実性が低下する可能性があります。

3.2.3 スペクトルライブラリを検討

default(規定) では、既存のすべてのスペクトルライブラリが自動的に選択されます。ライブラリの選択肢を表示または変更するには、Identify(分析) メニューの**Search Setup(サーチ設定)** を選択します。このデモンストレーションでは、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) とNicolet Summit Proスペクトロメーターで提供される無料のライブラリを使用しています。

3. チュートリアルとチュートリアル



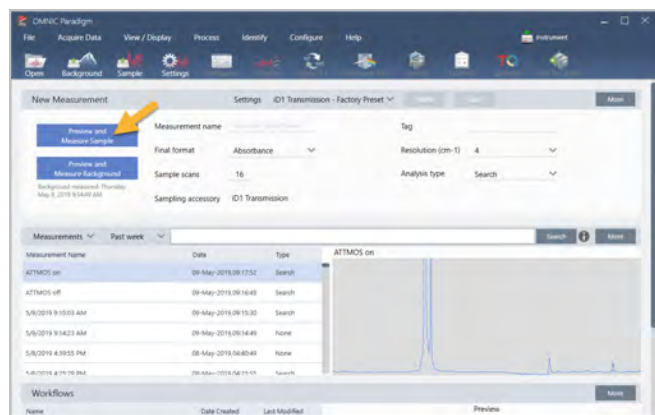
Cancel(キャンセル)を選択して、Search Setup(サーチ設定) ウィンドウを閉じます。

同じメニューでLibrary Manager(ライブラリマネージャー)を使用して、スペクトルライブラリを簡単に作成することもできます。作成するライブラリは、不明のサンプルで見つかる予想されるものを表す純粋なマテリアルから作成する必要があります。

ライブラリスペクトルは通常、サンプルスペクトルと同じかそれ以上の品質です。同じサンプリング手法(この場合は送信)を使用して取得した場合にも役立ちます。サーチを実行する前に、サンプルデータに対して出力フォーマット、分解能、スペクトル領域などの変換を実行する必要はありません。本ソフトウェアが自動的に変換を実行します。

3.2.4 サンプル測定と分析

分析を開始するには、Preview and Measure Sample(プレビューとサンプル測定)をクリックします。



3. チュートリアルとチュートリアル

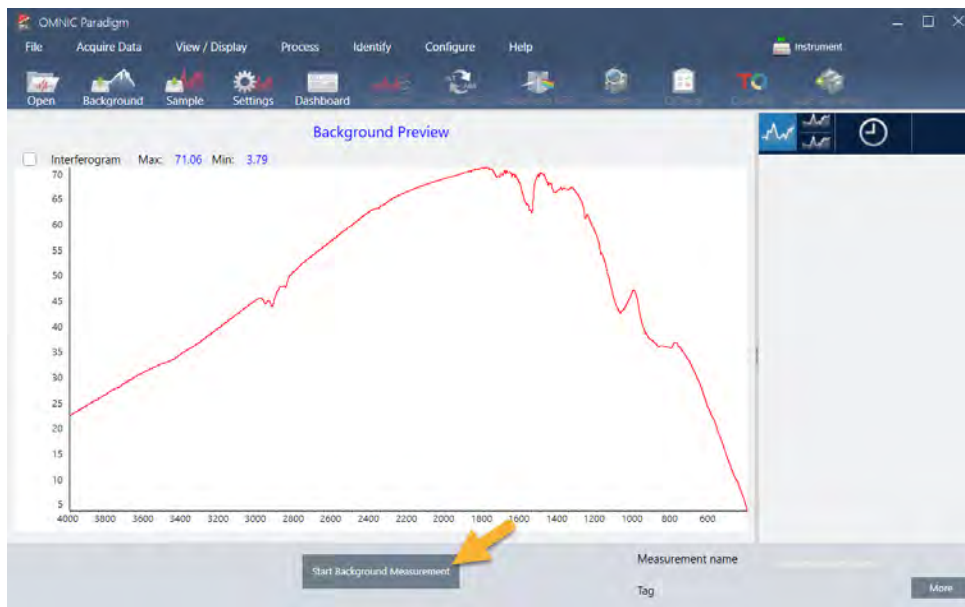
この分析は、バックグラウンド測定から始まります。透過バックグラウンドの唯一の要件は、赤外線ビームの経路からサンプルを削除することです。バックグラウンドスペクトルは、スペクトロメーター、透過アクセサリまたはサンプルホルダー、またはバックグラウンド環境に起因するサンプルデータ内の信号を除去するために使用されます。

本ソフトウェアは、スペクトルペインに現在のバックグラウンドスペクトルのプレビューを表示します。以下の例は、乾燥空気または窒素でパージされていない透過アクセサリと、パージされた透過アクセサリを使用した透過分析の一般的なバックグラウンドスペクトルを示しています。

図3-1: パージされていない透過アクセサリからのバックグラウンドスペクトル



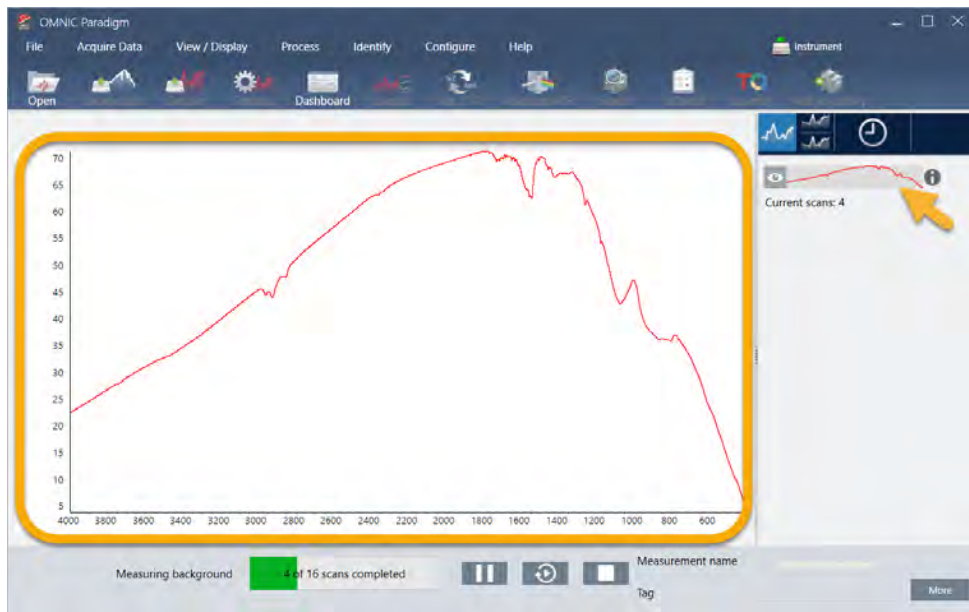
図3-2: パージされた透過アクセサリからのバックグラウンドスペクトル



3. チュートリアルとチュートリアル

Start Background Measurement(バックグラウンド測定 の開始) をクリックします。

バックグラウンド測定が完了すると、そのイメージが結果パネルとスペクトルペインに表示されます。



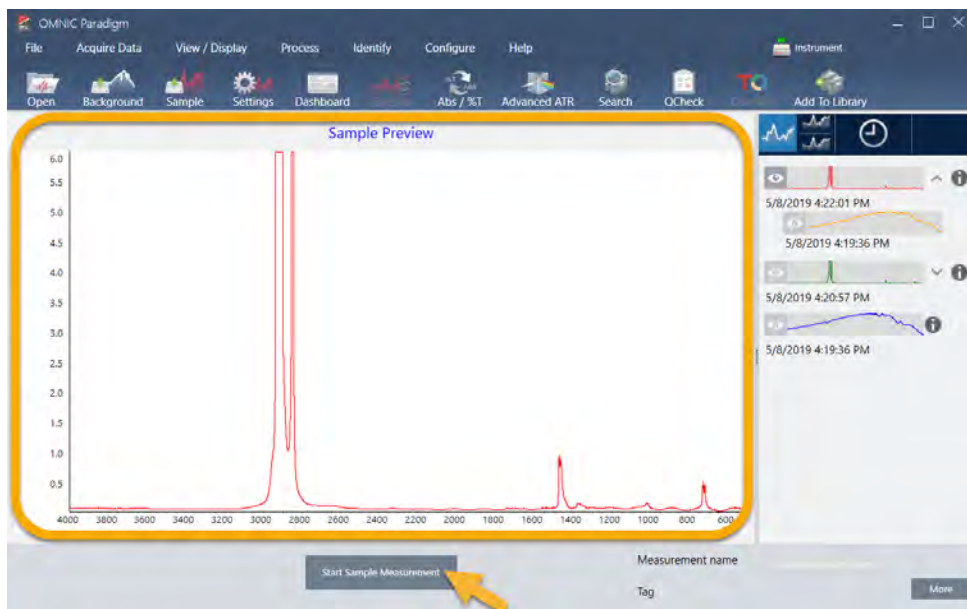
マウントされたフィルムサンプルをインストールするには、透過アクセサリーのカバーを開き、サンプルまたはサンプルホルダーをサンプルまたはサンプルホルダーの幅に最適なスロットにスライドさせます。サンプルまたはホルダーで許可されている場合は、ビームの焦点に近いスロットを選択します(iD1アクセサリーの場合、これはサンプルコンパートメントのほぼ中央にあります)。このデモンストレーションでは、サンプルカードに取り付けられたプラスチックフィルムを測定しています。

3. チュートリアルとチュートリアル

図3-3: iD1透過アクセサリビーム焦点



サンプルを配置したら、**Preview Sample(サンプルプレビュー)** をクリックして、スペクトルペインでサンプルデータをプレビューします。



プレビュースペクトルのピークが非常に小さい場合は、より厚いサンプルを使用してみてください。スペクトルにサンプルピークがない場合は、サンプル材料が赤外線スペクトルでエネルギーを伝達することを確認してください。

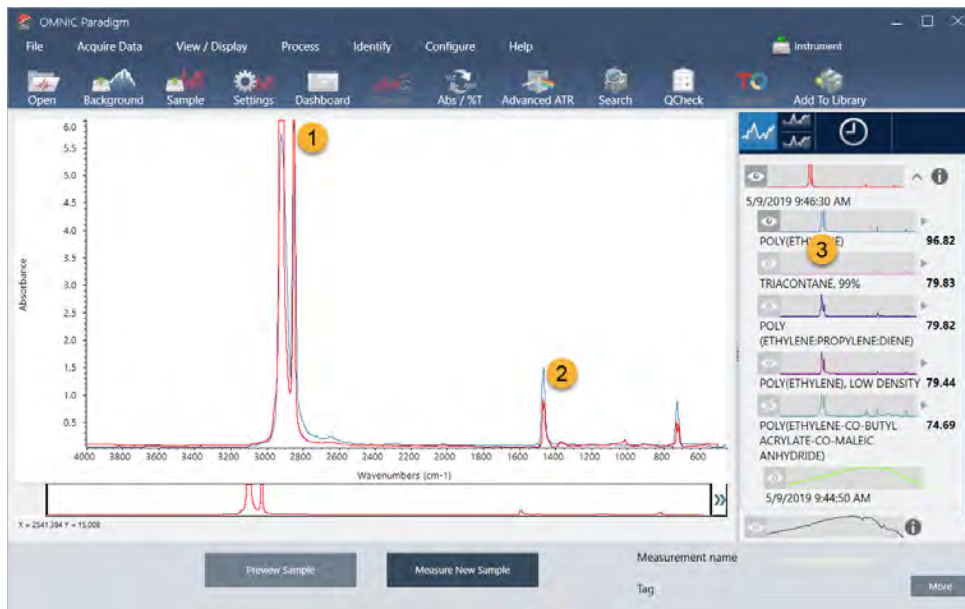
3. チュートリアルとチュートリアル

続行する準備ができたなら、**Start Sample Measurement(サンプル測定 の開始)** を選択し(以前のイメージを参照)、進行状況バーが完了するのを待ちます。本ソフトウェアは、サンプルスペクトルを選択したライブラリスペクトルとすばやく比較し、結果を表示します。

3.2.5 自分のサンプルには何が含まれていますか?

スペクトルペインには、選択したライブラリからの最適なスペクトルとともにサンプルスペクトルが表示されます。2つのスペクトルは、同じY軸スケールでオーバーレイされるため、結果を視覚的に比較できます。(この場合のように、スペクトルが非常に類似している場合は、違いを強調する他のビューがあります。これについては後で詳細に説明します。) 結果パネルには、もっともマッチする5つのスペクトルのリストとそれらのマッチ率が表示されます。

図3-4: 同じY軸スケールを使用して一緒に表示されるサンプルとトップサーチ結果



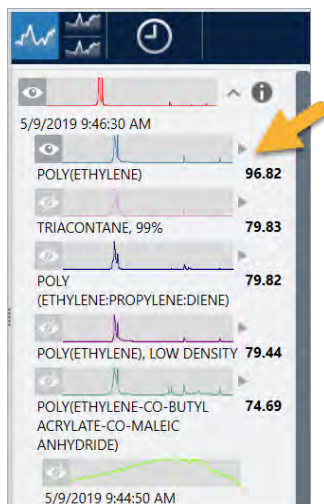
1. サンプルスペクトル(赤色)
2. ベストマッチ(青色)
3. 結果パネル

マッチ率は、各ライブラリスペクトルが不明のサンプルとどの程度マッチしているかを示します。この値が100に近いほど、マッチ度は高くなります。

この例では、トップマッチのマッチ率が85を超えており、これは適切なマッチを示しています。リスト内の次のスペクトルのマッチ率は、それをはるかに下回っています。

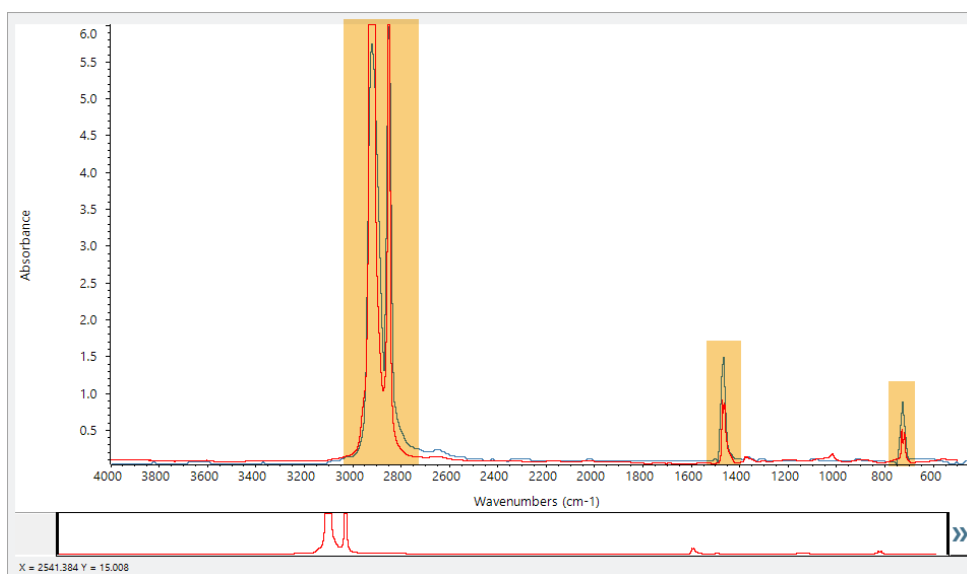
3. チュートリアルとチュートリアル

図3-5: 明確なマッチを示すマッチ率



スペクトルペインでオーバーレイされたスペクトルを見ると、メインピークの位置がX軸に沿って並んでおり、ピーク高のみが異なります。

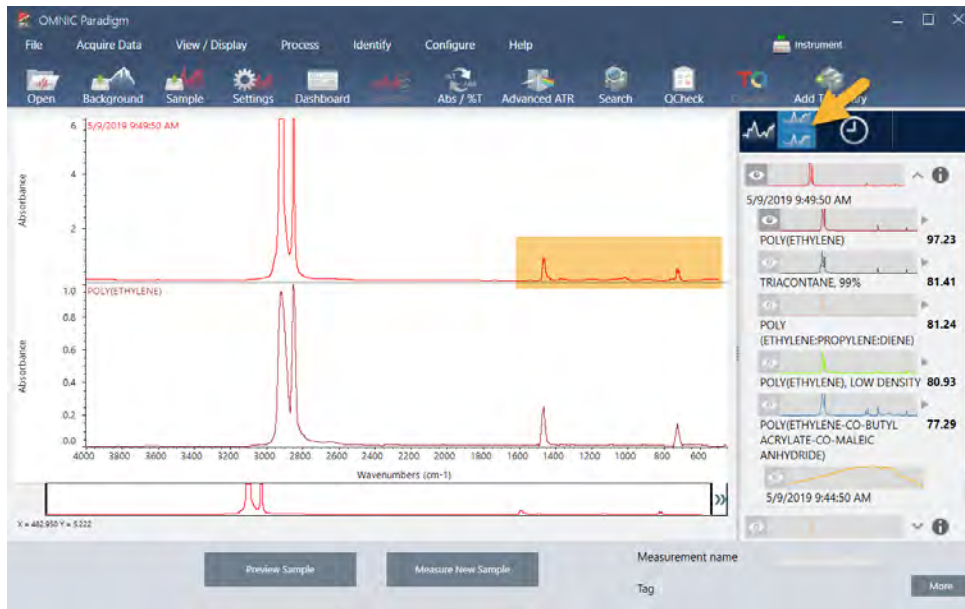
図3-6: 明確なマッチを示すオーバーレイされたスペクトル



Stack (スタック) ボタンをクリックして、各Y軸を埋めるように拡大縮小された2つのスペクトルを確認します。この場合も、サンプルスペクトルの低周波数領域でベースラインがわずかに上昇していることを除いて、スペクトルはよくマッチしています。その結果、サンプルはポリエチレンであり、分析は完了していると結論付けることができます。

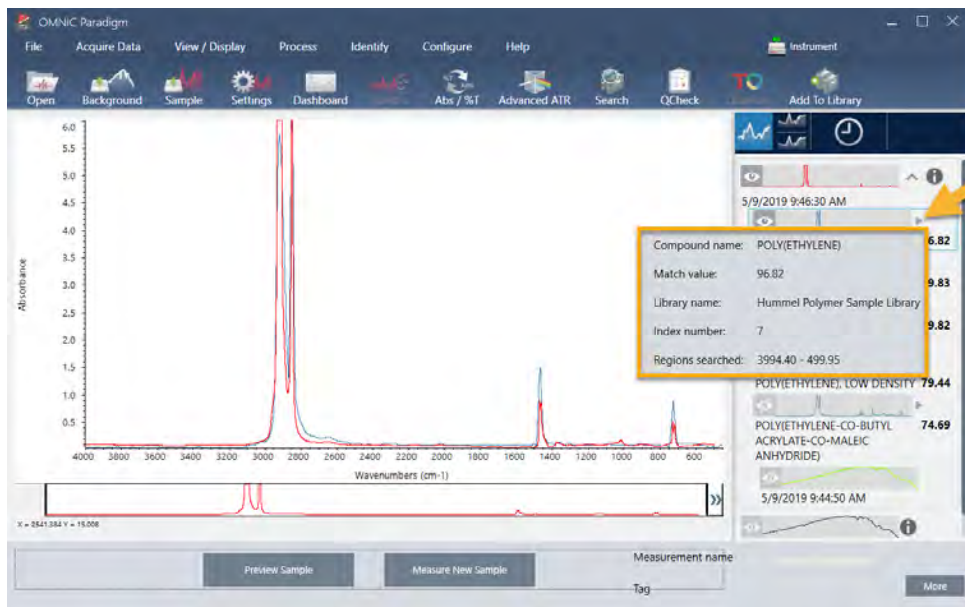
3. チュートリアルとチュートリアル

図3-7: 明確なマッチを示すスタックスペクトル



マッチリスト内のスペクトルに関する詳細情報(取得元のライブラリや識別番号など)を取得するには、結果パネルのスペクトルの灰色の矢印にカーソルを合わせます。

図3-8: ライブラリスペクトルのInformation(情報)ボタン



3.2.6 明確な(単一の)マッチがない場合はどうなりますか?

この例のように、分析結果にすべて類似したマッチ率を持つ複数のマッチが表示される場合は、Shiftキーを押しながら結果パネルの3つのマッチをクリックして、3つのスペクトルすべてをスペクトルペインに追加して詳細な比較を行います。

3. チュートリアルとチュートリアル

図3-9: いくつかの類似したマッチを示す積み重ねられたスペクトル



3.2.7 どうすれば分析結果を改善できますか?

明確なマッチが表示されない場合は、結果を改善する可能性のある考慮すべきオプションがいくつかあります。(一部の設定調整には、新規バックグラウンド測定が必要になります。)

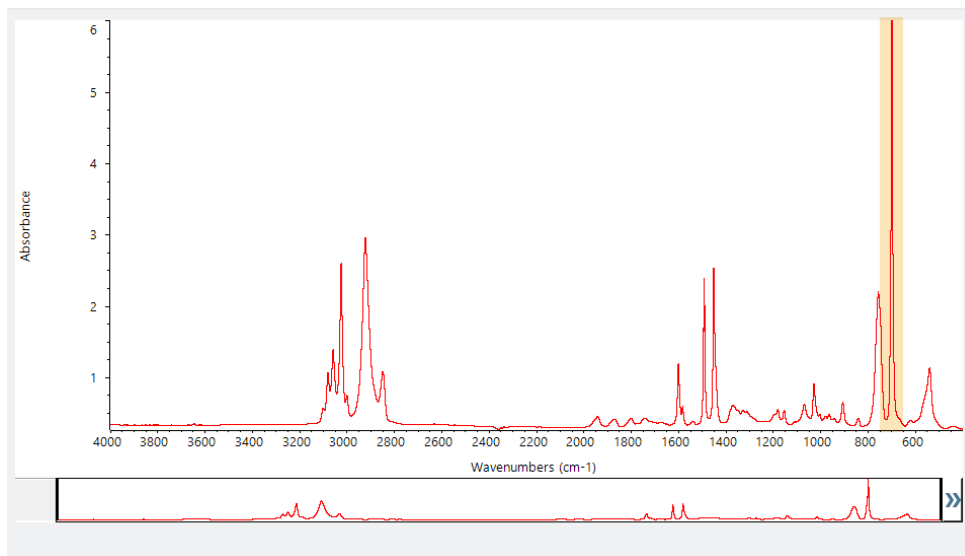
手始めに、ダッシュボードに戻って、不明なサンプルのResolution(分解能)設定を調整できます。例えば、低いResolution(分解能)設定を使用することで、より高い分解能でスペクトルを取得できます。サンプルピークがより鋭い場合や多数の場合、より良い分析結果が得られる可能性があります。より多くのスキャン回数を取得して、結果に影響を与える可能性のあるスペクトルノイズを減らすこともできます。

サンプルスペクトルのベースラインが傾斜または湾曲している場合は、サンプルスペクトルにAutomatic Baseline Correction(自動ベースライン補正)(Process(プロセス)メニュー)を適用してみてください。次に、Identify(分析)(メニュー)>Correlation Search(コリレーションサーチ)を選択して分析をリスタートするか、ツールバーのSearch(サーチ)ボタンをクリックします。

3.2.8 分析用のスペクトル領域を指定する方法

サンプルスペクトルのピークが非常に大きく、Y軸のスケールから外れている場合は、そのピークを分析から除外することをお勧めします。次に例を示します。

図3-10: 完全吸収ピーク例



これらの「フラットトップ」ピークは「完全吸収」と呼ばれ、分析結果に影響を与える過度のスペクトルノイズを含む可能性があります。

完全吸収ピークを除外するには、**Identify(分析)**(メニュー) > **Search Setup(サーチ設定)**を選択し、ツールを使用してサーチする領域を選択します。

最初に、Use Full Spectral Range(全スペクトル領域を使用) チェックボックスをオフにして、領域ツールを有効にします。

図3-11: サーチする領域を選択するためのツール

Correlation Search | Multi-Component Search | Library Locations

Match historical search results Search all libraries

Maximum spectra in search results 5

Show compounds with match values above 60.00

HR Aldrich Alcohols and Phenols

HR Aldrich Aldehydes and Ketones

HR Aldrich Dyes, Indicators, Nitro and Azo Compounds

HR Aldrich Esters, Lactones, and Anhydrides

HR Aldrich Hydrocarbons

Use full spectral range Add Remove

Region	Start	End
1	2279.900	2119.900

Absorbance

Wavenumbers (cm⁻¹)

Region 1

Search Setup Save Cancel

次に、垂直バーを位置させ、サーチする最初の領域を選択します。

Use full spectral range Add Remove

Region	Start	End
1	723.808	3362.722

Absorbance

Wavenumbers (cm⁻¹)

Region 1

Search Setup Save Cancel

サーチ領域を追加するには、**Add(追加)** ボタンをクリックし、垂直バーの2番目のセットを使用して次の領域を選択します。ここでは、最初の垂直バーのセットを使用して、完全に吸収するピークの左側の領域を選択しました。次に、領域を追加し、垂直バーの2番目のセットを使用して、完全に吸収するピークの右側の領域を選択しました。

Region	Start	End
1	723.808	3362.722
2	447.704	665.401

Spectral Regions

Use full spectral range Add Remove

Search Setup Save Cancel

領域の選択が終了したら、**Save(保存)**をクリックしてダッシュボードビューに戻り、ツールバーの**Search(サーチ)**ボタンをクリックしてサーチを再実行します。

3.3 QCheck(Qチェック) でサンプル組成を検証

QCheck(Qチェック) 分析でサンプルの品質を検証します。QCheck(Qチェック) を使用すると、サンプルが既知の参照と比較され、結果はサンプルと参照の間の相関値をレポートし、サンプルが仕様を満たしていることをすばやく検証できます。

このガイドでは、QCheck(Qチェック) 分析の例について説明します。

前提条件

このガイドは、お使いの機器とサンプリングアクセサリがすでに設定されていることを前提としています。サンプリングアクセサリの取り付け手順については、お使いの機器に付属の文書を参照してください。

また、参照として使用するには、少なくとも一つのスペクトルが必要です。データベース内の任意のスペクトルをリファレンススペクトルとして指定できます。ライブラリのスペクトルを使用するには、最初にライブラリからスペクトルを抽出して、データベースで利用できるようにします。詳細は、["ライブラリからスペクトルを抽出"](#)を参照してください。

3.3.1 QCheck(Qチェック) 分析の実行

QCheck(Qチェック) 分析を実行するには、分析および測定条件設定を設定し、バックグラウンドを測定して、サンプル測定を行い、その結果を解釈する必要があります。最後に、分析が完了したら、レポートを作成して保存できます。

◆ QCheck(Qチェック) を使用してサンプルの組成を検証するには

1. 分析を設定します。

サンプル測定前に、分析設定をレビューしてください。

- Identify(分析) > QCheck Setup(Qチェック設定) に移動します。
- QCheck Setup(Qチェック設定) オプションをレビューします。

3. チュートリアルとチュートリアル

The screenshot shows the OMNIC Paradigm software interface. The QCheck Setup dialog box is open, displaying various configuration options. The 'Pass/fail threshold' is set to 90, and 'Maximum spectra in QCheck results' is set to 5. The 'Spectral Regions' section includes options for 'Blank diamond ATR region (2200 - 1955)', 'Blank CO₂ region (2390 - 2240)', and 'Use full spectral range'. A spectral plot titled 'Test Sample for Paradigm' is visible in the background, showing absorbance versus wavenumbers (cm⁻¹) from 4000 to 500. The plot shows several peaks, with a prominent one at approximately 1700 cm⁻¹. The coordinates X = 2669.691 and Y = 0.554 are displayed at the bottom of the plot.

設定	説明
High Sensitivity(高感度)	参照に非常に類似しているサンプル間でさらに正確な結果を得るには、高感度を選択します。自然変動のあるサンプル測定を行う場合は、高感度の選択を解除することをお勧めします。
Pass/fail threshold(合格 / 不合格しきい値)	合格または不合格のしきい値を設定します。0 ~ 100の整数を入力します。 相関値100は、完全にマッチすることを示します。 このオプションの選択を解除すると、すべての結果に「合格」と表示されます。
Maximum spectra in QCheck results (QCheck(Qチェック)結果の最大表示数)	結果パネルに表示される結果数を設定します。例えば、値を2に設定すると、2つの最適なマッチのみが結果パネルに表示されます。
Prompt for reference(実行時にリファレンスを選択)	測定中に参照を選択する場合に選択します。選択を解除して、一つまたは複数のリファレンスペクトルを事前に指定します。複数のサンプルを同じ参照と比較する場合は、サンプル測定を行うたびに同じ参照を選択し続ける必要がないように、事前に設定しておく便利です。
Blank diamond ATR region (2200 - 1955)(ダイヤモンドATR領域(2,200 ~ 1,955)を除外)	ダイヤモンドATR結晶が放射線を吸収する、2,200波数から1,955波数までの領域のデータを除外する場合に選択します。
Blank CO ₂ region (2390 - 2240)(CO ₂ 領域(2,390 ~ 2,240)を除外)	二酸化炭素が放射線を吸収する2,390波数から2,240波数までの領域のデータを除外する場合に選択します。
Use full spectral range(全スペクトル領域を使用)	分析で全範囲を使用する場合に選択します。 選択を解除して、分析に使用する限られた範囲のみを指定します。

3. チュートリアルとチュートリアル

- c. 設定の保存してダッシュボードに戻るには、**Save(保存)**をクリックします。
- d. ダッシュボードで、測定条件設定をレビューし、記載されているサンプリングアクセサリが使用しているアクセサリとマッチすることを確認します。
- e. Analysis Type(分析タイプ)リストから、**QCheck(Qチェック)**を選択します。

測定と分析の設定に満足したら、バックグラウンドを測定する準備が整います。

2. バックグラウンドを測定します。

サンプル測定前に、バックグラウンドの現在の測定値を取得する必要があります。

バックグラウンドスペクトルは、スペクトロメーター、サンプリングアクセサリ、またはバックグラウンド環境に起因するサンプルデータ内の信号を除去するために使用されます。

- a. **Preview and Measure Background(プレビューとバックグラウンドの測定)**をクリックします。
- b. **Start Background Measurement(バックグラウンド測定の開始)**をクリックします。バックグラウンド測定が完了すると、スペクトルが結果パネルに追加されます。

3. サンプル測定を行います。

- a. お使いのサンプルを読み込みます。サンプルのローディング手順については、お使いの機器またはサンプリングアクセサリに同梱された文書を参照してください。
- b. **Preview Sample(サンプルプレビュー)**をクリックします。Preview Sample(サンプルプレビュー)には、サンプルスペクトルのライブプレビューが表示されます。このプレビューでは、サンプル測定前に、潜在的な問題を補正する機会が与えられます。
- c. 続行する準備ができたなら、**Start Sample Measurement(サンプル測定の開始)**をクリックします。

分析設定でPrompt for Reference(実行時にリファレンスを選択)が選択されている場合、サンプル測定完了後にSelect Reference Spectrum(リファレンススペクトルの選択)ダイアログが開きます。

- d. 分析に使用する一つまたは複数のリファレンススペクトルを選択し、**OK**をクリックします。

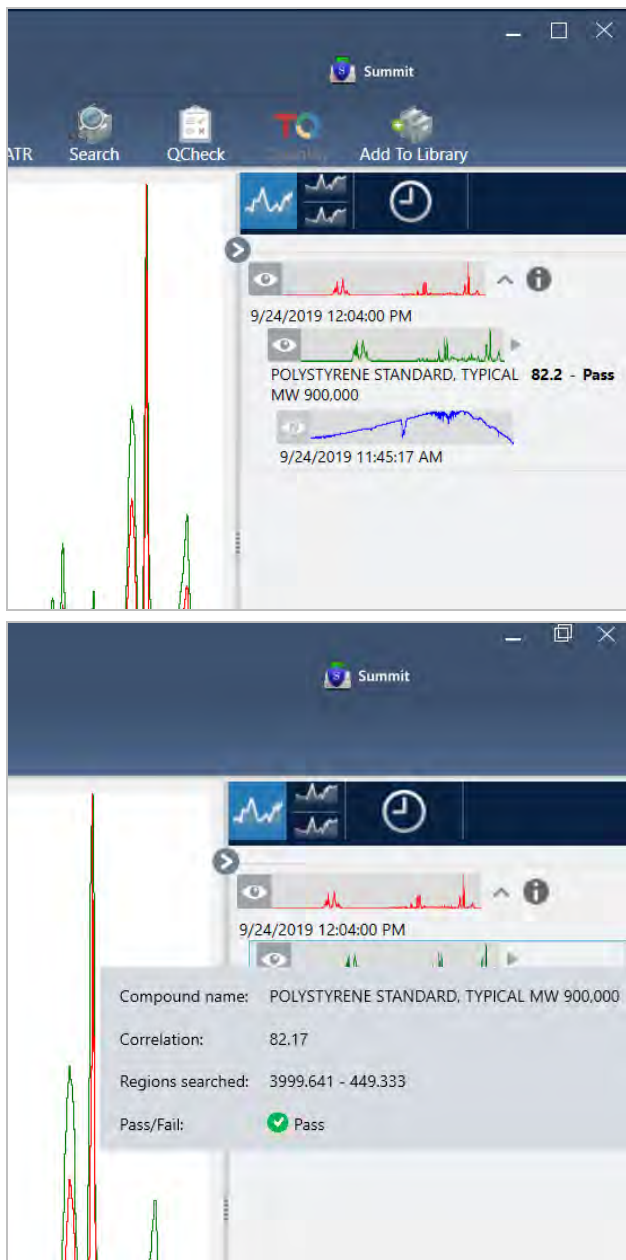
Ctrlキーを押しながらクリックして、選択範囲にスペクトルを追加します。

Shiftキーを押しながらクリックして、スペクトルのグループを選択範囲に追加します。

4. 結果を解釈します。

測定と分析が完了すると、結果が結果パネルに表示されます。追加詳細については、灰色の矢印にカーソルを合わせてください。

3. チュートリアルとチュートリアル



5. レポートを作成

分析が終了したら、レポートを作成して、結果をMicrosoft™ Word™、PowerPoint™、またはExcel™にエクスポートするか、結果を印刷または保存します。

- File(ファイル) > Create Report(レポートの作成)に移動します。
- レポートにタイトルを付けます。
- 「Format(フォーマット)」リストからフォーマットを選択し、QCheck(Qチェック)テンプレートを選択します。レポートのプレビューが右側のパネルに表示されます。
- Create(作成)をクリックします。

3.3.2 結果の改善

相関値が予想よりも低い場合は、結果を改善する可能性のある考慮すべきいくつかのオプションがあります。

- ダッシュボードに戻り、測定のResolution(分解能)設定を調整します。例えば、1や2などの小さい値を選択することで、より高い分解能でサンプル測定を行うことができます。サンプルピークがより鋭い場合や多数の場合、さらに正確な分析結果が得られる可能性があります。
- 測定のスキャン回数を増やすと、スペクトルノイズが減少する可能性があります。
- サンプルスペクトルに傾斜または湾曲したベースラインがある場合は、サンプルにAutomatic Baseline Correction(自動ベースライン補正)を適用してから、Identify(分析)メニューから分析をリスタートしてください。
- 選択した領域を分析から除外します。サンプルスペクトルのピークが非常に大きく、Y軸のスケールから外れている場合は、そのピークを分析から除外することをお勧めします。これらの「フラットトップ」ピークは「完全吸収」と呼ばれ、分析結果に影響を与える可能性があります。QCheck Setup(Qチェック設定)を開き、Use Full Spectral Range(全スペクトル領域を使用)の選択を解除し、サンプルスペクトルの完全吸収ピークを除外する範囲を選択します。次に、QCheck(Qチェック)分析を再実行します。

3.3.3 ライブラリからスペクトルを抽出

ライブラリからスペクトルを追加して、QCheck(Qチェック)分析の参照として使用します。商用ライブラリから追加されたスペクトルは分析に使用できませんが、名前の変更、タグ付け、またはエクスポートはできません。

◆ ライブラリからスペクトルを追加するには

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のデスクトップインターフェースのダッシュボードから、**Identify(分析) > Library Manager(ライブラリマネージャー)**に移動します。
2. 追加する化合物を選択します。
3. **Extract(追加)**をクリックします。確認メッセージは、スペクトルが正常に追加されたことを示します。

3.3.4 次の手順

このガイドでは、QCheck(Qチェック)分析を設定して実行し、サンプルが事前設定されたしきい値内で既知の参照とマッチすることを検証します。

次に、ワークフローを使用してルーチンの繰り返し可能な手順を作成するためのガイド付きチュートリアルについて["1次ワークフローの作成と実行"](#)を参照してください。

3.4 サンプル組成の定量

Quantify(定量)分析を使用して、サンプル中の成分の濃度を見つけます。Quantify(定量)分析では、以前に作成した定量メソッドを使用して、サンプル中の成分の濃度、またはピーク高やマッチ率などの他の種類の情報をレポートします。

このガイドでは、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のデスクトップインターフェースを使用してQuantify(定量)分析を設定および実行する方法について説明します。

前提条件

このガイドは、お使いの機器とサンプリングアクセサリがすでに設定されていることを前提としています。サンプリングアクセサリの取り付け手順については、お使いの機器に付属の文書を参照してください。

また、QNTファイルとして保存された有効な定量メソッドタイトルも必要になります。定量メソッドタイトルは、Thermo Scientific TQ Analystソフトウェアで校正する必要があります。定量メソッドタイトルの校正に関する情報については、そのソフトウェアに付属の文書を参照してください。

3.4.1 Quantify(定量)分析の実施



Quantify(定量)分析を実施するには、QNTファイルをインポートし、測定条件設定をレビューし、バックグラウンドを測定し、最後にサンプル測定を行う必要があります。分析が完了したら、レポートを作成して結果を保存または共有できます。

◆ Quantify(定量)分析を実施するには

1. 分析を設定します。

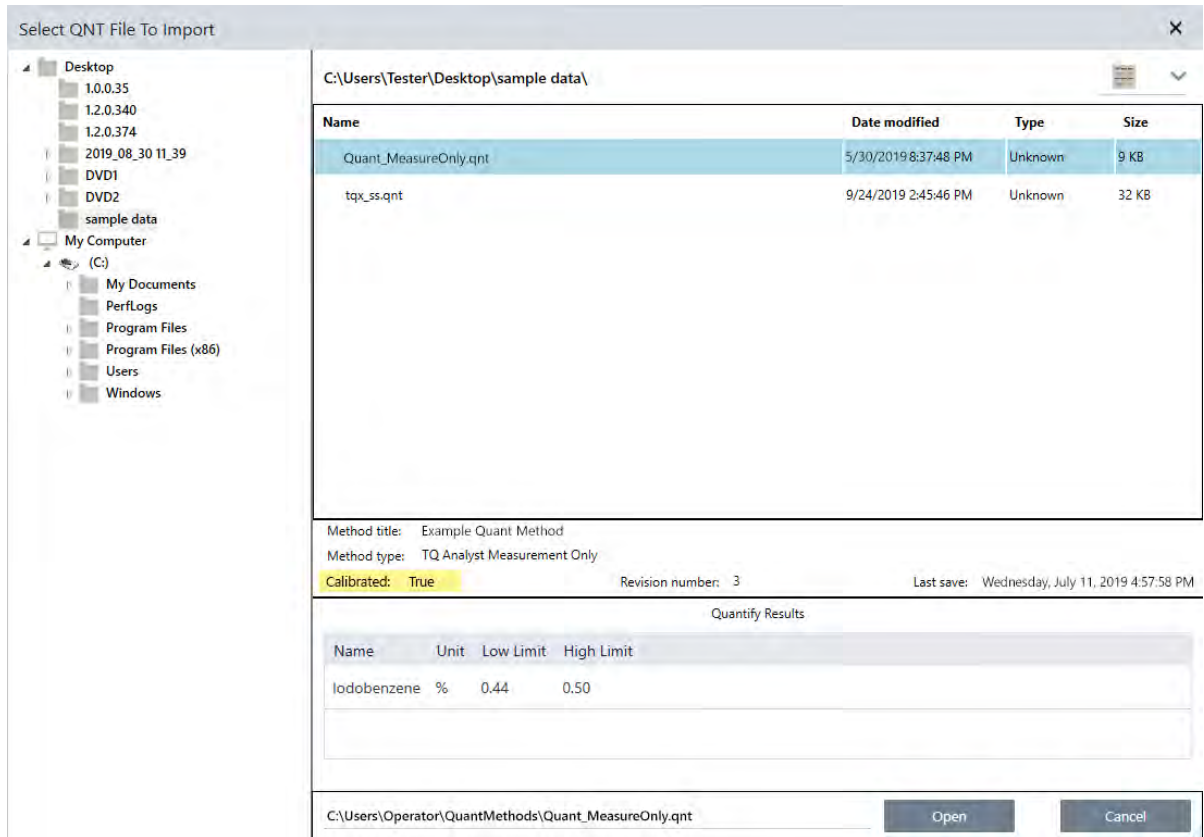
- a. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のデスクトップインターフェースのダッシュボードで、設定にサンプリングアクセサリが表示されていることを確認します。
- b. **Identify(分析) > Quantify Setup(定量分析の設定)**に移動し、分析に使用するQNTファイルを参照します。

このファイルエクスプローラーには、メソッドタイトル、メソッドタイプ、定量メソッドタイトルが校正済みであるかどうかなど、選択したQNTファイルに関する追加情報が表示されます。

- c. 定量メソッドタイトルをインポートするには、**Open(開く)**をクリックします。
- d. Analysis(分析)タイプリストで、**Quantify(定量)**を選択します。記号は、有効なQNTファイルをインポートしたことを示し  ます。Xが付いた赤い円  は、有効な方法がインポートされていないことを示します。

QNTファイルを選択すると、ファイルエクスプローラーに、メソッドタイトルとタイプ、定量メソッドタイトルが校正済みであるかどうかなど、選択に役立つ追加情報が表示されます。TQ Analystソフトウェアで校正された方法のみが有効です。

3. チュートリアルとチュートリアル



2. バックグラウンドを測定します。

サンプル測定前に、バックグラウンドの現在の測定値を取得する必要があります。

バックグラウンドスペクトルは、スペクトロメーター、サンプリングアクセサリ、またはバックグラウンド環境に起因するサンプルデータ内の信号を除去するために使用されます。

- Preview and Measure Background(プレビューとバックグラウンドの測定)** をクリックします。
- Start Background Measurement(バックグラウンド測定の開始)** をクリックします。バックグラウンド測定が完了すると、スペクトルが結果パネルに追加されます。

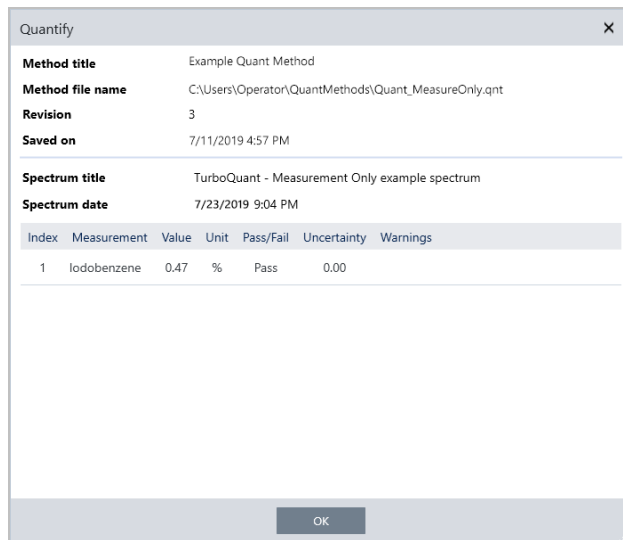
3. サンプルを測定します。


- お使いのサンプルを読み込みます。サンプルのローディング手順については、お使いの機器またはサンプリングアクセサリに同梱された文書を参照してください。
- Preview Sample(サンプルプレビュー)** をクリックします。Preview Sample(サンプルプレビュー)には、サンプルスペクトルのライブプレビューが表示されます。このプレビューでは、サンプル測定前に、潜在的な問題を補正する機会が与えられます。
- 続行する準備ができたなら、**Start Sample Measurement(サンプル測定の開始)** をクリックします。

4. 結果を解釈します。

3. チュートリアルとチュートリアル

サンプル測定完了時には、Quantify(定量)ダイアログボックスに分析結果が表示されます。表示される結果は、分析で使用する定量メソッドタイトルの設定に応じて異なります。以下に示す結果は、合格値を示す測定のみ結果を示しています。



OKをクリックしてQuantify(定量)ダイアログボックスを閉じた後、結果パネルのスペクトルの横にある情報アイコン [] をクリックすると、分析結果を表示できます。Spectrum Information(スペクトル情報)ダイアログで、History(履歴)タブに移動し、Quantify Results(定量結果)セクションを参照してください。

5. レポートを作成

分析が終了したら、レポートを作成して、結果をMicrosoft™ Word™、PowerPoint™、またはExcel™にエクスポートするか、結果を印刷または保存します。

- File(ファイル) > Create Report(レポートの作成)に移動します。
- レポートにタイトルを付けます。
- 「Format(フォーマット)」リストからフォーマットを選択し、Quantify(定量)テンプレートを選択します。レポートのプレビューが右側のパネルに表示されます。
- Create(作成)をクリックします。

3.4.2 結果の改善

結果が不明確または問題がある場合は、データを改善する可能性のある考慮すべきいくつかのオプションがあります。

- ダッシュボードに戻り、測定のResolution(分解能)設定を調整します。例えば、1や2などの小さい値を選択することで、より高い分解能でサンプル測定を行うことができます。サンプルピークがより鋭い場合や多数の場合、さらに正確な分析結果が得られる可能性があります。
- 測定のスキャン回数を増やすと、スペクトルノイズが減少する可能性があります。
- サンプルスペクトルに傾斜または湾曲したベースラインがある場合は、サンプルにAutomatic Baseline Correction(自動ベースライン補正)を適用してから、Identify(分析)メニューから分析をリスタートしてください。

3.4.3 次の手順

このガイドでは、あなたはQuantify(定量) 分析を設定、実施しました。

次に、ワークフローを使用してルーチンの繰り返し可能な手順を作成するためのガイド付きチュートリアルについて["1次ワークフローの作成と実行"](#)を参照してください。

3.5 1次ワークフローの作成と実行

このチュートリアルでは、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) でワークフローを作成する簡単な方法について説明します。ワークフローの基本情報、およびワークフロー機能と編集ツールの簡単な説明については、OMNIC Paradigmオンラインヘルプの「About Workflows(ワークフローについて) 」というタイトルの項を参照してください。

注記 ワークフローを作成するためのソフトウェア操作は、デスクトップバージョンのOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) でのみ利用可能です(タッチスクリーンバージョンでは使用できません) 。

ワークフローを作成する方法はいくつかあります。自動化しようとしている手順や開始方法によっては、一部のアプローチが他のアプローチよりもうまく機能する場合があります。例えば、次の方法で新規ワークフローを作成できます。

- ワークフローをゼロから構築する方法
- 誰かがあなたにくれたワークフローを編集する方法
- 本ソフトウェアで提供されるサンプルワークフローを複製する方法
- 自動化する測定タスクを実行し、本ソフトウェアにスペクトルの履歴情報からワークフローを作成させる方法

この項では、取得したスペクトルの履歴に基づいて、本ソフトウェアが自動的にワークフローを作成する方法を示します。また、以下を行う方法も示します。

- Workflow Editor(ワークフローエディタ) またはダッシュボードからワークフローを実行する
- ワークフローで生成されたスペクトルを分析する
- タイルを追加してワークフローを編集する
- 一般的なワークフローエラーを補正する

最後のセクションでは、ワークフローを作成および編集するための便利なヒントを提供します。

3.5.1 ワークフローを作成

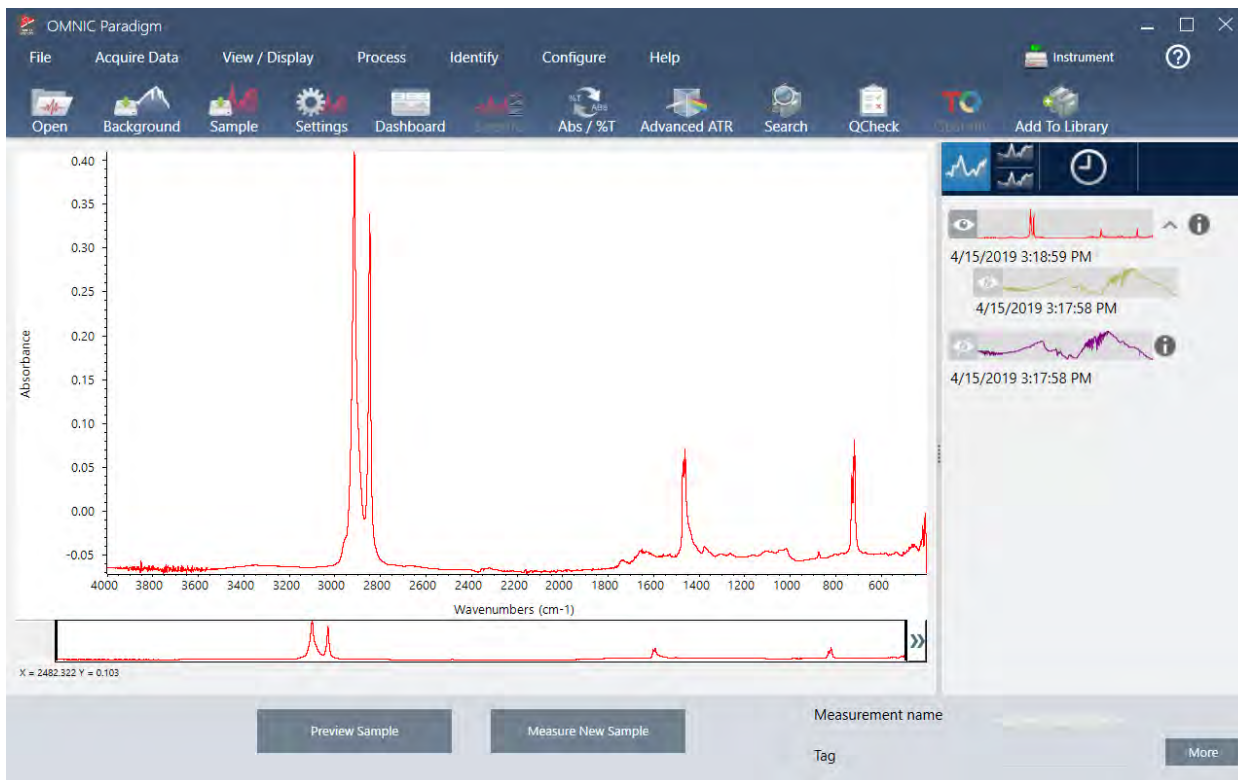
◆ 取得したスペクトルから新規ワークフローを作成するには

1. OMNIC Paradigmダッシュボードから、サンプル材料のスペクトルを取得します。

使用する素材やサンプリング手法の種類は関係ありません。本ソフトウェアで新規バックグラウンド測定が必要な場合は、最初にそれを実行してください。サンプル測定完了時には、サンプルスペクトルがSpectral(スペクトル) ビューに表示されます。

3. チュートリアルとチュートリアル

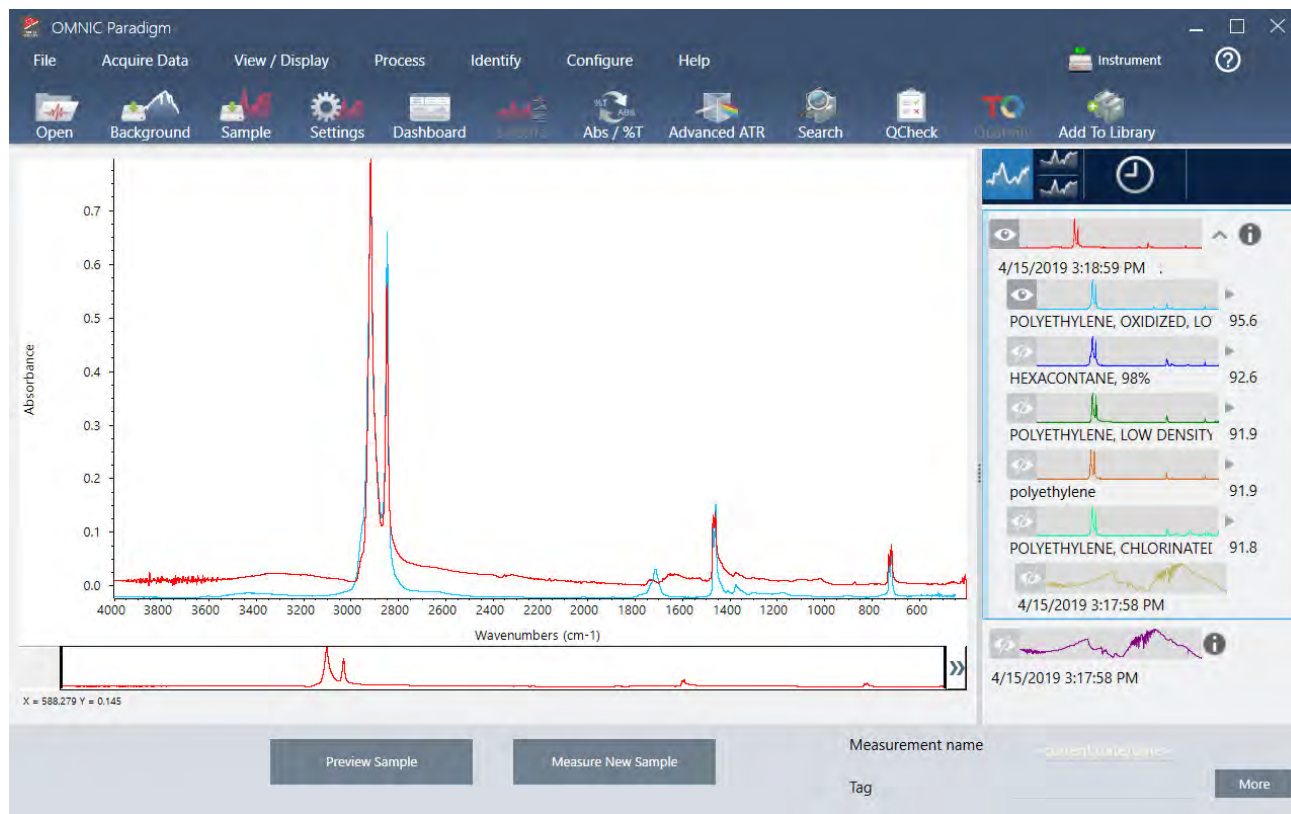
Spectral(スペクトル)ビューに表示されるスペクトルの例(減衰全反射率(またはATR、アクセサリ)で測定されたビニール袋)は次のとおりです。



2. スペクトルペインでスペクトルが選択されていることを確認してから、必要なデータ処理または分析手順(たとえば、減算、ベースライン補正、コリレーションサーチなど)を実行します。

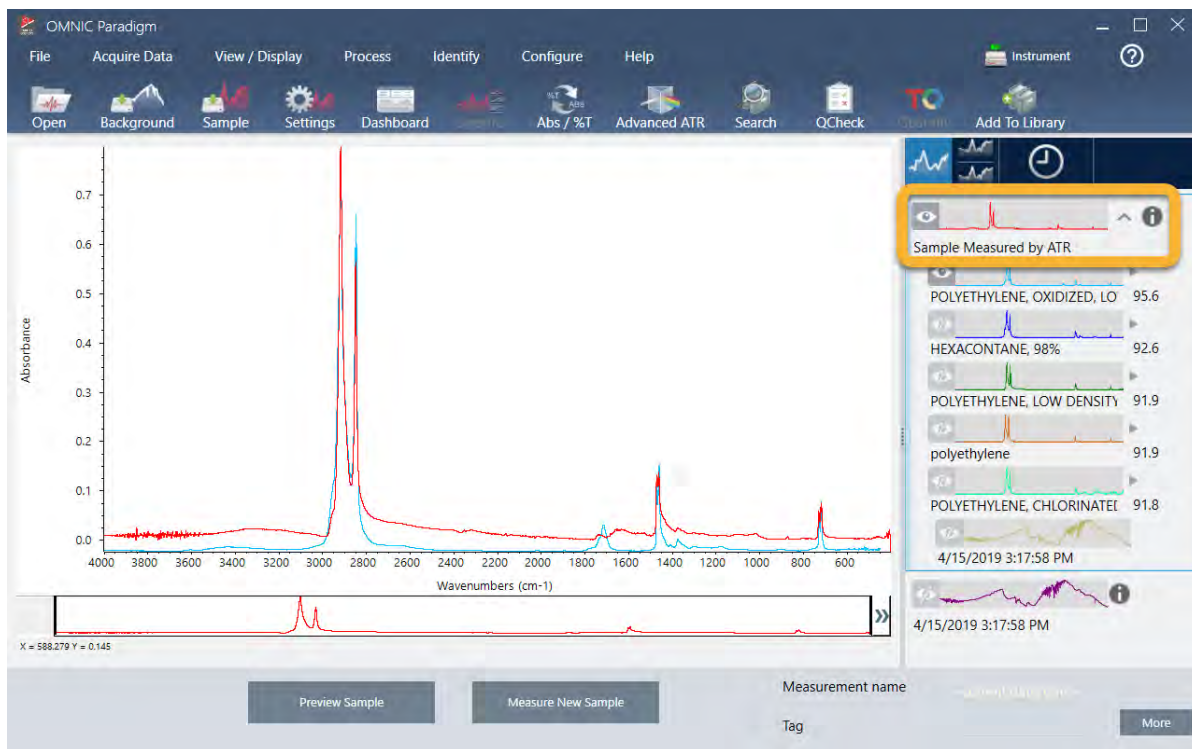
これは、Advanced ATR Correction(アドバンスドATR補正)とAutomatic Baseline Correction(自動ベースライン補正)を適用してからCorrelation Search(コリレーションサーチ)を実行した後のスペクトルの例です。

3. チュートリアルとチュートリアル



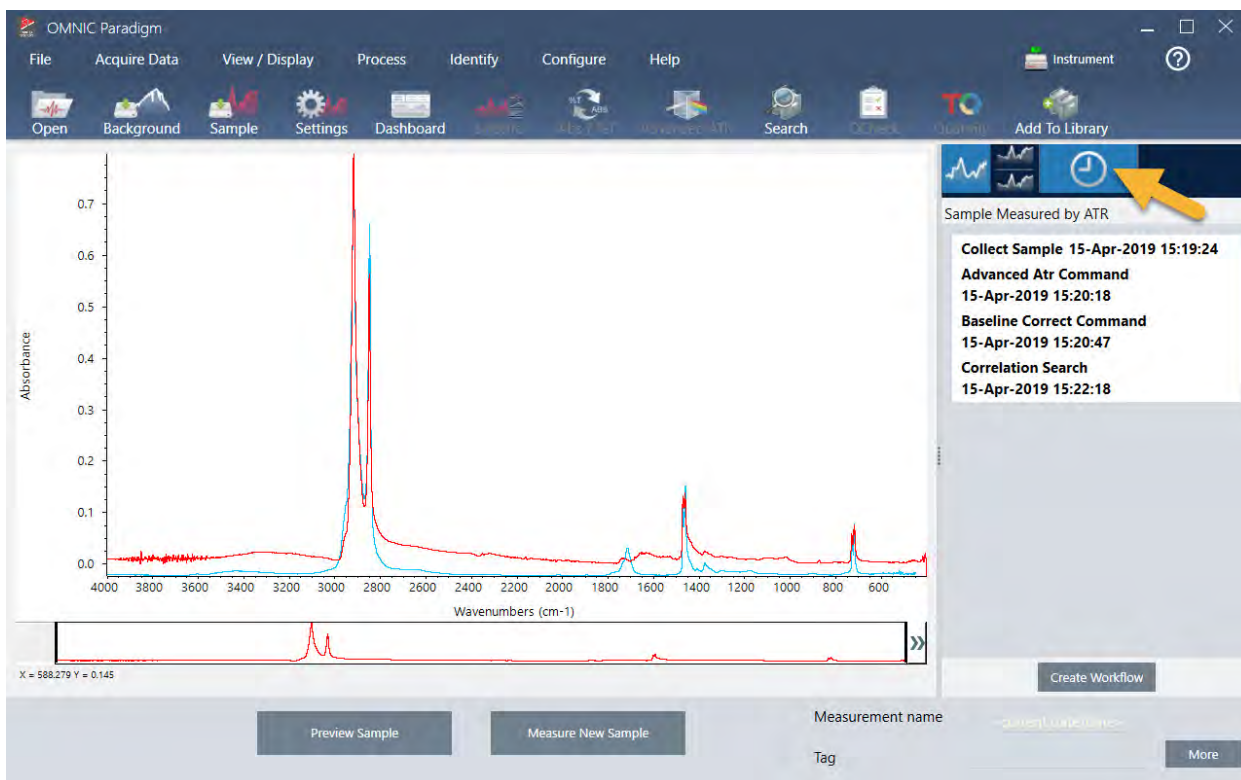
3. スペクトルにわかりやすい名前を付けます(本ソフトウェアは、作成されたワークフローにこの名前をデフォルトとして使用します。または、ワークフローに新規名前を付けることもできます)。
 - a. 結果パネルで元のスペクトルのイメージを右クリックし、**Rename Spectrum(スペクトル名の変更)**を選択します。
 - b. お使いのワークフローのdefault(規定)名をわかりやすい名前に置き換えて、**OK**を選択します。これが名前を変更したスペクトルの例です。

3. チュートリアルとチュートリアル



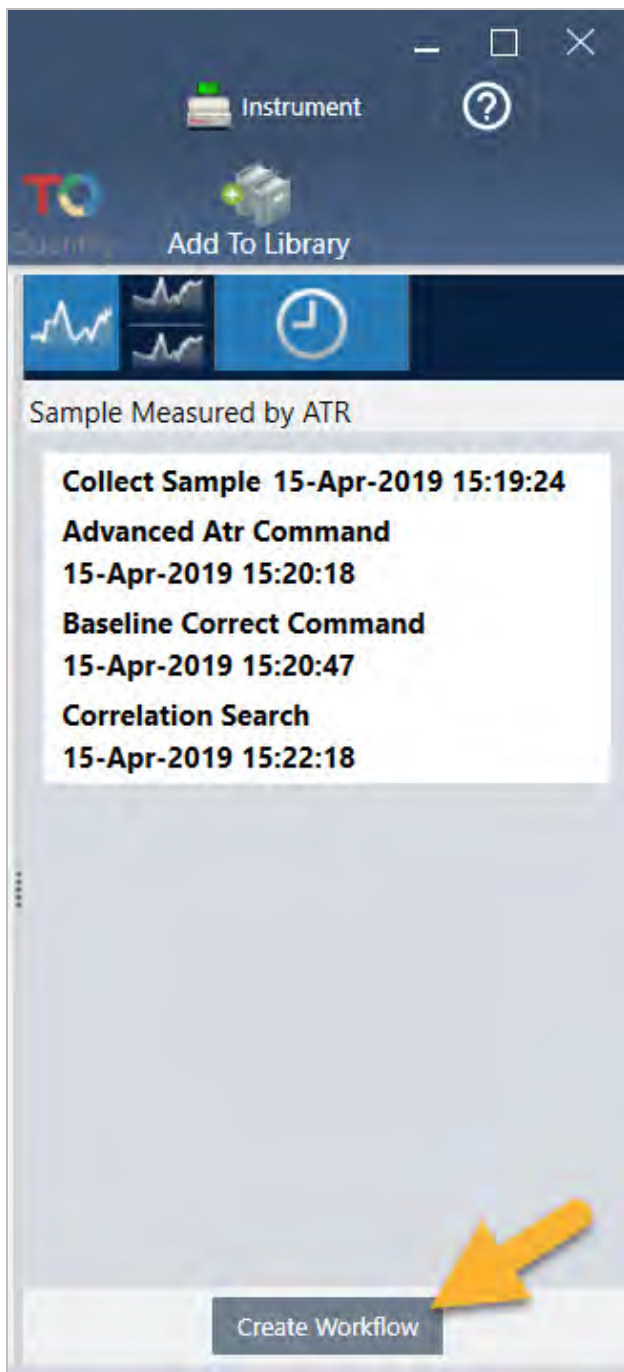
4. データ処理と分析の手順が完了したら、結果パネルの**History(履歴)** ボタンをクリックします。

履歴パネルには、選択したスペクトルで実行されたすべてのタスクが、実行された順序で表示されます。これがサンプルスペクトルの履歴情報です。



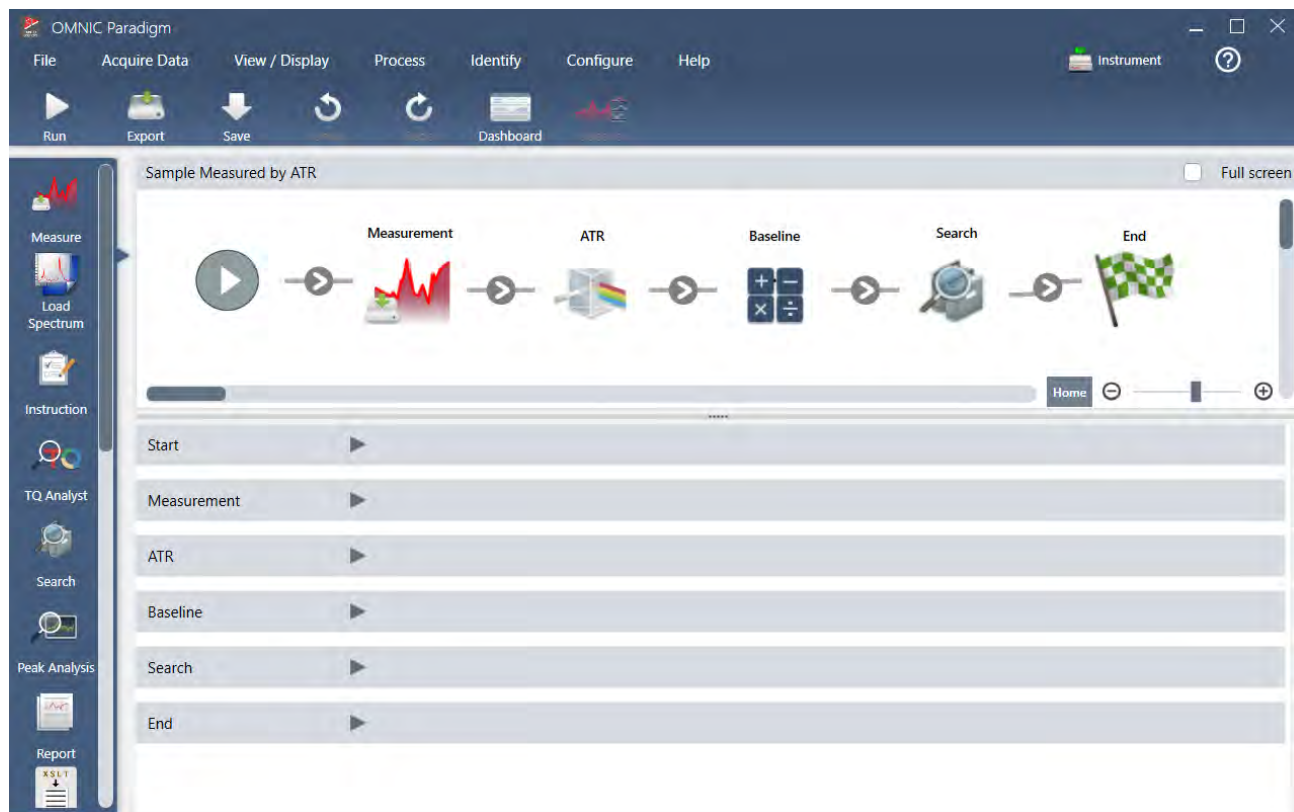
3. チュートリアルとチュートリアル

5. 履歴パネルの下部にある**Create Workflow**(ワークフローの作成)をクリックします。

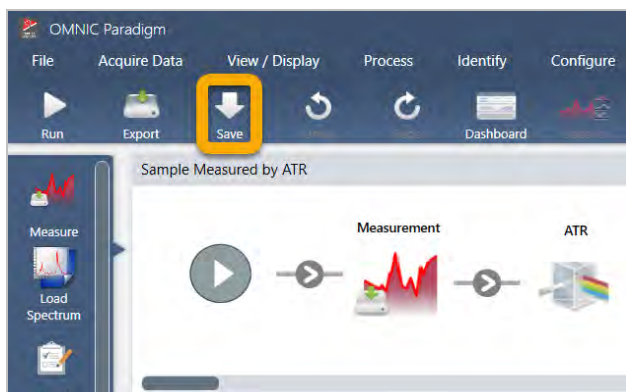


本ソフトウェアは、実行したすべての手順を含むワークフローを作成します。ワークフローはWorkflow Editor(ワークフローエディタ)に表示されます。実行された各タスクは、カラフルなタイルで表されます。実行した手順によっては、お使いのワークフローが以下の例とは異なる場合があります。

3. チュートリアルとチュートリアル



- 新規ワークフローを保存するには、ツールバー上の**Save(保存)** ボタンをクリックします。



- ワークフローを実行するには、ツールバーの**Run(実行)** ボタンをクリックします。

ワークフローは、手動で完了したのと同じタスクをまったく同じ順序で実行します。この例では、スペクトルを測定し、Advanced ATR Correction(アドバンスドATR補正)を実行し、スペクトルベースラインを補正し、コリレーションサーチを実行しました。

ワークフローが完了すると、本ソフトウェアはWorkflow Editor(ワークフローエディタ)に戻ります。

- ツールバーの**Dashboard(ダッシュボード)** ボタンをクリックして、新しく作成したワークフローをWorkflows(ワークフロー) リストに表示します。

3. チュートリアルとチュートリアル

ワークフローは、ワークフローの作成に使用されたスペクトル名に基づいて自動的に名前が付けられます。Workflows(ワークフロー) リストに新しく作成されたワークフローの例と、プレビューボックスにワークフローのプレビューがあります。

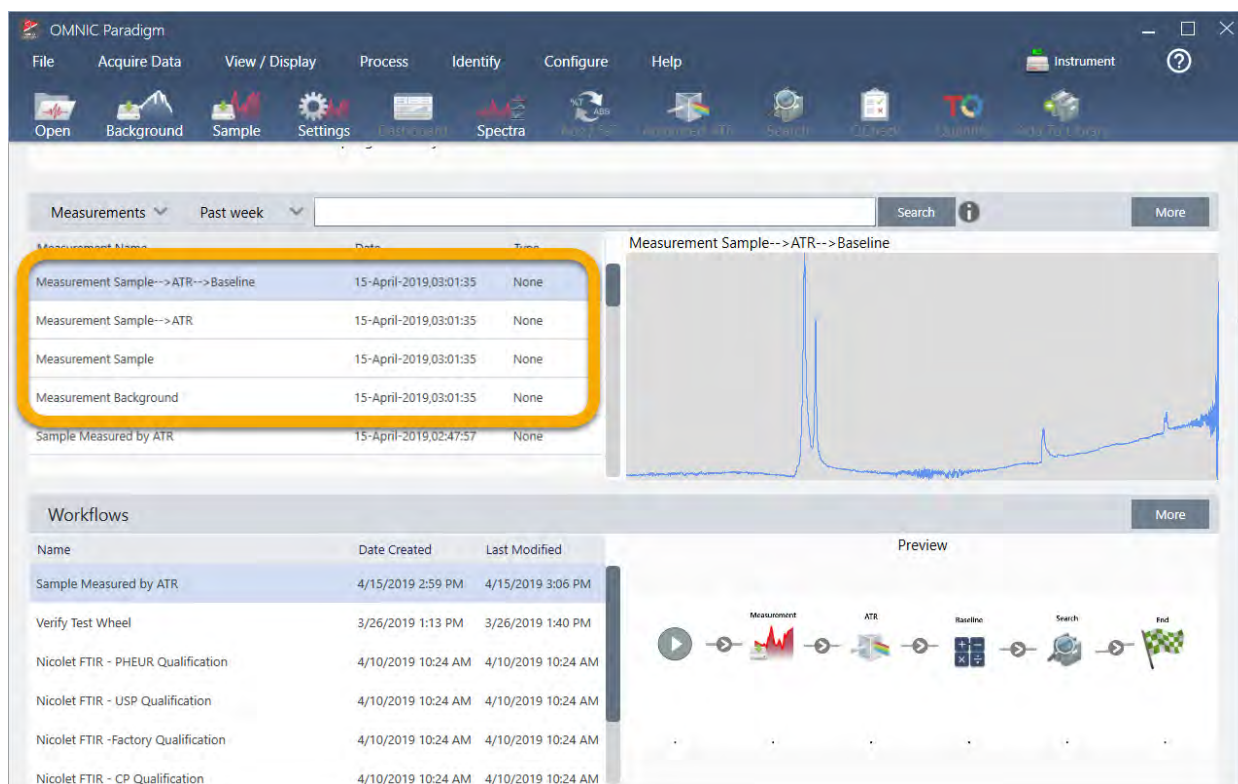
The screenshot displays the OMNIC Paradigm software interface. The top menu bar includes File, Acquire Data, View / Display, Process, Identify, Configure, Help, and Instrument. Below the menu is a toolbar with icons for Open, Background, Sample, Settings, Clean Up Job, Spectra, ATR, Advanced ATR, Search, Backup, Cleanup, and Add To Library. The main window is divided into two primary sections: Measurements and Workflows.

Measurements Section: This section shows a table of recent measurements. The table has columns for Measurement Name, Date, and Type. The first row is highlighted, showing 'Measurement Sample-->ATR-->Baseline' with a date of '15-April-2019,03:01:35' and a type of 'None'. To the right of the table is a preview of the corresponding spectrum, titled 'Measurement Sample-->ATR-->Baseline', showing a sharp peak.

Workflows Section: This section shows a table of workflows. The table has columns for Name, Date Created, and Last Modified. The first row is highlighted, showing 'Sample Measured by ATR' with a date created of '4/15/2019 2:59 PM' and a last modified date of '4/15/2019 3:06 PM'. An orange arrow points to this row. To the right of the table is a preview of the workflow, titled 'Preview', showing a sequence of steps: Measurement, ATR, Baseline, Search, and End, each represented by an icon and connected by arrows.

9. ワークフローで生成されたスペクトルがMeasurements(測定) リストに表示されます。

3. チュートリアルとチュートリアル



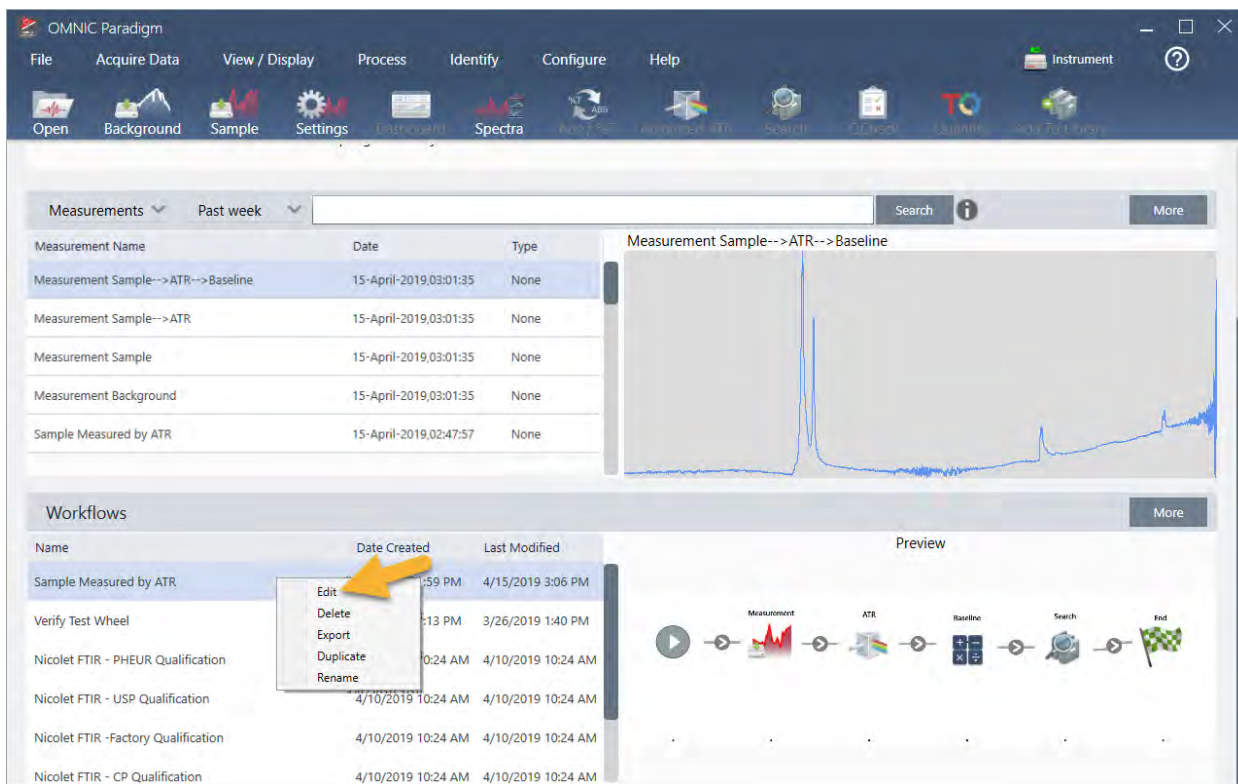
このワークフロー例では、4つのスペクトル、測定されたバックグラウンドスペクトル、測定されたサンプルスペクトル、ATR補正されたサンプルスペクトル、およびATRとベースライン補正されたサンプルスペクトルをサーチ結果とともに作成しました。ワークフローで生成されたスペクトルには、関連するワークフロータイトルのTile Name(タイル名)プロパティを使用して名前が付けられます。

3.5.2 ワークフローにタイルを追加する

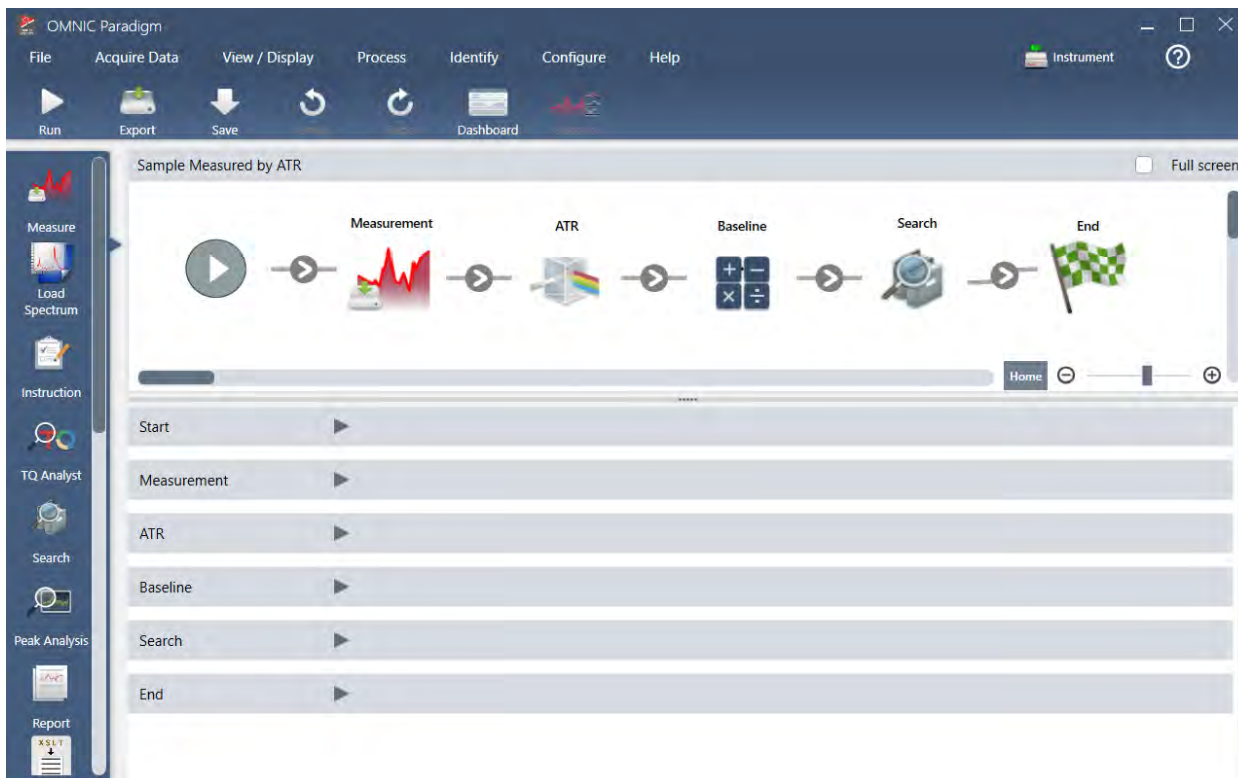
このセクションでは、ワークフロー編集ツールを使用して、自動生成されたワークフローにタイルを追加する方法を示します。

1. ダッシュボードからワークフロー名を右クリックし、**Edit(編集)**を選択します。

3. チュートリアルとチュートリアル



ワークフローがWorkflow Editor(ワークフローエディタ)で開きます。



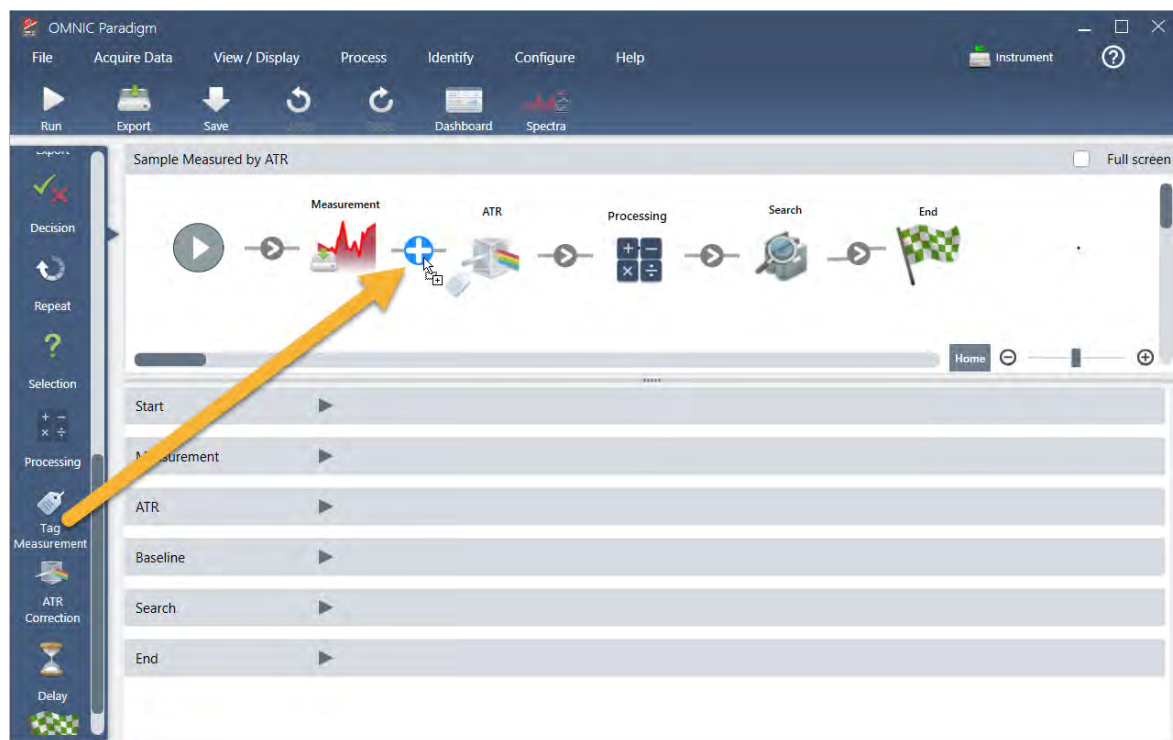
2. Tag Spectrum(タグスペクトル) タイルをワークフローに追加します。

3. チュートリアルとチュートリアル

ワークフローで生成されたスペクトルは、手動で取得したデータとともにOMNIC Paradigmデータベースに保存されます。ワークフロースペクトルにタグを付けて、ワークフローに関連付けましょう。これにより、後で簡単に開いて表示できます。

- a. ワークフローエディタで、Tag Measurement(タグ測定) タイルを選択バーからキャンバスにドラッグして、マウスカーソルを測定タイルとATR Correction(ATR補正) タイルの間の灰色の矢印の上に合わせます。

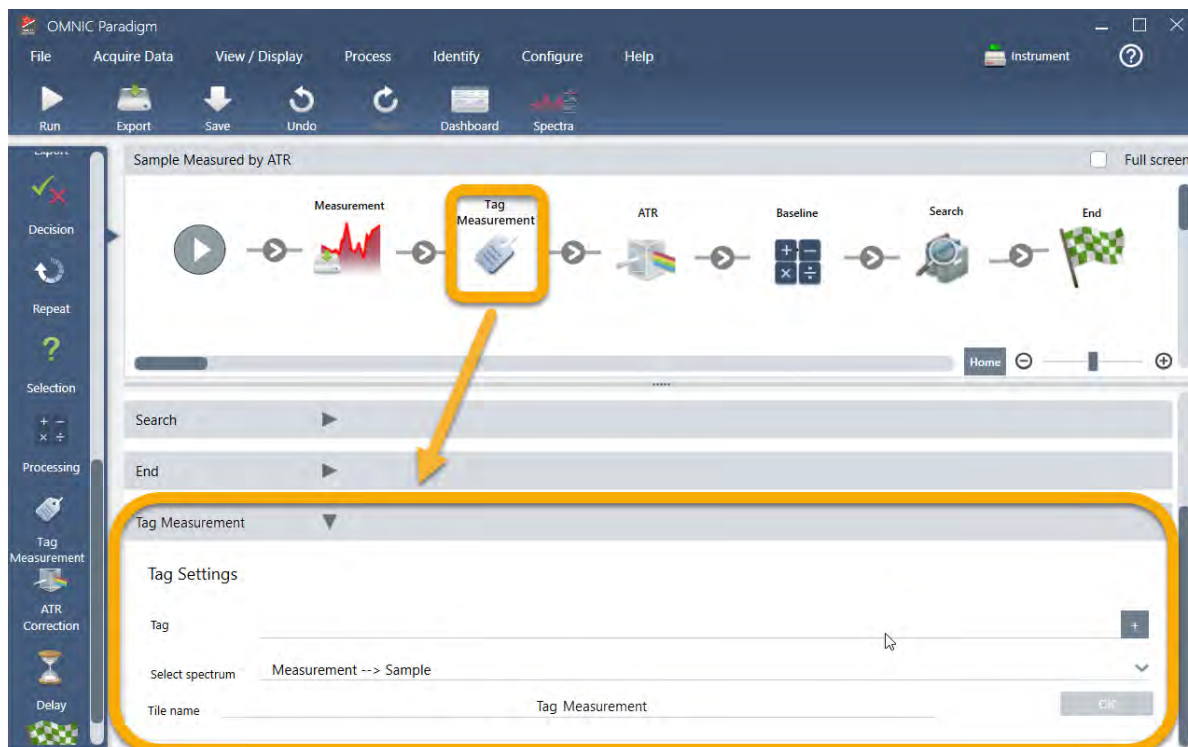
灰色の矢印がプラス記号に変わります。



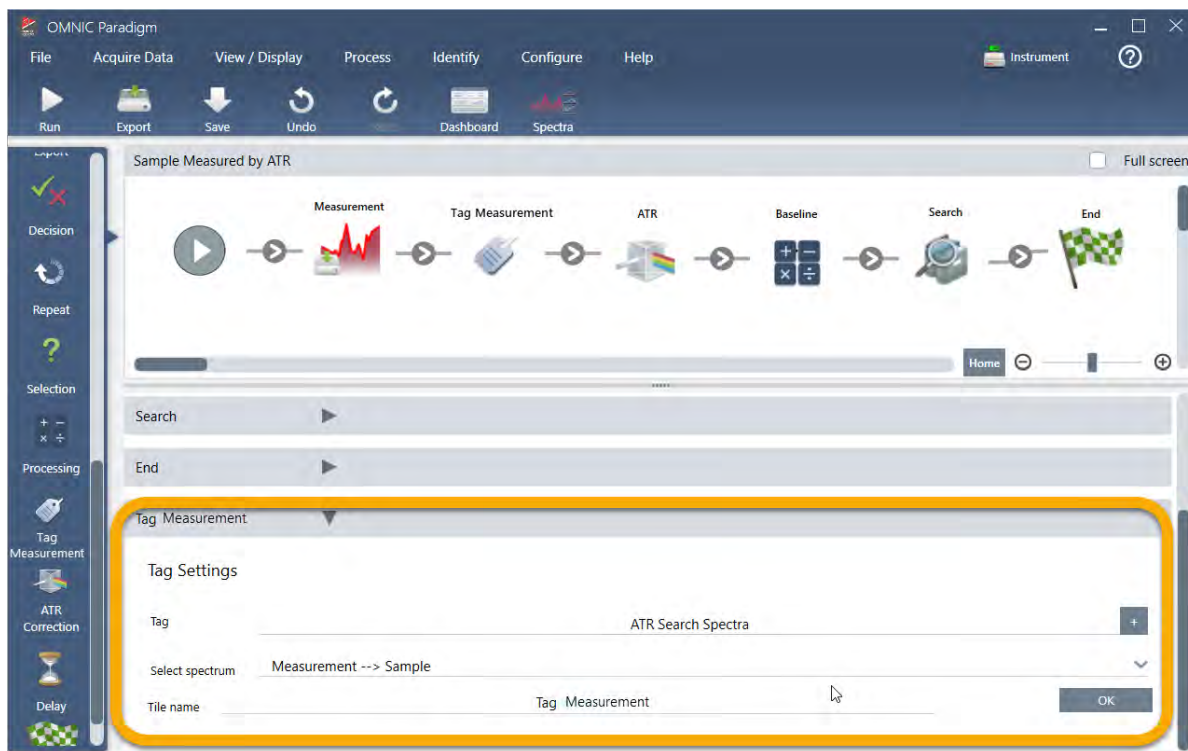
- b. マウスボタンを離します。

タイルがワークフローのその場所に追加され、ワークフロー設定ボックスがキャンバスの下に開きます。

3. チュートリアルとチュートリアル



- c. Tag Settings (タグ設定) で、ワークフローで生成されたスペクトルのベース名 (「ATR Search Spectra(ATRサーチスペクトル)」など) を入力し、「Select Spectrum(スペクトルの選択)」が測定したスペクトル(「Measurement - Sample(測定-サンプル)」) に設定されていることを確認し、OKを選択します。



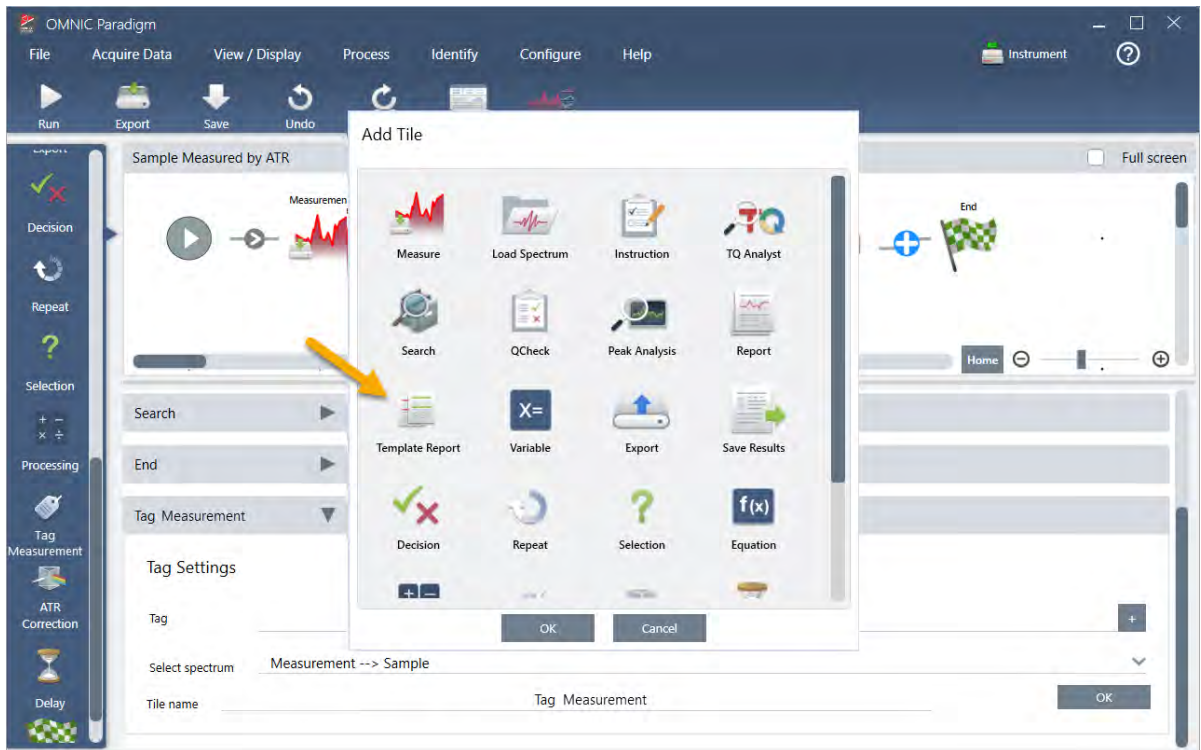
3. チュートリアルとチュートリアル

Tag Measurement(タグ測定) タイルは、ワークフローによって生成された各スペクトルに「ATR Search Spectra(ATR サーチスペクトル)」タグを自動的に追加します。これらのスペクトルをサーチする方法については、後で説明します。

次に、エラーにフラグを立てるタイルを追加するとどうなるかを見てみましょう。

3. Template Report(テンプレートレポート)タイルをワークフローに追加します。

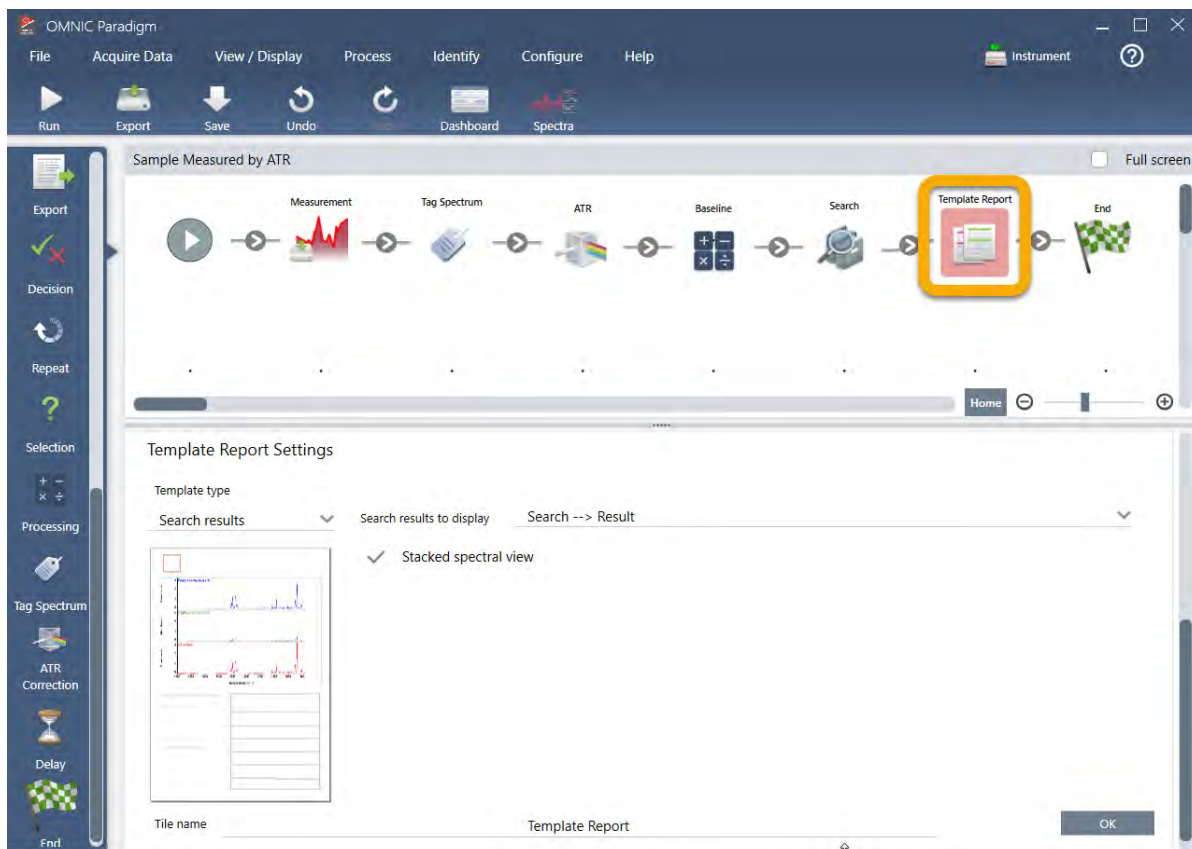
- a. Workflow Editor(ワークフローエディタ) で、マウスを使用してSearch(サーチ) タイルとEnd(終了) タイルの間の灰色の矢印にカーソルを合わせ(矢印がプラス(+) 記号に変わる)、マウスボタンをクリックします。本ソフトウェアはAdd Tile(タイルの追加) ボックスを開きます。(これは、タイルを追加するもう一つの簡単な方法です。)



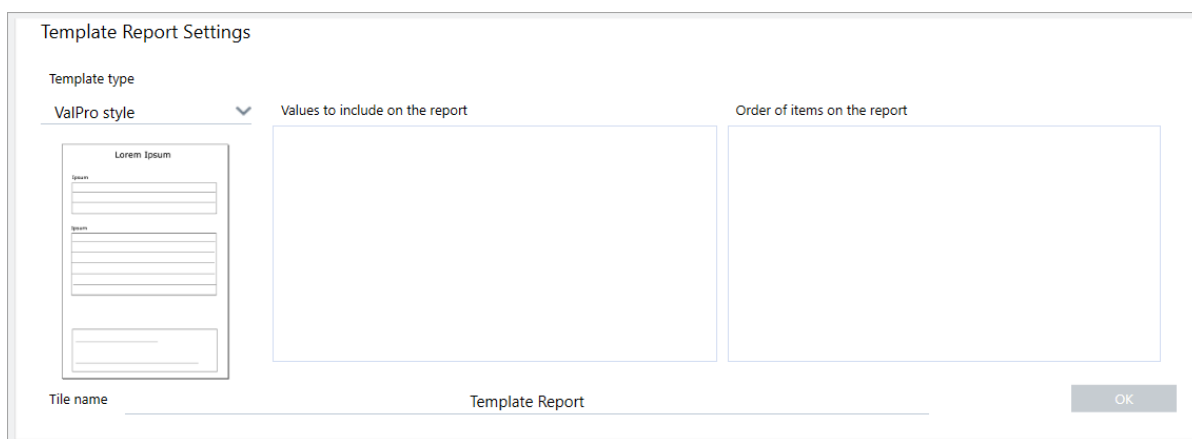
- b. Add Tile(タイルの追加) ボックスで、Template Report(テンプレートレポート) を選択し、OKを選択します。

タイルがワークフローのその場所に追加され、ワークフロー設定ボックスがキャンパスの下に開きます。

3. チュートリアルとチュートリアル



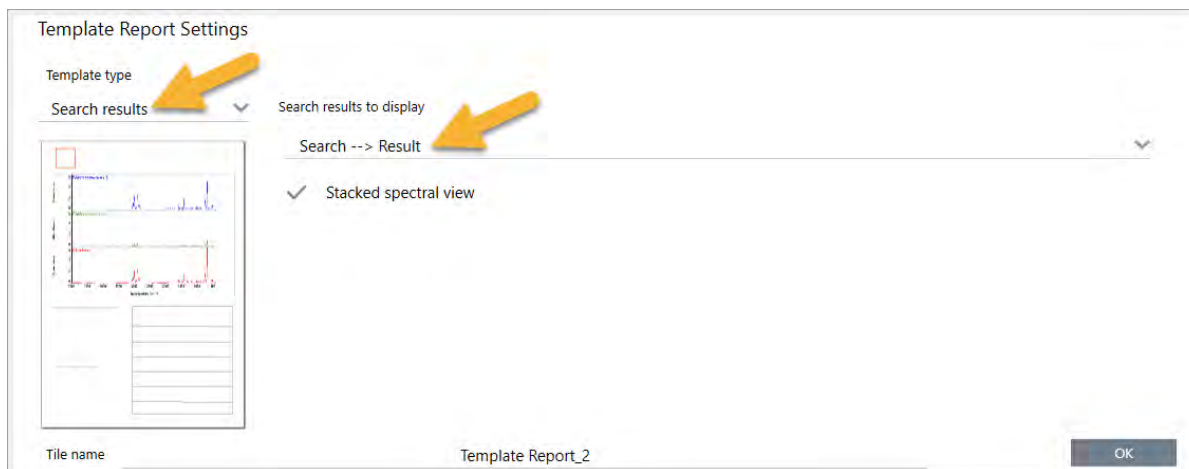
Template Report(テンプレートレポート)タイトルに赤い境界線があることに注意してください。これは、ワークフローが現在正常に実行されていないことを示しています。Template Report(テンプレートレポート)の設定を表示すると、ボックスはすべて空白になっています。



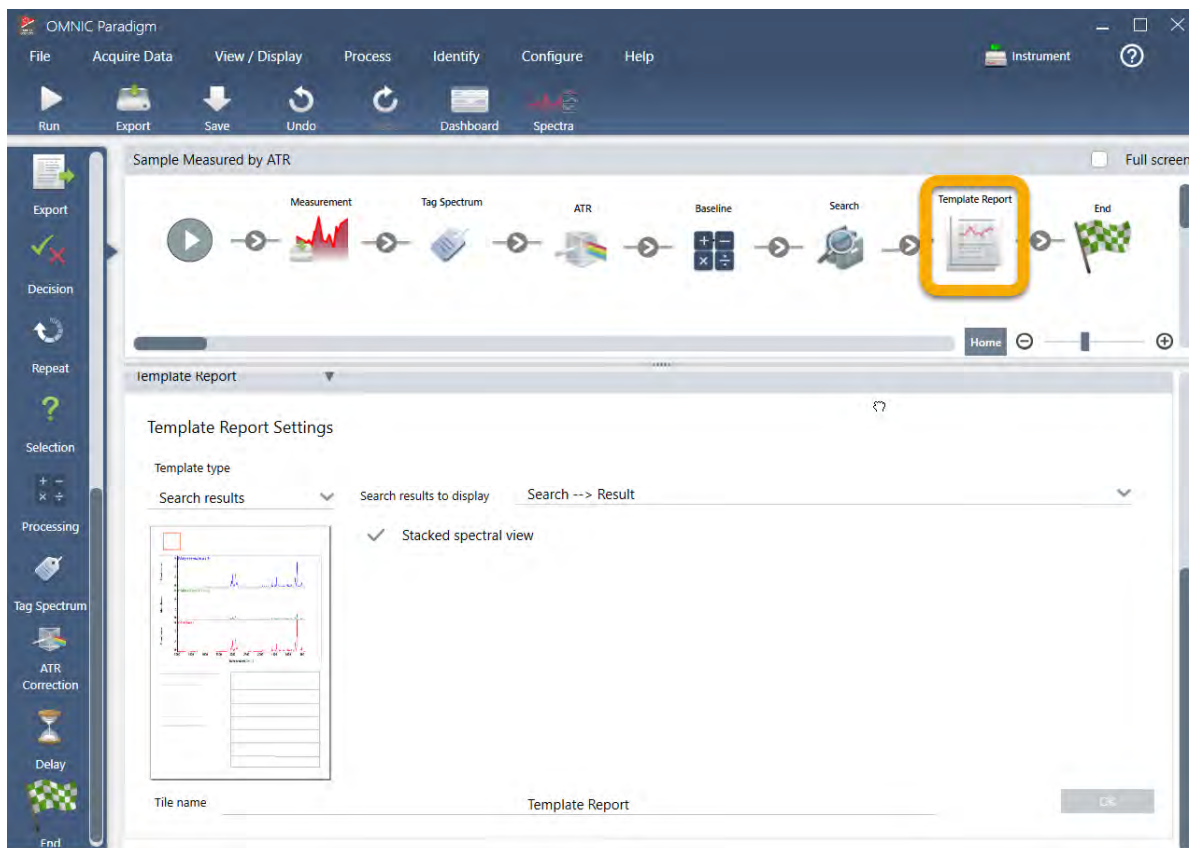
この問題を解決するには、レポートのテンプレートと含める結果を指定する必要があります。

- c. Search Results(サーチ結果) テンプレートを参考にして、**Template Type(テンプレートタイプ)**をお好みのレポートスタイルに設定し、あなたのワークフローの出力(この例では「Search Result(サーチ結果)」)に対して**Search Results To Display(表示するサーチ結果)**を設定してから、**OK**を選択します。

3. チュートリアルとチュートリアル



赤い境界線がもうないことに注意してください。



4. アップデートされたワークフローを保存するには、ツールバー上の**Save(保存)** ボタンをクリックします。

5. ワークフローを実行するには、ツールバーの**Run(実行)** ボタンをクリックします。

ワークフローはすべての手順を実行してから、最終レポートを表示します。

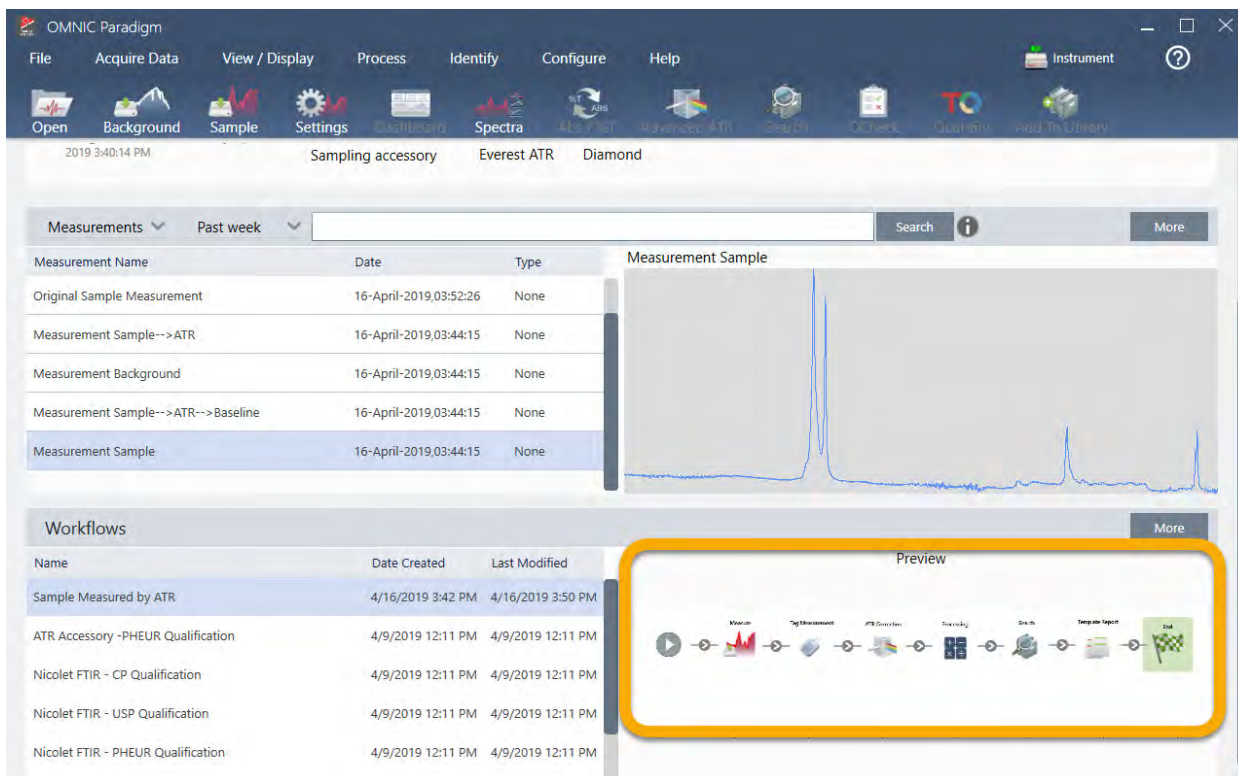
矢印ボタンをクリックしてワークフローを終了します。

3. チュートリアルとチュートリアル

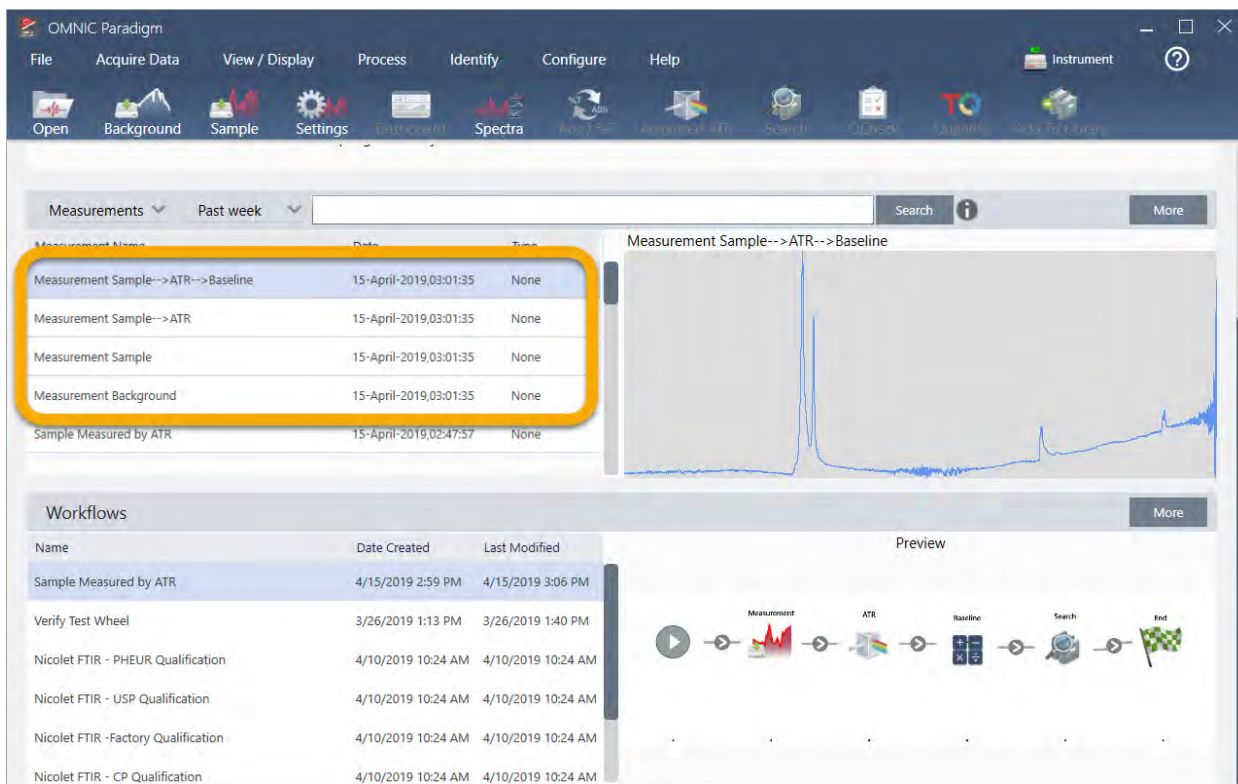


6. ツールバーのDashboard(ダッシュボード) ボタンをクリックして、ダッシュボードに戻ります。
7. Workflows(ワークフロー) リストでワークフローを選択すると、プレビューがアップデートされます。

3. チュートリアルとチュートリアル



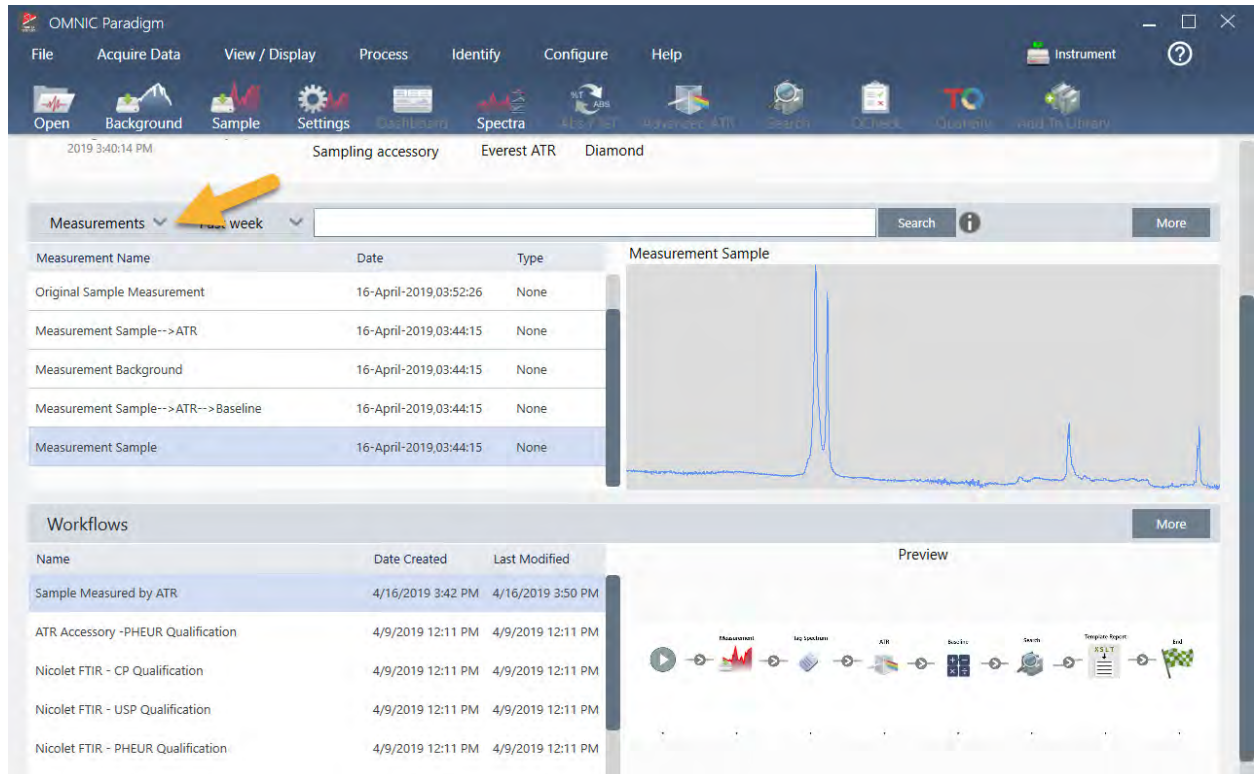
8. Search(サーチ)ボックスにタグを入力すると、本ソフトウェアはワークフローで生成されたスペクトルをMeasurements(測定)リストに表示します。



3. チュートリアルとチュートリアル

スペクトルペインにスペクトルを表示するには、Shift + クリックを使用してMeasurements(測定)リストで4つすべてを選択し、右クリックして「Open Selected Measurements(選択した測定を開く)」を選択します。

9. ワークフローで生成されたレポートを表示するには、この矢印ボタンをクリックして「Reports(レポート)」を選択します。



3.5.3 Workflows(ワークフロー)作成のヒント

さらにワークフローの作成に進む前に、ワークフローに関する一般的な質問に対するこれらの回答と、発生する可能性のある問題を解決するためのヒントをお読みください。

- **ワークフローでタイルが表示される順序は重要ですか?** はい、タイルの順序は重要です。各ワークフロータイルは以前のタイルに基づいて構築されており、すべてのタイルは入力要件と出力結果によって相互接続されています。例えば、Measure(測定)タイルを追加すると、出力結果(スペクトル)が作成されます。この結果には、ワークフローのMeasure(測定)タイルの後に配置されたタイルからのみアクセスできます。取得したスペクトルのベースラインを補正する場合は、Measure(測定)タイルの後にProcessing(データ処理)タイルを追加してから、Processing(データ処理)タイルの入力を測定出力(つまり、スペクトル)に設定する必要があります。それ以外の場合、Processing(データ処理)タイルには赤い境界線が表示され、ワークフローを実行する前に設定する必要があるオプションが含まれていることを示します。赤い境界線のあるタイルが表示された場合は、マウスを使用してそのタイルにカーソルを合わせると、問題の原因を見つけるのに役立ちます。
- **ワークフローにバックグラウンド測定を追加する必要がありますか?** ワークフローでバックグラウンドスペクトルに対してのみ操作を実行する必要がある場合を除きます。測定されたサンプルデータを処理するためにバックグラウンドスペクトルのみが必要な場合は、ワークフローに測定タイルを追加し、Measure(測定)タイル設定を使用してバックグラウンド測定を定義する必要があります。

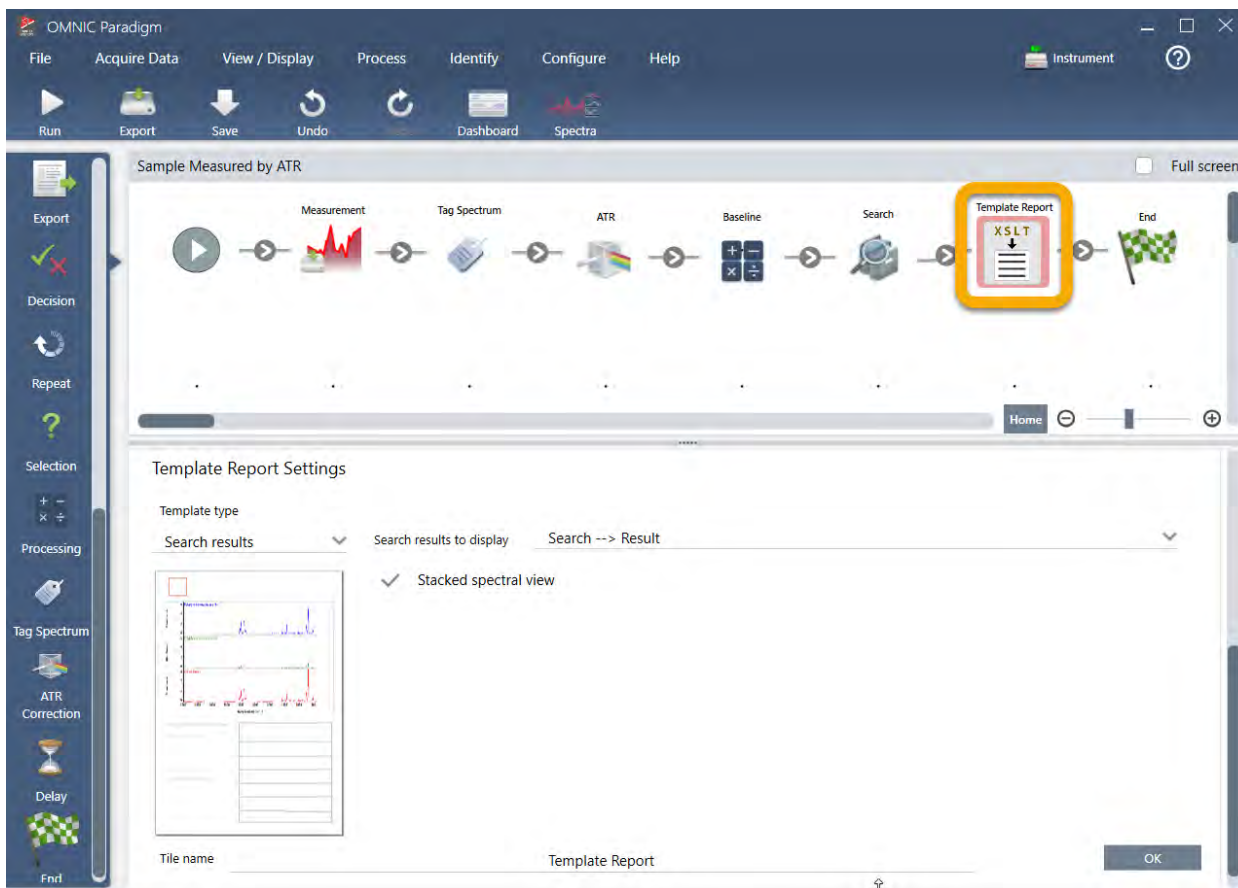
3. チュートリアルとチュートリアル

- **ワークフロータイトルのタイトルを変更できますか?** 各ワークフロータイトルには、タイトル名を指定する設定があります。(ワークフローエディタでタイトルをダブルクリックして、関連する設定を開きます。) Tile Name(タイトル名)設定を使用して、お使いのワークフローに詳細を追加できます。これは、ワークフロー開発者が物事を整理するのに役立ちます。特に、複数のパスやループ、または同じタイプの複数のタイトル(たとえば、同じワークフロー内の複数のMeasure(測定)タイトル)を含むワークフローを作成する場合に役立ちます。

タイトル名は、ワークフローの実行時に出カファイルに名前を付けるためにも使用できます。以下にいくつかの例を挙げます:

- **Measure(測定)タイトル。** このタイトルは、バックグラウンドとサンプルのスペクトルを取得します。ワークフローが実行されると、サンプルスペクトルは、関連付けられたMeasure(測定)タイトルのタイトル名とともに保存されます。
 - **ATR Correction(ATR補正)タイトル、Process(プロセス)タイトルなど。** 取得したスペクトルを操作するタイトルは、ワークフローの実行時に最終的なサンプルスペクトルとともに保存される出力スペクトルを生成します。各暫定的な「処理済み」スペクトルは、それを生成したワークフロータイトルのタイトル名とともに保存されます。
 - **Reports(レポート)タイトル。** このタイトルはサンプルレポートを作成します。ワークフローが実行されると、レポートは関連するReports(レポート)タイトルのタイトル名で保存されます。
- **すべてのワークフローにExport(エクスポート)タイトルが必要ですか?** この質問に対する答えは「いいえ」です。ワークフローから生成されたスペクトルとレポートは、スペクトロメーターを使用して手動で作成された(つまり、ワークフローからではなく)他のすべてのスペクトルとレポートとともに、OMNIC Paradigmデータベースに自動的に保存されます。お使いのワークフローで生成されたスペクトルとレポートを、アーカイブまたは他の場所(OMNIC Paradigmソフトウェアなどから)で開くことができるファイルとして保存する場合は、Export(エクスポート)タイトルを使用してそれらのファイルを自動的に作成します。
 - **ワークフローが実行されないのはなぜですか?** 新しく作成したワークフローを実行する前に、赤い境界線のあるタイトルがないことを確認してください。次に例を示します。

3. チュートリアルとチュートリアル



赤い境界線のあるタイルが含まれている場合、ワークフローは完了まで実行されません。

お使いのワークフローに赤い枠のタイルがある場合は、マウスを使用してタイルにカーソルを合わせると、問題を解決するためのヒントが表示されます。通常、赤い境界線は、タイルに設定されていない必須オプションが含まれていることを示します。ただし、タイルが「違反」であることを意味する場合があります。たとえば、ワークフローでMeasure(測定)タイルの前にProcessing(データ処理)タイルを配置すると、Processing(データ処理)タイルには赤い境界線が表示され、ベースラインを補正するための出力スペクトルがないため、ワークフローには解決できないエラーが含まれます。

【このページは意図的に空白にしています】

4. ハウツーガイド

4.1 データの管理	94
4.2 分光	107
4.3 タイムシリーズ測定	158
4.4 顕微分光法	171
4.5 ワークフローを使用	194
4.6 カスタムソリューション	225
4.7 データを保護	234

4.1 データの管理

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) には、測定、レポートおよびセッションを含むデータを簡単に見つけたり管理するツールがあります。

4.1.1 スペクトルライブラリの管理

ライブラリには、化合物と関連情報のリストが含まれており、ご自身のデータから購入または作成できます。コリレーションサーチまたは多成分サーチを実行すると、分析により、サンプルスペクトルが、サーチ設定で指定したライブラリに保存されている化合物と比較されます。

ライブラリマネージャーを使用して、お使いのライブラリと保存されている化合物に関する情報を表示し、ライブラリを作成または削除します。

新規ライブラリの作成

新規ライブラリの作成を行って、スペクトルデータを管理し、ご自身の測定データを検索します。

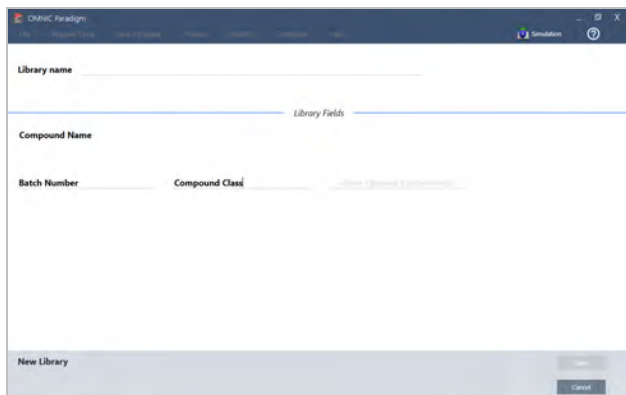
◆ デスクトップインターフェースで新規ライブラリの作成を行うには

1. メニューバーから、Identify(分析) > Library Manager(ライブラリマネージャー) を選択します。
2. Library Manager(ライブラリマネージャー) で、New Library(新規ライブラリ) を選択します。

3. ライブラリの名前を入力し、オプションのフィールドを追加します。

ライブラリにスペクトルを追加するときに、オプションのフィールドが使用されます。

図4-1: お使いのライブラリに名前を付け、New Library(新規ライブラリ)ビューのオプションフィールドをカスタマイズします。



4. **Save(保存)**をクリックして、新規ライブラリを作成します。

お使いの新規ライブラリは、ライブラリマネージャーのLibraries(ライブラリ)列に一覧表示されます。

◆ タッチスクリーンインターフェースで新規ライブラリの作成を行うには

1. ホーム画面からメニュー [☰]を開き、**Library Manager(ライブラリマネージャー)**を選択します。
2. ツールバーから**New Library(新規ライブラリ)**を選択します。
3. New Library(新規ライブラリ)ビューで、ライブラリの名前を入力し、オプションのフィールドを追加します。

ライブラリにスペクトルを追加するときに、オプションのフィールドが使用されます。

図4-2: お使いのライブラリに名前を付け、New Library(新規ライブラリ)ビューのオプションフィールドをカスタマイズします。



4. **Save(保存)**をタッチして、新規ライブラリを保存します。

ライブラリにスペクトルを追加

ライブラリにスペクトルを追加して、他のSearch(サーチ)分析ではご自身のサンプルデータを使用します。

◆ デスクトップインターフェースのライブラリにスペクトルを追加するには

1. Spectral(スペクトル)ビューで、ライブラリに追加するスペクトルを選択します。
 - a. 2つ以上のスペクトルを追加するには、複数のスペクトルを選択します。
 - i. すべての可視スペクトルを選択するには、Main Spectra(メインスペクトル)ビューを右クリックしてSelect All(すべて選択)を選択します。
 - ii. 複数のスペクトルを選択するには、Main Spectra(メインスペクトル)ビューでCtrlキーを押しながら任意のスペクトルを選択します。
2. メニューバーから、Identify(分析) > Add to Library(ライブラリに追加)を選択して、Add to Library(ライブラリに追加)ビューを開きます。
3. ライブラリのリストから、スペクトルを追加するライブラリを選択します。
4. スペクトル情報を調整し、化合物の名前を設定します。規定名は、サンプルが測定されたときに使用された測定名になります。
5. Save(保存)をクリックします。これで、スペクトルがライブラリで利用できるようになり、ライブラリマネージャーで表示できます。

◆ タッチスクリーンインターフェースのライブラリにスペクトルを追加するには

1. Spectral(スペクトル)ビューで、ライブラリに追加するスペクトルを選択します。Ctrlキーを押しながら選択して、選択範囲にスペクトルを追加します。
2. メニューからAdd to Library(ライブラリに追加)を選択します。
3. Add to Library(ライブラリに追加)ビューで、Library(ライブラリ)列からライブラリを選択します。
4. 化合物に名前を付け、オプションのフィールドを指定して、Save(保存)をタッチします。これで、スペクトルをご自身で選択したライブラリで利用できるようになります。

ライブラリからスペクトルを追加

ライブラリからスペクトルを追加して、分析またはワークフローの参照として使用します。追加されたスペクトルは、測定値とともにデータベースに保存されますが、名前を変更したり、タグを付けたり、エクスポートしたりすることはできません。

◆ ライブラリからスペクトルを追加するには

1. Library Manager(ライブラリマネージャー)に移動します。
2. 追加する化合物を選択します。
3. ツールバーで、Extract(追加)を選択します。スペクトルが正常に追加されたことを確認するメッセージが表示されます。測定値をビューして、追加されたスペクトルを見つけます。

ライブラリと化合物を削除

化合物を削除すると、その化合物はサーチ分析で使用されなくなり、化合物のリストで取り消し線が引かれます。ライブラリ内の他の化合物のインデックス位置は維持されます。

作成したライブラリのみを削除または編集できます。商用ライブラリとその化合物は削除できません。

注記 削除されたライブラリと化合物は復元できません。

◆ **ライブラリから化合物を削除するには**

- Desktop(デスクトップ) インターフェースの使用
 1. Library Manager(ライブラリマネージャー) で、削除する化合物に移動します。
 2. 化合物を右クリックして、**Delete(削除)** を選択します。ダイアログボックスで、**Yes(はい)** をクリックして確認します。
- タッチスクリーンインターフェースの使用
 1. Library Manager(ライブラリマネージャー) で、削除する化合物を選択します。
 2. Spectrum(スペクトル) ペインでDelete(削除) をタップします。

◆ **ライブラリを削除するには**

- Desktop(デスクトップ) インターフェースの使用
 1. Library Manager(ライブラリマネージャー) で、削除するライブラリを選択します。
 2. ツールバーの**Delete(削除)** をクリックし、**Yes(はい)** をクリックして確認します。
- Touchscreen(タッチスクリーン) インターフェースの使用
 1. Library Manager(ライブラリマネージャー) で、削除するライブラリを選択します。
 2. メインツールバーのDelete(削除) をタッチします。

ライブラリの場所を追加

Search Setup(サーチ設定) のLibrary Locations(ライブラリの場所) タブを使用して、追加のライブラリの場所を指定します。これは、お使いのライブラリがネットワークドライブなどの共有場所に保存されている場合に役立ちます。ライブラリの場所を追加すると、その場所にあるライブラリをSearch(サーチ)、QCheck(Qチェック)、およびその他の分析に使用できます。

◆ **ライブラリの場所を追加するには**

1. デスクトップインターフェースを使用して、**Identify(分析)** メニューを開き、**Search Setup(サーチ設定)** を選択します。
2. **Library Locations(ライブラリの場所)** タブに移動します。
3. **Add Location(ライブラリの場所を追加)** をクリックします。
4. 追加のライブラリの場所を参照し、**Open(開く)** をクリックします。
5. **Save(保存)** をクリックします。

4.1.2 データベースのBack Up(バックアップ)とRestore(復元)

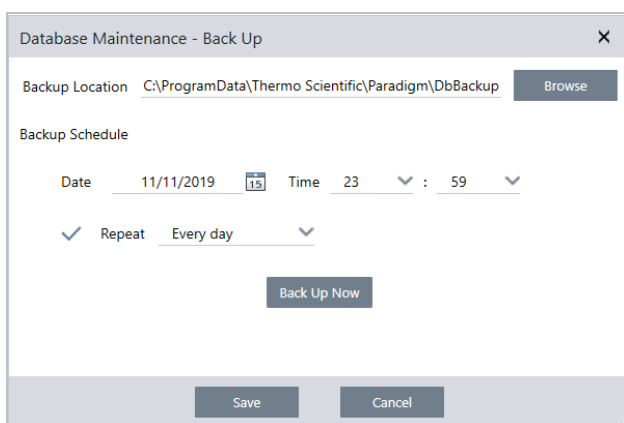
データベースを定期的にバックアップして、ハードドライブが故障した場合にデータを回復できるようにします。OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のデータベースメンテナンスツールを使用すると、OMNIC Paradigmソフトウェアから直接データを簡単にバックアップし復元することができます。

データベースのバックアップ

ハードドライブが故障した場合に備えて、データベースを別のデバイスにバックアップします。例えば、データを別のコンピュータや外付けハードドライブ、またはリモートネットワークの場所にバックアップします。

◆ データベースをバックアップするには

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のDesktop(デスクトップ)インターフェースを使用して、**Configure(構成) > Database Maintenance(データベースメンテナンス)**に移動し、**Back Up(バックアップ)**を選択します。



2. バックアップデータベースを保存するバックアップ場所を選択します。
3. バックアップをスケジュールするには、最初のバックアップの日付と時間を設定します。
 - a. **Repeat(リポート)**が選択されていることを確認し、そのリストからRepeat(リポート)オプションを選択します。
 - b. **Save(保存)**をクリックします。
4. スケジュールなしでデータベースを手動でバックアップするには、**Back Up Now(直ちにバックアップ)**をクリックします。

バックアップする前に新規バックアップ場所を設定するには、最初に場所を変更し、その変更を保存してから、[Database Maintenance - Back Up(データベースメンテナンス - バックアップ)]ウィンドウを再度開き、[Back Up Now(直ちにバックアップ)]をクリックします。

5. **Close(閉じる)**をクリックして、ダッシュボードに戻ります。

注記: Database backup(データベースバックアップ)ツールは、Session data(セッションデータ)の一部分のみをバックアップします。セッションデータには2つの部分があります: セッションの一部分はデータベースに保存され、セッションの一部分はディスクドライブのファイルに保存されます。OMNIC ParadigmソフトウェアのDatabase back up(データベースバックアップ)ツールは、データベースに保存されているデータのみバックアップします。

データを復元可能にするには、別のバックアップユーティリティプログラムを使って、次のディレクトリに保存してあるファイルをバックアップする必要があります: C:\Users\Public\Documents\thermo scientific\omnic paradigm\Sessions

Session(セッション) データをバックアップするには、通常どおりDatabase backup(データベースバックアップ) ツールを使用し、C:\Users\Public\Documents\thermo scientific\omnic paradigm\Sessionsにあるファイルをバックアップするには、オペレーティングシステムのBackup and Restore(バックアップ・復元) ツールなどの別のバックアップユーティリティプログラムを使用します。

Session(セッション) データを復元するには、バックアップ・復元ユーティリティを使ってSession(セッション) ディレクトリのファイルを復元し、それからデータベースを復元します。

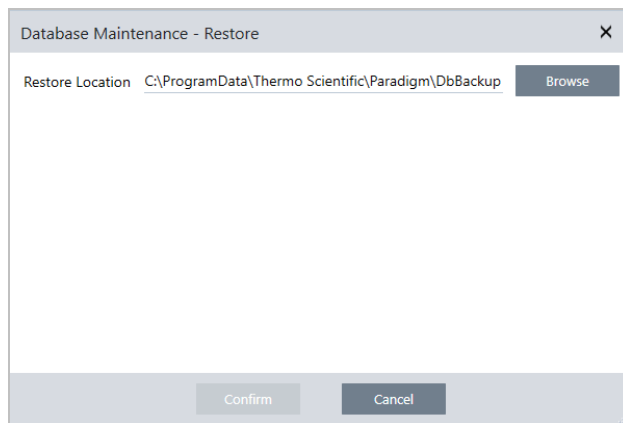
バックアップからデータベースを復元

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)の復元ツールを使用して、以前に保存したバックアップからデータベースを復元します。

注記この処理は、現在データベースにあるすべてのデータを完全に削除し、選択したバックアップデータに置き換えます。

◆ データベースを復元するには

1. OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のDesktop(デスクトップ) インターフェースを使用して、**Configure(構成) > Database Maintenance(データベースメンテナンス)**に移動し、**Restore(復元)**を選択します。



2. **Browse(参照)** をクリックして、バックアップデータベースの場所を選択します。

SummitスペクトロメーターでOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)を使用し、かつ他のスペクトロメーターと共有されているリモートバックアップからデータを復元する場合は、そのリモートバックアップを使用している個々のスペクトロメーターからデータを復元することができます。

単一スペクトロメーターのみからデータをバックアップするには、ホスト名リストからスペクトロメーターを選択します。

3. **Confirm(確認)** をクリックします。

4.1.3 データベースクリーンアップで不要な測定値を削除する

Database Maintenance(データメンテナンス) のClean Up(クリーンアップ) を使用して、過去の測定が指定された年齢に達したときに自動的に削除します。例えば、システムのスペースを節約するために、1か月以上変更がない測定値を自動的に削除できます。

データベースをクリーンアップするには、自動的に削除される前に、測定値を保持する期間を設定するか、Clean Up Measurements Now(測定値を今クリーンアップ) を選択し、指定したときよりすでに古い測定値を削除できます。

一度古い測定値を削除すると、元に戻せません。

ヒント 選択した測定値を維持するには、ライブラリに追加してください。後に、測定値をライブラリから取り出し、必要に応じて使用することができます。

◆ Desktop(デスクトップ) インターフェイスから古い測定値を自動的に削除する

1. Desktop(デスクトップ) インターフェイスを使用して、**Configure(構成) > Database Maintenance(データベースメンテナンス) > Create(作成)** に移動します。
2. 測定値を保持する期間を設定します。
測定値を保持する期間として、**Forever(ずっと)** を選択します。
3. **Save(保存)** をクリックします。
設定した期間より古い測定値をすぐに削除するには、**Clean Up Measurements Now(測定値を今クリーンアップ)** を選択します。

◆ Touchscreen(タッチスクリーン) インターフェイスから古い測定値を自動的に削除する

1. Home(ホーム) 画面から、Settings(測定条件) アイコンを選択する
2. **Database Maintenance(データベースメンテナンス)** タブに行きます。
3. **Clean Up(クリーンアップ)** を選択します。
4. 測定値を保存する期間を設定します。
測定値を無期限で保持するには、**Forever(無期限)** を選択します。
5. **Save(保存)** を選択します。
設定した期間より古い測定値をすぐに削除するには、**Clean Up Measurements Now(測定値を今クリーンアップ)** を選択します。

ヒント また、測定値すべてを一度に削除できます。すべての測定値を削除するには、すべての測定値を表示するようにフィルターを設定し、すべての測定値を選択し、測定値を右クリックして、**Delete Selected Measurements(選択した測定を削除)** を選択するか、Touchscreen(タッチスクリーン) インターフェイスで**Delete(削除)** を選択します。

4.1.4 測定とレポートのサーチ

保存された測定値とレポートをサーチするときは、タグとサーチキーワードを使用して、測定値とレポートのリストをフィルターします。

サーチ中

測定値をサーチする場合、サーチ用語は、スペクトルタグ、タイトル、最終更新日、識別された化合物、カスタム文字列、シリアルナンバーなどの情報と照合されます。レポートをサーチする場合、サーチに使用されるフィールドには、レポート名、作成日、およびテンプレートタイプが含まれます。

ヒント Measurement Name(測定名)やType(タイプ)などの列ヘッダーをクリックして、測定値を並べ替えられます。規定では、測定値は最後に変更された項目を最初に表示するようにsort(並べ替え)られます。

◆ 測定値とレポートをサーチするには

1. リストからReports(レポート)またはMeasurements(測定)を選択します。
2. サーチ結果を制限する時間を選択します。
3. サーチ用語を入力して、Search(サーチ)をクリックします。

以下のサーチ手法を使用して、結果を絞り込みます。

サーチテクニック	説明	例
引用符("")	タグから完全にマッチするもののみを返すには、引用符を使用します。これは、2つのワードタグをサーチしていて、一つのワードだけでタグ付けされたスペクトルを見たくない場合に便利です。	"赤青" 戻り値:「赤青」のタグが付いたスペクトルのみ。タグ「赤」または「青」のスペクトルを個別に返しませんが。
(アスタリスク)	サーチ用語の後にアスタリスク()を追加して、アスタリスクの前のテキストを含むすべての結果を返します。 注記: *はサーチ用語の後に追加できますが、他の語の前に付けることはできません。	ポリ* 戻り値: ポリスチレンなど、ポリで始まる用語を含む任意の測定値。
AND、OR、NOT演算子	示されているように、これらのキーワードはすべて大文字でなければなりません。 AND: 両方の用語を含む結果のみを返します。 OR: いずれかのキーワードを含む結果を返します。 NOT: 最初の用語を含み、NOTの後の用語を含まない結果のみを返します。	サンプルANDバックグラウンド 戻り値: サーチフィールドにサンプルとバックグラウンドの両方がある測定値のみ。 サンプルORバックグラウンド 戻り値: データにサンプルまたはバックグラウンドが含まれる測定値が返されます。 バックグラウンドNOTサンプル 戻り値: データ内にサンプルがあり、用語のバックグラウンドがない測定値またはレポート。

サーチテクニック	説明	例
title:<keyword>(タイトル:<キーワード>)	キーワードが測定またはレポートタイトルに含まれている必要があることを指定するために使用します。	title:poly(タイトル:ポリ) 戻り値: 名前内にポリが含まれる測定値ですが、他の場所(特定した化合物など)にポリが含まれる測定値は無視されます。
tags:<keyword>(タグ:<キーワード>)	キーワードがタグでなければならないことを指定するために使用します。 タグが2語の場合は、スペースの代わりにアンダースコアを使用してください。	tags:blue tags:blue_powder 戻り値: タグとして青を使用した測定値。ただし、他の場所(測定名など)に青を使用した測定値は無視されます。「blue_powder」は、2つのワードタグ「bluepowder」をサーチします。

タグ付け

タグは、データベース内の測定値とレポートを見つけるためのもう一つの便利な方法を提供します。例えば、一つのプロジェクトに関連する多くの測定値を収集している場合、それらの各測定値に同じ「プロジェクトA」タグを付けることができます。後で、このタグを使用して測定値をフィルターし、「プロジェクトA」タグの付いた測定値のみを表示できます。

◆ デスクトップインターフェースでタグを追加または削除するには

1. Measurements(測定)リストで測定値を右クリックし、**Manage Tags(タグ管理)**を選択します。

現在測定に割り当てられているタグは、Current Tags(現在のタグ)下に一覧表示されます。

- 新規タグを追加するには、New Tag(新規タグ)フィールドにテキストを入力して、**Add(追加)**をクリックします。その新規タグが現在のタグに追加されます。
- 現在のタグを削除するには、タグの右上隅にある削除アイコン(✖)をクリックします。そのタグは直ちに削除されます。

2. 変更を保存するには、**OK**をクリックします。Cancel(キャンセル)をクリックして、変更を保存せずにManage Tags(タグ管理)ダイアログを終了します。

◆ タッチスクリーンインターフェースでタグを追加または削除するには

1. ホーム画面から、Measurements(測定)タブに移動します。
2. 測定を選択し、More Options(その他のオプション)アイコンをタッチします。
3. **Manage Tags(タグ管理)**をタップします。
 - タグを追加するには、New Tag(新規タグ)フィールドにテキストを入力し、Add(追加)をタッチします。新規タグが現在のタグリストに追加されます。
 - タグを削除するには、タグの右上隅にあるDelete(削除)アイコン(✖)をタップします。

4. 変更を保存するには、OKをタッチします。Cancel(キャンセル)をタッチして、変更を保存せずにManage Tags(タグ管理)ダイアログを終了します。

シグネチャーの状態による測定値のフィルタリング

Signature(シグネチャー)フィルターを使用すると、シグネチャーの状態に基づいて測定値、レポート、およびセッションをすばやく見つけることができます。

例えば、Signature(シグネチャー)フィルターは、Authorship(著作者)の理由で署名されたものの、まだ承認が必要な測定値を見つけるのに適しています。

シグネチャー状態に基づいて記録をフィルターする

1. デスクトップインターフェースのダッシュボードから、Signature(シグネチャー)をクリックします。
2. フィルターオプションを選択して、OKをクリックします。

ダイアログにすべてのシグネチャー理由のリストが表示されます。各理由に対して、サインあり、サインなし、該当なしを選択することができます。

- **Signed(署名)**: この理由でサインされた記録を表示するのに選択します。この理由でサインされた記録が表示されます。
- **Unsigned(署名なし)**: この理由でサインされなかった記録を表示するのに選択します。このサインがある記録は表示されません。
- **N/A**: フィルターするときこの理由は無視されます。サインありおよびなしの記録が表示されます。

この例では、これらの設定により、まだ承認が必要なすべての記録が表示されます。



ヒント カラムの見出し(「Signed(署名)」)をダブルクリックすると、すべてのオプションでそのカラムが選択されます。もう一度ダブルクリックして、すべてのオプションをN/Aにリセットします。

ヒント シグネチャーフィルターは時間フィルターと連動します。例えば、過去1ヶ月間の承認が必要なすべての測定値を表示するには、時間をPast Month(過去1ヶ月間)に設定し、Approval(承認)のシグネチャーフィルターをUnsigned(サインなし)に設定します。

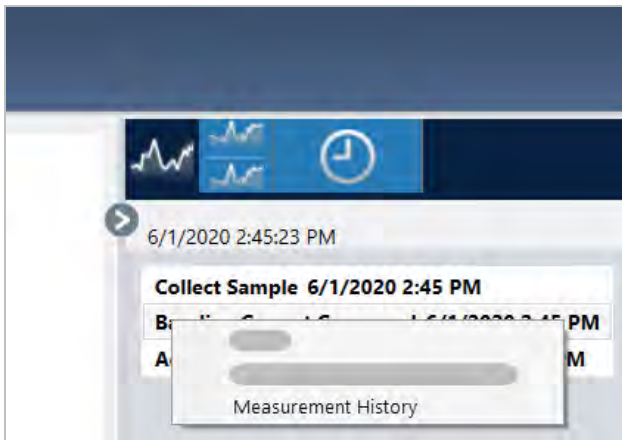
ヒント 複数の記録を一度にサインするには、フィルターを適用した後、記録すべてを選択して右クリックし、Sign(サイン)を選択します。

4.1.5 Measurement History(測定履歴)のビュー

測定履歴をビューして、データ処理と分析のさまざまなステージでスペクトルを視覚的に比較します。例えば、Automatic Baseline Correction(自動ベースライン補正)を適用した後、測定履歴を表示して、スペクトルがどのように変化したかをすばやく確認できます。

◆測定履歴を表示するには

1. Spectral View(スペクトルビュー)から、履歴パネルに移動します。
2. 履歴内の項目を右クリックして、**Measurement History(測定履歴)**を選択します。



履歴データには、データ処理と分析の各ステージでのスペクトルが表示されます。

- 履歴データのレポートを作成するには、File(ファイル)メニューを開き、Create Report(レポートの作成)を選択します。Historical Spectrum(履歴スペクトル)テンプレートを選択し、レポート設定を編集して、Create(作成)をクリックします。
- 測定履歴を終了するには、**Close Measurement History(測定履歴を閉じる)**をクリックします

4.1.6 測定を元に戻す


測定をデータ処理または分析するときに、Revert(元に戻す)を使用して一つまたは複数の手順を元に戻します。例えば、データ処理手順で測定データの品質が低下した場合は、最初からやり直して新規サンプル測定値をコレクションする代わりに、Revert(元に戻す)を使用して前の手順に戻ります。

以前の状態に戻すと、元に戻した手順の後に実行された処理はすべて失われます。つまり、元に戻す方法はありません。

安全な環境にいる場合、Revert(元に戻す)は使用できません。ただし、代わりにDuplicate(複製)ツールを使用して、前の手順と同じように測定値のコピーを作成できます。その後、サンプルを再測定することなく、複製された測定を処理できます。詳細は["複製測定"](#)を参照してください。

◆ 前の手順に戻すには

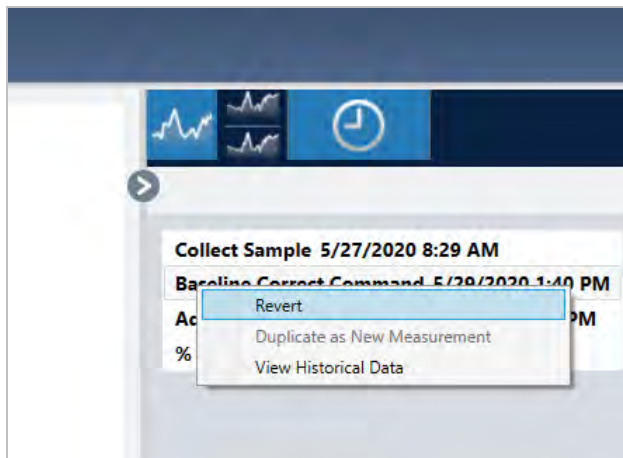
1. Spectral View(スペクトルビュー)で、結果パネルから測定値を選択します。

2.  アイコンをクリックして、履歴パネルを表示します。

履歴内の任意の項目をクリックして、そのステージでの測定をプレビューします。

3. イベントのリストで、元に戻す手順を右クリックします。

4. コンテキストメニューで、Revert(元に戻す)を選択します。



5. Yes(はい)をクリックして元に戻すか、No(いいえ)をクリックしてキャンセルします。

4.1.7 複製測定

New Measurement(新規測定)としてDuplicate(複製)を使用して、測定値のコピーを作成します。現在の状態または履歴の前の手順から測定値を複製できます。

ヒント Duplicate(複製)は、Revert(元に戻す)代替として役立ちます。例えば、元に戻すと現在のデータが破棄され、測定値が以前の状態に戻りますが、Duplicate(複製)を使用すると、以前の状態から測定値をコピーして、現在のデータを保持

できます。

また、Duplicate(複製)を使用して、作業中の特定のステージで測定値のコピーを保存することもできます。例えば、データをコレクションした直後に測定値を複製して、それ以上のデータ処理を行わずに測定値のコピーを保存し、測定値のコピーを一つだけ処理する場合があります。

測定を複製すると、すべてのスペクトル情報が新規測定にコピーされるわけではありません。ほとんどの情報は重複していますが、いくつかの違いがあります。

- 元の測定値にタグがある場合、タグは新規測定値にコピーされません。
- 測定履歴はコピーされますが、Spectral(スペクトル)ビューの履歴パネルには、測定が複製されたポイントより前の手順は表示されません。Measurement Information(測定情報)を開き、History(履歴)タブを表示して、測定履歴をレビューします。

◆測定値を複製するには

- ダッシュボードから

ダッシュボードからDuplicate(複製)して、測定値を現在の状態でコピーします。

1. Measurements(測定)ペインで測定を右クリックします。
2. **Duplicate as New Measurement(新規測定として複製)**を選択します。
3. 新規測定名を入力するか、規定名のままにします。
4. **OK**をクリックします。

- 測定履歴からDuplicate(複製)

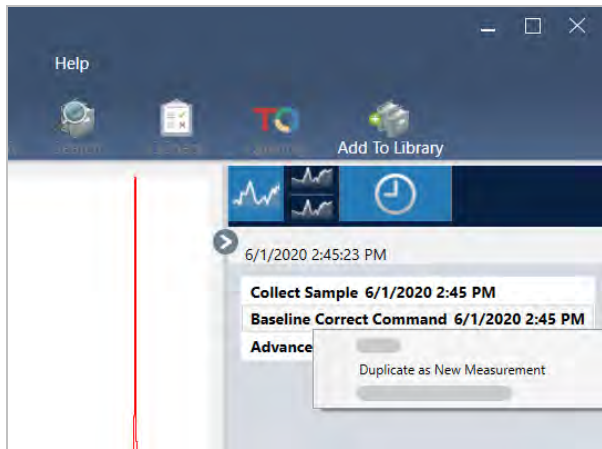
Spectral View(スペクトルビュー)からDuplicate(複製)して、以前のポイントからの測定値をコピーします。

1. Spectral View(スペクトルビュー)で、Results(結果)ペインで測定値を選択します。
2. 測定を選択した状態で、履歴パネルに移動します。

履歴内の任意の項目をクリックして、その時点でのスペクトルをプレビューします。

3. 測定を複製する手順を右クリックします。

Add to Library(ライブラリに追加)またはCreate Report(レポートの作成)など、スペクトルを変更しなかったイベントは、新規測定として複製できません。



4. Duplicate as New Measurement(新規測定として複製)を選択します。
5. 新規測定名を入力するか、規定名のままにします。
6. OKをクリックします。

4.2 分光

このセクションでは、OMNIC Paradigmソフトウェアの主要な機能について説明します。

4.2.1 サンプル測定

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)で新規データを取得するには、測定条件設定を設定して保存し、バックグラウンドスペクトルを収集して、最後にサンプル測定を行います。

測定オプションの設定と保存

測定条件設定では、サンプル測定方法と、スペクトルの収集後にデータを処理する方法を指定できます。設定は、機器とサンプリングアクセサリーがサンプル測定を行う方法と、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)がデータを処理する方法の両方を制御します。

測定条件設定を調整した後、すぐに使用することも、後で使用するために保存することもできます。

このガイドでは、一般的な測定オプションを設定、保存、および使用する方法について説明します。詳細設定の説明については、["高度な測定条件設定"](#)を参照してください。

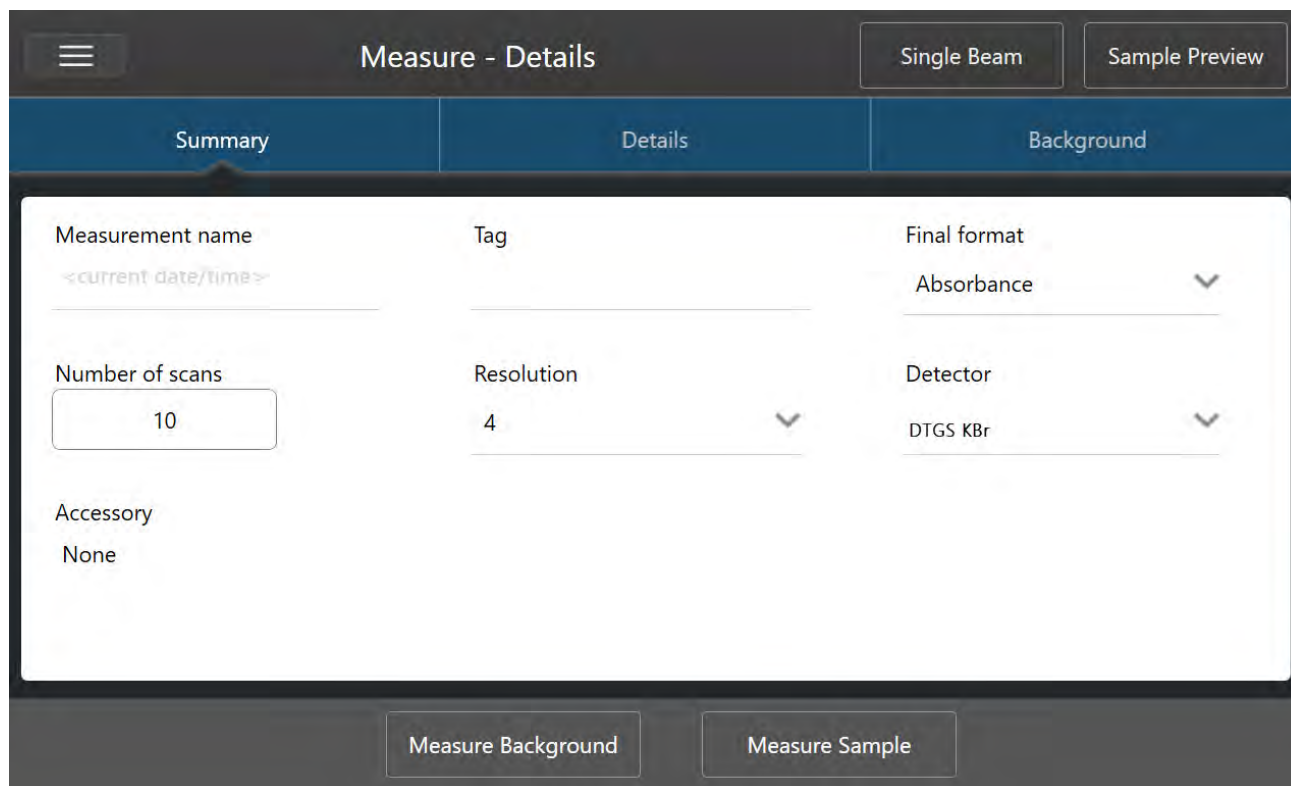
測定オプションの設定

測定を開始する前に、測定条件設定を設定して保存するか、以前に保存した設定を使用してください。

タッチスクリーンモードのOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)では、サンプル測定前に個々の設定を編集するか、設定ファイル(.exp)をインポートします。測定条件設定を編集またはレビューするには、ホーム画面からAnalysis Type(分析タイプ)を選択します。

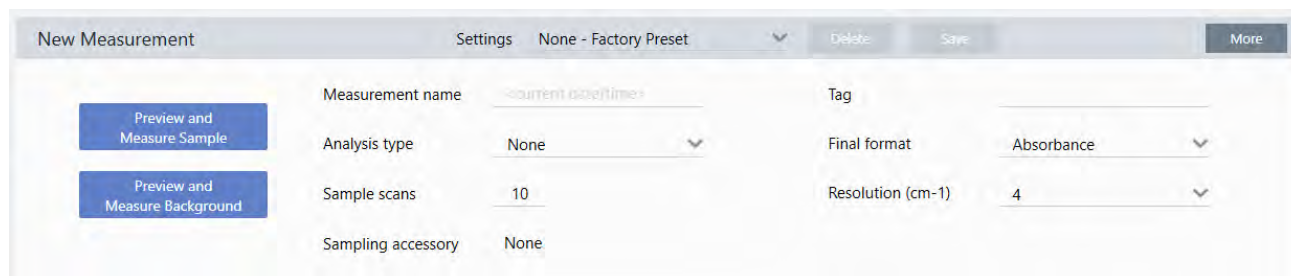
4. ハウザーガイド

図4-1: Summary(サマリ)、Details(詳細)、およびBackground(バックグラウンド) タブで測定条件設定をレビューします



デスクトップインターフェースを使用する場合は、ダッシュボードから測定条件設定を設定して保存するか、サンプルスペクトルのレビュー中にいくつかのオプションをアップデートします。

図4-2: New Measurement(新規測定) ペインで測定条件設定を編集します。



以下の表に、もっとも頻繁に使用する設定を示します。

オプション	説明	初期設定
Measurement Name(測定名)	サンプルデータの名前。この名前は、このデータを保存または開くとき、および生成するレポートに表示されます。規定名は、コレクションの日付と時間です。	Date and Time(日付と時間)
Number of sample scans (サンプルスキャン回数)	測定中にサンプルがスキャンされた回数。結果のデータは、すべてのスキャン回数の平均を反映しています。より多くのスキャン回数はより正確なデータをもたらしますが、測定に時間がかかります。	10

オプション	説明	初期設定
Resolution(分解能) (cm-1)	<p>写真やビデオの分解能と同様に、分解能が高いほど、スペクトルデータの詳細が細かくなります。例えば、分解能が高いと2つの非常に近いピークが区別されますが、分解能が低いとそれらが組み合わされる可能性があります。</p> <p>値が小さいほど、より高い(より優れた)分解能をもたらしますが、測定に時間がかかります。</p> <p>通常、固体サンプルと液体サンプルには4の分解能が使用されます。ガスサンプルの場合、1または0.5の分解能を使用します。</p>	4
Analysis type (分析タイプ)	<p>タッチスクリーンモードモードのOMNIC Paradigmでは、リストから選択するのではなく、ホーム画面から Analysis Type(分析タイプ)を選択します。</p> <p>データが収集された後、自動的にデータ処理することができます。</p> <p>追加分析なしでサンプル測定を行うには、None(なし)を使用します。</p> <p>Search(サーチ)はコリレーションサーチを実行します。サーチを使用して、不明のサンプルを分析します。Search Setup(サーチ設定)ビューでサーチ設定をEdit(編集)します。</p> <p>QCheck(Qチェック)の結果は、サンプルと参照の間のマッチ率を示しています。QCheck(Qチェック)を使用して、既知のサンプルの組成を検証します。QCheck Setup(Qチェック設定)ビューでQCheck(Qチェック設定)を編集します。</p> <p>Quantify(定量)は、事前に選択された定量メソッドタイトルを使用してサンプルの成分を定量するために使用されます。Identify(分析) > Quantify Setup(定量の設定)を選択して、定量メソッドを指定します。</p>	None(なし)
Tag(タグ)	スペクトルへのタグの追加を可能にします。タグは、後でスペクトルをサーチするときに使用できます。	
Final format(出力フォーマット)	収集されたデータに使用される単位を決定します。View/Display(ビュー/表示)メニューで収集した後、データを別のY軸単位に変換できます。	Absorbance(吸光度)
Sampling accessory(サンプリングアクセサリ)	サンプル測定に使用されるサンプリングアクセサリ。スマートアクセサリは自動的に検出されます。	

お使いの測定条件設定を保存

デスクトップインターフェースを使用している場合にも、測定条件設定の保存、編集、または削除できます。

後で使用するためにダッシュボードから簡単に選択できるように、測定条件設定に名前を付けて保存します。Search(サーチ)、QCheck(Qチェック)、およびQuantify(定量)分析のSettings(設定)は、これらの設定には保存されません。

◆ 測定条件設定を保存するには

1. 設定に必要な変更を加えます。
2. ダッシュボードの上部にあるSettings(設定)メニューの近くにある**New(新規)**をクリックします。
3. 設定名を入力し、**Save(保存)**をクリックします。

保存した設定は、後で使用できるようにSettings(条件)リストに追加されます。

◆ 保存した設定を変更するには

1. Settings(設定)メニューから、アップデートする名前付き設定を選択します。
2. 設定を編集する
3. **Save(保存)**をクリックします。

これで、新規設定が古い設定名で保存され、Settings(設定)メニューで利用できるようになります。

◆ 保存した設定を削除するには

1. Settings(設定)メニューから、削除する名前付き設定を選択します。
2. **Delete(削除)**をクリックします。
3. 確認ダイアログで、**OK**をクリックして、名前付き設定を完全に削除します。

保存した設定のインポートとエクスポート

設定ファイルをインポートして、現在の測定条件設定を以前に保存した設定に自動的にアップデートします。設定をインポートする場合、OMNIC測定条件ファイル(.exp)またはOMNIC Paradigm設定ファイル(.exp)をインポートできます。

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)は、OMNICソフトウェアで作成された.expファイルと互換性があります。ただし、OMNIC Paradigmでは、以前のバージョンのOMNICソフトウェアと互換性のない.expファイルのみをエクスポートできません。

OMNIC測定条件ファイルをインポートすると、測定条件設定がアップデートされますが、Search Setup(サーチ設定)やQCheck Setup(Qチェック設定)などの分析設定は変更されません。

◆ 設定ファイルをインポートするには

- タッチスクリーンインターフェースを使用している場合
 - a. ホーム画面から、Analysis Type(分析タイプ)を選択します。
 - b. Summary(サマリ)タブを表示しているときに、メニューを開き、**Open Settings(設定を開く)**を選択します。
 - c. インポートするOMNIC設定ファイル(.exp)またはOMNIC Paradigm設定ファイル(.exp)ファイルを選択し、**Open(開く)**をタッチします。
- デスクトップインターフェースを使用している場合
 - a. ツールバーで、**Settings(設定)**をクリックします。
 - b. インポートするファイルを選択し、**Open(開く)**をクリックします。

◆ 設定ファイルをエクスポートするには

Settings(設定)は、デスクトップインターフェースからのみエクスポートできます。Settings(設定)ファイルは、.expファイル名拡張子で保存されます。

4. ハウザーガイド

1. **Settings(設定)** リストからエクスポートする設定を選択します
2. **Acquire Data(データ取得) > Export Settings(設定のエクスポート)** を選択します。
3. 設定ファイル名を入力し、ファイルを保存するディレクトリを選択して、**Save(保存)** をクリックします。

これで設定ファイルが保存され、将来使用できるようになりました。

高度な測定条件設定

高度な測定条件設定を使用すると、アポダイゼーション、ゼロフィリング、領域範囲、機器固有の設定など多くの機能を制御できます。

これらの詳細設定は通常、規定の状態のままにしておく必要があります。これらの設定は、稀なまたは特定の状況でのみ編集する必要があります。

タッチスクリーンインターフェースの詳細設定をレビューまたは編集するには、Details(詳細)タブを開きます。

図4-1: Details(詳細)タブには、高度な測定条件設定が表示されます。

The screenshot shows the 'Measure - Details' screen with three tabs: Summary, Details, and Background. The 'Details' tab is active and displays the following settings:

- Zero fill:** 2
- Source:** IR
- Apodization:** Norton Beer Strong
- Velocity (cm/sec):** 0.4747
- Range Limits:** MAX: 4000, MIN: 400. Below the input fields, it says 'Rec: 4000 — Rec: 400' and 'Enter value between 350 and 8500'.
- Aperture:** Large
- Atmospheric suppression:**
- Prompt for measurement name:**

At the bottom of the screen, there are two buttons: 'Measure Background' and 'Measure Sample'.

デスクトップインターフェースの詳細設定をレビューまたは編集するには、New Measurement(新規測定)ペインで**More(詳細)**をクリックします。

図4-2: 高度な測定条件設定はダッシュボードから利用可能です



高度な測定条件設定

以下の表で、各詳細設定について説明します。

オプション	説明	初期設定
Detector(検出器)	<p>この検出器は、赤外線ビームが当たると応答して電気信号を生成するスペクトロメーター内のデバイスです。</p> <p>この検出器の設定は、スペクトロメーターの設定に基づいて自動的にアップデートされます。</p> <p>Nicolet Summit: DTGS</p> <p>Nicolet Summit Pro: TEC DTGS</p>	
Optical velocity(ミラー速度)	<p>干渉計のミラー速度を測定します。初期値は、使用している検出器のタイプによって決定され、特定のスペクトロメーターでのみ変更可能です。</p> <p>Nicolet Summitスペクトロメーターでは、その初期値は0.4747であり、変更することはできません。</p>	
Zero fill(ゼロフィリング)	<p>収集されたデータポイント間でデータポイントを補間します。これは、データの実際の分解能を高めることはありませんが、シャープな外形を滑らかにし、スペクトル線の形状を改善することができます。</p> <p>サンプルスペクトルとバックグラウンドスペクトルは、同じゼロフィリング設定で収集してください。</p> <p>オプション</p> <p>None(なし): ゼロフィリングは行われません。</p> <p>1: 1つのデータポイントが収集された各データポイント間に追加されます</p> <p>2: 3つのデータポイントが収集された各データポイント間に追加されます</p>	2

4. ハウソーガイド

オプション	説明	初期設定
Source(ソース/光源)	検出器に伝わる赤外線を放出するスペクトロメーター内の成分。 ソース/光源タイプはスペクトロメーターの設定によって決まります。ソース/光源の詳細については、スペクトロメーターのユーザーガイドを参照してください。	
Apodization(アポダイゼーション)	アポダイゼーションとは、インターフェログラムが無限のデータセットではないために発生する可能性のあるピークサイドローブを低減または削除するために、シングルビームデータに適用される数学関数を指します。 強力なアポダイゼーション関数は、ノイズをさらに低減しますが、データ分解能を低下させ、ピークを拡大させる可能性もあります。 高分解能ガススペクトルなどの、非常に狭いピークのスペクトルを測定する場合は、Boxcarなどの弱いアポダイゼーションを使用することをお勧めします。 各タイプのアポダイゼーションの説明については、 "アポダイゼーション関数" を参照してください。	Norton Beer Strong (ノートン・ビール・ストロング)
Automatic Atmospheric Suppression(自動大気補正)	収集したスペクトルに対する水蒸気と二酸化炭素の影響を抑制します。 一般に、現在のバックグラウンドスペクトルを使用して大気条件を制御することをお勧めします。バックグラウンドを頻繁に測定する場合や大気条件の変化が遅い場合は、この機能を使用する必要はありません。 この機能は、バックグラウンドを頻繁に測定しない場合や大気条件が急速に変化する場合にのみ使用してください。	選択解除
Range Limits(領域範囲)	収集されたスペクトルに含まれる周波数領域範囲を波数で設定します。	最大:4,000 最小:400
Aperture(アパーチャ)	サンプルに到達する赤外線の強度を制御します。 アパーチャは、調整可能なアパーチャを備えたスペクトロメーターを使用する場合にのみ変更可能です。 一般に、アパーチャが大きいほど信号対雑音比の向上につながる一方、アパーチャが小さいほど安定性と精度の向上につながります。高分解能の測定には、小さなアパーチャが適しています。 真の高分解能スペクトルを取得するには、小さなアパーチャを使用する必要があることがあります。	

アポダイゼーション関数

アポダイゼーションとは、インターフェログラムが無限のデータセットではないために発生する可能性のあるピークサイドローブを低減または削除するために、シングルビームデータに適用される数学関数を指します。

強力なアポダイゼーション関数は、ノイズをさらに低減しますが、データ分解能を低下させ、ピークを拡大させる可能性もあります。

アポダイゼーションの概略紹介については、FTIR分光アカデミーを参照してください。

次の表に、利用可能なアポダイゼーションタイプを示します：

4. ハウソーガイド

設定	説明
Boxcar	インターフェログラムは重み付けられていません。つまり、データは開始時と終了時で単純に切り捨てられます。このタイプは、最大の分解能を必要とし、リングング(サイドローブ)を気にしない場合に、ガスサンプル測定中に使用します。このタイプでは、大量のリングングが発生します。
Cosine(コサイン)	この設定はサイドローブを抑制し、スペクトル分解能を適度に低下させます。この設定は、Happ - GenzelおよびNorton Beer Medium(ノートン・ビール・ミディアム)アポダイゼーションに似ています。Cosine(コサイン)は通常、それを使用した他の測定条件の結果を再現するためにのみ使用されます。
Happ - Genzel	Triangular(三角)タイプよりも効果的にサイドローブを抑制し、Triangular(三角)タイプよりも分解能の低下が最小化されています。(これはBoxcarタイプよりさらに低い分解能をもたらします)
Norton Beer Weak(ノートン・ビール・ウィーク)	この設定は、Norton Beer Medium(ノートン・ビールミディアム)タイプおよびNorton Beer Strong(ノートン・ビールストロング)タイプよりもデータ上でスムージング効果が少なく、分解能の低下もそれらのタイプよりも少なくなっています。サイドローブはピークの両側に表示され、ピークが鋭いほどさらに顕著になります。 この設定は、可能な限り最高の分解能が必要な場合にのみ使用してください。この設定は一般的に推奨されておらず、通常、この設定を使用した他の測定条件の結果を再現するためにのみ使用されます。
Norton Beer Medium(ノートン・ビールミディアム)	このタイプは、データ上でNorton Beer Weak(ノートン・ビールウィーク)タイプとNorton Beer Strong(ノートン・ビールストロング)タイプの中間のスムージング効果をもたらします。スペクトル分解能を適度に低下させるだけなので、サイドローブを可能な限り抑制します。サイドローブの抑制は、Norton Beer Weak(ノートン・ビール・ウィーク)アポダイゼーションよりも顕著です。この設定は、ほとんどの通常のサンプルに適しており、Happ - Genzelで得られた結果と実質的に同じ結果が得られます。
Norton Beer Strong(ノートン・ビールストロング)	ノートン・ビールストロングは、Nicolet SummitおよびSummit Proスペクトロメーターに推奨されるアポダイゼーションです。 この設定は、Norton Beer Weak(ノートン・ビールウィーク)タイプおよびNorton Beer Medium(ノートン・ビールミディアム)タイプよりもデータのスムージング効果が大きく、スペクトル分解能をさらに低下させます。このサイドローブの抑制は、Norton Beer Medium(ノートン・ビール・ミディアム)アポダイゼーションよりも顕著です。
Triangular(三角)	インターフェログラムデータに数学的加重を付けてリングング効果(サイドローブ)を低減させるため、BoxcarやHapp - Genzelタイプで得られる分解能よりも分解能が低下します。通常、このタイプでは何らかのリングングが発生します。この設定は通常、それを使用した他の測定条件の結果を再現するためにのみ使用されます。
Blackman Harris(ブラックマン・ハリス)	4項のBlackman Harris(ブラックマンハリス)関数は、サイドローブの抑制において他のどの関数よりも優れた強力なアポダイゼーション関数です。ただし、その他の関数の線よりも幅広い線をもたらします。実際に、これはスペクトルのランダムノイズを減らす効果がある一方、帯域の広がりを引き起こします。

バックグラウンドを測定

正確なサンプルスペクトルには、バックグラウンドの正確で最新の測定が必要です。

バックグラウンドスペクトルを収集すると、検出器の特性やスペクトロメーター内の雰囲気など、サンプルが配置されていないスペクトロメーターの環境の測定値が収集されます。次に、このバックグラウンドスペクトルを使用して、スペクトロメーターまたはバックグラウンド環境に起因するサンプルスペクトル内の信号を除去します。バックグラウンドの測定がなければ、測定したサンプルからのデータを見ているのか、バックグラウンド環境からのデータを見ているのかを知る方法はありません。

バックグラウンドを測定するタイミング

スペクトロメーターのバックグラウンド環境は時間とともに変化する可能性があるため、バックグラウンドスペクトルを頻繁にアップデートする必要があります。

環境の変化に応じて定期的に新規バックグラウンドスペクトルを収集することに加えて、以下のいずれかの状況の後に新規バックグラウンドを収集します。

- サンプリングアクセサリの変更など、スペクトロメーターのハードウェアを変更しました
- サンプル測定中の設定を変更しました

バックグラウンド設定

バックグラウンドの測定をいつどのように行うかについては、いくつかのオプションがあります。これらのオプションは、バックグラウンドの新規測定値を収集するように求められるタイミングとかどうかを決定します。

タッチスクリーンインターフェースで別のバックグラウンドオプションを選択するには、分析オプションを選択して**Background(バックグラウンド)**タブを開きます。

デスクトップインターフェースで別のバックグラウンドオプションを選択するには、ダッシュボードのNew Measurement(新規測定) ページで**More(詳細)**をクリックし、Background(バックグラウンド) グループまでスクロールします。

4. ハウザーガイド

図4-1: タッチスクリーンインターフェースで、Background(バックグラウンド) タブのバックグラウンド設定を選択します。

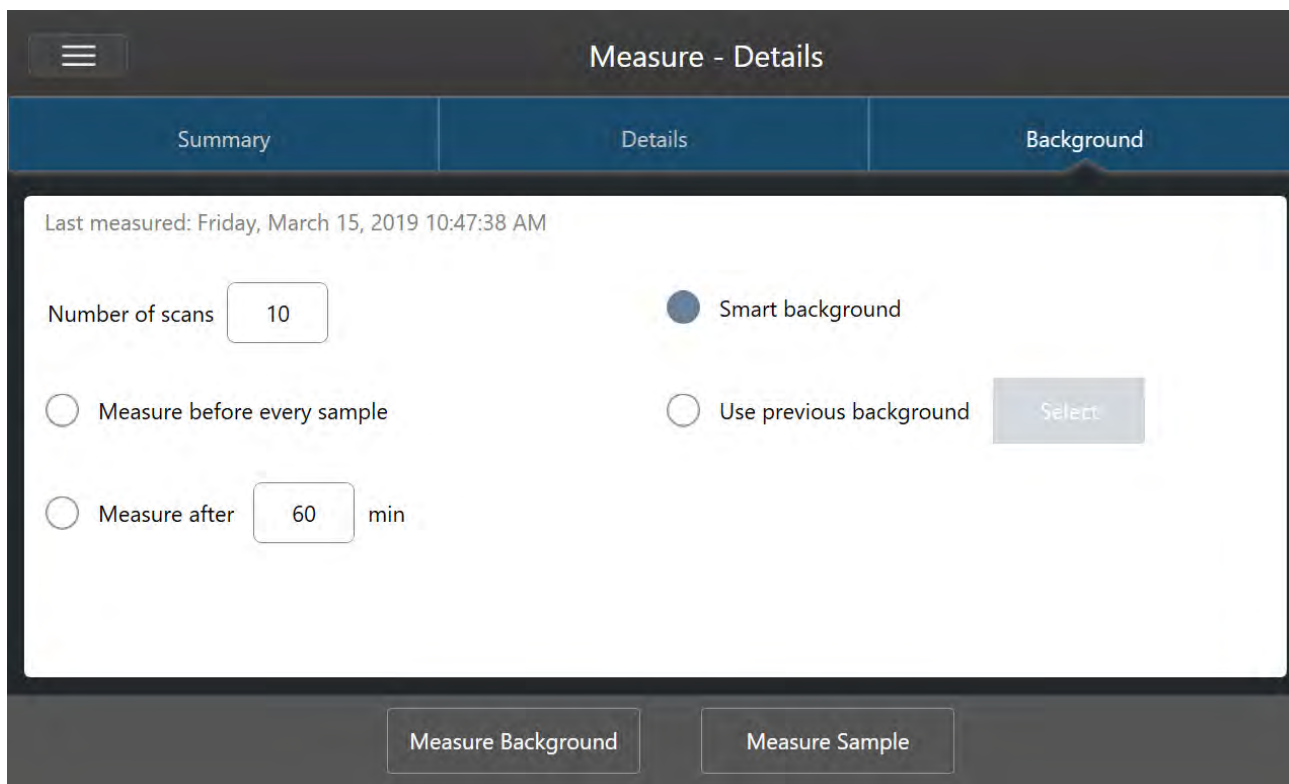
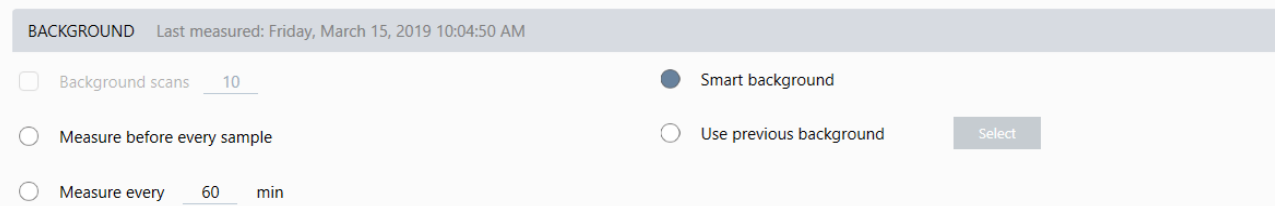


図4-2: デスクトップインターフェースで、Background(バックグラウンド) ペインのバックグラウンド設定を選択します。



以下の表で、バックグラウンド設定について説明します。

設定	説明
Background scans(バックグラウンドスキャン回数)	バックグラウンドが測定される回数。結果のスペクトルは、すべてのスキャン回数の平均を表します。より多くのスキャン回数はより正確なスペクトルを生成しますが、より長いコレクション時間が必要になります。初期値は10です。
Measure before every sample(すべてのサンプル測定前)	このオプションを選択すると、すべてのサンプル測定の前に新規バックグラウンドスペクトルを収集するように求められます。これは、現在の測定を保証するため、少数のサンプルのみを測定する場合に適したオプションですが、測定プロセスが遅くなる可能性があります。

設定	説明
Measure every ___ min(指定時間毎: ___分ごとに測定)	同じバックグラウンドスペクトルを使用して多くのサンプル測定を行うことができます。1 ~ 1024の任意の整数値を入力できますが、バックグラウンド環境は時間の経過とともに変化し、サンプルスペクトルは時間の経過とともに精度が低下する可能性があることに注意してください。
Smart background(スマートバックグラウンド)	スマートバックグラウンドは、手動でバックグラウンド測定を行うことなくバックグラウンドを自動的に測定するため、常に最新の測定値を取得できます。
Use previous background(以前のバックグラウンドを使用)	以前のバックグラウンドスペクトルを選択できます。このオプションは、まれに、異常な状況(例えば、システム環境を変更せずにサンプルを開く、または削除することができない場合)でのみ使用する必要があります。この場合、サンプル測定を行う条件にできるだけ近い条件を使用して、バックグラウンドスペクトルを早期に収集して保存します。

バックグラウンドを測定

バックグラウンド測定には、いくつかの簡単な手順が必要です。現在のバックグラウンドスペクトルなしでサンプル測定を行おうとすると、続行する前にバックグラウンドを測定するように求められます。

◆ デスクトップインターフェースのバックグラウンドを測定するには

1. サンプリングアクセサリーからサンプルをすべて削除します。
2. ダッシュボードから、**Preview and Measure Background(プレビューとバックグラウンドの測定)**を選択します。

Background Preview(バックグラウンドのプレビュー)ウィンドウが開き、コレクションを続行する前にバックグラウンドをプレビューできます。

3. 続行するには、**Start Background Measurement(バックグラウンド測定の開始)**を選択するか、ツールバーの**Dashboard(ダッシュボード)**をクリックしてキャンセルし、ダッシュボードに戻ります。

測定中は、コレクションを一時停止、リスタート、または停止できます。コレクションを停止すると、部分的なデータが使用されます。例えば、8回のスキャン回数を収集する予定であるが、4回後に停止した場合、バックグラウンドスペクトルは4回のスキャン回数でのみ使用されます。

バックグラウンドスペクトルが収集されたら、サンプルスペクトルをプレビューして、サンプル測定条件設定に必要な変更を加えるか、ダッシュボードに戻ることができます。

◆ タッチスクリーンインターフェースでバックグラウンドを測定するには

1. ホーム画面から、**Analysis Type(分析タイプ)**を選択します。
2. **Background(バックグラウンド)**タブを開いて、バックグラウンド設定を編集またはレビューします。
3. 測定を開始するには、**Measure Background(バックグラウンドの測定)**をタッチします。

Background Preview(バックグラウンドのプレビュー)が開き、先に進む前にバックグラウンドをプレビューできます。

4. 続行するには、**Start Background Measurement(バックグラウンド測定の開始)**をタッチします。

4. ハウソーガイド

測定中は、コレクションを一時停止、リスタート、または停止できます。コレクションを停止すると、部分的なデータが使用されます。例えば、8回のスキャン回数を収集する予定であるが、4回後に停止した場合、バックグラウンドスペクトルは4回のスキャン回数で利用可能になります。

バックグラウンドスペクトルが測定されたら、サンプルスペクトルをプレビューして、サンプル測定条件設定に必要な変更を加えるか、メニューでHome(ホーム)を選択してホーム画面に戻ることができます。

サンプル測定

サンプル測定を行うには、サンプルを準備し、測定条件設定を設定して保存し、バックグラウンドスペクトルを測定し、最後にサンプル測定を行う必要があります。

◆ **タッチスクリーンモードモードのOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)**を使用してサンプル測定を行うには

1. サンプルを準備する

サンプルの準備方法は、スペクトロメーターとサンプリングアクセサリーによって異なります。サンプルの準備とローディングの詳細については、サンプリングアクセサリーのユーザーガイドを参照してください。

2. 実行している分析を反映するAnalysis Type(分析タイプ)を選択します。追加の分析を実行せずにサンプル測定を行うには、**Measure(測定)**を選択します。

Analysis Type(分析タイプ)を選択すると、設定のサマリビューが開きます。

図4-1: Summary(サマリ)タブには、一般的な測定条件設定が表示されます。

The screenshot shows the 'Measure - Details' interface. At the top, there are two buttons: 'Single Beam' and 'Sample Preview'. Below them are three tabs: 'Summary', 'Details', and 'Background'. The 'Summary' tab is selected and displays the following settings:

- Measurement name: <current date/time>
- Tag: [Empty field]
- Final format: Absorbance (dropdown arrow)
- Number of scans: 10 (input field)
- Resolution: 4 (dropdown arrow)
- Detector: DTGS KBr (dropdown arrow)
- Accessory: None

At the bottom of the screen, there are two buttons: 'Measure Background' and 'Measure Sample'.

3. 測定条件設定をレビューして編集します。

Details(詳細)タブを開いて追加の測定条件設定をレビューするか、**Background(バックグラウンド)**タブを開いてバックグラウンドの測定方法の設定を調整します。バックグラウンドの設定に応じて、サンプル測定前に新規バックグラウンドを測定するように求められる場合があります。

各設定の説明については、["測定オプションの設定と保存"](#)を参照してください。

4. ハウザーガイド

分析設定の詳細については、"[ATRで不明のサンプルを分析](#)"を参照してください。

4. 設定にサンプル測定に問題がなければ、**Measure Sample(サンプル測定)** をタッチします。Preview Sample(サンプルプレビュー) が開き、スペクトルのライブプレビューが表示されます。
5. 続行するには、**Start Sample Measurement(サンプル測定 の開始)** をタッチします。

測定中は、測定を一時停止、リスタート、または停止して保存できます。例えば、データが十分にあり、それ以上のスキャン回数が必要ない場合は、**Stop(停止)** をタッチしてデータを保存し、そのまま使用します。**Restart(リスタート)** をタッチしてデータを全てクリアし、最初からスキャンを開始します。

サンプルが測定されたら、Spectral(スペクトル) ビューでデータ処理または分析したり、別のサンプル測定を行うことができます。Spectral(スペクトル) ビューから別のサンプル測定を行うには、**Measure New Sample(新規サンプル測定)** をタッチします。

◆ デスクトップ用のOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)を使用してサンプル測定を行うには

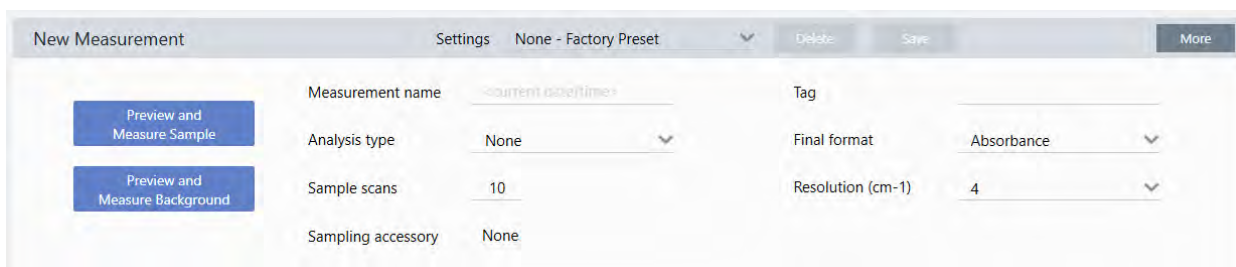
1. サンプルを準備する

サンプルの準備方法は、スペクトロメーターとサンプリングアクセサリーによって異なります。サンプルの準備とローディングの詳細については、サンプリングアクセサリーのユーザーガイドを参照してください。

2. Search(サーチ)、QCheck(Qチェック)、またはQuantify(定量) 分析の設定を編集するには、**Identify(分析)** メニューを開き、対応する設定オプションを開きます。
3. 測定条件を設定して保存します。

以前に保存した設定を使用するには、Settings(設定) リストから設定を選択します。

図4-2: Settings(設定) リストには、以前に保存した設定が表示されます



各設定の説明については、"[測定オプションの設定と保存](#)"を参照してください。

分析設定の詳細については、"[ATRで不明のサンプルを分析](#)"を参照してください。

4. New Measurement(新規測定) ペインで、**Preview and Measure Sample(プレビューとサンプル測定)** をクリックします

バックグラウンドの設定に応じて、新規バックグラウンドを測定するように求められる場合があります。その場合は、画面上の指示に従って新規バックグラウンドを測定します。

サンプル測定中に、測定を一時停止、リスタート、または停止して保存できます。例えば、データが十分にあり、それ以上のスキャン回数が必要ない場合は、**Stop(停止)** をクリックしてデータを保存し、そのまま使用します。**Restart(リスタート)** をクリックしてデータを全てクリアし、最初からスキャンを開始します。

サンプルが測定されたら、Spectral(スペクトル)ビューでデータ処理または分析したり、別のサンプル測定を行うことができます。Spectral(スペクトル)ビューから別のサンプル測定を行うには、**More(詳細)**をクリックして一般的な測定条件設定をレビューし、**Measure New Sample(新規サンプル測定)**をクリックして開始します。

次の手順

OMNIC Paradigmソフトウェアを使用してサンプル測定を行うには、いくつかの簡単な手順を実行するだけです。サンプル測定前に、測定条件設定をレビューし、最近使用されているバックグラウンドスペクトルがあることをレビューしてください。

スペクトルを測定すると、スペクトルを分析、検証、または定量化する準備が整います。ライブラリサーチを使用してサンプルを分析するためのガイドについては、「["ATRで不明のサンプルを分析"](#)」を参照してください。

4.2.2 プロセスデータ

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のデータ処理ツールを使用して、データをよりよく理解します。

取得したデータに基本方程式を適用

取得したサンプルスペクトルを使用して、基本的な方程式(加算、減算、乗算、除算)を実行できます。特にリファレンスペクトルを減算するために、これを実行する理由はいくつかあります。詳細情報については、以下のセクションを参照してください。

スペクトル演算操作を実行するには

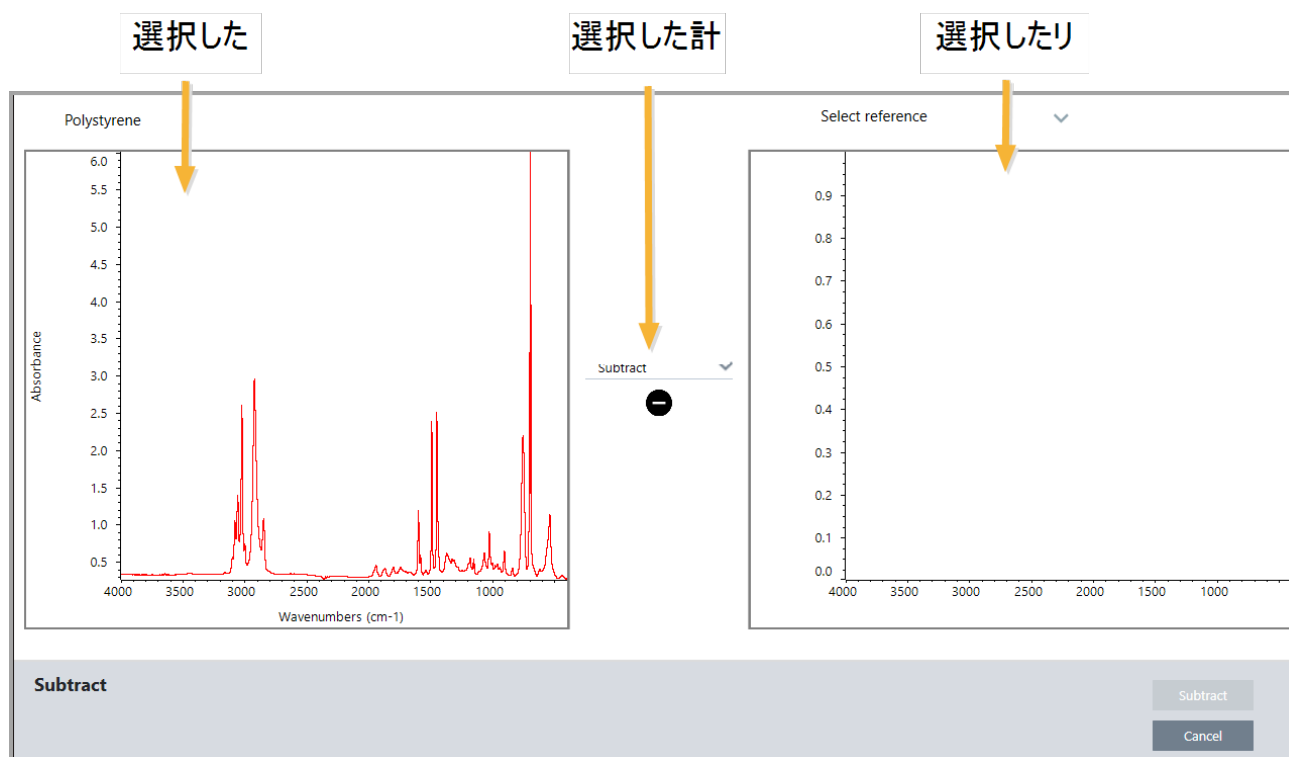
スペクトル演算を実行するには、サンプルスペクトルとリファレンスペクトルが同じスペクトル分解能を持ち、同じY軸単位にある必要があります。そうでない場合、本ソフトウェアは、選択したサンプルスペクトルにマッチする選択したリファレンスペクトルを自動的に変換します。スペクトルを減算、乗算、または除算するには、2つのスペクトルのスペクトル領域(X軸)の少なくとも一部がオーバーラップしている必要があります。

◆ スペクトルに対してスペクトル演算操作を実行するには

1. サンプルのスペクトルを取得または開き、Spectral(スペクトル)ビューでスペクトルが選択されていることを確認します。
2. **Process(プロセス)**(メニュー) > **Spectral Math(スペクトル演算)**を選択します。

本ソフトウェアは、左側のペインにサンプルスペクトルが表示され、右側のペインにリファレンスペクトル用のスペースが表示されたSpectral Math(スペクトル演算)設定ウィンドウを開きます。

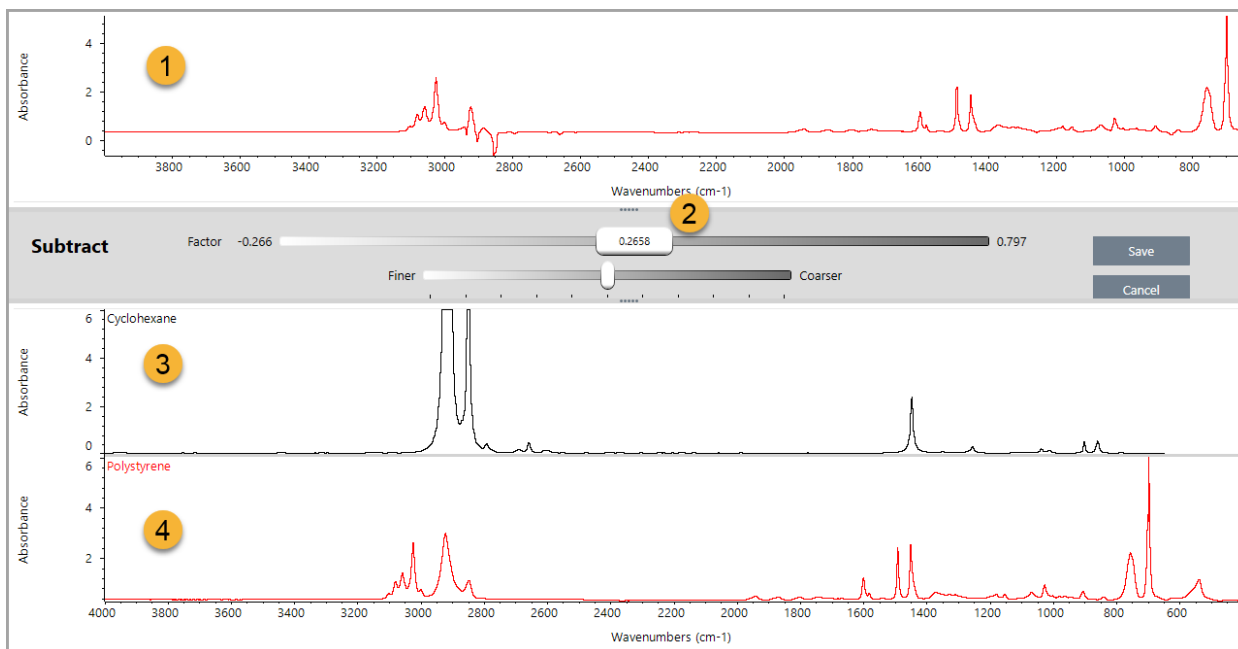
図4-1: Spectral Math Setup(スペクトル演算設定) ウィンドウ



- 2つのペインの間の設定リストを使用して、スペクトル演算操作 (Subtract(減算) 、 Add(加算) 、 Multiply(乗算) 、または Divide(除算)) を選択します。
- Select Reference(リファレンスの選択) リストを使用して、現在のプロジェクト、別のプロジェクト、またはスペクトルライブラリからスペクトルをサーチします。
- Subtract(減算)** (Add(加算) 、 Multiply(乗算) 、 Divide(除算)) をクリックして演算を開始します。

本ソフトウェアは、2つの元のスペクトル(下) と現在の結果を係数スライダー(上) で表示するSpectral Math(スペクトル演算) 操作ウィンドウを開きます。減算結果を示す例を以下に示します。

4. ハウソーガイド



1. 現在の減算結果
2. 係数
3. サンプル
4. リファレンス
6. 必要に応じて係数を調整または入力して、結果スペクトルの参照の強度を増減します。

各数学タイプの係数を調整するためのヒントについては、以下のセクションを参照してください。

注記 下部のバーを使用して、Factor(係数) の調整可能範囲を変更します。

7. **Save(保存)** を選択します。

本ソフトウェアでは、Spectral(スペクトル)ビューを、スペクトルペインにある減算結果と共に表示するだけでなく、結果パネルの上部、そのすぐ下に元のサンプルとリファレンススペクトルと共に表示します。



1つのスペクトルを別のスペクトルから減算(A-B)

Subtract(減算)を使用して、あるスペクトルを別のスペクトルから減算します。スペクトル減算は、さまざまな状況で役立ちます。以下にいくつかの例を挙げます:

- 溶剤に溶解したサンプル測定を行う場合、スペクトルには溶剤に起因するピークが含まれます。サンプルスペクトルから純粋な溶剤のスペクトルを減算することにより、溶剤のピークを排除し、サンプル材料の「クリーンな」スペクトルを生成できます。
- 2つ以上の成分の混合物であるサンプル測定を行う場合、スペクトルは、理論的には、すべての成分のスペクトルの総和です。サンプルスペクトルから純粋な成分のスペクトルを減算することにより、その成分を削除した、より単純な混合スペクトルを生成できます。次に、ライブラリに対してそのスペクトルをサーチして、残りの成分を分析できます。(この場合、代わりにMulti-Component Search(多成分サーチ)オプションを使用してみてください。)
- 不明の汚染物質を含むサンプル測定を行う場合、スペクトルには汚染物質によるピークが含まれます。最初のスペクトルから汚染されていないサンプル材料のスペクトルを減算することにより、汚染物質の残留スペクトルを生成できます。次に、ライブラリに対してそのスペクトルをサーチして、汚染物質を分析できます。
- スペクトルを収集して製造中の材料の品質を監視する場合、スペクトルを視覚的に比較するよりも、あるサンプルスペクトルを次のサンプルから減算(またはその逆)することで、あるバッチから次のバッチへの変化をさらに簡単に検出できます。

スペクトル減算に関するヒント

- 減算係数を決定するには、係数を変更するときの一般的なピークの変化を監視します。結果スペクトルの一般的なピークは小さくなるはずですが、最適な係数は、他の重要なスペクトル情報を減算せずに、減算結果にヌル(またはゼロ)の共通ピークを生成する係数です。正しい係数を使用すると、結果に存在するピークは、対象のサンプル材料のみに起因します。
- 初期減算係数は、表示された領域から自動的に計算されます。別のスペクトル領域を表示して減算を再度実行すると、減算係数が変更されたため、差分スペクトルが異なる可能性があります。

4. ハウソーガイド

- サンプルスペクトルからリファレンススペクトルを減算すると、ベースライン領域がピークを含む領域とともに減算されます。サンプルスペクトルのベースラインが平坦でなく、吸光度がゼロ(または100%の透過率)の場合、減算結果のベースラインは同じ望ましくない特性を持ちます。最初にベースラインを補正すると、結果にベースラインの問題が発生することなく、対応するピークが減算される「クリーンな」減算を取得できます。
- 混合物のスペクトルから純粋なリファレンス物質のスペクトルを減算と、ピークがきれいに減算されない場合があります。これは、リファレンススペクトルが、混合物の他の成分との分子相互作用または成分の相対濃度の違いによって発生する可能性のある変化を考慮していないためです。これらの条件により、一部のピークがわずかにシフトしたり、形状が変化したりする場合があります。

2つのスペクトルを一緒に追加する(A + B)

Add(追加)を使用して、2つのスペクトルを一緒に追加します。スペクトルの追加は、以下の状況で役立ちます。

- Add(追加)を使用して、異なるスペクトル領域の2つのスペクトルを結合できます。
- 2つの純粋な成分スペクトルを合計することにより、2つの成分スペクトルの総和である理論的なコンポジットスペクトルを生成できます。この理論的なコンポジットスペクトルは、定量分析で不明の混合スペクトルと比較できます。

スペクトルを追加するためのヒント

- Factor(係数)設定を使用して、リファレンススペクトルをサンプルスペクトルに追加する前に、スケールアップまたはスケールダウンします。
- スペクトルの一つだけにスペクトル領域のデータポイントが含まれている場合、スペクトルが追加されると、他のスペクトルのY値はその領域でゼロと見なされます。

一つのスペクトルに別のスペクトルをMultiply(乗算)する(A*B)

Multiply(乗算)を使用して、2つのスペクトルを乗算します。ほとんどの個人は、ほとんどのアプリケーションで乗算ではなく除算を使用します。ただし、スペクトルの乗算は、バックグラウンドが異なるスペクトルを再処理する場合に役立ちます。例えば、マトリックスに付着したサンプル測定を行う場合、マトリックスのみのシングルビームスペクトルを取得し、そのスペクトルを使用して元のバックグラウンドをキャンセルし、新規バックグラウンドに置換することができます。その方程式は次のとおりです。

$$S * B_1 / B_2$$

ここで:

S = サンプルスペクトル(元のバックグラウンドで処理)

B₁ = 元のバックグラウンド

B₂ = 新規バックグラウンド

1つのスペクトルを別のスペクトルでDivide(除算)(A/B)

Divide(除算)を使用して、あるスペクトルを別のスペクトルで除算します。スペクトルの除算は、バックグラウンドが異なるスペクトルを再処理する場合に役立ちます。例えば、マトリックスに付着したサンプル測定を行う場合、マトリックスのみのシングルビームスペクトルを取得し、そのスペクトルを使用して元のバックグラウンドをキャンセルし、新規バックグラウンドに置換することができます。その方程式は次のとおりです。

$$S / (B_2 / B_1)$$

ここで:

4. ハウソーガイド

S = サンプルスペクトル(元のバックグラウンドで処理)

B₁ = 元のバックグラウンド

B₂ = 新規バックグラウンド

スペクトル除算のヒント

- 元のサンプルスペクトルで吸光度値がゼロのデータポイントは、結果のスペクトルで非常に強い吸光度値を生成します。

データセキュリティでのスペクトル演算の使用

Thermo Scientific Security Suite(セキュリティスイート)で「Require reason for change for Spectral Math(スペクトル演算の変更理由が必要)」が有効になっている場合、Spectral Math(スペクトル演算)は結果を保存する前に変更理由と署名を必要とし、以下の変更イベントが監査ログに記録されます。

- 日付と時間
- 実行される演算: 減算、加算、乗算、除算
- サンプルスペクトルタイトル
- リファレンススペクトルタイトル
- Factor(係数)

Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)

Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)は、基準スペクトル演算よりも高い柔軟性とパワーを提供します。基準スペクトル演算では、シングルリファレンススペクトルを使用したスペクトルの減算、加算、乗算、除算がサポートされていますが、Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)では、最大10個のリファレンススペクトル演算と広い範囲の演算を使用してカスタム方程式を構築できます。

多くのアプリケーションでは、スペクトル演算で標準の減算、加算、乗算、除算機能を使用するのは簡単で十分な効果があります。ただし、分析でさらに複雑な方程式が必要な場合は、Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)が必要になる場合があります。

いずれのフォーマットのスペクトル演算も、OMNIC ParadigmソフトウェアのDesktop(デスクトップ)インターフェースでのみ利用可能です。

2つの方法のいずれかを選択するときは、以下の違いを考慮して、どちらのツールが適切かを判断してください:

- Standard Spectral Math(基準スペクトル演算)
 - 係数を調整するスライダー付きのシングルリファレンススペクトルを使用して、減算、加算、乗算、および除算のみをサポートします
- Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)
 - 基本的な減算、加算、乗算、除算だけでなく、微分係数、指数など多くの関数も使用する柔軟な等式ビルダー
 - その等式には最大10個の異なるリファレンススペクトルを含めることができます

アドバンストスペクトル演算の実行

Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)を使用する場合、通常、方程式で使用するスペクトルを追加し、方程式を構築し、その結果をプレビューして、最後にSpectral View(スペクトルビュー)で結果をレビューします。

◆ Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)を実行するには

1. Spectral View(スペクトルビュー)で、Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)で使用する測定を選択します。
2. **Process(プロセス)**メニューを開き、**Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)**を選択します。等式ビルダーが開きます。

図4-1: Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)ビュー



3. 方程式で使用するリファレンススペクトルを追加します。

最大10個のスペクトルを追加可能ですが、開いたすべてのスペクトルを使用する必要はありません。方程式は、それに重点的に取り組んでいる間に利用できるように、スペクトルを最初に追加する方が簡単な可能性もありますが、必要に応じてのみ追加することを選択することもできます。

- a. リファレンススペクトルまたはライブラリスペクトルを選択します。スペクトルを追加すると、新規タブが自動的に開きます。
 - その方程式で商用(ロックされている)ライブラリのスペクトルを使用する場合は、結果をエクスポートすることはできません。

4. 方程式を構築します。

- a. 演算子をクリックして、それを方程式に追加します。
- b. 演算子が追加されたら、任意のオープン **?** スペースをクリックして、スペクトルまたは別の演算子を挿入することができます。
 - スペクトルを追加するには、オープンスペースを選択した状態で、スペクトルを選択し、**Insert into Equation(演算式に追加)**をクリックします。
 - 演算子を追加するには、その演算子をクリックします。オープン **?** スペースを選択してある場合には、演算子はそのスペースに追加されます。いかなるスペースも選択してない場合、新規演算子は現在の方程式の周りに配置されます。
 - また、方程式を保存したり、以前の方程式を開くことも可能です。
 - 方程式を保存するには、単にSave(保存)をクリックします。その方程式は利用可能な方程式のリストに追加されます。

4. ハウジーガイド

- 以前の方程式を開くには、最初に方程式で使用されている正しい数のスペクトルを開く必要があります。例えば、方程式で3つのスペクトル(A、B、およびC)を使用すると、少なくとも3つのスペクトルを開きます。スペクトルを開くと、その対応する位置で方程式に自動的に追加されますが、その方程式は必要に応じて編集したり、そのスペクトルを置き換えたりすることができます。

c. その方程式に満足したら、**Calculate(計算)** をクリックして方程式の結果をプレビューします。

5. 方程式の結果をプレビューします。

図4-2: 方程式の結果は上部に示され、リファレンスペクトルは下部に示されます

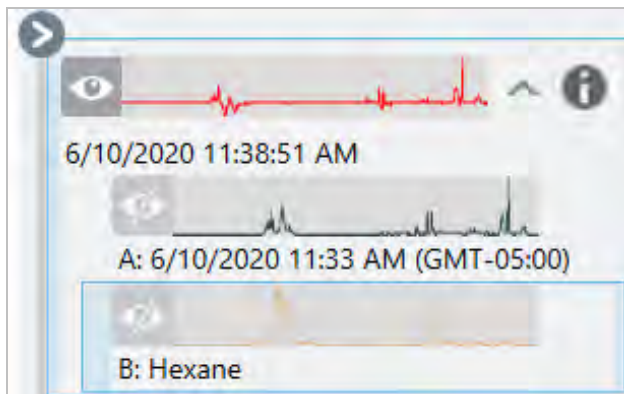


方程式の結果のプレビューには、方程式から得られたスペクトルだけでなく、方程式で使用されている各スペクトルも表示されます。方程式の結果は上部ペインに表示され、リファレンスペクトルは下部ペインに表示されます。

- その方程式を編集するには、Cancel(キャンセル) をクリックして以前の画面に戻ります。
- 方程式の結果を保存するには、結果として得られたスペクトル名を入力するか、規定のままでSave(保存) をクリックします。

6. Spectral View(スペクトルビュー) でその結果を表示します。

結果として得られたスペクトルは、Results(結果) ペインに一覧表示されます。方程式で使用されるスペクトルは、方程式での使用を示すラベルとともに、結果として得られたスペクトル下のサブペインに表示されます。



Advanced Spectral Math(アドバンストスペクトル演算)で利用できる関数

関数	説明
k	定数
? + ?	加算
? - ?	減算
? * ?	乗算
? / ?	除算
log(?)	対数。基数10の対数を返します
exp(?)	指定された値の累乗で累乗された定数e(2.7182818)の結果を返します
sqrt(?)	値の2乗根
deriv(?)	微分
savderiv(?)	Savitsky-Golay微分
norderiv(?)	Norris微分

スペクトルの再処理

再プロセスを使用すると、スペクトルの元のインターフェログラムデータを新しい設定で変換することができます。

スペクトルをリファレンスと比較する場合、両方のスペクトルが同じ設定で処理されていれば、より正確な比較ができます。例えば、リファレンスより幅の広い範囲を使用してスペクトルを収集したとき、または異なったアポダイゼーションテクニックを使用したとき、比較は不正確になる場合があります。再プロセスを行うことで、元のデータをリファレンススペクトルに合わせて変換し、相関分析、QCheck分析、定量分析においてより良い結果を得ることができます。

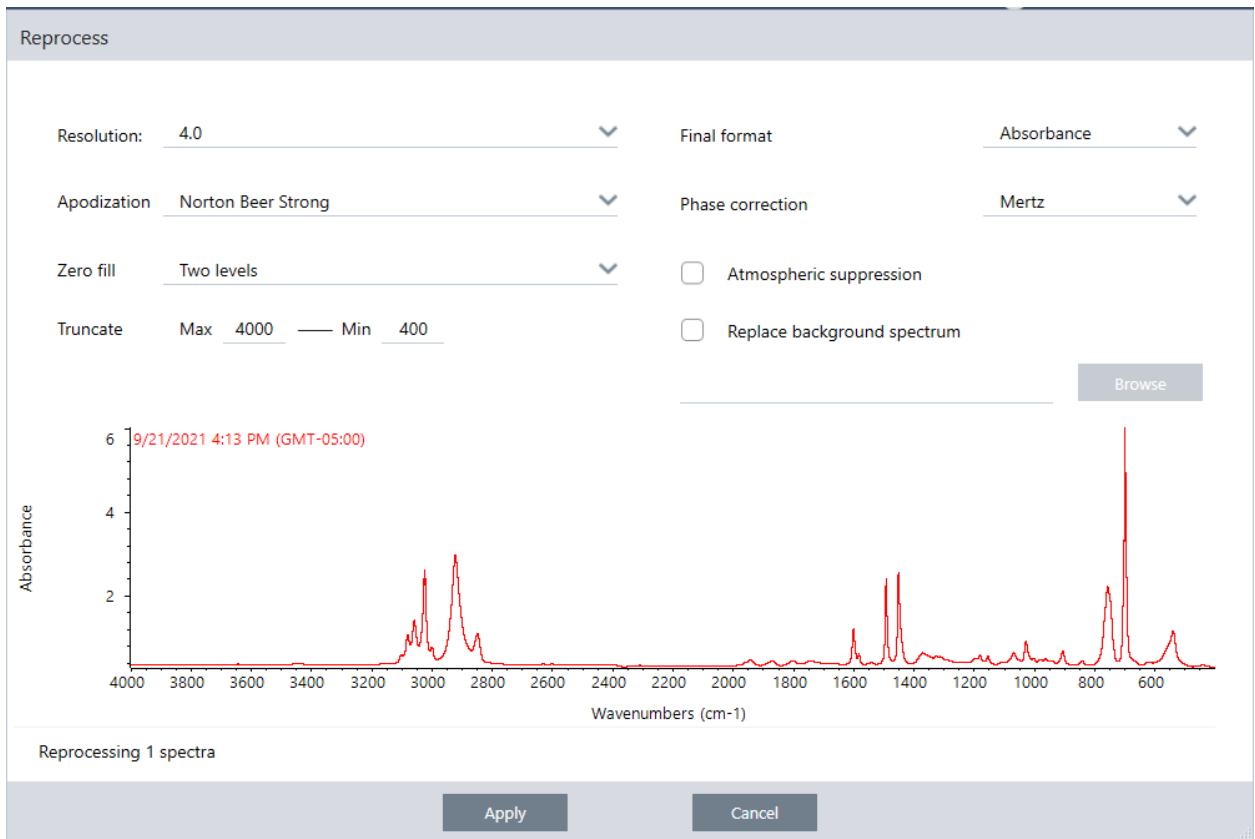
元々使用されていた分解能よりも細かい分解能で再プロセスすることはできません。再プロセスによってデータを変換することはできますが、収集されなかったデータを補うことはできません。

複数のスペクトルを再プロセスする場合、オプションにはそれらが共有する値のみが表示されます。例えば、あるスペクトルがより細かい分解能で測定された場合、再プロセスには共有されたより低い分解能のみを選択することができます。これは領域にも当てはまります。Truncate(切り捨て)の最大値と最小値は、共有の重複する範囲のみに設定することができます。

◆ スペクトルを再プロセスする

再プロセスは、ソフトウェアのDesktop(デスクトップ) ビューでのみ実行できます。

1. Spectra(スペクトル) ビューで、ひとつ以上のスペクトルを選択します。
2. **Process(処理)** メニューに移動し、**Reprocess(再プロセス)** を選択します。Reprocess(再処理) ダイアログには、再プロセスに使用した設定と、結果のスペクトルのプレビューが表示されます。ひとつ以上のスペクトルを再プロセスする場合、プレビューには最初のスペクトルのみが表示されます。



3. 再プロセス設定を変更します。異なるバックグラウンドスペクトルを使ってスペクトルを再プロセスするには、**Replace background spectrum(バックグラウンドスペクトルの置換)** を選択し、それから使用する新しいスペクトルを選択します。
4. Apply(適用) をクリックして、スペクトルを再プロセスします。

History(履歴) パネルを表示し、以前の状態に戻すことで、再プロセスを取り消すことができます。複数のスペクトルを再プロセスした場合は、それぞれを個別に元に戻す必要があります。

スペクトルの領域をブランクにする

Process(プロセス) メニューのBlank Regions(ブランク領域) ツールを使って、スペクトルの領域からデータを消去します。また、Processing(プロセッシング) タイルでワークフローの領域をブランクにできます。

Blank Regions(ブランク領域) ツールは、分析に干渉するノイズが多いデータを取り除くのに最適な方法です。例えば、以下のような場合に領域をブランクにすることができます。

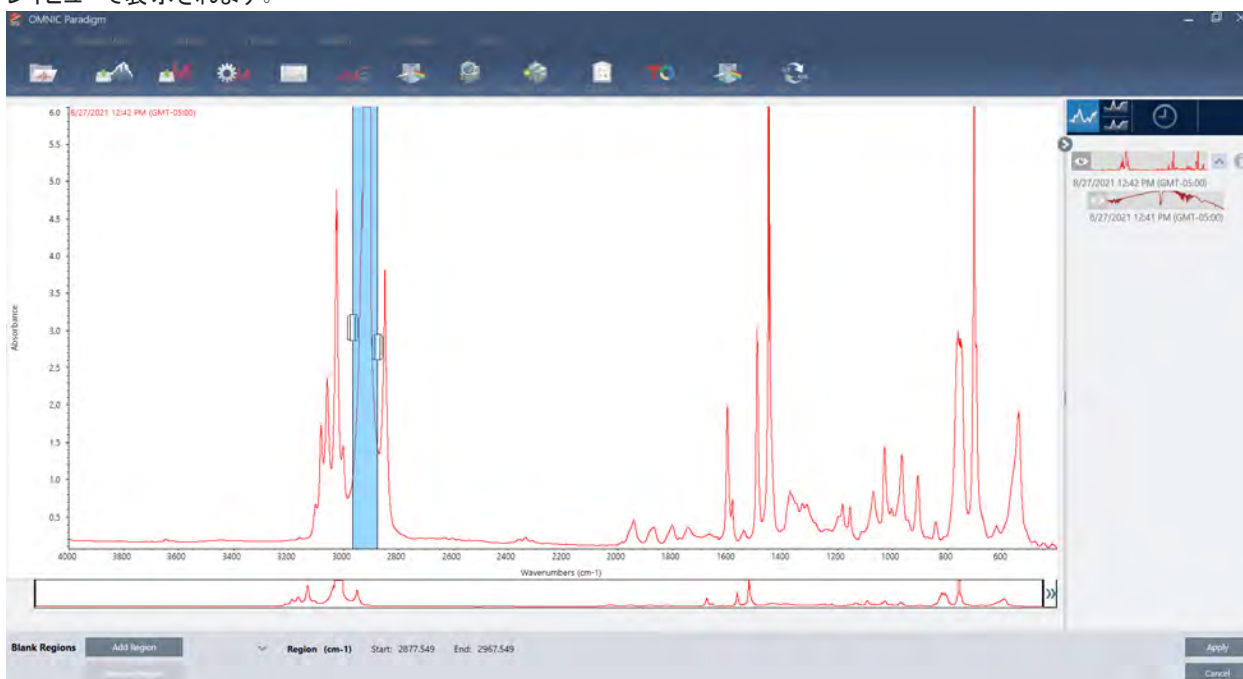
4. ハウソーガイド

- サンプルが厚すぎるために、スペクトルには完全に吸収されたピークがある。これらのピークの最上部にあるランダムなノイズは、ライブラリに対するスペクトルのサーチ、定量分析および差スペクトルを行うときに不十分な結果となる原因となります。
- スペクトルに、MCT検出器のカットオフ(およそ700波数)またはATRクリスタルのカットオフより下の領域が含まれる。このような領域には、スペクトル情報が存在しないため、ノイズのみが含まれます。これらの領域を除去しないと、ライブラリサーチまたはスペクトル処理は妨げとなります。

ブランクの領域

ひとつ以上のスペクトルの領域をブランクにできます。

1. ブランクしたい領域のスペクトルを選択します。CTRLを押したまま、ひとつ以上のスペクトルをクリックして選択するか、CTRL + Wを押して、すべてのスペクトルを選択します。
2. **Process(プロセス)**メニューに移動し、**Blank Regions(ブランク領域)**を選択します。1つ以上の領域を選択すると、オーバーレイビューで表示されます。



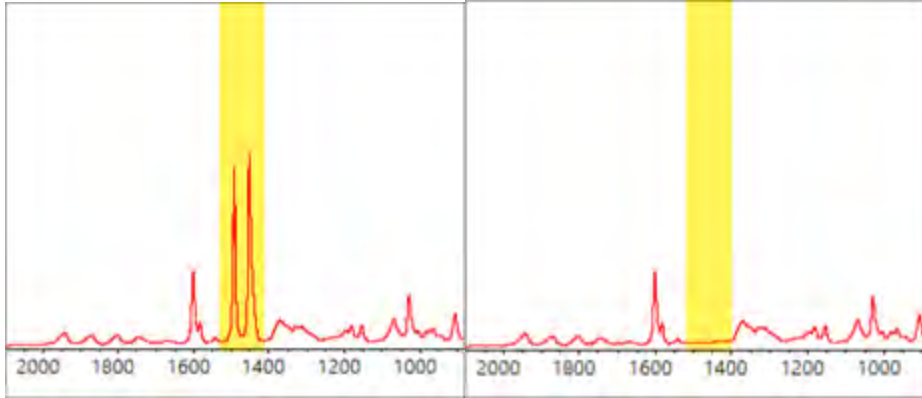
3. 領域セレクターを使って、削除する領域を選択します。**Add Region(領域の追加)**をクリックして1つ以上の領域を削除し、**Apply(適用)**をクリックして領域をブランクにします。

変更を取り消すには、スペクトルの履歴を表示し、以前の状態に戻します。

領域を直線に置き換える

Straight Line(直線)コマンドを使用して、スペクトル領域を、データポイントで構成される直線に置き換えることができます。領域のブランク化と同様に、スペクトルから不要な特性を除去できるという点で有用です。

4. ハウソーガイド



領域のブランク化と直線の違い

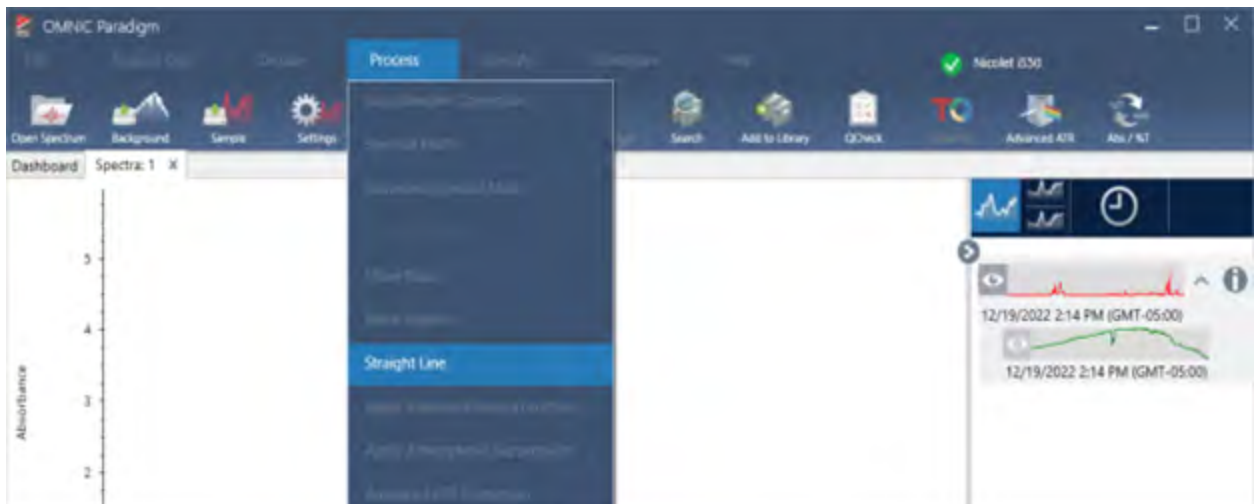
Straight Line(直線)は、選択した領域の端に近いポイント同士を線で結びます。一方、Blank Region(領域のブランク化)は、選択した領域のポイントを削除するだけです。スペクトルを分析する際に領域を直線で置き換えても、その変化は目で見て分からないことがあります。一方、領域をブランク化すると、その領域から元のデータが削除されたことが明らかに分かります。

注:ピークを含む領域を直線と置き換えて、ライブラリでそのスペクトルを検索すると、比較に直線領域を使用します。これは、ブランク化した領域でスペクトルを識別する目的でライブラリを検索する場合とは異なります。この場合、ブランク化した領域は無視されます。

Straight Line(直線)コマンドはDesktop(デスクトップ)ビューでのみ使用できます。

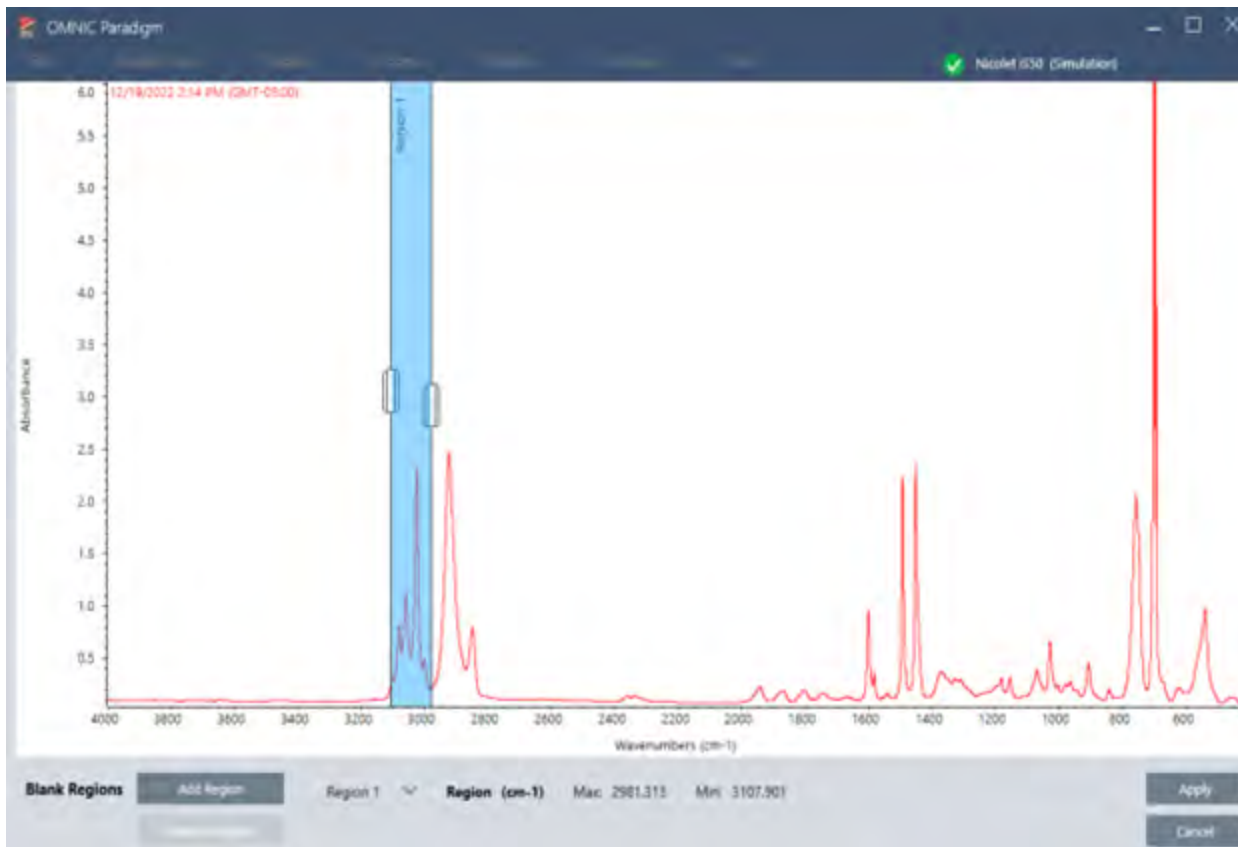
◆ スペクトル領域を直線に置き換えるには

1. Spectra(スペクトル)ビューから、Process(プロセス) > Straight Line(直線)に移動します。



2. セレクターを使って、直線と置き換える領域を選択します。複数の領域でStraight Line(直線)を使用するには、Add Region(領域を追加)を選択します。

4. ハウソーガイド



3. **Apply(適用)**を選択します。

領域が直線に置き換わります。

Straight Line(直線)コマンドを取り消すには、スペクトルの履歴を表示し、以前の状態に戻します。

Kramers-Kronig変換を適用

クラーマース-クロニグ補正は、正反射スペクトルをより一般的な透過スペクトルに変換する際に有用です。補正後のスペクトルは吸光度単位を使用し、最大吸光度が1になるように正規化されています。

正反射スペクトルは、そのピーク位置、強度比、スペクトルパターンが原因で定量分析やスペクトル検索での使用が難しく、分析に問題を生じさせることが多くあります。

開始および終了周波数帯域においてスペクトルが平坦になる場合は、補正によって最適な結果が得られます。分光器のバースまたは大気補正を実行して、水蒸気および二酸化炭素を除去する必要があります。また、必要に応じて、Straight Line(直線)ツールを使用してこれらの特性を除去することもできます。

◆ Kramers-Kronig変換を適用するには

• デスクトップ

Spectra(スペクトル)ビューからProcess(プロセス)メニューに移動し、Apply Kramers-Kronig Correction(Kramers-Kronig変換を適用)を選択します。

• タッチスクリーン

Spectra(スペクトル)ビューからメインメニューを開いて、Spectral Corrections(スペクトル補正) > Apply Kramers-Kronig Correction(Kramers-Kronig変換を適用)を選択します。

平均および標準偏差のスペクトルを計算する

スペクトルの平均や標準偏差を知るには、Process(プロセス)メニューのStatistical Spectra(統計的スペクトル)ツールを使用します。

スペクトルの各X値に対し、Y値の平均または標準偏差を求めることができます。これにより、新しいスペクトルが作成されます。

- **平均**:各データポイントにおけるY値の算術平均を求めます。サンプル材料のいくつかの測定を得た場合、測定の際のばらつきの影響を少なくするために、平均スペクトルを計算できます。平均スペクトルは、単一の測定値よりも化合物を代表する可能性があるため、リファレンススペクトルとしても有用です。
- **標準偏差**:各データポイントにおけるY値の標準偏差です。ピークの分散を比較することにより、生産工程における不純物の混入を検出できます。

また、標準偏差を使用して、異なる時間に測定した標準サンプルのスペクトルを比較することもできます。これは、測定の再現性をテストするのに有効な方法です。

統計的スペクトルは、ソフトウェアのDesktop(デスクトップ)ビューでのみ計算できます。Processing(プロセッシング)タイルを使って、ワークフローの統計的スペクトルを計算します。

◆ 統計的スペクトルを計算する

1. Spectral(スペクトル)ビューから、計算に使用する2つ以上のスペクトルを選択します。
2. Process(処理)メニューに移動し、Statistical Spectra(統計的スペクトル)を選択します。
3. 実行する計算と計算に使用するデータ形式を選択し、Calculate(計算)を選択します。結果として得られたスペクトルは、Results(結果)パネルに追加されます。どのスペクトルが、新規スペクトルの測定情報で新しいスペクトルを生成するのに使用されたかを知ることができます。

スペクトルをスムージングしてノイズを低減

Process(プロセス)メニューのSmooth(スムーズ)を使って、ランダムノイズを除去し、スペクトルの形を向上します。スムージングでは、Savitsky-Golayアルゴリズムを使用します。

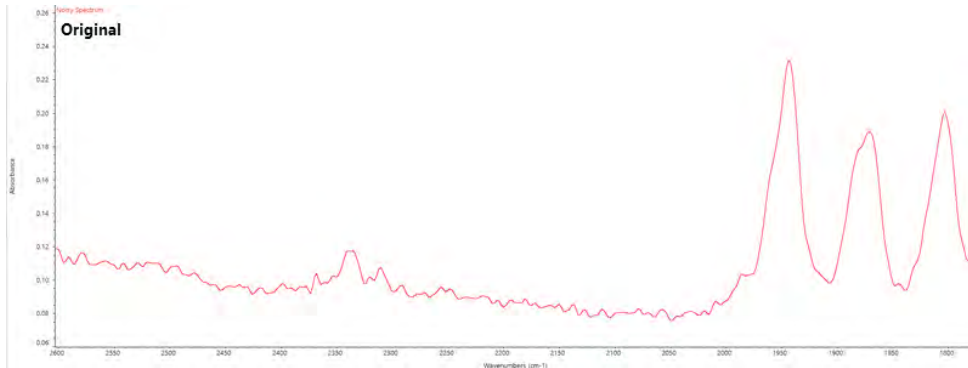
2種類のスムージングが可能です。

4. ハウザーガイド

- オートスムージング: 多くの場合オートスムージングで良好な結果が得られ、手動スムージングよりも高速に処理されます。
- Savitzky-Golayスムージング: アルゴリズムで使用されるポイント数を手動で設定します。より多くのポイントを使用することで、より高度なスムージングが可能になります。

これらの画像は、ノイズの多いスペクトルに最も積極的なSavitzky-Golayスムージングを適用した結果を示しています。これは、違いをより簡単に示すために、スペクトルの一部を拡大しています。

スムージング前のスペクトル



スムージングを適用後のスペクトル



実際に細かいサンプルピークを持つスペクトルをスムージングする場合は、サンプルピークの特徴も一緒にスムージングされるので注意が必要です。スムージングによりデータの有効な分解能が低下し、小さなスペクトル特性が取り除かれる(「スモースアウト」)可能性があります。

一般的には、スムージングを使用する代わりに、より多くのスキャンとより良い解像度でサンプルを測定することをお勧めします。

スムージングは現在選択されたスペクトルに適用され、新しい結果のスペクトルは作成されません。

デスクトップインターフェイス

◆オートスムージングを適用するには

1. スペクトルビューでさらにスペクトルを開きます。
2. スペクトルを選択して、**Process(プロセス) > Smooth Spectrum(スペクトルのスムージング) > Automatic(自動)**に行きます。

スムージングが自動で適用されます。スムージングを元に戻すには、測定履歴を表示します。

Savitzky-Golayスムージングを適用するには

1. スペクトルビューでさらにスペクトルを開きます。
2. スペクトルを選択して、**Process(プロセス) > Smooth Spectrum(スペクトルのスムージング) > -Savitzky-Golay**に行きます。
3. Savitzky-Golayアルゴリズムで使用するスムージングポイント数を設定します。
 - スムージングポイント数は、アルゴリズムで使用される移動ウィンドウのサイズを設定するのに使用されます。より多くのポイントを使用すると、よりスムージングが行われます。
4. **Save(保存)**をクリックします。

タッチスクリーンインターフェイス

◆オートスムージングを適用するには

1. スペクトルビューでさらにスペクトルを開きます。
2. スペクトルを選択して、**Spectral Smoothing(スペクトルのスムージング) > Automatic(自動)**に行きます。

スムージングが自動で適用されます。スムージングを元に戻すには、測定履歴を表示します。

◆Savitzky-Golayスムージングを適用するには

1. 測定を開きます。
2. メインメニューを開けて、**Spectral Smoothing(スペクトルのスムージング) > Savitzky-Golay**を選択します。
3. Savitzky-Golayアルゴリズムで使用するスムージングポイント数を設定します。
 - スムージングポイント数は、アルゴリズムで使用される移動ウィンドウのサイズを設定するのに使用されます。より多くのポイントを使用すると、よりスムージングが行われます。
4. **Save(保存)**を選択します。

スペクトルのスケールを正規化する

正規化を使用して、選択したスペクトルのY軸スケールを「通常」スケールに変更します。このスケールでは、吸光度スペクトルのようなスペクトルの場合はデータポイントのY値が最低点の0吸光度単位から最高ピークの1吸光度単位までの範囲になり、透過ス

4. ハウザーガイド

ベクトルのようなスペクトルの場合には、10%から100%までの透過率になります。これらの通常のスケールは、市販のスペクトルライブラリのスペクトルの典型です。

スペクトルのスケールが正規化された後は、拡大縮小係数を理解し、それに応じて定量結果を調整しない限り、定量分析に使用することはできません。

デスクトップインターフェイス

デスクトップインターフェイスを正規化するには、Spectra(スペクトル)ビューから**Process(データ処理) > Normalize(ノーマライズ)**に行きます。

タッチスクリーンインターフェイス

タッチスクリーンインターフェイスのスケールを正規化するには、Spectra(スペクトル)ビューからメインメニューを開け、**Spectral Corrections(スペクトル補正) > Normalize Scale(スケールの正規化)**を選択します

インターフェログラムの表示

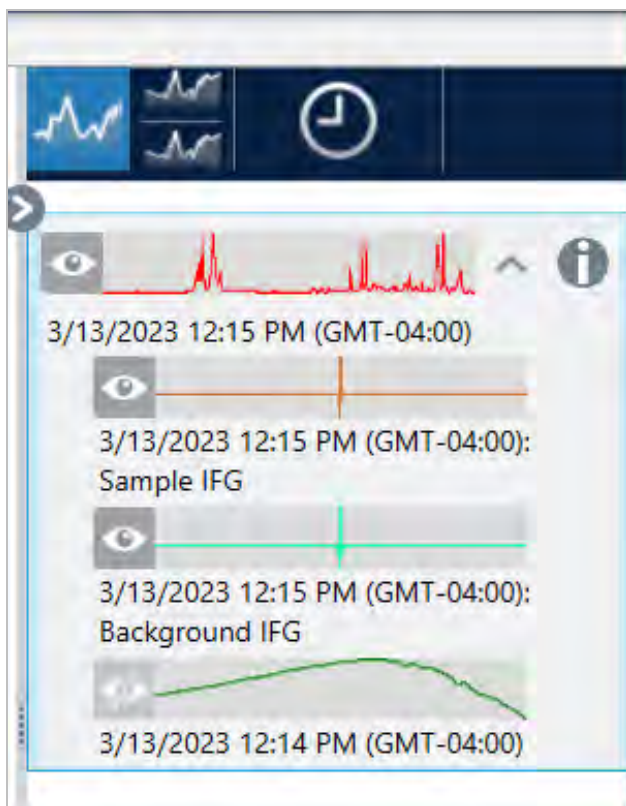
Retrieve Interferograms(インターフェログラムを取得)を使用して、バックグラウンドおよびサンプルのインターフェログラムなどスペクトルの元データを表示します。変換したデータに問題が見つかった場合は、インターフェログラムを調査して問題を診断できる可能性があります。たとえば、スペクトルのベースラインの正弦波は通常、赤外線がサンプルを「2回通過」していることを示します。この場合、対応するインターフェログラムは、データ側に「スパイク」信号を示すことが多くあります。

4. ハウソーガイド

◆ インターフェログラムを取得するには

デスクトップビューのみ

1. Spectra(スペクトル)ビューで、スペクトルを選択します。
2. **Process(プロセス)**メニューに移動し、**Retrieve Interferograms(インターフェログラムを取得)**を選択します。スペクトルビューに2つのインターフェログラムが追加されます。



4.2.3 データを分析

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)の分析ツールを使用して、不明サンプルを特定し、サンプルの成分を検証します。

ピーク検出

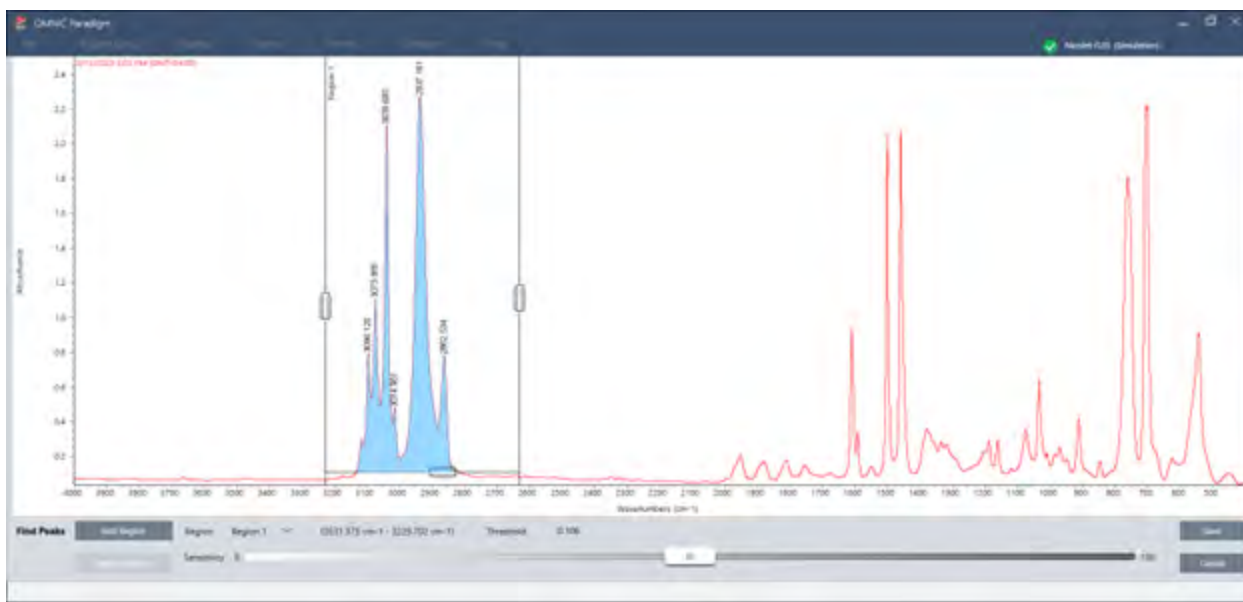
Identify(識別)メニューのFind Peaks(ピーク検出)を使用して、スペクトルのピーク位置を識別します。このコマンドは、表示されたスペクトル領域または選択した領域(該当する場合)のピークを検出します。

このコマンドは、Y値がしきい値を超えるピークを検出して、そのX値を表示します。

4. ハウソーガイド

◆ ピークを検出するには

1. Spectral(スペクトル)ビューで、スペクトルを選択します。
2. Identify(分析)メニューに移動し、Find Peaks(ピーク検出)を選択します。CTRL+Kキーでショートカットキーになります。Find Peaks(ピーク検出)画面が開きます。
3. 領域、しきい値、および感度を任意に調整します。検出されたピークと現在の設定が表示されます。複数の領域を追加したり、全範囲を対象にしたりできます。



4. Save(保存)をクリックします。ピークがスペクトルに注釈表示されます。検出されたすべてのピーク位置を記載したPeak Results(ピーク結果)レポートを作成できます。

表4-1: Find Peaks(ピーク検出)設定

設定	説明
Region(領域)	ツールがピークを検出する領域を指示します。
Threshold(しきい値)	Find Peaks(ピーク検出)ツールは、Y軸の値がこの限度値を超えるピークを識別します。 スペクトルのY軸フォーマットが下向きピークを生成する設定である場合は、このしきい値を下回るピークを検出します。たとえば、しきい値が0.5の場合、選択したスペクトル領域からY値が0.5以上のピークを検出してラベル表示します。

設定	説明
Sensitivity(感度)	<p>感度は、Find Peaks(ピーク検出) ツールがどれくらい容易にピーク上のショルダーやベースラインの小さなピークを検出できるかを決定します。Y値がしきい値を上回るピークを検出するのは異なり、感度は周辺のスペクトル特性の相対的な大きさを考慮に入れます。</p> <p>低感度に設定すると、ショルダーは主ピークの一部として、小さいピークはベースラインのノイズとして処理されて、いずれの特性も検出されません。高感度に設定すると、ショルダーと小さいピークはピークとして検出され、ラベル表示されます。</p> <p>感度を高く設定しすぎると、ノイズやその他重要性の低い特性がしきい値を超えた場合に、有用な特性と一緒に検出されてしまいます。目的とするスペクトル特性だけを検出できるように、しきい値と感度を組み合わせて使用します。</p>

サンプルと混合物の識別

OMNIC Paradigmソフトウェアでは、コリレーションサーチと多成分サーチを使用して、サンプルと混合物を識別することができます。この分析タイプでは、サンプルのスペクトルはライブラリに保存されているスペクトルと比較され、ソフトウェアが最もよく一致するものを見つけます。コリレーションサーチでは、各結果は単一の化合物であり、多成分サーチでは、各結果は全体のコンポジットスペクトルに寄与する複数の化合物を表示します。

サンプルと混合物の識別

サンプルと混合物の識別をするには、通常通りにサンプルを測定します。Spectra(スペクトル)ビューで、Identify(識別)メニューに行き、単一のマッチを検索するコリレーションサーチ、または複合マッチと寄与するコンポジットを特定する多成分サーチのいずれかを選択します。

サーチ設定

Search Setup(サーチ設定)を使用して、コリレーションサーチと多成分サーチの設定を構成します。これらの設定は、デスクトップインターフェースのIdentify(分析)メニューまたはタッチスクリーンインターフェースのメインメニューからCorrelation Search(コリレーションサーチ)またはMulti-component Search(多成分サーチ)を選択すると自動的に使用されます。

デスクトップインターフェースを使用して(Search Setup(サーチ設定)を使用することも可能)、お使いのシステム上の追加ライブラリの場所を指定することもできます。詳細は["ライブラリの場所を追加"](#)を参照してください。

Correlation Search Settings(コリレーションサーチ設定)

コリレーションサーチでは、測定値をお使いのライブラリ内の化合物と比較し、最も近いマッチを返します。結果には、0から100までの値を持つ各化合物のマッチ率が含まれます。100は完全マッチを示します。

図4-1: Correlation Search Settings(コリレーションサーチ設定)

設定	説明
Match historical search results(過去のサーチ結果と一致する)	<p>サーチ結果を従来のOMNICアプリケーションの結果とマッチさせる場合に選択します。OMNIC Paradigmソフトウェアで使用される改善されたアルゴリズムは、大きなピークを拡大縮小して、スペクトルを完全に吸収する影響を減らします。</p> <p>新規測定値を従来のOMNICソフトウェアを使用して収集された古いデータと比較する場合にのみ選択してください。</p>
Maximum spectra in search results(最大サーチ結果表示数)	<p>サーチ結果表示数を制限します。例えば、最大5の場合、サーチでは5つの最適なマッチのみが返されます。</p> <p>1から20までの数値を入力できます。</p>
Show compounds with match values above ____ (ヒット率のしきい値 ____)	<p>サーチによってマッチが返されるしきい値を設定します。例えば、値が60の場合、コリレーションサーチは60を超えるマッチ率を持つマッチのみを返します。</p>
Search all libraries(全てのライブラリをサーチ)	<p>お使いのすべてのライブラリをサーチする場合に選択します。選択をクリアして、サーチに使用する特定のライブラリのみを指定します。</p>
Use full spectral range(全スペクトル領域を使用)	<p>サーチに全スペクトル領域を使用の場合に選択します。選択をクリアして、サーチの一つまたは複数の制限された範囲を指定します。</p> <p>複数の領域を使用して、サーチから別の領域を除外できます。例えば、完全吸収ピークの両側に領域を含めて、サーチから除外します。</p>

4. ハウソーガイド

コリレーションサーチの結果

コリレーションサーチの結果は、マッチ率の順に結果ペインに表示されます。



- A** 結果ペインには、元のスペクトルとコリレーションサーチの結果が表示されます。各結果は、サーチしたスペクトルの下にネスト表示 されます。

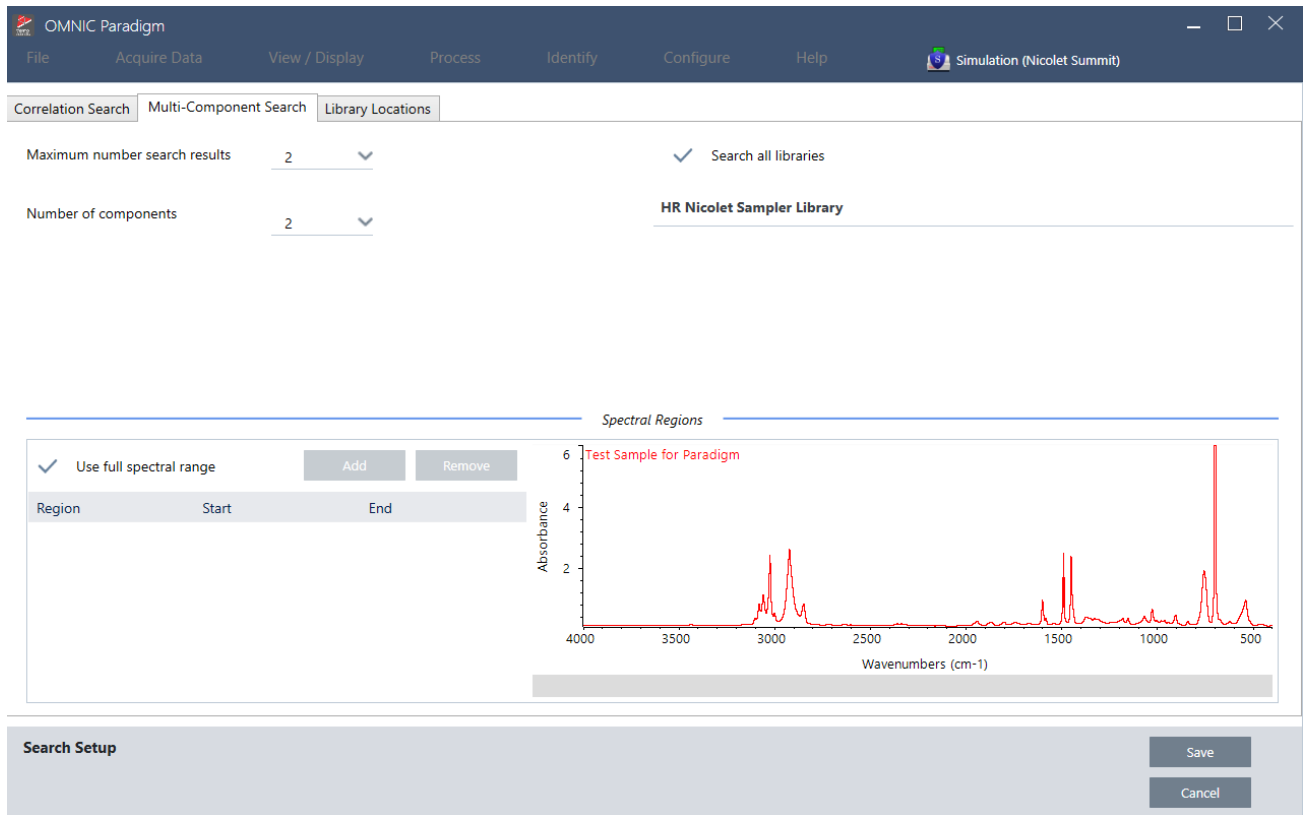
- B** マッチ値は、どのくらい元のスペクトルに一致するかを表し、100は完全一致を表します。

- C** 灰色の矢印の上にカーソルを合わせると、マッチを検索したライブラリやライブラリ内の位置など、各マッチの詳細が表示されます。

多成分サーチ設定

多成分サーチを使用して、サンプルを構成する成分を特定します。

図4-2: 多成分サーチ設定

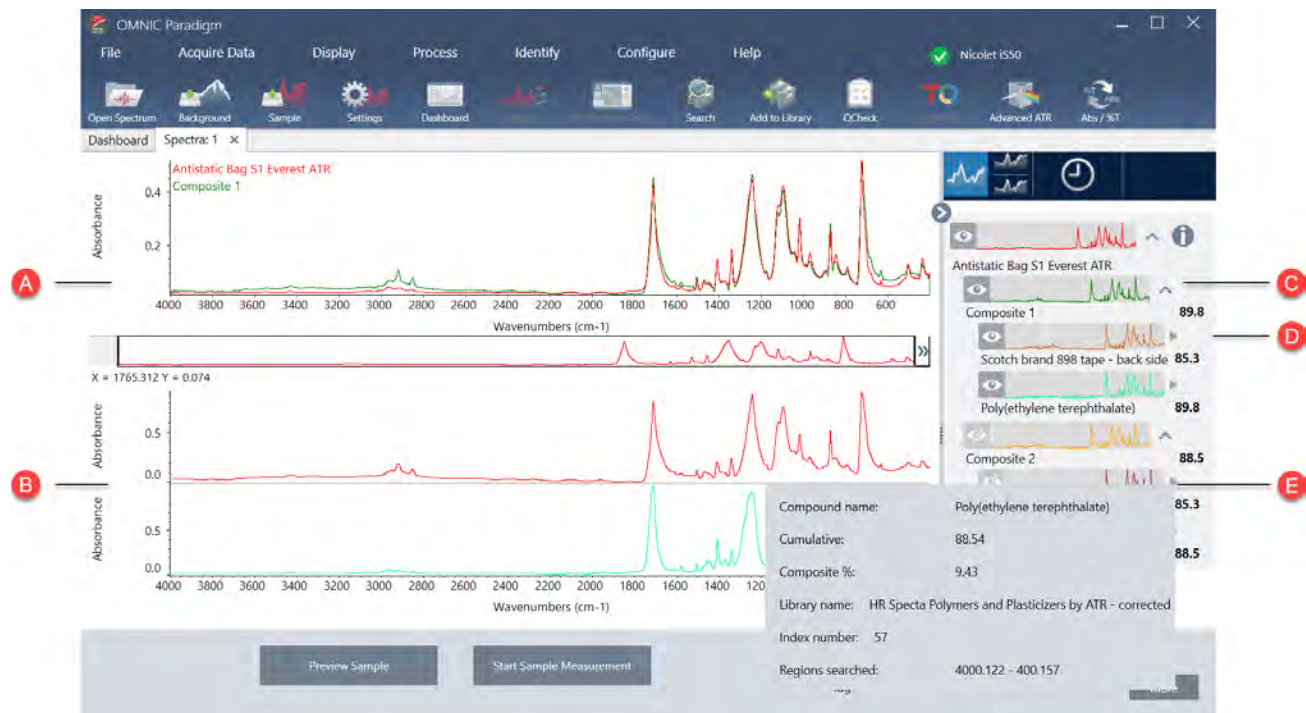


設定	説明
Maximum number of search results (最大サーチ結果表示数)	コンポジットサーチ結果表示数を制限します。
Number of components(成分数)	各コンポジットごとに返す成分数を設定します。
Search all libraries(全てのライブラリをサーチ)	お使いのすべてのライブラリをサーチする場合に選択します。選択をクリアして、サーチに使用する特定のライブラリのみを指定します。
Use full spectral range(全スペクトル領域を使用)	<p>サーチに全スペクトル領域を使用場合に選択します。選択をクリアして、サーチの一つまたは複数の制限された範囲を指定します。</p> <p>複数の領域を使用して、サーチから別の領域を除外できます。例えば、完全吸収ピークの両側に領域を含めて、サーチから除外します。</p>

多成分サーチの結果

コリレーションサーチの結果は、マッチ率の順に結果ペインに表示されます。

4. ハウジーガイド



A サンプルスペクトルとコンポジット スペクトル

B コンポジットに含まれる化合物のスペクトル

C コンポジット スペクトルは成分 スペクトルを組み合わせたものです。コンポジット マッチ率は全体のマッチ率を表します。コンポジットとサンプルのスペクトルがどのくらい一致するかを示し、100は完全一致を表します。

D 成分スペクトルは、その一部を構成するコンポジットの下にネスト表示されます。

累積値は、各コンポーネントが全体のコンポジット マッチ値にどのように寄与しているのかを示します。最初の合成物の累積値は、全体のマッチ度に対する寄与を示し、追加の各コンポーネントの寄与は全体のマッチ度に加算されます。例えば、累積値70の合成物と累積値80の化合物を含む、マッチ値80のコンポジットを考えてみましょう。この場合、最初の化合物はマッチ値に70寄与し、次の化合物はマッチ値に10寄与します。

コンポジットの%値は、コンポジットのリファレンス化合物量を表します。例えば、55%のコンポジット値は、コンポーネントが合計コンポジット スペクトルに55%寄与することを意味します。コンポジット パーセント値の合計は常に100%です。コンポジット パーセント値は実際のサンプルに対するものではなく、コンポジットに対する化合物の寄与を示すことに注意してください。言い換えれば、検出されたコンポーネントのコンポジット 値が55%であっても、サンプル混合物にその成分が55%含まれているとは限りません。

E 灰色の矢印の上にカーソルを合わせると、各化合物の詳細が表示されます。

QCheck(Qチェック) を使用してサンプルを検証するには

QCheck(Qチェック) 分析では、サンプルを既知のリファレンスペクトルと比較して、ソフトウェアが一致値と合格または不合格の結果を提供します。QCheck(Qチェック) はサンプルが内部標準と一致するかどうかを迅速に検証するのに適しています。

QCheck(Qチェック) の使用の詳細については、"[QCheck\(Qチェック\) でサンプル組成を検証](#)"を参照してください。

QCheck(Qチェック) を使用してサンプルを検証するには

QCheck(Qチェック) 分析を実行するには、通常通りにサンプルを測定します。それから、Spectra(スペクトル) ビューで、Identify(分析) メニューに行き、QCheck(Qチェック) を選択します。

QCheck Setup(Qチェック設定)

QCheck(Qチェック設定) を使用して、QCheck(Qチェック) 分析を構成します。保存したQCheck(Qチェック) の設定は、サンプル測定前にAnalysis Type(分析タイプ) としてQCheck(Qチェック) を選択した場合や、Identify(分析) メニューからQCheck(Qチェック) を選択した場合に自動的に使用されます。

QCheck(Qチェック) の使用の詳細については、"[QCheck\(Qチェック\) でサンプル組成を検証](#)"を参照してください。

図4-1: QCheck(Qチェック) の設定画面

QCheck Setup

Save Cancel

Region	Start	End

Measurement Name	Date	Type

設定	説明
High Sensitivity(高感度)	参照に非常に類似しているサンプル間でさらに正確な結果を得るには、高感度を選択します。自然変動を含むサンプル測定中には、高感度の選択を解除することをお勧めします。

4. ハウソーガイド

設定	説明
Pass/fail threshold(合格 / 不合格しきい値)	合格または不合格のしきい値を設定します。0～100の整数を入力します。 相関値100は、完全にマッチすることを示します。 このオプションの選択を解除すると、すべての結果に「合格」と表示されます。
Maximum spectra in QCheck results(Qチェック結果の最大表示数)	結果パネルに表示される結果数を設定します。例えば、値を2に設定すると、2つの最適なマッチのみが結果パネルに表示されます。
Prompt for reference(実行時にリファレンスを選択)	測定中に参照を選択する場合に選択します。選択を解除して、一つまたは複数のリファレンスペクトルを事前に指定します。複数のサンプルを同じ参照と比較する場合は、サンプル測定を行うたびに同じ参照を選択し続ける必要がないように、事前に設定しておく便利です。 ライブラリの化合物を参照として使用するには、最初に化合物を追加してデータベースで利用できるようにします。
Blank diamond ATR region (2200 - 1955)(ダイヤモンド ATR領域(2,200～1,955)を除外)	ダイヤモンドATR結晶が放射線を吸収する、2,200波数から1,955波数までの領域のデータを除外する場合に選択します。
Blank CO2 region (2390 - 2240)(CO2領域(2,390～2,240)を除外)	二酸化炭素が放射線を吸収する2,390波数から2,240波数までの領域のデータを除外する場合に選択します。
Use full spectral range(全スペクトル領域を使用)	分析で全範囲を使用する場合に選択します。 選択を解除して、分析に使用する限られた範囲のみを指定します。

汚染物質の特定

既知の物質があり、他の予期しない物質をチェックしたいとき、Contaminant Analysis(汚染物質の分析)を使用します。Contaminant Analysis(汚染物質の分析)では、既知の物質のリファレンスペクトルと実際のスペクトルを比較し、潜在的な汚染物質を特定します。スペクトルを単一のリファレンスペクトルと比べ、合致した数値とパス/失敗をレポートするQCheckと異なり、汚染物質分析はサンプルに含まれる可能性のある汚染物質を特定します。

Contaminant Analysis(汚染物質の分析)結果は、どのような汚染物質が、どの程度の量存在する可能性があるかを示します。

設定と汚染物質の分析の使用法

Contaminant Analysis(汚染物質の分析)はDesktop(デスクトップ)とTouchscreen(タッチスクリーン)インターフェースの両方から実行できます。

Desktop(デスクトップ) インターフェースのContaminant Analysis(汚染物質の分析)

◆ 汚染物質の分析を使用する

1. Search Setup(サーチ設定)のリファレンススペクトルを割り当てます。
 - a. Identify(分析) > Search Setup(サーチ設定) に行きます。
 - b. Contaminant Analysis Search(汚染物質の分析を検索) タブを選択します。
 - c. リファレンススペクトルを選択します。これは既知の物質のスペクトルです。
 - d. 他の設定をレビューします。
2. Save(保存) をクリックします。
3. Spectra(スペクトル) ビューで、分析するスペクトルを選択します。
4. Identify(分析) > Search(検索) > Contaminant Analysis(汚染物質の分析) に行きます。

しばらくすると、分析結果がスペクトルビューに表示されます。

Touchscreen(タッチスクリーン) インターフェースのContaminant Analysis(汚染物質の分析)

◆ 汚染物質の分析を使用する

1. Search Setup(サーチ設定)のリファレンススペクトルを割り当てます。
 - a. メインメニューを開き、Search Setup(サーチ設定) を選択します。
 - b. Contaminant Analysis Search(汚染物質の分析を検索) タブを選択します。
 - c. リファレンススペクトルを選択します。これは既知の物質のスペクトルです。
 - d. 他の設定をレビューします。
2. Save(保存) を選択します。
3. Spectra(スペクトル) ビューで、スペクトルを選択します。
4. メインメニューを開き、Search(検索) > Contaminant Analysis(汚染物質の分析) を選択します。

しばらくすると、分析結果がスペクトルビューに表示されます。

汚染物質の分析設定

設定	説明
Max number of results (結果の最大数)	コンポジット結果を何件返すかを設定します。例えば、結果を2に設定すると、汚染物質の分析は一致する値の順に2件のコンポジット候補が表示されます。
Number of contaminants (汚染物質数)	各コンポジットごとに返す化合物数を設定します。例えば、結果に3汚染物質を設定した場合、各コンポジットスペクトルは3つの汚染物質候補が表示されます。

4. ハウソーガイド

設定	説明
Search all libraries(全てのライブラリをサーチ)	検索で、どのライブラリを使用するか選択します。ライブラリ数が少ないほど、分析は早く実行されます。
Select reference source (リファレンスソースの選択)	リファレンスペクトルがライブラリにあるか、データベースのスタンドアロン測定かを示します。
Select reference (リファレンスの選択)	既知の化合物。汚染物質の分析結果では、各コンポジットは既知の化合物と汚染物質と思われるものが含まれます。
Use full spectral range(全スペクトル領域を使用)	分析で範囲を制限するか全スペクトルを使用します。

結果を解釈します

他のSearch analysis(検索分析)と同じように、汚染物質の分析結果はSpectra(スペクトル)ビューに表示されます。Results(結果)ペインには、各コンポジットと汚染物質の可能性が表示されます。



特長	説明
A	サンプルスペクトルとコンポジットスペクトル
B	既知化合物を含むコンポジットの化合物のスペクトル
C	コンポジットの詳細を表示または非表示

特長	説明
D	コンポジット マッチ数値は、コンポジットのスペクトルがどのくらいサンプルにマッチするかを表示し、100は完全一致を表しています。
E	灰色の矢印の上にカーソルを合わせると、各化合物の詳細が表示されます。

各化合物の詳細は次のものを含みます：

化合物名	化合物の名称
累積 / 蓄積	<p>累積値は、各コンポーネントが全体のコンポジット マッチ値にどのように寄与しているかを示します。最初のコンポジットの累積値は、全体のマッチ度に対する寄与を示し、追加の各コンポーネントの寄与は全体のマッチ度に加算されます。</p> <p>例えば、累積値70の化合物と累積値80の化合物を含む、マッチ値80のコンポジットを考えてみましょう。</p> <p>この場合、最初の化合物はマッチ値に70寄与し、次の化合物はマッチ値に10寄与します。</p>
コンポジット%	<p>コンポジットの%値は、コンポジットのリファレンス化合物量を示します。例えば、55%のコンポジット値は、コンポーネントが合計コンポジットスペクトルに55%寄与することを意味します。コンポジットパーセント値の合計は常に100%です。</p> <p>コンポジットパーセント値は際のサンプルに対するものではなく、コンポジットに対する化合物の寄与を示すことに注意してください。言い換えれば、検出されたコンポーネントのコンポジット値が55%であっても、サンプル混合物にその成分が55%含まれているとは限りません。</p>
ライブラリ名	化合物が見つかったライブラリ名
インデックス番号	化合物のライブラリでの位置
検索された領域	ライブラリ検索で使用するスペクトル領域

4.2.4 レポートの作成

テンプレートからレポートを生成して、データをMicrosoft Wordファイル、PowerPointファイル、Excelファイルとして保存し、共有します。あるいは、スペクトル、ワークフロー、設定をエクスポートして、同僚と共有します。

レポートとエクスポートデータを作成および共有

テンプレートからレポートを生成して、データをMicrosoft™ Word™、PowerPoint™、またはExcel™ファイルとしてすばやく保存または共有したり、スペクトル、ワークフロー、または設定をエクスポートすることができます。

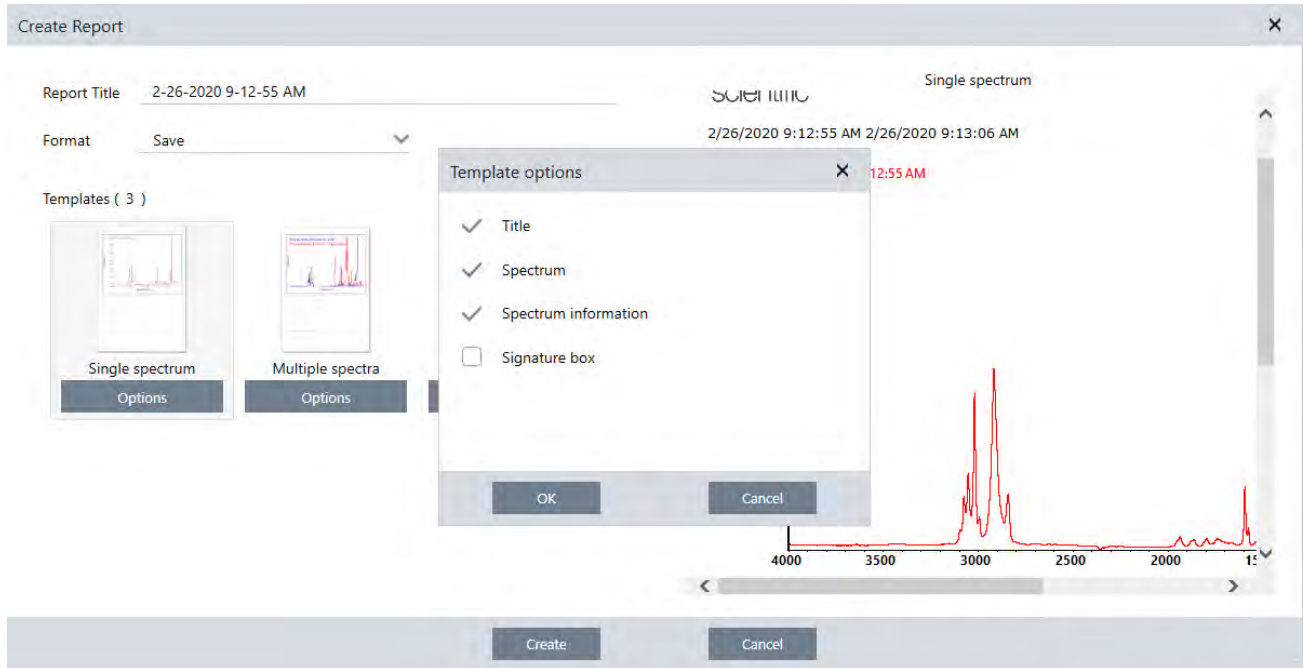
4. ハウザーガイド

◆ デスクトップインターフェースからレポートを作成するには

1. Spectra(スペクトル)ビューから、File(ファイル) > Create Report(レポートの作成)を選択します。
2. レポートのタイトルを入力し、フォーマットとテンプレートのオプションを選択します。このプレビューは、選択内容にマッチするようにアップデートされます。

お使いのフォーマットでSave(保存)を選択すると、レポートデータがデータベースに保存されます。

3. テンプレートを構成するには、Options(オプション)をクリックして、含める項目を選択します。OKをクリックして選択内容を保存します。



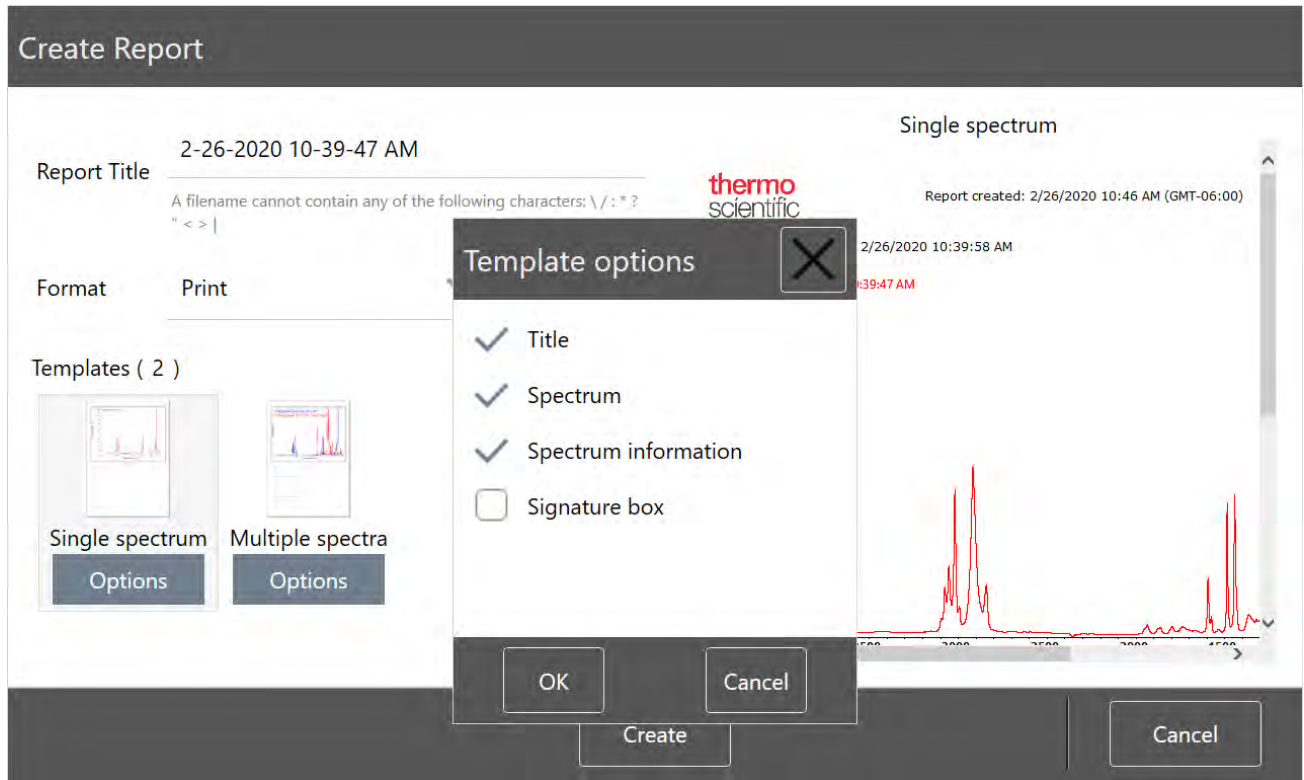
4. Create(作成)をクリックします。

◆ タッチスクリーンインターフェースからレポートを作成するには

1. Spectral(スペクトル)ビューからメニューを開き、Create Report(レポートの作成)を選択します。
2. レポートのタイトルを入力し、レポートを保存するディレクトリを選択し、フォーマットを選択して、最後にテンプレートを選択します。このプレビューは、お使いのフォーマットとテンプレートの選択にマッチするようにアップデートされます。

お使いのフォーマットでSave(保存)を選択すると、レポートデータがデータベースに保存されます。

3. テンプレートを構成するには、Options(オプション)をタッチして、含める項目を選択します。OKをタッチして、選択内容を保存します。



4. **Create(作成)** をタッチします。

設定、スペクトル、またはワークフローをエクスポート

デスクトップ用のOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)を使用して、設定とワークフローをエクスポートします。デスクトップモードまたはタッチスクリーンモードでスペクトルをエクスポートします。

◆ 設定をエクスポートするには

1. エクスポートする設定をSettings(設定)リストから選択します。
2. **Acquire Data(データ取得) > Export Settings(設定のエクスポート)** を選択します。
3. 設定ファイルに名前を付けて、**Save(保存)** をクリックします。

Settings(設定)は.expファイル拡張子で保存されます。これらの設定ファイルには測定条件設定が保存されますが、Search(サーチ)、QCheck(Qチェック)、またはQuantification(定量)設定は保存されません。拡張子が.expのSettings(設定)ファイルは、以前のバージョンのOMNICソフトウェアと互換性がありません。

◆ ワークフローをエクスポートするには

- デスクトップインターフェースを使用している場合
 - a. Workflow Pane(ワークフローペイン)で、エクスポートするワークフローを右クリックし、メニューから**Export(エクスポート)**を選択します。

4. ハウザーガイド

- b. お使いのワークフローファイルに名前を付けて、**Save(保存)**をクリックします。
- c. ワークフローファイルは、.nwfファイル拡張子で保存されます。
- タッチスクリーンインターフェースを使用している場合
 - a. Workflows(ワークフロー) タブで、エクスポートするワークフローを選択し、More Options(詳細オプション) メニューを選択します。
 - b. **Export(エクスポート)**を選択します。
 - c. お使いのワークフローファイルに名前を付けて、**Save(保存)**をタッチします。
 - d. ワークフローファイルは、.nwfファイル拡張子で保存されます。

◆ 測定値をエクスポートするには

- デスクトップインターフェースを使用している場合
 - a. Measurements(測定) ペインで、エクスポートするスペクトルを右クリックし、**Export(エクスポート)**を選択します。
 - b. スペクトルファイルに名前を付けて、**Save(保存)**をクリックします。スペクトルは.spaファイル拡張子で保存されます。
- タッチスクリーンインターフェースを使用している場合
 - a. ホーム画面から、**Measurements(測定)** タブを選択します。
 - b. More Options(詳細オプション) メニュー [⋮]を開き、**Export(エクスポート)**を選択します。
 - c. **Save(保存)**にタッチします。スペクトルは.spaファイル拡張子で保存されます。

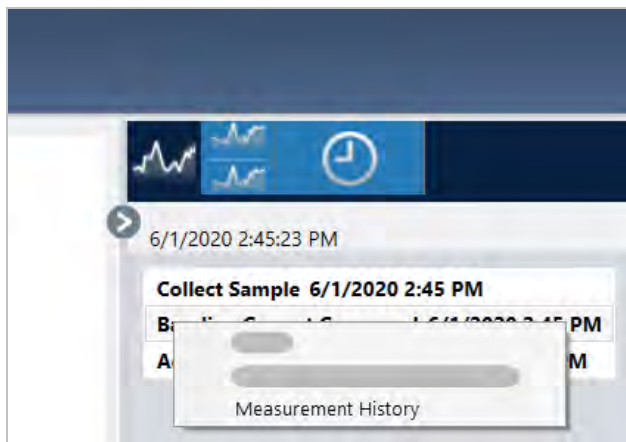
履歴スペクトルレポートを作成

Historical Spectrum(履歴スペクトル)レポートには、データ処理と分析を実行したときに測定値が時間の経過とともにどのように変化したかに関する詳細情報が含まれています。レポートには、履歴の各手順でのスペクトルが表示されます。

測定履歴のレポートの作成は、他のレポートの作成と似ていますが、最初に履歴データビューを開く必要があります。通常のSpectral View(スペクトルビュー)からCreate Report(レポートの作成)を開いた場合、Historical Spectrum(履歴スペクトル)テンプレートは使用できません。

◆ Historical Spectrum(履歴スペクトル)テンプレートレポートを作成するには

1. デスクトップインターフェースを使用して、Spectral View(スペクトルビュー)で測定値を開きます。
2. Measurement History(測定履歴)タブに移動します。
3. 履歴内の項目を右クリックして、**Measurement History(測定履歴)**を選択します。



4. File(ファイル)メニューを開き、**Create Report(レポートの作成)**を選択します。
5. Create Report(レポートの作成)ダイアログでレポートのタイトルを入力し、フォーマットを選択して、テンプレートオプションを編集します。Historical Spectrum(履歴スペクトル)テンプレートレポートでは、Print(印刷)フォーマットとSave(保存)フォーマットのみを使用できます。
6. **Create(作成)**をクリックします。

スペクトルにラベルと注釈を追加

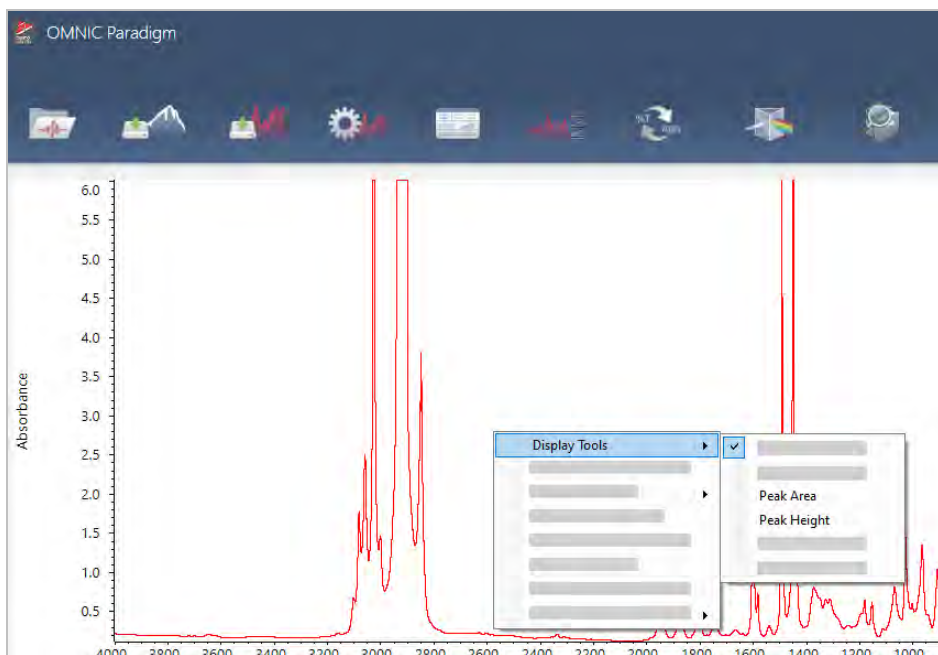
Annotation Tools(注釈ツール)を使用して、カスタムラベルを追加したり、スペクトルの特徴を強調表示します。注釈は、データを表示または共有するときにレポートに追加情報を追加するのに最適です。

注釈は、Desktop(デスクトップ)インターフェースでのみ作成できます。

◆ スペクトルにピーク注釈を追加するには

1. Spectral(スペクトル)ビューで、スペクトルを選択します。
2. Spectral(スペクトル)ペインを右クリックし、**Display Tools(表示ツール)**を選択して、**Peak Area(ピーク面積)**または**Peak Height(ピーク高)**のいずれかを選択します。

4. ハウザーガイド



3. ピークツールの設定を調整し、**Save(保存)**をクリックします。

4. 注釈を移動するには、そのテキストをクリックしてドラッグします。

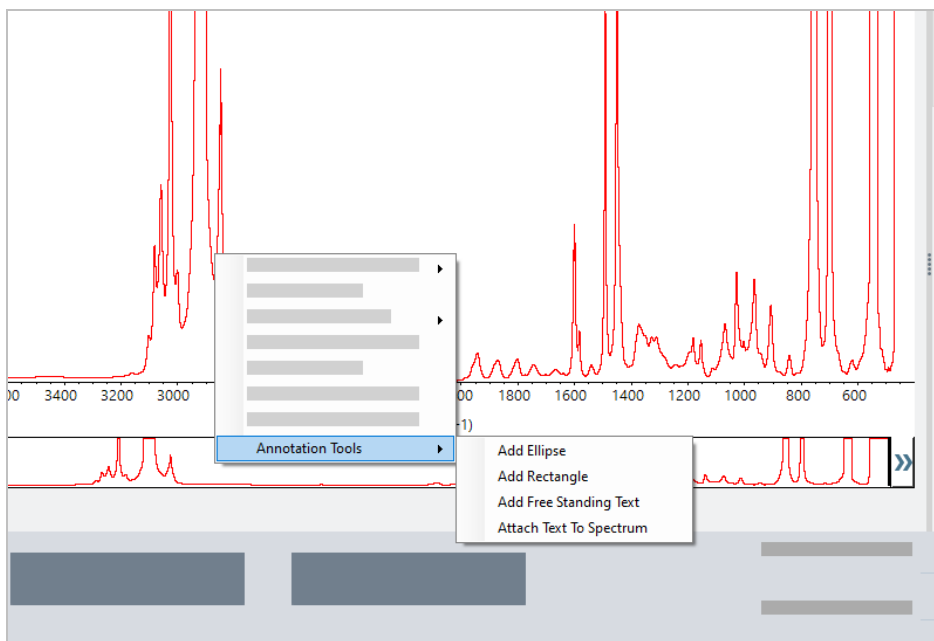
Peak Height(ピーク高さ)とPeak Area(ピーク面積)の注釈は、右クリックメニューを使用して編集または削除することはできません。それらの注釈を削除するには、履歴を使用して前のデータ処理手順に戻ります。

◆ スペクトルにカスタムラベルと注釈を追加するには

1. Spectral(スペクトル)ビューで、スペクトルを選択します。

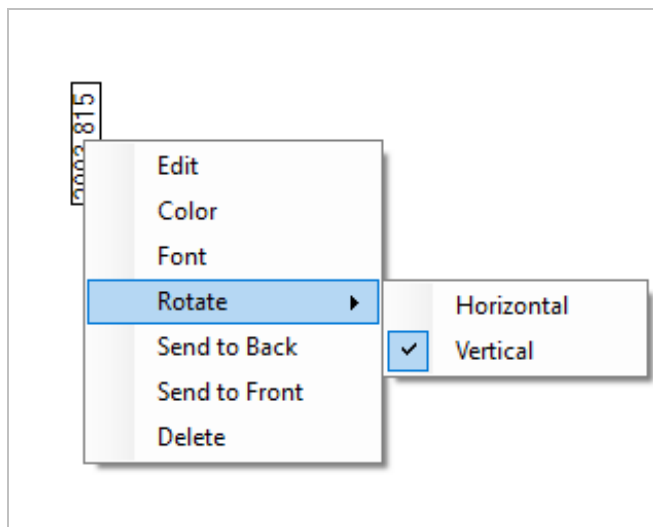
2. Spectral(スペクトル)ペインを右クリックし、**Annotation Tools(注釈ツール)**を選択して、Annotation(注釈)オプションを選択します。

4. ハウザーガイド



3. 注釈を移動するには、そのテキストをクリックしてドラッグします。Ellipse(楕円形)注釈またはRectangle(長方形)注釈の場合は、その図形の上部をクリックしてドラッグします。

追加のCustomization(カスタマイズ)オプションを使用するには、注釈を右クリックします。



4.3 タイムシリーズ測定

4.3.1 タイムシリーズ測定を理解する

このセクションでは、タイムシリーズ測定に関する重要な概念の概要を説明します。可能な場合は、リンクをたどって、個別の機能およびベストプラクティスについて詳細をご覧ください。

4.3.2 タイムシリーズ測定について

タイムシリーズ測定はサンプル測定値の経時変化を知りたいときに役立ちます。たとえば、タイムシリーズ測定を使ってTGA-IR実験やGC-IR実験中のサンプルの変化を調べたり、収集した標準測定値を開いて、ある週やある月を通して一貫した測定値が得られているか確認することで、測定値に変化が生じた時期が分かります。

ワークフロー中に繰り返し行った一連の測定結果からタイムシリーズ測定を作成することもできます。たとえば、1時間の間、60秒ごとに測定する場合など、Repeat(繰り返し) タイルやDelay(待ち時間) タイルを使って、一定期間同じサンプルを繰り返し測定することができます。その後、タイムシリーズ測定で測定値を開いて、ワークフローの間サンプルがどのように変化したかを確認できます。

タイムシリーズ測定は現在も開発が進められており、今後のリリースでさらに多くの機能が提供されます。現在は、標準測定値およびワークフローの測定値をタイムシリーズ測定に変換できますが、時間ベースの測定値として直接データを収集することはできません。

ヒント タグを使って測定値を整理することで、後からタイムシリーズ測定に容易に変換できます。ワークフローでTag(タグ) タイルを使って、すべての測定値に自動的にタグを付けることができます。ダッシュボードのTag(タグ) 設定を使って、データ収集中に個々の測定値にタグを適用できます。

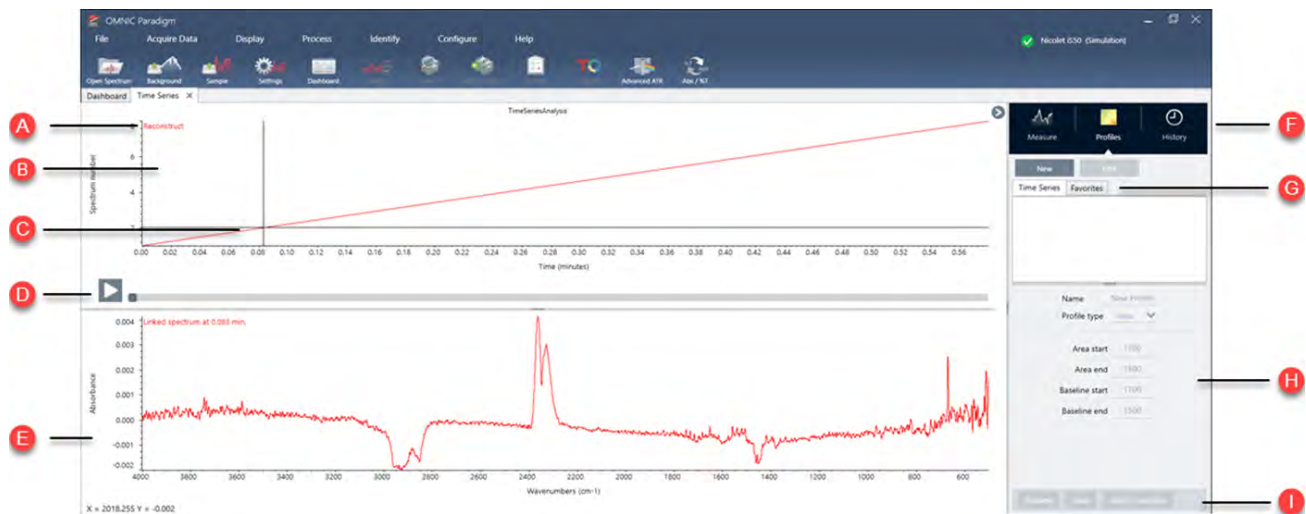
重要な概念と用語

- タイムシリーズ:** タイムシリーズ測定は、ある期間内にプロットされた4つ以上の測定値で構成されます。
 - 測定値をタイムシリーズ測定に変換する方法については、["タイムシリーズ測定の作成"](#)を参照してください。
- プロファイル:** プロファイルは一連のデータを示し、データの経時変化を表すために使用します。各プロファイルは、ピーク高さやピーク面積の変化など、測定データのさまざまな面を表します。
 - 各プロファイルの説明については、["プロファイルタイプ"](#)を参照してください。
 - プロファイルの適用、保存、編集については、["プロファイルの作成と使用"](#)を参照してください。
- 履歴:** タイムシリーズ測定 のすべてのデータ処理および表示の変換が履歴に含まれます。履歴を使って、データに適用した処理を確認したり、特定の処理を削除したりできます。
 - データ処理の適用および削除の方法については、["タイムシリーズデータの処理"](#)を参照してください。

タイムシリーズウィンドウの概要

タイムシリーズで測定値を開くと、分析ウィンドウが開いてデータが表示されます。

4. ハウソーガイド



- | | | |
|----------|-----------------------|--|
| A | プロフィール名 | 表示されるプロフィールの名前です。 |
| B | プロフィールビュー | 保存されているすべてのプロフィールのプロファイル曲線が表示されます。右クリックしてX軸の単位を変更します。 |
| C | 十字線 | プロフィールの選択位置を示します。選択位置に応じたスペクトルのX値およびY値が画面の左下隅に表示されます。 |
| D | タイムライン | タイムラインを使って測定値をスクロールします。スペクトルペインにタイムラインの現在位置のスペクトルが表示されます。

タイムラインを選択した状態で、左右の矢印を使って前後の時間のスペクトルに移動できます。 |
| E | スペクトルペイン | タイムラインで選択した現在位置のスペクトルが表示されます。 |
| F | 測定、プロフィール、履歴タブ | Measure(測定)、Profile(プロフィール)、History(履歴)タブ <ul style="list-style-type: none"> • Measure(測定)タブ: タイムシリーズ測定に関する情報を表示します。 • Profile(プロフィール)タブ: プロファイルの作成、編集、適用に使用します。 • History(履歴)タブ: データに適用したすべての処理および表示変換を表示します。 |
| G | プロフィールタイプタブ | プロフィールタイプタブを使って、お気に入りプロフィールとタイムシリーズプロフィールを切り替えます。 <ul style="list-style-type: none"> • Time Series(タイムシリーズ)プロフィール: タイムシリーズ測定に固有のプロファイルです。単独で再作成しない限り、他の分析に再使用することはできません。 • Favorites(お気に入り): これらのプロフィールはすべてのタイムシリーズ測定で共有されます。タイムシリーズ測定を作成する都度、再使用できます。 |
| H | プロフィール設定 | 選択したプロフィールの現在の設定が設定エリアに表示されます。このエリアを使ってプロフィールを編集します。 |

- プロフィールへのアクション** 編集または作成したプロフィールをプレビューまたは保存できます。保存したプロフィールは、Favorites(お気に入り)プロフィールまたは個々のTime Series(タイムシリーズ)プロフィールに追加できます。
- Preview(プレビュー) : プロファイルのプレビューを更新して、現在の設定でプロファイル曲線を表示します。
 - Save(保存) : 現在の設定でプロファイルを保存します。

4.3.3 時系列データの収集

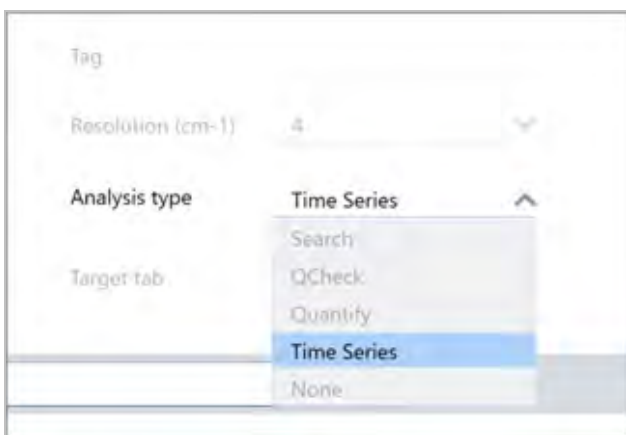
時系列分析では、TGA分析やGC分析のように、一連のデータを測定して経時変化を識別し、分析することができます。

データ収集の準備

時系列データを測定する前に、現在の測定設定を確認および編集します。

◆ 時系列分析の設定を表示、編集するには

1. Analysis type(分析タイプ)を**Time Series(時系列)**に設定します。



2. **More(詳細)**を選択すると、Time Series(時系列)分析に関するその他すべての設定が表示されます。



表4-1:表1時系列測定の設定

設定	説明
Start from external trigger(外部トリガーによる起動)	リモート起動によって時系列データ収集を自動で作動させる場合に、このオプションを選択します。 詳細については、お使いの分光分析装置またはその他アクセサリーの付属文書を参照してください。
Set measurement duration(測定時間設定)	測定時間を設定します。設定時間を過ぎると、自動で測定を終了します。任意に、設定時間よりも早く終了することもできます。
Stop measurement manually(手動で測定を終了)	手動で終了させるまで測定を継続します。
Delay between samples(サンプル間遅延)	通常、サンプルの測定間隔は、分解能、ミラー速度、スペクトルあたりのスキャン回数によって決まります。 このオプションを使用して、さらに長い測定間隔を手動で設定できます。サンプルの変化が非常に遅いことが明らかである場合や、収集するデータ数を制限したい場合などに有用です。
Profile selection(プロファイル選択)	このオプションを使用して、Gram-Schmidtプロファイルに加えて、Favorites(お気に入り)から自動でプロファイルを適用できます。
Heaters(ヒーター)	GCアクセサリーを使用する場合は、時系列設定にヒーター設定が含まれます。 Current Status(現在の状態)に、ヒーターがオフであること、または現在の温度が表示されます。 <ul style="list-style-type: none"> • Flow cell setpoint(フローセル設定値): 目的とするフローセル温度を設定します。 • Transfer line setpoint(トランスファーライン設定値): 目的とするトランスファーライン温度を設定します。 • Start heaters(ヒーター作動): 選択すると、ヒーターの電源が入ります。目的とする設定温度まで自動で上昇します。ヒーターの電源が入ると、このボタンの表示はTurn Heaters Off(ヒーターを切る)に変わります。 • Show status(状態を表示): 選択すると、ヒーターの状態を示す別のダイアログが開きます。ソフトウェアの他の機能を使用しながら、ヒーターを監視できるため便利です。

時系列測定を開始する

分析タイプとして時系列を設定し、測定設定を確認したら、分析を開始できます。

◆ 時系列データを測定するには

1. **Measure Time Series(時系列測定)**を選択します。
Target(ターゲット) タブにバックグラウンドのプレビューが開きます。
2. **Start Background Measurement(バックグラウンド測定を開始)**を選択して、測定が完了するまで待ちます。
3. **Start Time Series Measurement(時系列測定を開始)**を選択します。

4. ハウザーガイド

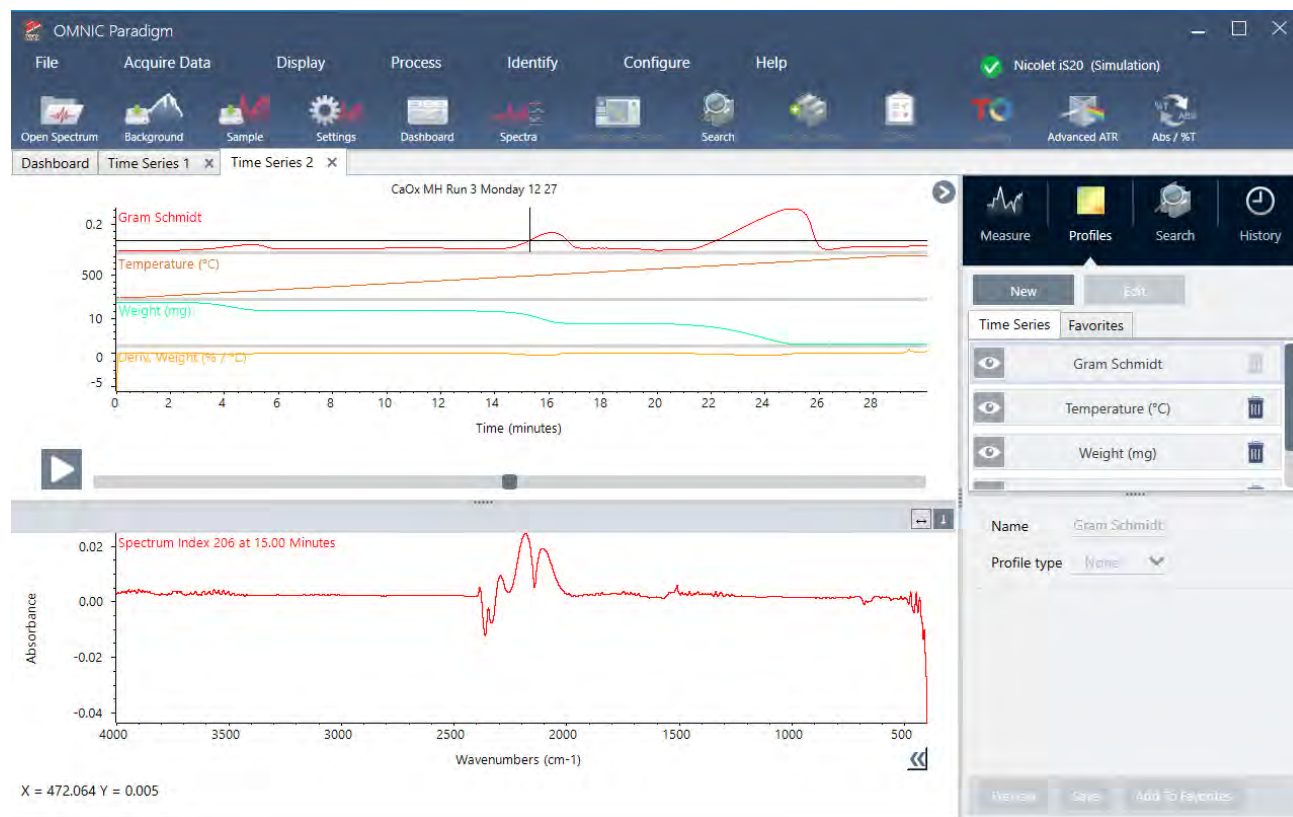
時系列測定が開始します。測定中、上ペインにGram-Schmidtプロフィールが、下ペインに直近のスペクトルが表示されます。

特定の時間を設定した場合は、その間測定が継続し、自動で終了します。その他の場合は、Stop(終了)を選択して測定を終了します。

測定中、プロフィールを作成して適用したり、都度、スペクトルを表示するポイントを選択したりできます。

4.3.4 TGAファイルのインポート

TA Instruments製分析計を使用してTGA分析を実行する場合は、一連の収集データにTGAデータをインポートして、重量、温度、および微分重量を結果に加味することができます。



◆ TGAデータをインストールするには、

1. 拡張子 .tga を付けた TGA データファイルを TGA 装置からエクスポートします。TGA データのエクスポートに関する説明については、分析計に同梱されていた文書を参照してください。
2. 一連のデータを表示させて、File(ファイル) > Time Series(時系列) > Import TGA File(TGAファイルのインポート)に移動します。
3. TGAファイルを選択し、Open(開く)を選択します。

Profiles(プロフィール)タブに温度、重量、および微分重量プロフィールが追加されます。

4.3.5 時系列分析の成分識別

時系列分析で成分識別サーチを実行することで、Thermo Scientific TGA-IRモジュールを使用して測定したTGAサンプルなど、時系列測定値の主成分を迅速に識別することができます。

成分識別サーチの設定

成分識別サーチの設定を指定できます。成分識別サーチでも、多成分サーチと同様のオプションを使用できます。

◆ 成分識別サーチを設定するには

1. **Identify(識別)**メニューに移動して、**Search Setup(サーチ設定)**を選択します。
2. **Time Series Component Search(時系列成分サーチ)**タブに移動します。
3. 設定内容を任意に変更して**Save(保存)**を選択します。

表4-1: 識別サーチの設定

設定	説明
Maximum number of search results (最大サーチ結果表示数)	検索するコンポジット結果の最大数を設定するために、このオプションを使用します。
Number of components(成分数)	それぞれのコンポジット結果から検索する成分数を設定するために、このオプションを使用します。
Search all libraries(全てのライブラリをサーチ)	お使いのすべてのライブラリまたはライブラリのサブセットのみを検索する際にこのオプションを使用します。検索対象のライブラリ数が多いほど、検索に時間がかかります。
Use full spectral range(全スペクトル領域を使用)	サーチに全スペクトル領域を使用場合に選択します。選択をクリアして、サーチの一つまたは複数の制限された範囲を指定します。複数の領域を使用して、サーチから別の領域を除外できます。例えば、完全吸収ピークの両側に領域を含めて、サーチから除外します。

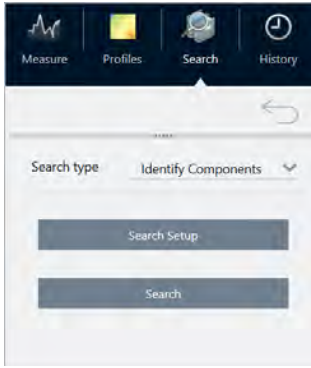
成分識別サーチの使用

時系列分析が完了した後、Search(サーチ)タブに移動して成分識別サーチを開始します。

◆ 成分を識別するには

1. Time Series(時系列)ビューから、**Search(サーチ)**タブに移動します。
2. Search Type(サーチの種類)リストから、**Identity Components(成分識別)**を選択します。

4. ハウソーガイド



3. Search(サーチ)を選択します。

サーチを開始します。結果が表示されます。サーチにかかる時間は、検索対象とするライブラリ数と時系列測定にかかった時間に左右されます。測定時間が長い場合や多くのライブラリを検索する場合は、サーチに数分間かかる可能性があります。

4. サーチが完了したら、結果を解析します。

図4-2: 成分識別サーチの結果の例



表4-3:成分識別サーチの結果

A プロファイルペインは、データ収集を行った全期間における全成分の合成スペクトル応答を表示します。Profile(プロフィール)リストから、ここに表示するプロフィールを選択します。

- B** コンボジット スペクトルペインは、プロファイルペインで選択した分解時間に関連付けられるスペクトルと、同じ分解時間で選択したマッチ率になるコンボジット スペクトルを表示します。
-
- C** ライブラリマッチプロファイルペインは、データ収集を行った全期間において確認された各主成分のスペクトル応答を表示します。これにより、各主成分がいつサンプルから蒸発したかが分かります。
-
- D** 結果ペインは、各サーチで確認されたコンボジット スペクトルおよび成分スペクトルを表示します。コンボジットは、マッチセットに含まれるすべての参照基準の計算値です。コンボジットに含まれる各参照基準の量は、選択した分解時間に成分プロファイルに含まれる量をベースにしています。選択したスペクトルは赤色になります。
-
- E** コンボジット結果に寄与する成分です。
-
- F** マッチ値は、マッチセットと系列データセットに含まれるすべてのスペクトルとの一致の度合いを表します。この値が大きいほど、よく一致しています。

4.3.6 タイムシリーズ測定 の作成

タイムシリーズ測定を作成するには、一連の測定値を選択して時系列で開きます。

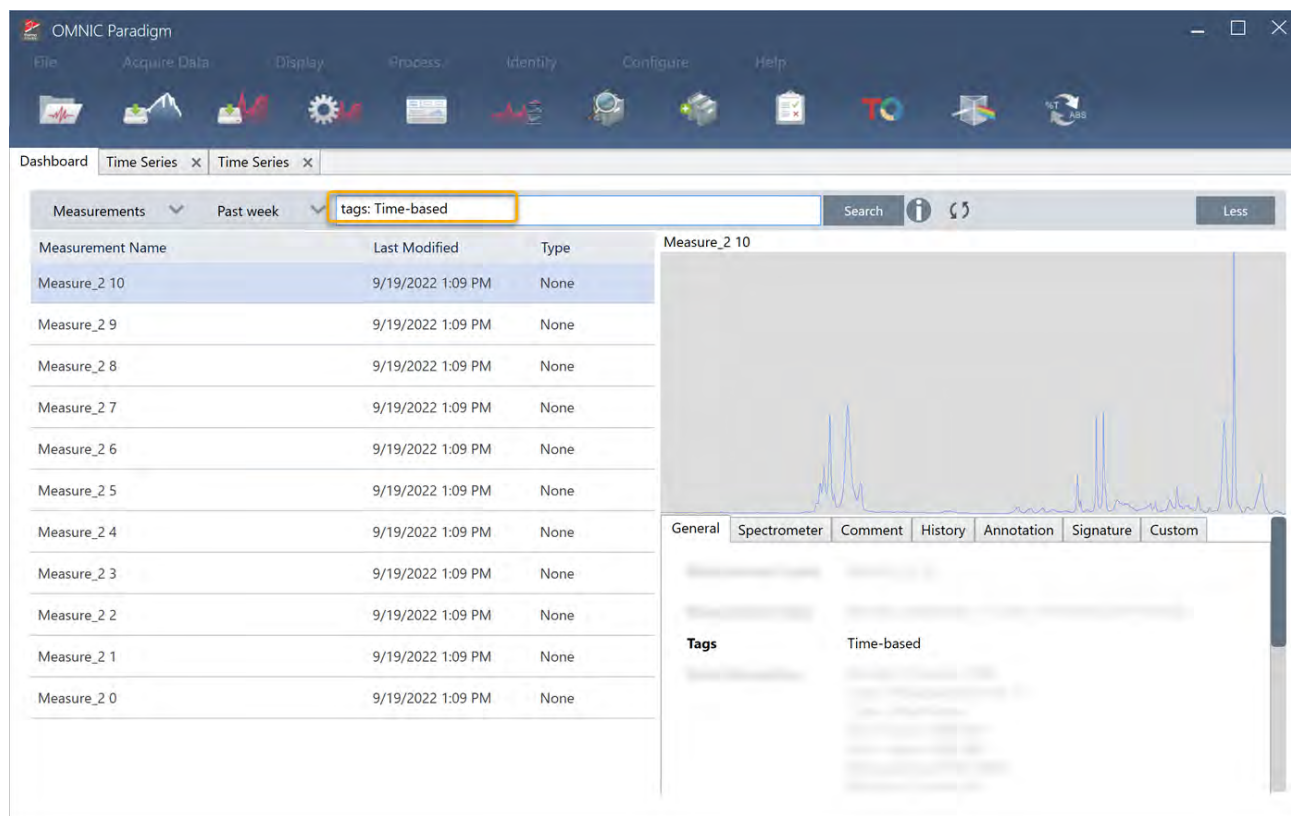
タグを使用すると測定値を簡単にフィルタリングできます。目的のすべての測定値が同じタグを持つ場合、そのタグを検索してすべての測定値を選択することで、タイムシリーズ測定を作成できます。ワークフローのTag(タグ) タイルで、ワークフローで収集した個々の測定値に自動的にタグが付けられます。

測定値リストのフィルタリングを行った後、1つの測定値を選択してCtrlキーを押しながらAキーを押すと、すべての測定値が選択されます。

ヒントキーワードに'tags'を使用することで、タグに限定して検索できます。

4. ハウソーガイド

図4-1: タグを使用した測定値のフィルタリング

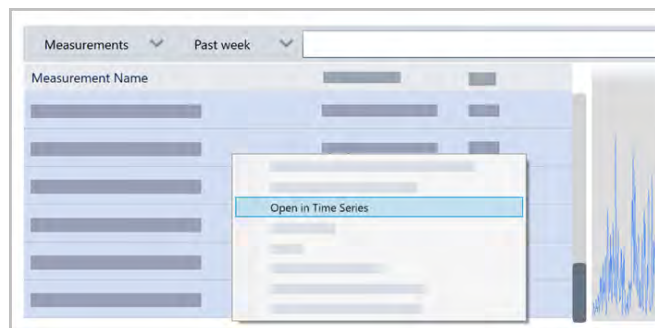


◆ タイムシリーズ測定 の作成:

1. 一連の測定値を選択して時系列で表示します。

1つの測定値を選択して、Shiftキーを押したまま一連の測定値を選択するか、Ctrlキーを押しながらAキーを押すと、すべての測定値が選択されます。

2. 測定値を右クリックして**Open in Time Series**(タイムシリーズウィンドウで開く)を選択します。



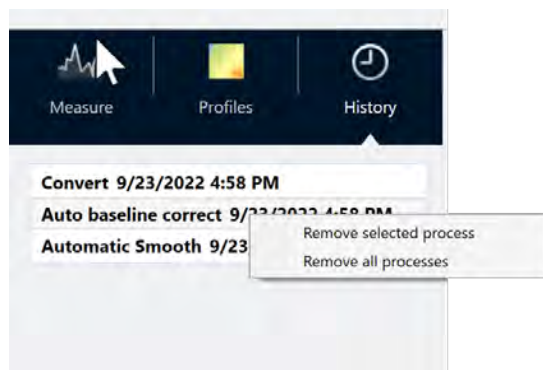
タイムシリーズ測定が開きます。

4.3.7 タイムシリーズデータの処理

標準的な測定値の場合、タイムシリーズデータ処理によってベースラインの補正、ATR測定値の考慮、スペクトル演算、データのスムージングなどを実行できます。タイムシリーズ測定でデータ処理を適用すると、すべてのスペクトルに1度で操作が適用されます。たとえば、Auto Baseline Correct(自動ベースライン補正)は、分析に含まれる各スペクトルのベースラインを補正します。

Display(表示)メニューのオプションを選択すると、すべてのスペクトルが選択した表示形式に変換されます。たとえば、分析にスペクトルの測定単位として透過率%と吸光度が混在する場合、Display(表示) > Absorbance(吸光度)を選択すると、すべての単位が吸光度になります。

History(履歴)タブで、過去の操作を表示または削除できます。



すべてのスペクトルを同じY軸単位に変換する

Display(表示)メニューのオプションを選択して、すべてのスペクトルを同じY軸単位に変換します。プロファイルを適用する前に、すべてのスペクトルに同じ表示単位が使用されていることを確認してください。スペクトルの単位が混在していると、プロファイルに誤った値や誤解を与える値が表示される可能性があります。

データ処理を削除する

データ処理を削除するには、History(履歴)タブで該当する操作を右クリックします。単一またはすべての操作を削除できます。

4.3.8 プロファイルの適用

プロファイルはある期間においてプロットした測定データを表します。プロファイルを使用してサンプルの経時変化を調べたり、その変化とTGA-IR実験温度などの外部要因との相関関係を調べたりできます。

プロファイルタイプ

プロファイルタイプ	説明
Reconstruct(再構築)	過去の測定値からタイムシリーズ測定を作成したときのデフォルトの表示です。Reconstruct(再構築)は、ある期間のスペクトルの総数をただ単にプロットします。

4. ハウソーガイド

プロファイルタイプ	説明
Correlation(コリレーション)	<p>Correlation(コリレーション) プロファイルは、各スペクトルをリファレンスペクトルと比較して、QCheck(Qチェック) 分析と同様にマッチ率を表示します。プロファイル曲線のY軸はコリレーション値を示し、1は完全一致を表します。</p> <p>Set Correlation Reference(コリレーションリファレンスの設定) を選択して、現在表示されているスペクトルのリファレンスを設定します。</p>
Area(面積)	Area(面積) プロファイルのY軸は、ピーク面積がどのように拡大または縮小しているかを示します。
Peak(ピーク)	Peak(ピーク) プロファイルはピーク高さの変化を表示します。
Area Ratio(面積比)	<p>Area Ratio(面積比) プロファイルは、2つのピークの比率の変化を示します。このプロファイルを使用して、2つのピークの間隔を特定します。1番目のピークを分子として、2番目のピークを分母として比を求めます。</p> <p>このプロファイルの「Intensity threshold(強度しきい値)」は、計算で使用する最小ピーク面積を指します。いずれかのピーク面積がこの最小値以下の場合、結果は計算値ではなく、0になります。これは、いずれかのピーク面積が0に近づくにつれて、極度に大きな値になることを避けられる点で便利です。</p>
Peak Ratio(ピーク比)	<p>Peak Ratio(ピーク比) プロファイルは、2つのピークの比を計算します。</p> <p>Peak Ratio(ピーク比) プロファイルの「Intensity Threshold(強度しきい値)」は、最小ピーク高さを指します。いずれかのピークが最小値以下の場合、プロファイルは比を計算せずに0をプロットします。これは、いずれかのピーク高さが0に近づくにつれて、極度に大きなまたは小さな値になることを避けられる点で便利です。</p>
Chemigram(ケミグラム)	Chemigram(ケミグラム) プロファイルは、特定の領域の未補正エリアを表示します。
Peak position(ピーク位置)	<p>Peak position(ピーク位置) プロファイルは、特定のピークがY軸方向にどのように連続して移動したかを示します。ピーク位置は波数で表します。</p> <p>このプロファイルの「Intensity threshold(強度しきい値)」は、最小ピーク高さを指します。ピーク高さがこの値以下の場合、NaN(数字ではない)が返され、曲線に小さい切れ目ができます。プロファイル曲線はこのポイントをスキップして、いずれの側のポイントもつなげます。大きな切れ目の場合、プロファイル曲線に目に見える空白ができます。</p>
Peak Width(ピーク幅)	<p>Peak Width(ピーク幅) プロファイルは、特定のピークの幅の変化を測定します。このプロファイルのY軸は、ピークの波数を示します。</p> <p>Height%(高さ%) は、ピークの測定箇所を決めます。たとえば、Height%(高さ%)を75%に設定すると、ベースラインから75%のピーク高さで幅を測定します。</p> <p>このプロファイルのIntensity Threshold(強度しきい値) は、最小ピーク高さを指します。ピーク高さがこの値以下の場合、プロファイルは幅を計算せずにNaN(数字ではない)を返します。プロファイル曲線はこれらの値をスキップして、いずれの側のポイントもつなげます。大きな切れ目の場合、プロファイル曲線に目に見える空白ができます。</p>
Quant(定量)	<p>Quant(定量) プロファイルは、TQ Analyst Quant法を使用してプロファイル曲線を計算します。Y軸の値は使用するQNTファイルによって異なります。</p> <p>Quantプロファイルを使用するには、Identify(分析) > Quant Setup(定量化設定)に行き、QNTファイルを選択します。その後、Quantプロファイルを作成します。</p>

プロフィールの作成と使用

プロフィールには、次の2種類があります。

- **Time Series(タイムシリーズ) プロファイル**: タイムシリーズ測定に固有のプロファイルです。単独で再作成しない限り、他の分析に再使用することはできません。
- **Favorites(お気に入り)**: これらのプロフィールはすべてのタイムシリーズ測定で共有されます。タイムシリーズ測定を作成する都度、再使用できます。

◆プロフィールの作成と適用

1. **Time Series(タイムシリーズ)** タブまたは**Favorites(お気に入り)** タブを選択します。
2. **New(新規)** をクリックします。
3. プロファイル名を入力します。名前は後からいつでも変更できます。

ヒント 特にQuant(定量) プロファイルの場合、後からプロフィール曲線がわかりやすいように、わかりやすい名前を付けることをお勧めします。

4. プロファイルタイプを選択します。各プロフィールの説明については、"[プロフィールタイプ](#)"を参照してください。
5. コントロールを使って設定を編集します。
6. プロファイル曲線の形状を確認するには、**Preview(プレビュー)** をクリックします。
7. 完了したら、**Save(保存)** をクリックします。

プロフィールはTime Series(タイムシリーズ) タブまたはFavorites(お気に入り) タブのリストに追加されます。プロフィール曲線はプロフィールビューに追加されます。

プロフィールを削除して消去するには、**Delete(削除)** を選択します。

プロフィールの名前、タイプ、設定を変更するには、**Edit(編集)** を選択します。

4.3.9 タイムシリーズレポートの作成

レポートを印刷または保存して、分析結果の記録を残すことができます。タイムシリーズ測定レポートには次の項目が含まれます。各項目は任意です。

- **タイトル**: レポートのタイトルです。
- **プロフィール**: 適用されているすべてのプロフィールのイメージが表示されます。レポートには、作成時に使用しているタブに応じて、タイムシリーズプロフィールまたはお気に入りプロフィールのみが表示されます。
- **スペクトル**: Create Report(レポートの作成) ウィンドウに移動したときにどのスペクトルが表示されたかを示します。

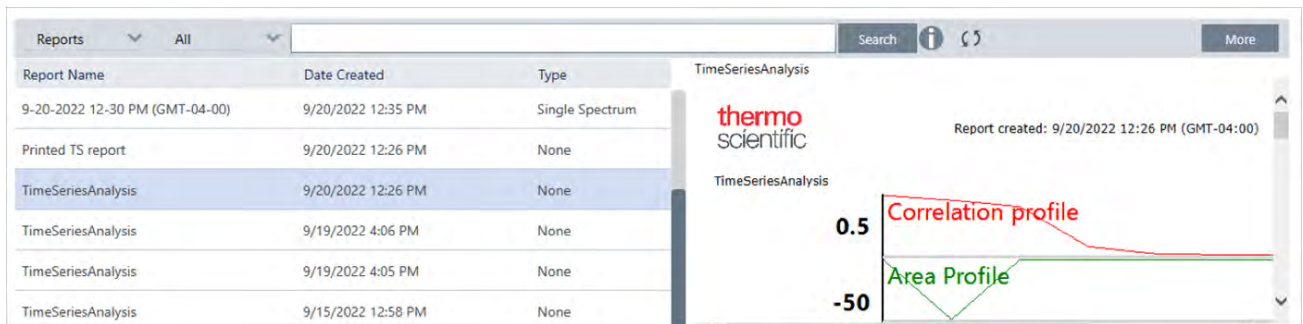
4. ハウザーガイド

- **タイムシリーズ情報**: 分析を実施したユーザー名、分析日時、含まれるスペクトル数など分析の詳細を示します。
- **署名ボックス**: 署名ボックスを入れると、署名、日付、その他コメントを記載するスペースが追加されます。

◆タイムシリーズ測定レポートの作成:

1. Time Series(タイムシリーズ測定) タブから、**File > Create Report(ファイル>レポートの作成)**に行きます。
2. レポートのタイトルを入力して、レポートのフォーマットを選択します。印刷済みレポートも保存されます。
3. **Options(オプション)**を選択して、レポートに含める項目をカスタム設定します。
4. **Create(作成)**を選択します。

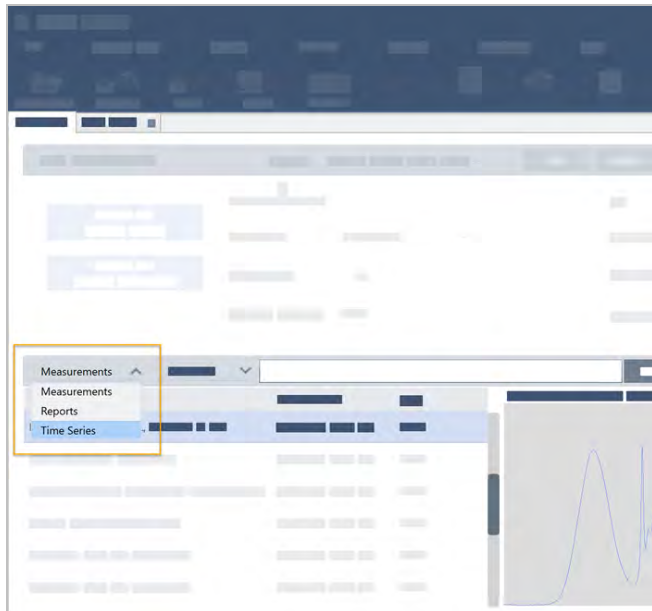
保存したレポートは、ダッシュボードに他のレポートと一緒に表示されます。



保存したタイムシリーズレポートを表示するには、ダッシュボードのReports(レポート)を表示します。

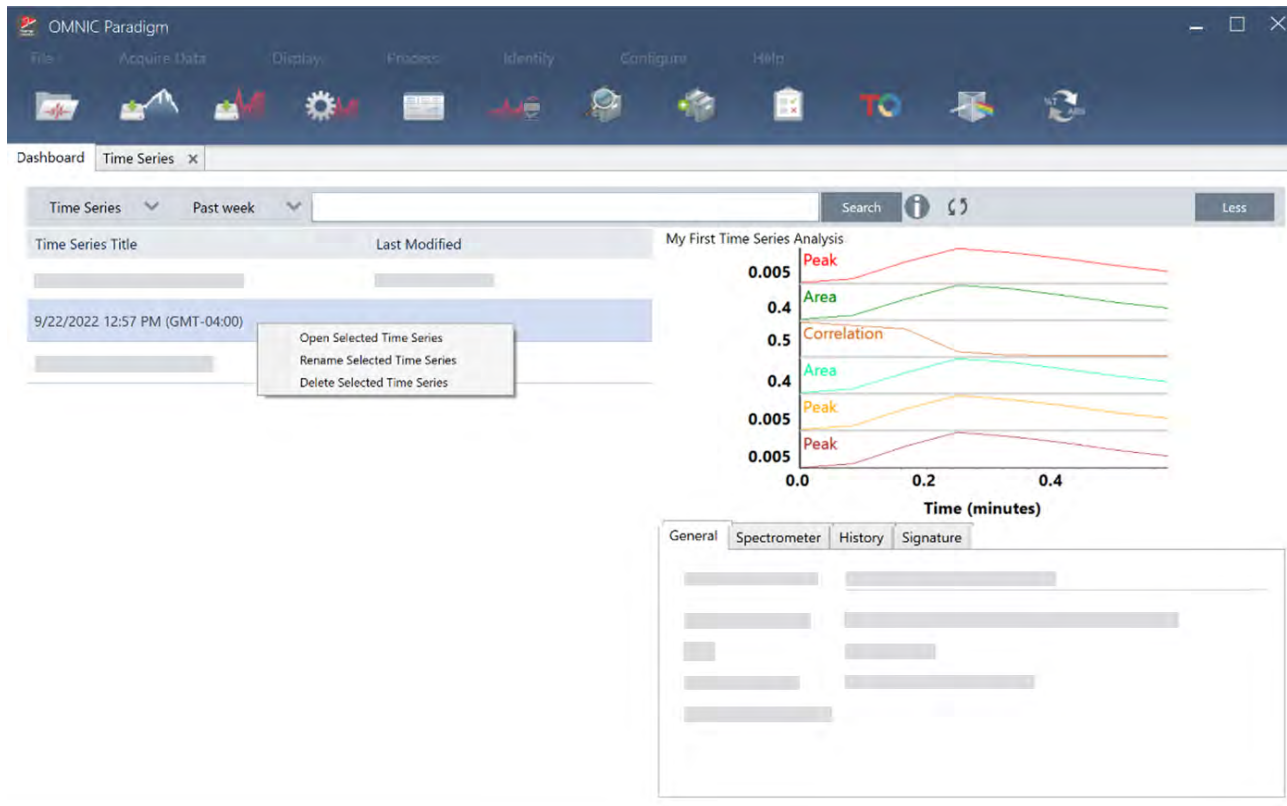
4.3.10 タイムシリーズ測定を管理

過去のタイムシリーズ測定を一覧表示し、管理するには、ダッシュボードのTime Series(タイムシリーズ)を選択します。



4. ハウソーガイド

過去の分析を一覧表示したり、開いて名前を変更、削除できます。More(詳細)オプションを選択すると、一般情報、処理履歴、デジタル署名の詳細(あれば)などその他の詳細を表示できます。



4.4 顕微分光法

このセクションでは、OMNIC ParadigmソフトウェアでFTIR顕微鏡に使用される機能について説明します。

4.4.1 サンプルの表示

ステージを移動し、サンプルにフォーカスを合わせる

最も簡単な方法は、モザイクキャプチャーリストからおおよその撮影場所を選択し、撮影前にオートフォーカスを行うオプションを選択することで、サンプルに焦点を合わせることができます。これらのオプションを選択すると、セッションを開始したときに、ステージが自動的に正しい位置に移動し、サンプルにフォーカスが合ってモザイクがキャプチャーされます。

別の場所に移動し、新しい領域にフォーカスを合わせたい場合は、ソフトウェアまたはオプションのジョイスティックのいずれかを使用してステージを移動し、サンプルにフォーカスを合わせることができます。

ステージの移動には、OMNIC Paradigmソフトウェアまたはオプションのジョイスティックを使用します。ステージは絶対に手動では動かさないでください。

ソフトウェアを使う場合

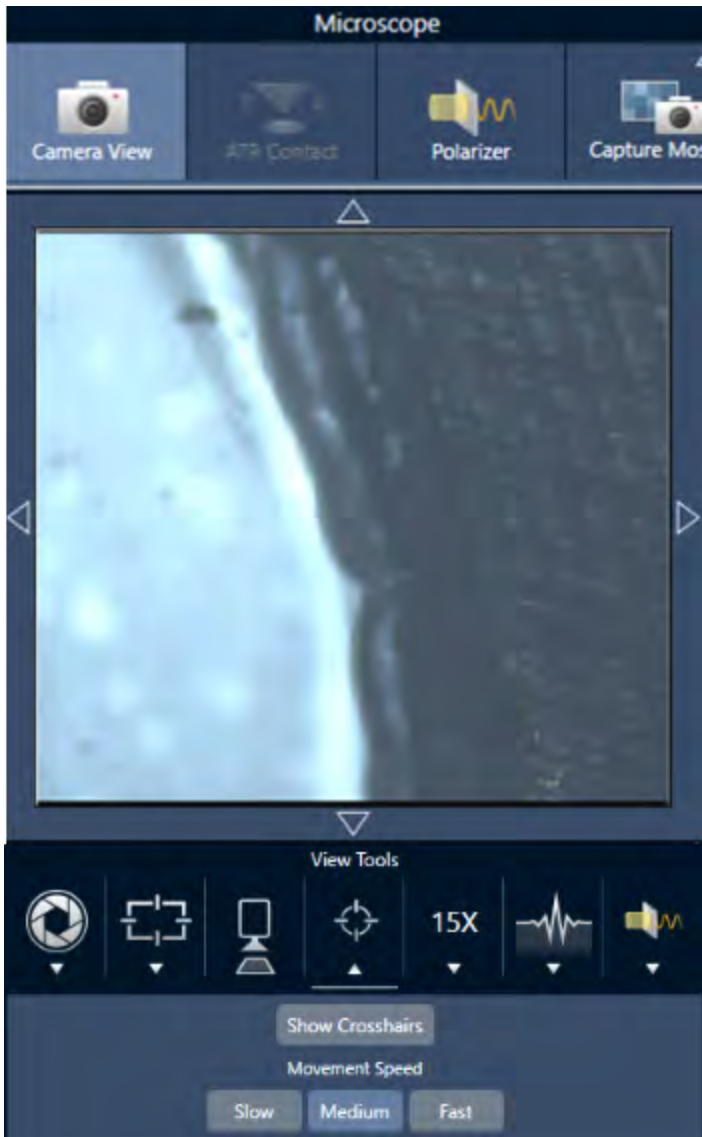
セッションビューで、Camera View(カメラビュー)を開き、サンプルを確認します。

4. ハウザーガイド

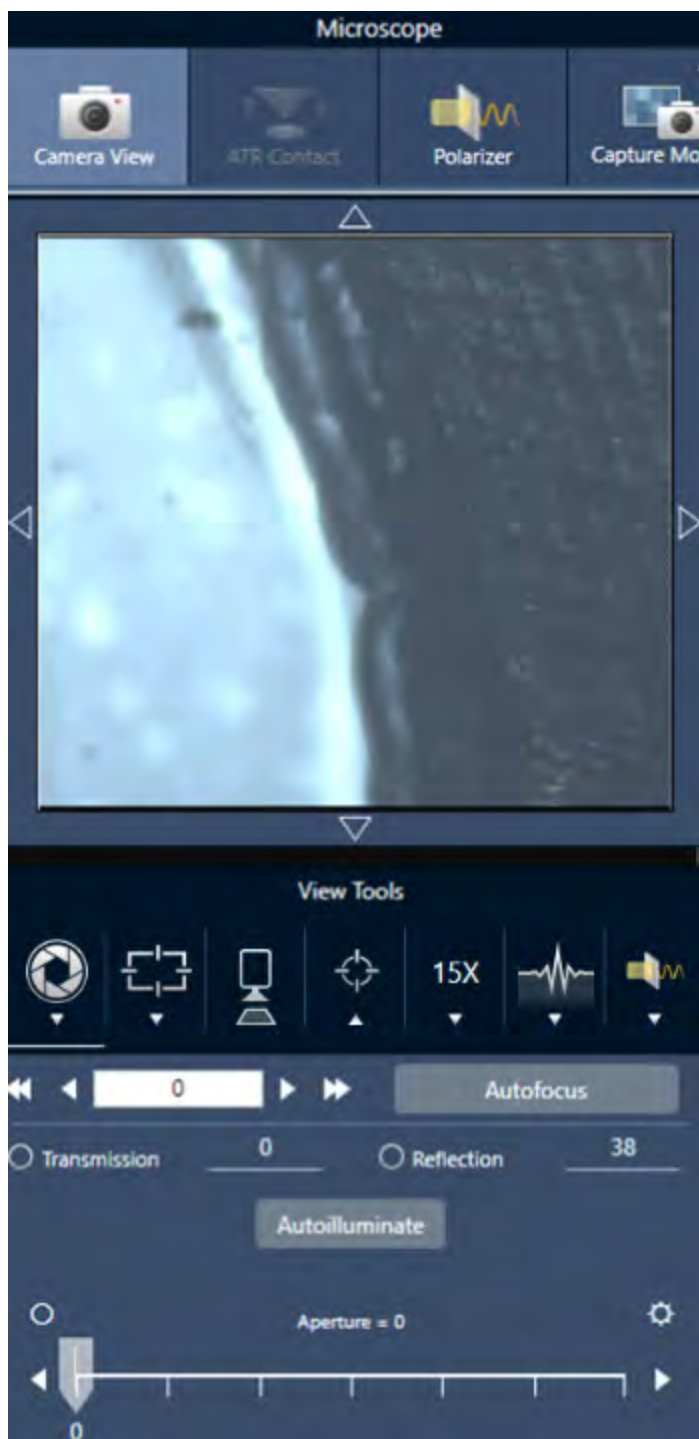
- ステージを水平方向に移動させるには、Camera View(カメラビュー)を開き、ステージツールを開きます。

サンプル画像の横と上下の矢印をクリックすると、ステージが移動します。移動速度を変更すると、クリックするたびにステージが移動する距離を変更できます。

ライブビデオ画像の内側をダブルクリックすると、その位置でステージが中央に配置されます。



- ステージを垂直方向に移動させるには、Camera View(カメラビュー)を開き、フォーカス設定を開きます。ステージを下に動かすには、左右矢印をクリックします。



オートフォーカス

サンプルに自動的にピントを合わせるには、Autofocus(オートフォーカス)をクリックします。ソフトウェアがステージを上下に動かして、最適なフォーカスを探します。オートフォーカスは、視覚的なコントラストが高い領域で最も効果的に機能します。一部の低コントラストのサンプルや複数の焦点面を持つサンプルでは、オートフォーカスがうまく機能しない場合があります。

オートフォーカスのヒント

4. ハウザーガイド

- 最適に見えるように照度を調整する。照明が高すぎたり低すぎたりすると、オートフォーカスが適切なピントを見つけるための十分なコントラストが得られない場合があります。
- 40倍の対物レンズを手動フォーカシングで使用している場合、フォーカシングが0の位置に設定してあるのを確認します。フォーカシングの位置が正しくない場合、オートフォーカスの妨げになることがあります。

ジョイスティックの使用

ジョイスティックでステージを水平 / 垂直に動かすことができ、移動速度コントロールで素早く、または慎重に移動することができます。Camera View(カメラビュー) やオプションのアイピースで位置を判断してください。

- **ステージを水平に移動させるには**、ジョイスティックを前後左右に押すか引くかします。
- **ステージを上下に動かすには**、ジョイスティックを時計回りに回転させるとステージが上に、反時計回りに回転させるとステージが下に移動します。

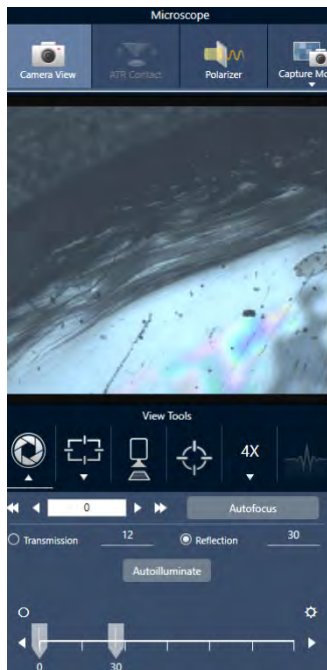
スピードセクターで移動速度を変更します。

サンプルを照明で照らす

ソフトウェアまたはオプションのジョイスティックを使用して、サンプルに届く光の量をコントロールできます。反射照明コントロールでサンプルの上からの光を設定し、透過照明コントロールでサンプルの下からの光を設定します。

ソフトウェアを使う場合

ソフトウェアで照明を制御するには、Camera View(カメラビュー)を開きます。Transmission(透過)またはReflection(反射)のいずれかを選択し、スライダーをドラッグして希望の照明設定にします。また、実際に値を入力することもできます。



自動照明

Autoilluminate(自動照明)をクリックすると、ソフトウェアが自動的にサンプル照明を最適化します。

ジョイスティック(オプション)を使う場合

オプションのジョイスティックには、透過照明と反射照明を設定するための2つの操作ノブがあります。Camera View(カメラビュー)またはオプションのアイピースを使用して、サンプル照明を確認します。ノブを回転させ、光をコントロールします。

アパーチャの調節

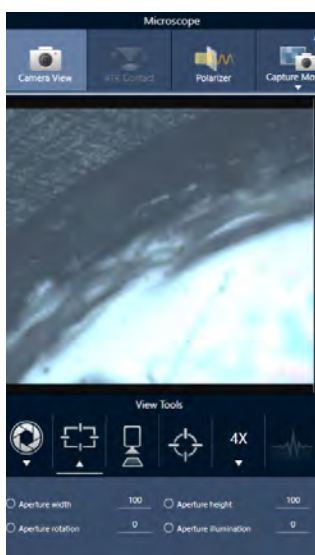
アパーチャは、赤外線ビームがサンプルと相互作用する領域を定義します。これにより、赤外線エネルギーが隣接するサンプル材料ではなく、関心領域のみに当たるようになり、関心領域の端を通過するわずかな回折放射が検出器に到達しないようになります。

粒子分析中、ソフトウェアはすべての粒子に対して理想的なアパーチャのセットを見つけ、サンプル測定中にそのアパーチャを使用します。

ダッシュボードのAdvanced settings(詳細設定)エリアまたはCamera View(カメラビュー)で、アパーチャを手動で設定します。

◆ アパーチャのサイズ、形状、回転を調整するには、

1. Camera View(カメラビュー)を開き、Aperture settings(アパーチャの測定条件)を選択します。



2. スライダーを使用するか、正確な値を入力して、アパーチャの高さ、幅、回転を調整します。

注記 アパーチャを視覚化するには、アパーチャを通過する明るい青色の長方形の光が見えるようになるまで照明を調整します。

4.4.2 測定条件の準備

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)には、FTIR顕微鏡でどのようにサンプルを見て測定するかの基本および詳細設定があります。

4. ハウソーガイド

基本設定は頻繁に使用され、実行する分析のタイプを決定します。詳細設定は頻繁に調整する必要がなく、どのように装置のハードウェアを構成するか、およびサンプルのスペクトルを生成するためにどのようにデータを処理するかに関するものです。

基本設定

サンプルの位置をFTIR顕微鏡に設定後、New Measurement(新規測定) ペイン内に基本設定があります。

図4-1: 顕微鏡の基本設定

表4-2: 顕微鏡の基本設定

設定	説明
Autofocus before capture(キャプチャー前にオートフォーカスをする)	セッションを開始したら、自動的にサンプルにフォーカスするかを選択します。 このオプションを選択しない場合、セッションを開始する前にオプションのジョイスティックとアイピースを使って手動でサンプルにフォーカスを合わせるか、モザイクキャプチャー設定をCustom Mosaic(カスタムモザイク)に変更してください。セッション開始後、Camera View(カメラビュー)を開いて、モザイクをキャプチャーする前に手動でサンプルにフォーカスを合わせます。
Session name(セッション名)	セッションデータの名前。名前は保存したデータに使用され、もしSecurity Suite(セキュリティスイート)ソフトウェアがインストールされているなら監査証跡で使用されます。規定名は、セッションが開始されたの日付と時間です。
Final format(出力フォーマット)	収集されたデータに使用される単位を決定します。Display(ビュー/表示)メニューでコレクションした後、データを別のY軸単位に変換できます。
Sample scans(サンプルスキャン)	各サンプルポイントで収集されたスキャン数です。スキャン数が少ないと、データコレクションは速くなるが、データのノイズが多くなる可能性があります。
Mosaic capture(モザイクをキャプチャー)	セッションを開始したとき、モザイクタイプを自動的にキャプチャーするか特定します。 モザイクをキャプチャーせずにセッションを開始するには、<No Mosaic(モザイクなし)>を選択します。 極端に大きなモザイクは、保存するためにハードディスクの容量を必要とし、収集に時間がかかります。ディスク容量と測定時間を節約するために、分析に必要なサンプル部分のモザイクのみをキャプチャーします。

設定	説明
Camera profile(カメラプロフィール)	<p>分析するサンプルタイプに合った最適のカメラプロフィールを選択します。カメラプロフィールは明るさ、コントラスト、ホワイトバランスなどを設定し、サンプルの最適なイメージを提供します。</p> <p>多くのサンプルは、反射率の高いバックグラウンドの上に準備されますが、それ自身は反射率が高くはありません。サンプル表面と対象エリアに合った最適なオプションを選択するようにしてください。</p> <ul style="list-style-type: none"> • High Reflective(高反射率): サンプルは、通常、光源(近くの照明や太陽光など)に当たると、目に見える反射を起こします。これらのサンプルにはガラススライド、光沢紙、よく磨かれた金属などが含まれます。 • Matte(マット): 非常に暗い色のプラスチック、ゴム、段ボール、紙、布など、表面が粗く、目に見える反射が少ない暗い色の材料には、このオプションを選択します。 • Diffuse(拡散): 反射率が中程度または低く、色が薄い材料には、このオプションを選択します。淡色のプラスチック、光沢のない紙、医薬品の錠剤などのサンプルには、「Diffuse(拡散)」を使用します。 <p>適切なカメラプロフィールを見つける</p> <p>カメラプロフィール設定がサンプル材料に適しているかを確認するには、サンプルイメージにフォーカスを合わせ、自動または手動コントロールで照明を調整します。</p> <p>照明数は、15~70の間に行ってください。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 15未満だと、カメラ設定は高反射率プロフィールに調整する必要があります。 • 70を超える数値の場合、カメラプロフィールは拡散またはマットに調整する必要があります。
Tag(タグ)	<p>セッションにTag(タグを追加します。タグは、保存したセッションを後で検索したり、フィルタリングしたりするのに便利です。</p>
Resolution(分解能)	<p>写真やビデオの分解能と同様に、分解能が高いほど、スペクトルデータの詳細が細かくなります。例えば、分解能が高いと2つの非常に近いピークが区別されますが、分解能が低いとそれらが組み合わせられる可能性があります。</p> <p>値が小さいほど、より優れた分解能をもたらしますが、測定に時間がかかります。</p>
Profile(プロフィール)	<p>エリア、ラインやポイントのセットを測定した後、化学的データを表示するために使用するデフォルトのプロファイルです。データを測定後に、プロフィールは変更できます。各プロフィールについての詳細は、Apply Profiles(プロフィールの適用)を参照してください。</p>
Analyze using(使用して分析)	<p>サンプル測定に使用される手法です。選択した技法によって、セッション中に使用できる設定が決まります。</p> <ul style="list-style-type: none"> • Reflection(レフレクション) • Transmission(透過) • ATR
Analyze particles(粒子分析)	<p>粒子分析を行うか選択します。選択した場合、Session(セッション)ビューでParticle analysis(粒子分析)ツールが使用できます。このオプションはセッションを開始する前に選択する必要があります。</p>
Enable Polarizer acquisition(偏光板獲得を有効にする)	<p>データコレクション中に、偏光板および分析器を使用するかどうかを選択します。セッション中に偏光板を有効にすることも可能です。</p>

設定	説明
Step size(ステップサイズ:)	ステージがサンプルポイント間を移動する距離で、単位はマイクロメートルです。ステップサイズを小さくすると、エリア内のより多くのポイントでサンプルを測定できますが、測定に時間がかかり、保存するスペースも必要です。
Aperture height and width(アパーチャーの高さと幅)	アパーチャーは、サンプルの不要な部分を測定から除外し、不要な光が検出器に到達するのを防ぐために使用されます。 アパチャは、測定中に赤外線ビームが通過する長方形の窓のようなものと想像してください。 Camera View(カメラビュー) でもアパチャの高さ、幅および回転角度を設定できます。

バックグラウンドと詳細設定

バックグラウンドと詳細設定エリアは、データの収集と処理方法について追加のオプションが用意されています。

BACKGROUND

Use the fixed reference location on the RaptIR sample holder

Match sample scans Measure background before each region

Set background scans 16 Measure background once for entire sample

ADVANCED

Zero fill 2 Optical velocity (cm/sec) 6.329 Gain 1

Apodization Norton Beer Strong Beamsplitter KBr Sample spacing 2

Mapping speed High speed Detector MCT/A

Range limits Max 4000 — Min 650 Prompt for session name Atmospheric suppression

表4-3:顕微鏡のバックグラウンド設定

設定	説明
Use the fixed reference location on the RaptIR sample holder RaptIR(サンプルホルダーにある固定参照位置の使用)	RaptIRサンプルホルダーには、透過分析および反射分析のための基準点が入蔵されています。このオプションを選択して、最初のモザイクをキャプチャーした後、ステージを自動的に参照位置に移動させます。このオプションは、Mosaic Capture(モザイクキャプチャー) リストのCustom Mosaic(カスタムモザイク) を選択していると、利用できません。

4. ハウソーガイド

設定	説明
Match sample scans (サンプルのスキャン回数と合わせる)	選択した場合、バックグラウンド測定に使用するスキャン回数は、サンプルに使用するスキャン回数と同じになります。
Set background scans (バックグラウンドスキャンの設定)	選択すると、バックグラウンドのスキャン回数を変更することができます。
Measure background before each region (各領域測定前にバックグラウンドを測定)	選択すると、ソフトウェアは、サンプルの各新規領域の前に、新しいバックグラウンドを測定します。例えば、サンプル測定に3つのエリア領域がある場合、このオプションを選択すると、ソフトウェアは各エリア前に新規のバックグラウンドを収集します。同じ測定条件を使用する一連のポイントは、ひとつの領域としてみなされることに注意してください。
Measure background once for entire sample (サンプル全体のバックグラウンドを一度測定)	このオプションを選択すると、測定条件が変更されたときのみ、新規のバックグラウンドを収集します。例えば、このオプションを選択した場合、1回のサンプルコレクションで3つのエリアを測定し、それらがすべて同じ測定条件を使用する場合、ひとつの背景のみが収集されます。

詳細設定を以下に示します:

表4-4:顕微鏡の詳細測定条件

設定	説明
Zero fill (ゼロフィリング)	<p>収集されたデータポイント間でデータポイントを補間します。これは、データの実際の分解能を高めることはありませんが、シャープな外形を滑らかにし、スペクトル線の形状を改善することができます。</p> <p>サンプルスペクトルとバックグラウンドスペクトルは、同じゼロフィリング設定で収集してください。</p> <p>オプション</p> <ul style="list-style-type: none"> • None (なし): ゼロフィリングは行われません。 • 1: 1つのデータポイントが収集された各データポイント間に追加されます • 2: 3つのデータポイントが収集された各データポイント間に追加されます
Optical velocity (ミラー速度) (cm/sec)	干渉計のミラー速度を測定します。初期値は、使用している検出器のタイプによって決定され、特定のスペクトロメーターでのみ変更可能です。
Gain (ゲイン)	検出信号の増幅率を設定します。ゲインを高くすると信号が大きくなりますが、ノイズも増えません。最適なゲインは、実験によって異なります。

設定	説明
Apodization(アポダイゼーション)	<p>アポダイゼーションとは、インターフェログラムが無限のデータセットではないために発生する可能性のあるピークサイドローブを低減または削除するために、シングルビームデータに適用される数学関数を指します。</p> <p>強力なアポダイゼーション関数は、ノイズをさらに低減しますが、データ分解能を低下させ、ピークを拡大させる可能性もあります。</p> <p>各オプションの説明については、"アポダイゼーション関数"を参照してください。</p>
Beamsplitter(ビームスプリッター)	<p>装置に複数のビームスプリッターがインストールされている場合は、ここでそのうちの1つを選択することができます。ABXがスペクトロメーターにインストールされているときは、ABXを最初に構成し、ここで使用するビームスプリッターを選択します。</p>
Sample spacing(サンプル間隔)	<p>サンプル間隔とは、インターフェログラムのサンプル頻度を意味します。</p> <p>サンプル間隔を低く設定すると、より広い周波数範囲を測定できます。サンプル間隔を高く設定すると、ミラーが高速で移動して赤外線測定が追いつかないような、非常に高速な光速で測定する場合に便利です。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 0.5: IR信号は、ゼロクロス毎とレーザー信号波のトップとボトムで測定されます。この設定により、より広いデータ範囲が可能になります。 • 1: IR信号は、レーザー波長のゼロクロスごとに測定されます。7899波長を超える範囲を拡張する場合に使用します。 • 2: IR信号は、1つおきのゼロクロスで測定されます。これは非常に速い光速を使用する場合に有効ですが、最大測定範囲は7900以下でなければなりません。
Mapping speed(マッピング速度)	<p>ほとんどの用途では高速が良いですが、データの品質を向上させる必要がある場合はNormal(ノーマル)を試してください。</p>
Detector(検出器)	<p>現在インストールされている顕微鏡検出器を表示します。</p>
Range Limits(領域範囲)	<p>収集されたスペクトルに含まれる周波数領域範囲を波数で設定します。</p>
Prompt for session name(セッション名の入力)	<p>選択した場合、新しいセッションを開始するたびに、新しいセッション名を入力するためのプロンプトが表示されます。</p>
Atmospheric suppression(大気補正)	<p>収集したスペクトルに対する水蒸気と二酸化炭素の影響を抑制します。</p> <p>一般に、現在のバックグラウンドスペクトルを使用して大気条件を制御することをお勧めします。バックグラウンドを頻繁に測定する場合や大気条件の変化が遅い場合は、この機能を使用する必要はありません。</p> <p>この機能は、バックグラウンドを頻繁に測定しない場合や大気条件が急速に変化する場合にのみ使用してください。</p>

4.4.3 モザイクキャプチャー

モザイクとは、サンプル表面の視覚的イメージです。このカメラは小さな高解像度の画像をいくつもキャプチャーし、それらをつなぎ合わせて一つのモザイクを作り、分析に使えるサンプル表面の大きなイメージを得ることができます。モザイクは分析のための作業スペースとして機能し、関心領域を探索したり、IRデータコレクションのための領域やポイントを指定したりすることができます。

一般に、サンプルを分析する場合、4倍や10倍の対物レンズで低倍率のモザイクイメージを収集し、必要に応じて設定を調整した後、15倍や30倍の対物レンズでより小さな領域の高倍率のモザイクイメージをキャプチャーします。モザイクをキャプチャーしたら、領域を描画したり、粒子を選択したりして、データの計測を開始します。

モザイクのキャプチャーは、セッション開始時に自動的に行うか、Session(セッション)ビューから手動で行うことができます。

モザイクのタイプ

モザイクには次の2種類があります。

- 低倍率(4xまたは10x) 低倍率モザイクをキャプチャーすることによって、分析をはじめます。これは、サンプル表面のより大きな概要を把握することができます。
- 高倍率(15xまたは30x) 必要な場合、より小さいエリアの高倍率モザイクをキャプチャーします。高倍率モザイクは質の良い画像を提供しますが、収集するのに長い時間がかかります。

自動および手動キャプチャー

セッションが始まった時に、自動的にモザイクをキャプチャーすることも、最初に測定条件を調整してから手動でモザイクをキャプチャーすることもできます。

低倍率モザイク

◆ モザイクを自動的にキャプチャーする

1. Dashboard(ダッシュボード)の、**Mosaic Capture(キャプチャーモザイク)** リストからオプションを選択します。もし「Custom Mosaic(カスタムモザイク)」以外のオプションを選ぶと、セッションをはじめた時に、ソフトウェアはモザイクを自動的にキャプチャーします。
2. 通常、セッションを始める前に**Autofocus before capture(キャプチャー前にオートフォーカスをする)**を選択します。このオプションを選択すると、ソフトウェアは自動的にサンプルにフォーカスを合わせ、最適なモザイクが得られるように照明を最適化します。
3. **Start Session(セッション開始)**を選択します。セッションが始まり、ソフトウェアはモザイクを自動的にキャプチャーします。

◆ モザイクを手動でキャプチャーする

1. セッションを始めていない場合、ダッシュボードでMosaic capture(モザイクキャプチャー)リストから**Custom Mosaic(カスタムモザイク)**を選択します。次に**Start Session(セッション開始)**をクリックします。
2. Session(セッション)ビューで、Camera View(カメラビュー)を使って、ステージを任意の位置に移動します。
3. 低倍率の対物レンズが選択されているのを確かめてください。
4. **Capture Mosaic(モザイクキャプチャー)**をクリックします。

4. ハウザーガイド

5. 低倍率モザイクを追加するには、Capture Mosaic(モザイクキャプチャー)ツールが低倍率対物レンズを表示しているのを確かめてください。
 - a. Mosaic(モザイク)ツールを選択し、キャプチャーするエリアを描画します。
 - b. Capture Mosaic(モザイクキャプチャー)をクリックします。

高倍率モザイク

高倍率モザイクをキャプチャーできる前に、低倍率モザイクをキャプチャーしなければなりません。

◆ 高倍率のモザイクをキャプチャーする

1. Session(セッション)ビューで、フローティングToolbar(ツールバー)からMosaic(モザイク)ツールを選択します。
2. 低倍率モザイクで、クリックとドラッグをして矩形を描画します。これが、高倍率モザイクをキャプチャーするエリアです。
3. まだ選択されていない場合、Change Objective(対物レンズの変更)をクリックして、高倍率オプション(通常15x)を選択します。
4. Capture Mosaic(モザイクキャプチャー)を選択します。

高倍率モザイクは、その前のモザイクの上に描画され、Results(結果)パネルのMosaic(モザイク)タブにサムネイル画像を追加します。

Snapshots(スナップショット)

スナップショットとは、Camera View(カメラビュー)から見たサンプル表面の1枚の画像のことです。

◆ スナップショットのキャプチャー

1. Session(セッション)ビューで、Camera(カメラ)ビューを開きます。
2. Snapshot(スナップショット)ツールをクリックします。スナップショットがMosaics(モザイク)タブに追加されます。



モザイクの探索

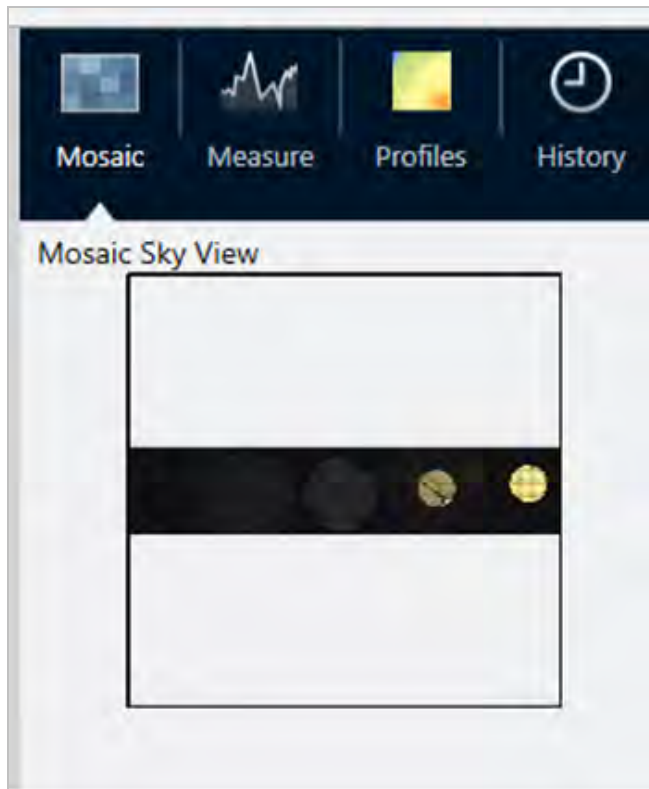
Navigation(ナビゲーション)ツールを使って、モザイクの様々なエリアを見たり、拡大・縮小できます。

モザイクスカイビュー

Sky(スカイ)ビューは、モザイクのハイレベルイメージを表示します。拡大してモザイクを表示したとき、Sky(スカイ)ビューはサンプル表面のどこを見ているか表示します。

4. ハウザーガイド

Sky(スカイ)ビューを使用して、モザイクをナビゲートすることもできます。Sky(スカイ)ビューのエリアをクリックすると、その場所に移動します。拡大・縮小するフォーカスした領域の境界をクリックしてドラッグします。



ナビゲーションツール

- 拡大・縮小
 - マウスのスクロールウィールを使って、モザイクを拡大・縮小します。
 - 少し拡大したら、モザイクのSky(スカイ)ビューで拡大することができます。Sky(スカイ)ビューのフォーカスした領域の境界をクリック・ドラッグして拡大・縮小します。
- モザイクの他のエリアを表示するには、Pan(パン)ツールを選択します。Pan(パン)ツールを選択したあと、クリック・ドラッグでモザイク画像を移動します。

4.4.4 サンプルの分析

バックグラウンドスペクトルの測定

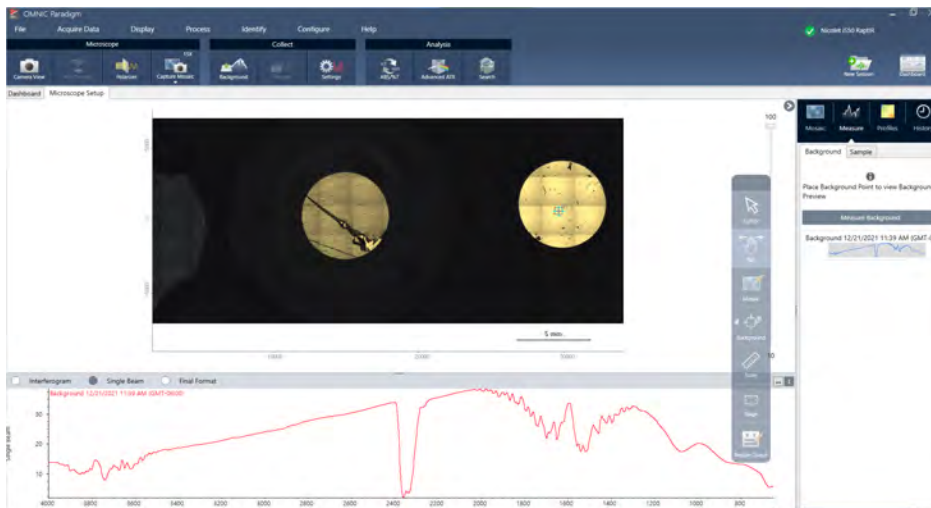
サンプルデータを収集する前に、バックグラウンドを測定する必要があります。バックグラウンドはサンプルがない状態での装置のサンプリング条件を測定したものです。バックグラウンドとサンプルを測定した後、最終サンプルスペクトルを作成するために、サンプルデータはバックグラウンド測定に対して比率化されます。

使用する最良の位置または材料は、サンプルタイプや適用に応じて変化します。下記の表は、バックグラウンド収集のためのいくつかの提案です。

サンプルタイプと適用	バックグラウンドの提案
透過光、空気中に浮遊するサンプル	空気
透過光、皿に乗っている塩のサンプル	サンプル材料がない塩の乗っている皿のレリア
透過光、圧縮セル内のサンプル	同じ圧縮セル内のKBr(または他のハロゲン化物塩)の結晶がサンプルに隣接している状態
鏡面反射	鏡または磨かれた金属
拡散反射	粉碎したKBr、炭化ケイ素の紙など、粗く、赤外線を吸収しないもの
反射-吸収	鏡または磨かれた金属、サンプル材料がないサンプルサポートのエリア
ATR	空気

◆ バックグラウンドスペクトルの測定

1. セッションを開始して、低倍率モザイクをキャプチャーします。
2. フローティングツールバーから、Background(バックグラウンド)ツールを選択します。
3. バックグラウンドを測定したい位置でモザイクをクリックします。スペクトラペインにライブのシングルビームスペクトルが表示されます。バックグラウンドポイントを移動するには、モザイクを再びクリックします。
4. バックグラウンドのシングルビームスペクトルに満足したら、Accept Background(バックグラウンドの受け入れ)をクリックします。
5. Measure Background(バックグラウンドの測定)をクリックします。バックグラウンドスペクトルが収集されます。完了すると、スペクトルのBackground(バックグラウンド)タブに追加されます。



バックグラウンド測定が完了したら、エリア、ライン、ポイントを配置して、サンプルを測定できます。

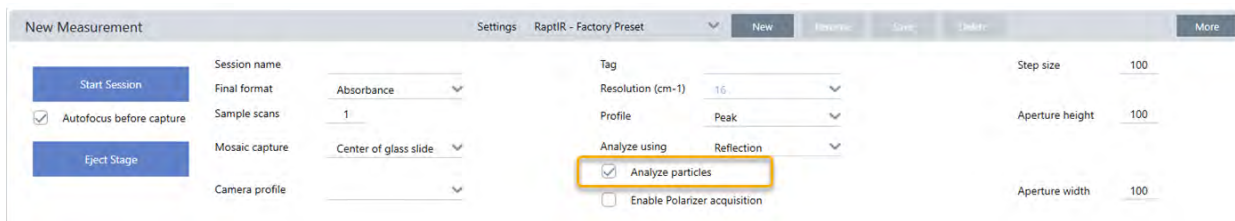
長期間、複数のエリアを測定する場合は、定期的バックグラウンド測定を置き換えてください。一般的には、サンプルを測定する前に、常に最新のバックグラウンドの測定値を取得しておく必要があります。

Analyze particles(粒子分析)

Particle analysis tool(粒子分析ツール)を使って、粒子の位置確認、特性評価、識別を行います。

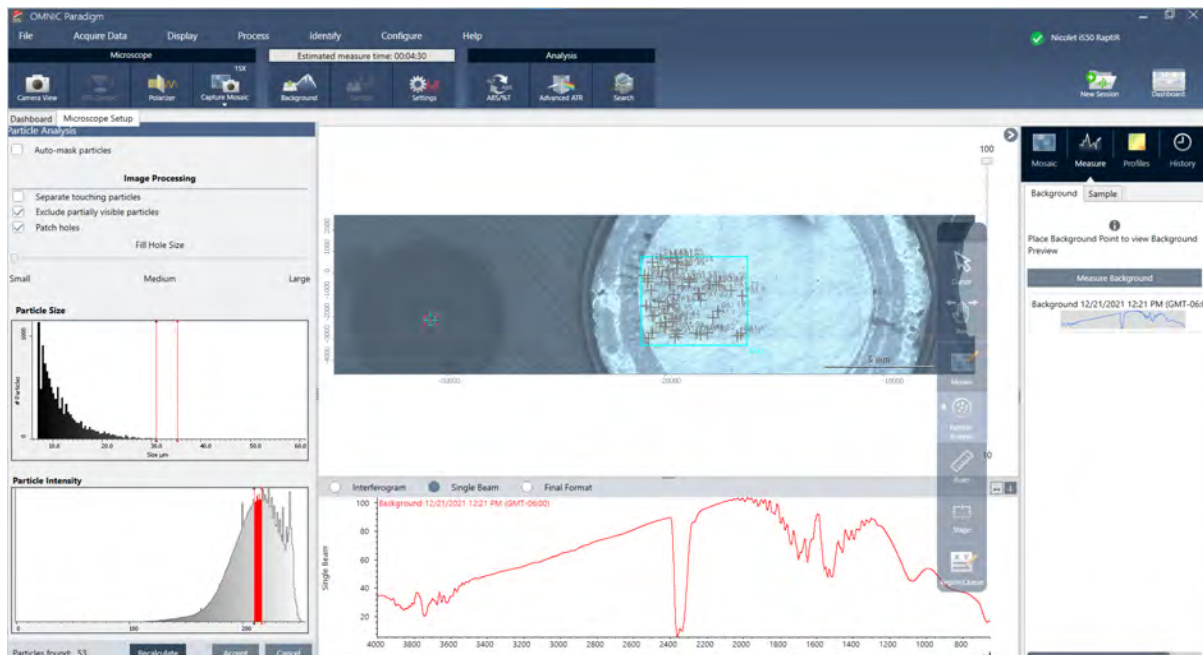
◆ 粒子分析を行うには:

1. サンプルを準備する
2. ダッシュボードから、**Analyze particles(粒子分析)**を選択します。



3. ["モザイクキャプチャー"](#)
4. Session(セッション) ビューでモザイクをレビューし、フォーカスやイルミネーションに必要な変更を加えます。必要に応じて、高倍率のモザイクをキャプチャーしてください。
5. ["バックグラウンドスペクトルの測定"](#).
6. Analyze particles(粒子分析)
 - a. Particle Analysis(粒子分析) ツールを選択し、クリック&ドラッグしてモザイク上に矩形を描きます。これが関心領域で、ソフトウェアが粒子を検出する場所です。領域を描画すると、Partical Analysis(粒子分析) ウィンドウが開きます。

4. ハウザーガイド



- b. オプションと選択ツールを使用して、選択範囲を絞り込みます。設定更新後に**Recalculate(再計算)**を選択し、粒子を更新します。Particle analysis tools(粒子分析ツール)や設定の詳細については、OMNIC Paradigmガイドとチュートリアルを参照してください。
- c. 選択内容が決定したら、**Accept(採用)**をクリックします。これで選択設定は保存されますが、データの測定はまだ行われません。
- d. **Sample(サンプル)**をクリックします。

エリア、ポイントとラインの分析

分析するエリアを1つ以上指定し、サンプル表面の化学イメージを作成します。またラインツールおよびポイントツールを使用して、ラインまたは個々のポイントを測定できます。エリア、ライン、ポイントを一緒に測定することができます。

エリア、ラインとポイントの測定

エリア、ライン、ポイントを測定するには、まずモザイクをキャプチャーし、バックグラウンドを測定する必要があります。

◆ エリア、ポイントとラインの分析

1. ["モザイクキャプチャー"](#)
2. ["バックグラウンドスペクトルの測定"](#).
3. 分析するエリア、ライン、ポイントを指定します。ひとつの分析に、複数のエリア、ラインやポイントを追加することができます。

分析するには: このツールを選択して 次の手順に従ってください。

<p>エリア</p>		<ol style="list-style-type: none"> 1. Area(エリア) ツールを選択します。 2. モザイク上でクリック&ドラッグして領域を描画します。
<p>ライン</p>		<ol style="list-style-type: none"> 1. Line(ライン) ツールを選択します。 2. クリック&ドラッグしてラインを引きます。
<p>ポイント</p>		<ol style="list-style-type: none"> 1. Point(ポイント) ツールを選択します。 2. クリックして点を追加します。

Cursor(カーソル) ツールで、エリア、ポイント、ラインを選択・削除します。

4. エリアとポイントの追加が完了したら、**Sample(サンプル)**をクリックします。

測定が完了したら、新しいタブで結果を表示します。

偏光板の使用

偏光板オプションがついている顕微鏡は、可視光用と赤外光用の偏光板を別々に搭載しています。

顕微鏡には各光源に対して、偏光板と分析器と呼ばれる2つの偏光フィルターが付属されています。

- 偏光板: 光源とサンプルの間に設置されています
- 分析器: サンプルとカメラまたはアイピースと検出器の間に設置されています

偏光板を使うときは、平面偏光は偏光板のみ、交差偏光は偏光板と分析器を挿入できます。偏光板と分析器は一緒にまたは別々に回転させることができます。

偏光板と分析器を使う

偏光板を使うときは、サンプルをCamera View(カメラビュー)で表示することから始めます。ここでは、偏光板設定をプレビューでき、可視光偏光板と分析器を調節できます。

Camera View(カメラビュー)でサンプルをプレビューすると、サンプル測定中にしようする最適の設定を適用できます。

◆ 偏光板と分析器をCamera View(カメラビュー)で使用する

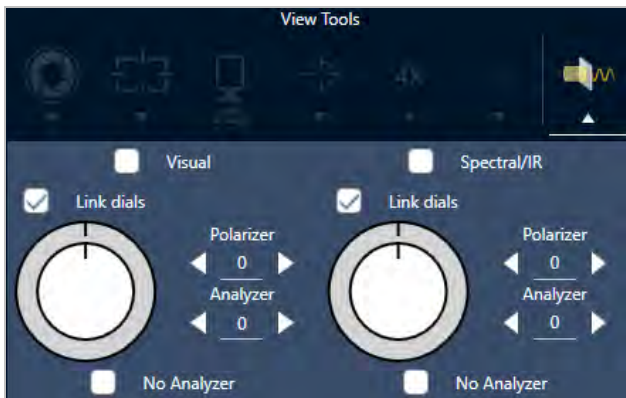
1. ダッシュボードから、Enable Polarizer acquisition(偏光板獲得を有効にする)を選択します。

このオプションを選択すると、偏光板を使って領域を測定します。測定条件を変更しない場合、デフォルトの偏光板と分析器測定条件が使用されます。セッションの間、変更が必要な時は、データを収集する前に偏光板を有効にしたり無効にしたりできます。

4. ハウザーガイド

- 透過型または反射型の分析タイプを使用して、通常通りに顕微鏡セッションを開始します。ATR分析タイプを使用しているときは、偏光板は使用できません。
- Microscopy Setup(顕微鏡設定)ビューで、Camera View(カメラビュー)を開き、Polarizer(偏光板)タブに行きます。

図4-1: Camera View(カメラビュー)のPolarizer(偏光板)タブ



- 可視光偏光板を使用するときは、Visual(ビジュアル)を選択します。IR偏光板を使用するときは、Spectral/IR(スペクトル/IR)を選択します。
 - Camera View(カメラビュー)のサンプルイメージを見て、可視光偏光板の測定条件を調整します。
 - IR偏光板測定条件をプレビューするには、ライブスペクトラムビューをオンにして、スペクトラムを表示します。

表4-2: Camera View(カメラビュー)の偏光板測定条件

設定	説明
Visual(目視)	選択すると、ビジュアル偏光板を有効にします。
Spectral/IR (スペクトル/IR)	選択すると、IR偏光板を有効にします。
Link dials (リンクダイヤル)	選択すると、偏光板と分析器を同じ割合で回転します。2つのうちひとつの角度を変更すると、もう片方も変更します。
Polarizer angle (偏光板の角)	偏光板の角度を設定します。
Analyzer angle (分析器の角)	分析器の角度を設定します。
No analyzer (分析器なし)	選択すると、分析器はビームパスから外され、偏光板のみ使用されます。("Plane-polarized light"(「平面偏光」))

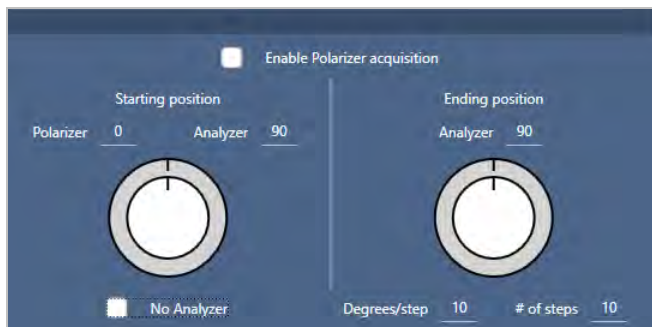
偏光板でIRデータを収集

サンプルを偏光板を有効にして測定するとき、測定方法は2つあります。

4. ハウザーガイド

- 偏光板 (および分析器) を1つの固定した角度で、全領域を測定します。
- 測定中自動的に分析器を回転させて、5度回転ごとなど、指定した間隔でデータを収集します。

図4-3: 偏光板設定オプション



◆ 偏光板と分析器でデータを収集

1. 顕微鏡設定ビューで、ツールバーの**偏光板設定**をクリックし、偏光板測定条件を表示します。
2. Enable Polarizer acquisition (偏光板獲得を有効にする)を選択します。
3. 偏光板測定条件を編集し、レビューします。
 - 1つの固定角度を使用するときは、ステップ#を1に設定します。分析器の開始位置のみが使用されます。
 - 段階的にコレクションする場合...
 - a. 偏光板の角度を設定します。
 - b. 分析器の開始および終了角度を設定します。
 - c. # of steps (ステップ#) またはDegrees/step (角度/ステップ)のどちらかを設定します
4. ひとつ以上の領域を定義し、通常通りサンプルを測定します。

バックグラウンドポイントが、サンプルに対応するように各分析器の角度で自動的に測定されます。サンプルコレクション中に、各ポイントをあらゆる角度で測定します。

表2: 偏光板獲得測定条件

設定	説明
Enable Polarizer acquisition (偏光板獲得を有効にする)	データコレクションで、偏光板 (およびオプションで分析器) を使用するかどうかを選択します。
Starting position (開始位置)	
Polarizer (偏光板)	偏光板の固定角度

設定	説明
Analyzer(分析器)	分析器の開始角度。ステップ#を0に設定した場合、この角度のみ使用されません。
No Analyzer(分析器なし)	選択すると、分析器をビームパスから外して、偏光板のみを使用します。
Ending position(終了位置)	
Analyzer(分析器)	分析器の終了角度。
Degrees/step(角度 / ステップ)	角度 / ステップまたはステップ#を入力してください。その他の数値は自動的に計算されます。
# of steps(ステップ#)	角度 / ステップまたはステップ#を入力してください。その他の数値は自動的に計算されます。

偏光板データの探索

偏光板でデータをコレクションした後、結果は分析タブに表示されます。偏光板で収集されたデータを見るには、角度スライダーでコレクションに使用した各角度のプロファイルイメージを表示することができます。

プロファイルの適用

Profile(プロファイル)設定は、化学的イメージを作成するために選択した領域またはポイントを含む測定値の各スペクトルに適用される数学的アルゴリズムを定義します。アルゴリズムは各スペクトルを数値に変換し、化学的イメージをカラーで表現します。

プロファイルを適用するには

セッションを始める前に、デフォルトプロファイルを選択し、データ測定後にプロファイルを素早く変更することができます。

- セッションをはじめる前に、Dashboard(ダッシュボード)にあるProfile(プロファイル)リストからプロファイルを選択します。これは、エリア、ラインまたはポイントの測定後に初めて表示されるプロファイルです。
- エリア、ラインまたはポイントを測定後、Profiles(プロファイル)タブを選択し、**Profile type(プロファイルタイプ)**リストからオプションを選択します。**Update(アップデート)**をクリックして、変更を適用します。

利用可能なプロファイルタイプを下記に示します。

プロファイル	説明
Correlation(コリレーション)	Correlation(コリレーション)プロファイルは、化学的イメージと選択したコリレーションスペクトルの各サンプルポイント間のコリレーションを表示します。 プロファイルの強度スケールの各色は、コリレーションスペクトルとのコリレーションの度合いを表しています。

プロファイル	説明
Area(エリア)	Peak Area(ピーク面積) プロファイルは、化学的イメージの各 サンプルポイントにおける特定のピークの補正エリアを表示します。化学的イメージの色は、各 サンプルポイントの特定ピークの相対的な面積を表します。強度値が高いほど(プロファイル強度スケールのトップに近いほど)、より大きなピークエリアを示します。
Peak(ピーク)	Peak(ピーク) プロファイルは、化学的イメージの各 サンプルポイントにおける特定のピークの補正された高さを表示します。化学的イメージの色は、各 サンプルポイントの特定ピークの相対的強度を表します。強度値が高いほど(プロファイル強度スケールのトップに近いほど)、より大きなピークを示します。
Area Ratio(面積比)	Peak Area(ピーク面積) プロファイルは、化学的イメージの各 サンプルポイントにおける2つの特定の補正面積比を表示します。2つのピークの比率を使用すると、次のことが分かります： <ul style="list-style-type: none"> • サンプル材料の変化(他のピークが減少する一方、増加するピークもある) • 2つのサンプルコンポーネントの変化 • 別のピークに対して正規化されたピークエリアの変化により、物理的な変化(フォーカスなど) がピークエリアの測定値の変化の原因となっていないことを確認する • グラフェンなどのレイヤーになったサンプルに存在するレイヤー数や材料の品質に関する情報 化学的イメージの色は、特定ピークの相対的な面積を表します。強度値が高いほど(プロファイル強度スケールのトップに近いほど)、より大きなピークエリア比を示します。
Peak Ratio(ピーク比)	Peak Height Ratio(ピークの高さ比率) プロファイルは、化学的イメージの各 サンプルポイントにおける2つの特定のピークの補正した高さの比率を表示します。化学的イメージの色は、特定ピークの相対的な高さを表します。強度値が高いほど(プロファイル強度スケールのトップに近いほど)、より大きなピークの高さの比率を示します。
Chemigram(ケミグラム)	Chemigram(ケミグラム) プロファイルは、化学的イメージの各 サンプルポイントにおける特定の領域の未補正エリアを表示します。化学的イメージの色は、各 サンプルポイントの特定領域の相対的な面積を表します。強度値が高いほど(プロファイル強度スケールのトップに近いほど)、より大きなピークエリアを示します。
Peak position(ピーク位置)	Peak position(ピーク位置) プロファイルは、X軸に沿った特定のピーク位置方向にどのように移動したかを示すものです。測定は、化学的イメージの各 サンプルポイントにおける特定の領域のピーク最大値に基づきます。プロファイル強度スケールの色と関連したX軸値は、特定領域のピーク最大値の相対的位置を示します。
Peak Width(ピーク幅)	Peak Width(ピーク幅) プロファイルは、化学的イメージの各 サンプルポイントにおける特定のピークの幅を表示します。測定は、特定の高さにおけるピークの全幅に基づいています。化学的イメージの色は、各 サンプルポイントの特定ピークの相対的幅を表します。強度値が高いほど(プロファイル強度スケールのトップに近いほど)、より広いピークを示します。
Quant(定量)	TQ Analystソフトウェアで作成された、カスタム分析方法を使用します。 方法を設定するには、 Identify > Quantify Setup(分析 > 定量化設定) に行き、QNTファイルを選択します。 方法の開発とキャリブレーションの詳細情報については、TQ Analystソフトウェアのヘルプ情報を参照してください。

プロフィール	説明
MCR	MCRプロフィールは、純成分スペクトル(計算値)に基づいてサンプルデータ内の成分を検出し、化学的イメージ内の位置を表示します。

お気に入りとセッションプロフィール

プロフィール設定は、お気に入りまたはセッションプロフィールに保存できます。

- お気に入りは、今後すべてのセッションで使用するために保存します。例えば、同じピーク位置を使用するPeak position (ピーク位置) プロフィールを頻繁に使うときは、そのピーク位置のプロフィールをお気に入りに保存でき、そのプロフィールを使うごとに位置を特定する必要がなくなります。
- Session(セッション) プロフィールは、セッションデータとのみ保存できます。将来セッションを開けると、そのプロフィール設定は残っていますが、他のセッションで利用することはできません。これは、特定のセッションのプロフィール設定を保存したいが、その設定を定期的に変更する予定がない場合に便利です。

◆ プロフィール設定を保存するには

1. Profile(プロフィール) タブで、プロフィールタイプを選択し、希望のオプションを設定します。
2. 名称を入力してSave(保存)をクリックします。
3. Favorite(お気に入り) プロフィールをセッションプロフィールに移動するには、Favorites(お気に入り) タブからプロフィールを選択し、Save to session(セッションに保存)をクリックします。

Spectra(スペクトル) ビューでさらに測定数値を探索

測定結果をセッションビューで見るとき、セッションビューにはないツールで、特定のスペクトルを詳細に探索したい場合があります。幸い、スペクトルを測定に簡単に保存し、Spectra(スペクトル)ビューで開けることができます。

◆ Spectra(スペクトル)ビューでセッション分析からスペクトルを見る

1. Session Analysis(セッション分析)ビュータブで、Cursor(カーソル) ツールを選択し、分析したいポイントをクリックします。
2. まだ開いてなければ、Spectra(スペクトル) ペインを開け、選択したポイントのスペクトルを表示します。
3. スペクトルを右クリックし、Add selected spectrum to dashboard measurements(選択したスペクトルをダッシュボード測定に追加)を選択します。Spectra(スペクトル) ペインに表示されたスペクトルのXとYの位置をメモします。
4. ダッシュボードに戻るには、Dashboard(ダッシュボード) アイコンをクリックします。
5. Measurements(測定値) から、スペクトルを見つけてください。スペクトルは、XとYの位置を使用して名前が付けられています。
6. スペクトルを右クリックし、Spectra(スペクトラ)ビューで開きます。

4.4.5 顕微鏡分析結果のレポート

顕微鏡レポートの作成とカスタム化

サンプル分析後、レポートを印刷または保存して、調査結果を記録することができます。

◆ 顕微鏡レポートを作成するには

1. Session Analysis(セッション分析) タブから、**File > Create Report(ファイル> レポートの作成)**に行きます。
2. レポートのタイトルを入力し、フォーマットとテンプレートを選択します。利用可能なテンプレートは、実行した分析タイプによって異なります。
3. レポートをカスタマイズするには、**Options(オプション)**を選択し、含める要素または除外する要素を選択します。
4. **Create(作成)**をクリックします。

4.5 ワークフローを使用

ワークフローを使用してあなたのタスクを自動化し、分析とデータ処理が毎回まったく同じ方法で実行できるようにします。

4.5.1 ワークフローについて

OMNIC Paradigmソフトウェアのワークフロー機能を使用すると、重要な手順および頻繁なタスクを自動化することができます。ワークフローとは、ボタンをクリックするだけで起動することができる一連のソフトウェア操作です。このソフトウェア操作はタイルで表されます。これらのタイルは、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) のワークフローキャンバスにドラッグアンドドロップすることができます。データコレクション設定の指定、オペレーターへの指示の提供、データ処理の定義、レポート作成、および事前のアーカイブを行うことが可能です。ワークフローが作成された時点で、オペレーターはそれを繰り返し使用することができ、各手順を毎回同じ方法で完了することができます。

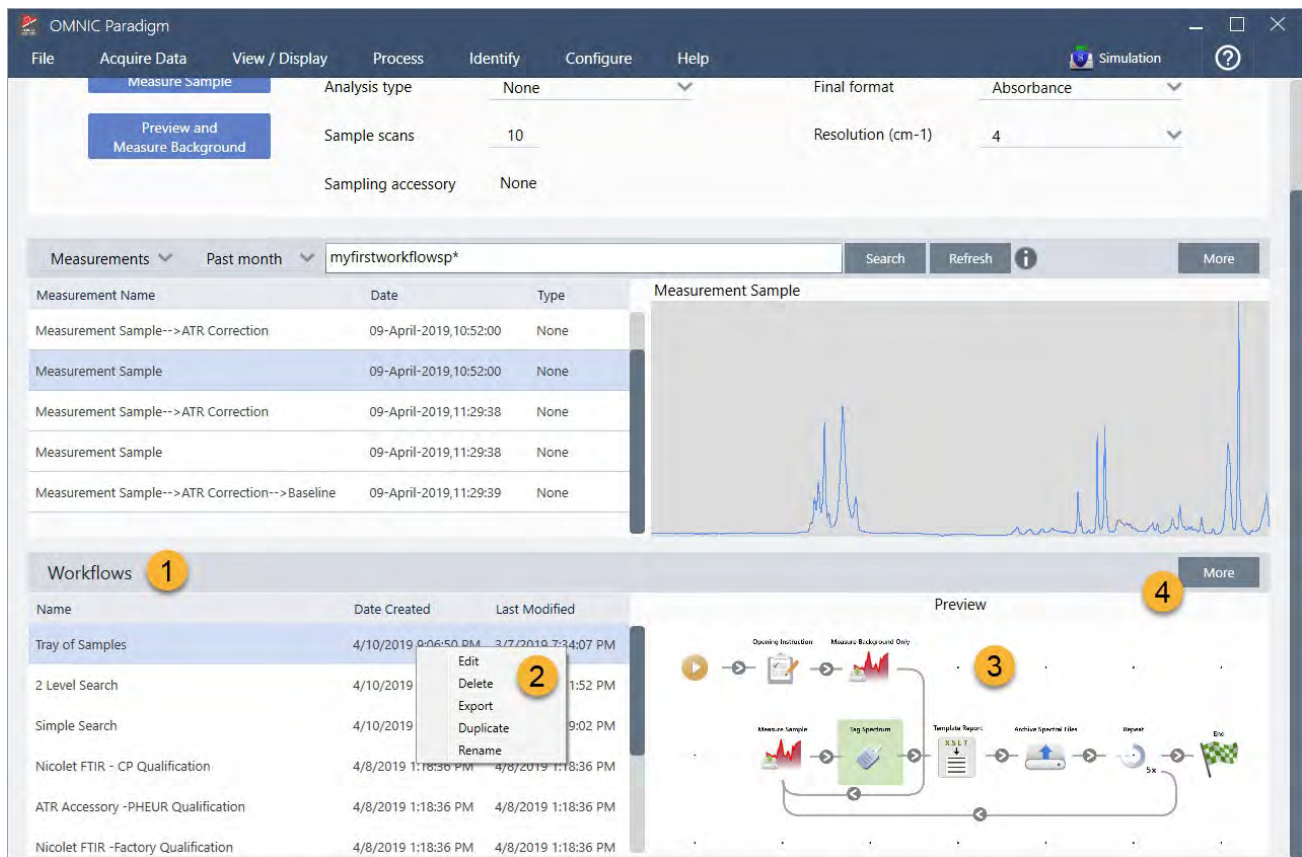
この項では、これらの基本的なワークフロー機能とツールの概要を説明します：

- ワークフローペイン
- Run Workflow(ワークフローの実行) ウィンドウ
- Workflow editor(ワークフローエディタ)

ワークフローペイン

ワークフローペインはOMNIC Paradigmダッシュボード下部で常に利用可能です。このスペースを使用すると、作成したワークフローをプレビューして実行することができ、Workflow editor(ワークフローエディタ) を開いて新規ワークフローを編集または作成することができます。

図4-1: OMNIC ParadigmダッシュボードのWorkflow Pane(ワークフローペイン)



1. 最新のワークフロー (ワークフローをプレビューするには1回クリックし、ワークフローを開くには2回クリックします)
2. 他のオプション詳細については、ワークフローを右クリックします
3. 選択したワークフローのプレビュー
4. Workflows (ワークフロー) ペインの拡大または縮小

表4-2:

ワークフローペインから既存のワークフローを操作

これを行うには...	以下の処理を行います
ワークフローを選択してプレビューします	選択したワークフロー名を1回クリックします
ワークフローをテストまたは実行します	選択したワークフローを右クリックして、Run(実行)を選択します。これにより、ワークフロータスク手順をステップスルーできるRun Workflow(ワークフローの実行)ウィンドウが開きます。
選択したワークフローの編集、名前の変更、複製、削除、またはエクスポートを行います	選択したワークフローを右クリックして、Shortcut(ショートカット)メニューからオプションを選択します。

Run Workflow(ワークフローの実行) ウィンドウ

Run Workflow(ワークフローの実行) ウィンドウを使用して、ワークフローをテストまたは実行します。Run Workflow(ワークフローの実行) ウィンドウを開くには、ワークフローを右クリックしてRun(実行) を選択します。

図4-3: ワークフローを右クリックし、Run(実行) を選択します

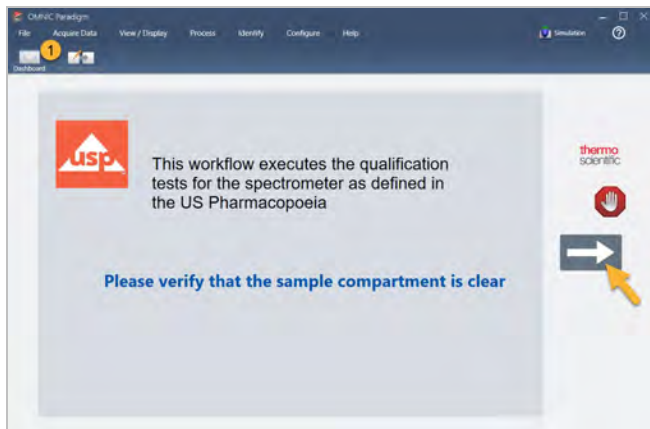
The screenshot displays the OMNIC Paradigm software interface. At the top is a menu bar with options: File, Acquire Data, View / Display, Process, Identify, Configure, Help, and Simulation. Below the menu bar is a toolbar with icons for Open, Background, Sample, Settings, Dashboard, Search, ADL / XCL, Advanced ATB, QC Check, Quantity, and Web To Library. The main workspace is divided into three sections:

- Measurements:** A table with columns for Measurement Name, Date, and Type. The table lists several measurements, including one from Mon Jan 14 16:04:32 2019 (GMT-06:00) and another from 4/4/2019 11:30:45 AM. A graph to the right shows a spectral plot with a prominent peak labeled 'PE'.
- Workflows:** A table with columns for Name, Date Created, and Last Modified. The 'Tray of Samples' workflow is selected and highlighted with a red circle containing the number '1'. Other workflows listed include Simple Search, Measure Only Quant with Poly, Nicolet Any KBr - Factory, Nicolet Any KBr - CP, and 2 Level SearchCopy.
- Preview:** A flowchart showing the steps of the selected workflow: Measure Sample, Tag Spectrum, Template Report, Archive Spectral Files, Report, and End.

1. 選択したワークフロー(このワークフローはダブルクリックして開きます)

Run Workflow(ワークフローの実行) ウィンドウで、矢印ボタンを使用してワークフロー内の次のタスクに移動します。選択したワークフローは設計どおりに実行され、選択したワークフローによって示されるようにタスクとオペレーターメッセージが表示されます。

図4-4: Run Workflow(ワークフローの実行) ウィンドウ



選択したワークフローを停止してダッシュボードに戻るには、Play Workflow(ワークフローの実行) ウィンドウのStop(停止) ボタンをクリックします。(選択したワークフローにStop(停止) ボタンがない場合は、ツールバーのDashboard(ダッシュボード) ボタンをクリックして選択したワークフローを停止します。)

Workflow Editor(ワークフローエディタ)

このWorkflow Editor(ワークフローエディタ)には、ワークフローメニュー、ツールバー、タイル選択バー、キャンバスなどのワークフローを作成するためのすべてのツールが含まれています。このWorkflow Editor(ワークフローエディタ)を開くには、ダッシュボードでワークフロー名を右クリックし、Shortcut(ショートカット)メニューからEdit(編集)を選択します。

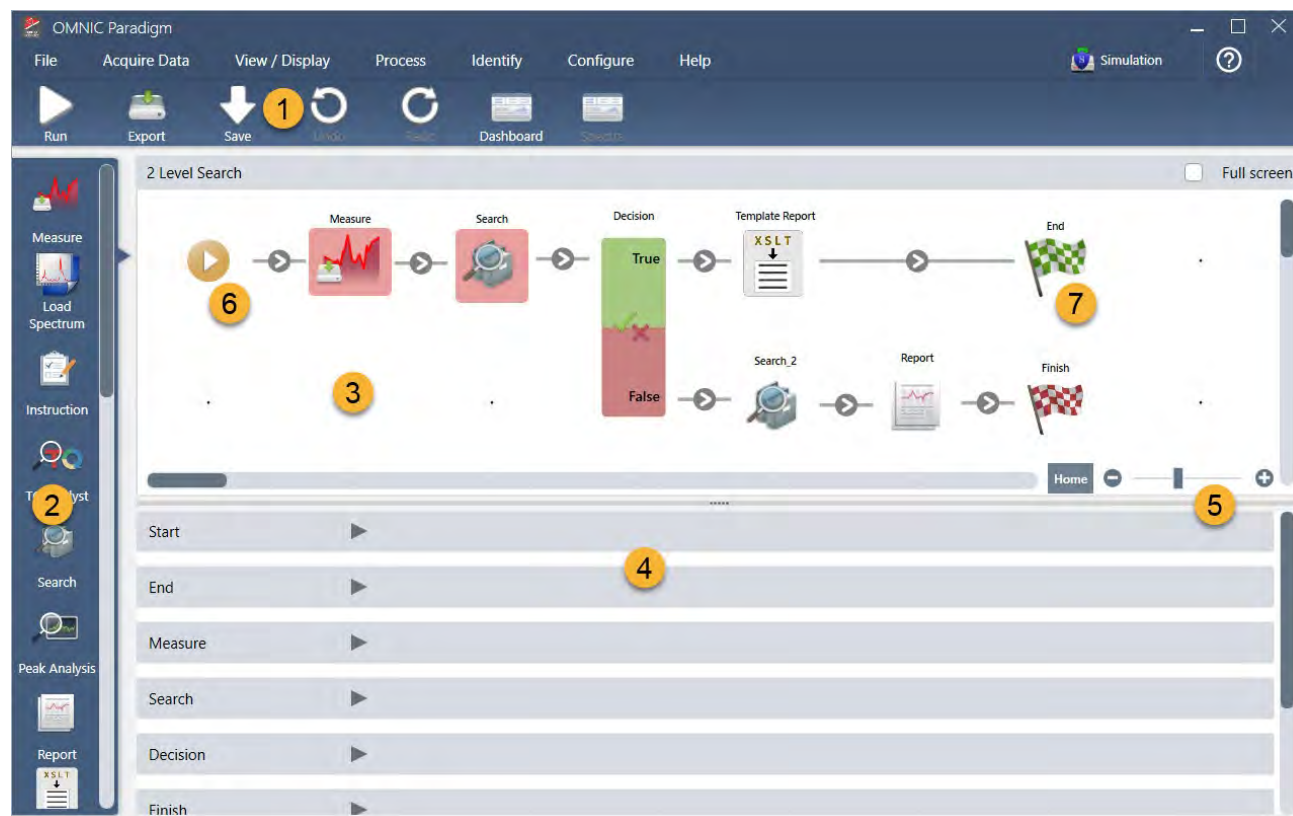
また、次を選択して、OMNIC ParadigmのメインウィンドウからWorkflow Editor(ワークフローエディタ)を開くこともできます：

File(ファイル) (メニュー) > Workflows(ワークフロー) > Create Workflow(ワークフローの作成)

このワークフローキャンバスは、ワークフローで実行するタスクを選択および設定し、タスクを結合してワークフローを作成する場所です。Workflow Editor(ワークフローエディタ)が開き、必須の「Workflow Start(ワークフロー開始)」タイトルと「Workflow End(ワークフロー終了)」タイトルがキャンバスに表示されます。現在のワークフローで各タイルごとに利用可能な設定は、キャンバス下の拡張可能部分にあります。キャンバス表示をスクロール、ズーム、リセットするツールはその右側にあります。便利なツールバーがこのキャンバスの上にあります。

4. ハウザーガイド

図4-5: Workflow Editor(ワークフローエディタ)



1. ツールバー
2. タイル選択バー
3. キャンバス
4. タイル設定
5. キャンバスを調整およびリセットするためのツール
6. 開始タイル
7. 終了タイル

各タスクは、タイル選択バーのカラーフルなタイルで表されます。ここでは、一般的に使用される例を以下に示します:

Instruction



Measure



Search



Template Report



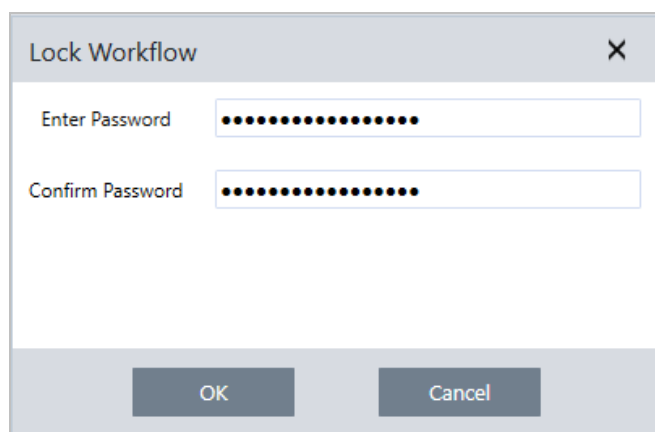
4. ハウザーガイド

ワークフローを作成、開く、およびエクスポートするためのツールは、Workflow(ワークフロー)サブメニュー(OMNIC Paradigm File(OMNIC Paradigmファイル)メニューから利用可能)にあります。ここで利用できるワークフロー例は、開始する場所として適していますが、スペクトル履歴からワークフローを作成することも可能です。詳細については、「1次ワークフローの作成と実行」を参照してください。

タイトルを追加、移動、コピー、および削除して、望ましいワークフローを作成することが可能です。詳細情報については、「Edit a Workflow(ワークフローの編集)」というタイトルの項を参照してください。

4.5.2 パスワードでワークフローを保護

他の個人が編集できないように、ワークフローをパスワードでロックします。ロックしたワークフローは編集、削除したり複製することはできず、プレビューも表示されません。ワークフローがロックされている場合でも、名前の変更を行ったり、エクスポートすることができます。



ワークフローのロックとロック解除

ワークフローのロックとロック解除は、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のデスクトップインターフェースからのみ実行できます。

◆ ワークフローをロックするには

1. Workflow Editor(ワークフローエディタ)で、**Lock(ロック)**を選択します。
2. パスワードを入力して確認し、**OK**をクリックします。
3. 変更を保存します。

◆ ワークフローのロックを解除するには

1. ダッシュボードで、ワークフローを右クリックし、**Unlock(ロック解除)**を選択します。
2. 正しいパスワードを入力し、**OK**をクリックします。

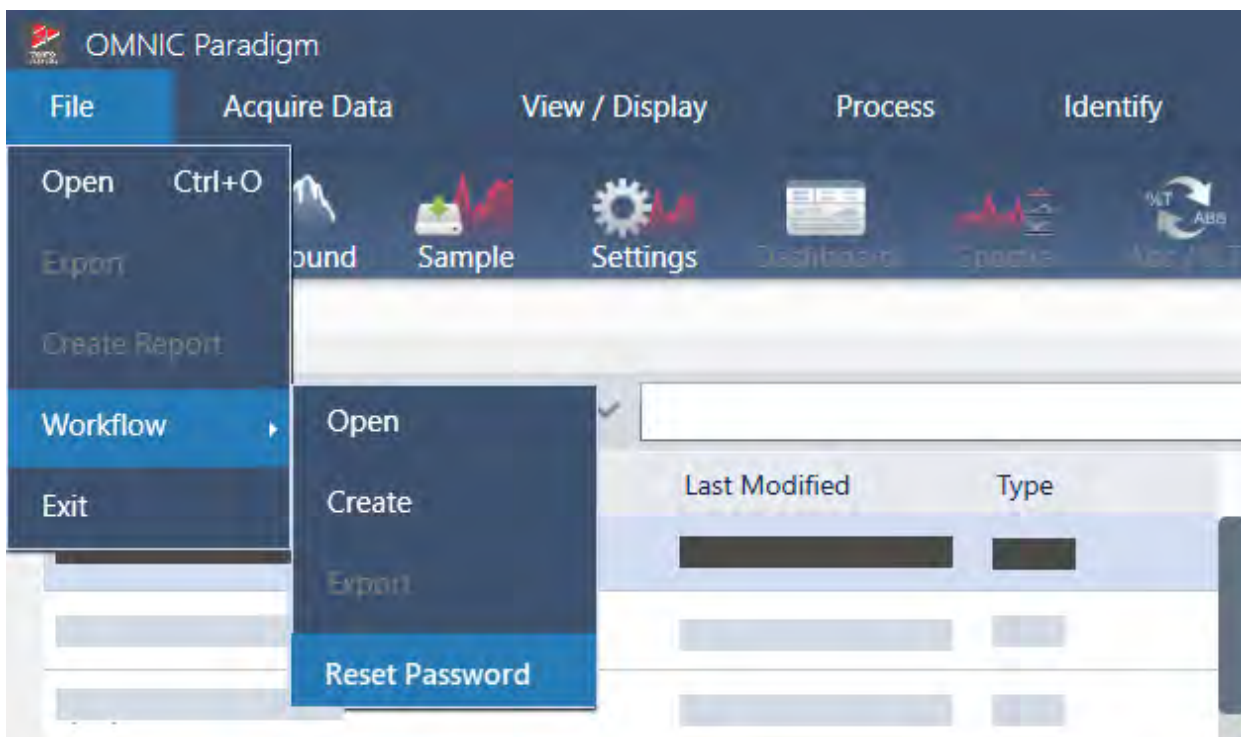
紛失したパスワードをリセット

ワークフローのパスワードを紛失したり忘れたりした場合は、パスワードをリセットしてワークフローのロックを解除できます。

ワークフローパスワードをリセットできるのは、Windowsの管理者アカウントタイプのパスワードのみです。パスワードをリセットするには、管理者としてOMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)を実行します。Security Suite(セキュリティスイート)ソフトウェアを使用している場合は、Reset Workflow Password(ワークフローパスワードのリセット)制御へのアカウントアクセスが許可されている場合でも、ユーザーは管理者としてOMNIC Paradigmを実行する必要があることに注意してください。

◆ ワークフローパスワードをリセットするには

1. WindowsデスクトップのStart(開始)メニューで、Thermo Scientific > OMNIC Paradigmに移動します。OMNIC Paradigmを右クリックし、Run as Administrator(管理者として実行)を選択します。
2. OMNIC Paradigmで、デスクトップインターフェースを使用して、リセットするパスワードを使用してロックされたワークフローを選択します。
3. File(ファイル) > Workflow(ワークフロー) > Reset Password(パスワードのリセット)を選択します。このオプションは、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)を管理者として実行している場合にのみ表示されます。



パスワードがワークフローから削除され、ワークフローのロックが解除されます。

4.5.3 テンプレートワークフローを作成

テンプレートワークフローを使用すると、状況に応じて動的な値を使用して実行できる単一のワークフローを作成できます。例えば、テンプレートワークフローを使用すると、複数の異なるサンプリングアクセサリを使用して実行できる単一のワークフローを作

4. ハウザーガイド

成できます。オペレーターはアクセサリーを選択でき、ワークフローは、アクセサリーにマッチするイメージ、定量化方法、および変数を使用するように自動的にアップデートされます。

テンプレートワークフローを作成するには、Workflow Table(ワークフロー表) タイルを使用します。Workflow Table(ワークフロー表) タイルを使用して、CSVファイルからオプションと対応する値の表をインポートします。次に、ワークフロー全体で値を使用します。

ワークフロー表のタイルを使用すると、次のことができます...

- 一度に多くのファイルと変数をインポート
- オペレーターがオプションのリストから選択するか、選択を自動化できるようにします
- カスタム変数をインポートするか、イメージやQNTファイルなどの外部ファイルを参照します

Workflow Table(ワークフロー表) タイルを使用するには、含めるオプションとデータのCSVファイルをビルドし、Workflow Table(ワークフロー表) のタイルを構成して、含まれているデータを使用する必要があります。

◆ Workflow Table(ワークフロー表) タイルを使用してテンプレートワークフローを作成するには

手順1: お使いのデータのCSVファイルを作成します

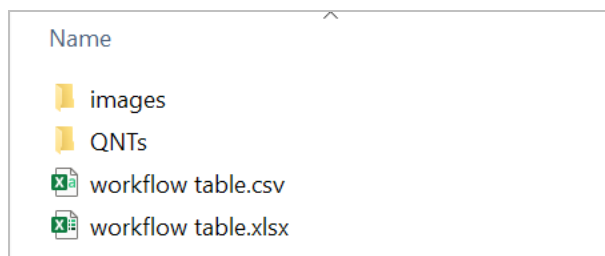
1. Workflow Table(ワークフロー表) タイルを使用してインポートするCSVファイルを作成します。

図4-1: 以下の例は、3つのアクセサリーオプションを含む表を示しています。

	A	B	C	D	E	F
1	Accessory	images	values	quants		
2	Everest ATR	Everest.jpg	5	HexadecaneCoverage.qnt		
3	iD7 ATR	iD7.jpg	10	HexadecaneMatchR.qnt		
4	iD1 Transmission	iD1.jpg	20	PathlengthHexadecaneR.qnt		

- **表の構造化**。表を作成するとき、各行はオプションまたは関連する値のカテゴリを反映します。例えば、アクセサリーの各行を使用し、そのアクセサリーに関連付けられたデータとファイルの列を使用できます。ワークフローを開発すると、列見出しが変数として使用されます。表をCSVファイルとして直接作成することもできますが、スプレッドシートプログラムで表を操作してから、データをCSVファイルとしてエクスポートする方が簡単な場合があります。
- **外部資源の整理**。イメージやQNTファイルなどの外部資源を参照するときは、お使いのファイルを非常によく整理してください。これにより、Workflow Table(ワークフロー表) タイルにインポートして後でアップデートするのが簡単になります。

図4-2: 参照資源を整理



2. 表をCSVファイルとして保存します。

4. ハウソーガイド

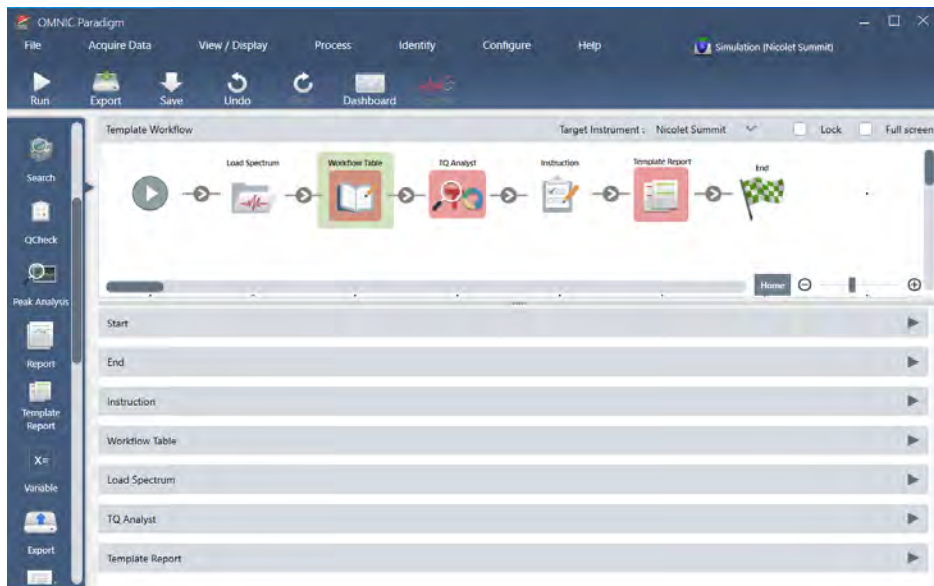
図4-3: このイメージは、表をCSVファイルとして示しています

```
1  Accessory, images, values, quants
2  Everest ATR, Everest.jpg, 5, HexadecaneCoverage.qnt
3  iD7 ATR, iD7.jpg, 10, HexadecaneMatchR.qnt
4  iD1 Transmission, iD1.jpg, 20, PathlengthHexadecaneR.qnt
```

手順2: ワークフローを作成し、Workflow Table(ワークフロー表) タイルを構成します。

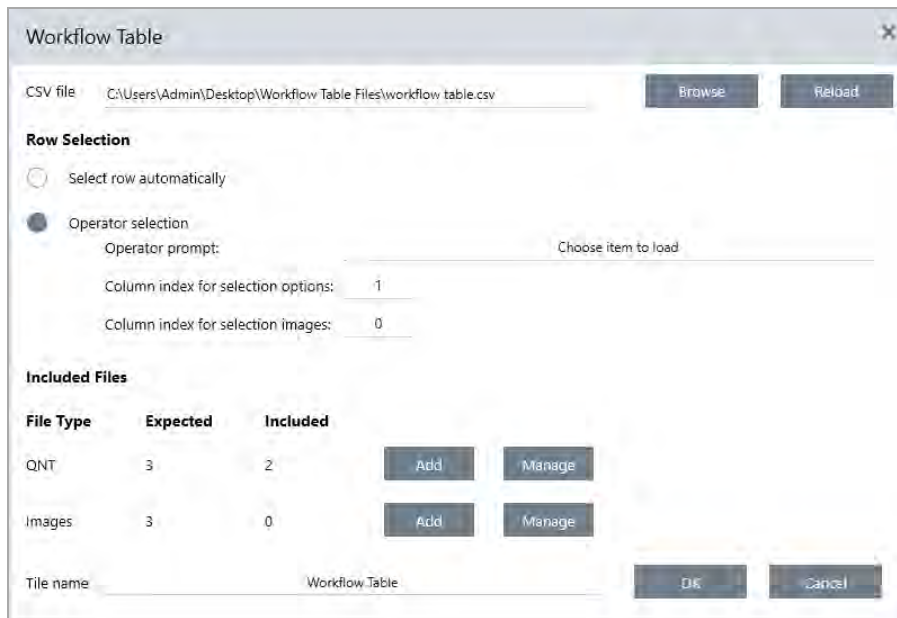
1. OMNIC Paradigmソフトウェアで、File(ファイル) > Workflows(ワークフロー) > Create(作成)に移動します。ワークフローに名前を付け、OKを選択してWorkflow Editor(ワークフローエディタ)を開きます。
2. ワークフローに必要なタイルを追加します。
3. Workflow Table(ワークフロー表) タイルをワークフローに追加します。Workflow Table(ワークフロー表) タイルの配置は、個々の要件によって異なります。

図4-4: このサンプルワークフローは、開始近くのワークフロー表のタイルを使用します



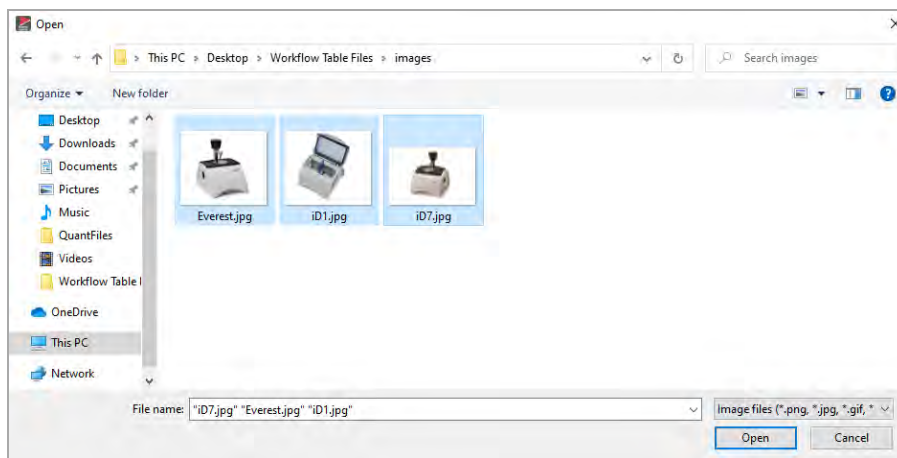
4. Workflow Table(ワークフロー表) タイルをダブルクリックして、タイル設定を開きます。
5. Workflow Table(ワークフロー表) タイルを構成します。
 - a. **Browse(参照)**を選択して、CSVファイルを開きます。

CSVファイルにイメージ、QNT、またはSPAファイルへの参照が含まれている場合、タイルは、テンプレートが追加のファイルを予期していることを示し、ファイルを追加および管理するためのボタンを提供します。



- b. 必要なファイルのカテゴリごとに、**Add(加算)**を選択し、CSVファイルにリストした関連ファイルを開きます。ファイル名は、CSVファイルに含めたものと正確にマッチする必要があります。

図 4-5: これらのイメージファイルは、CSVファイルのファイル名とマッチします



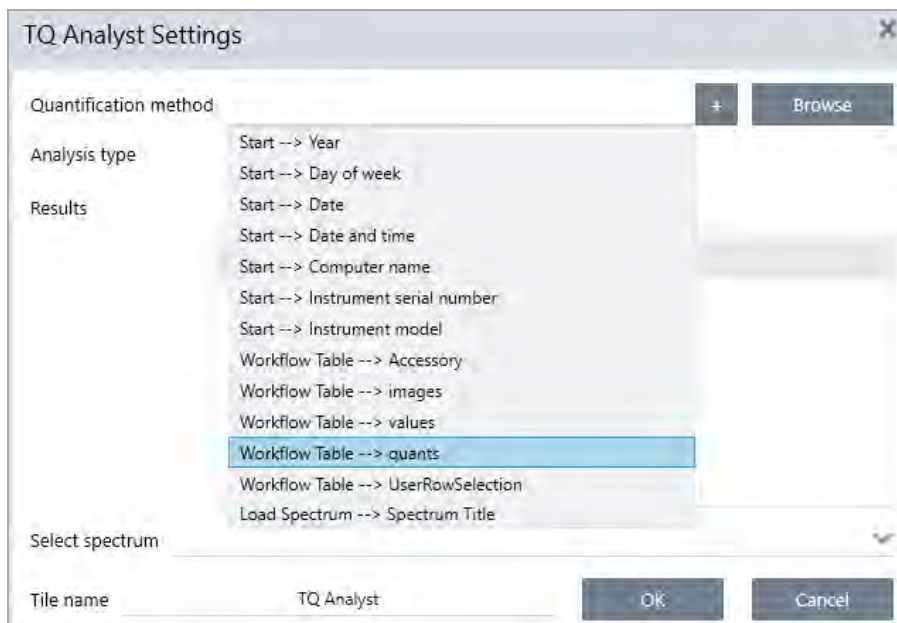
- c. オペレーターにオプションの選択を求めるには、**Operator Selection(オペレーターの選択)**を選択して列を選択します。オプションの列インデックスは、オペレーターに提示されるオプションに使用されるデータ列を決定します。最初の列は列1です。オプションで表示するイメージ列を指定することもできます。イメージを表示しない場合は、インデックスを0に設定します。
- 行を自動的に選択するには、**Select row automatically(自動的に行を選択)**を選択します。最初の行は行1です。特定の値を入力するか、変数を使用できます。例えば、Variable(変数) タイルを使用して、Repeat(リピート) タイルからの Repeat_Count(リピート_カウント) 変数を1だけ増加させてから、新規変数を使用してオプションすべてを自動的にループします。

手順3: インポートしたファイルと変数を使用する

4. ハウソーガイド

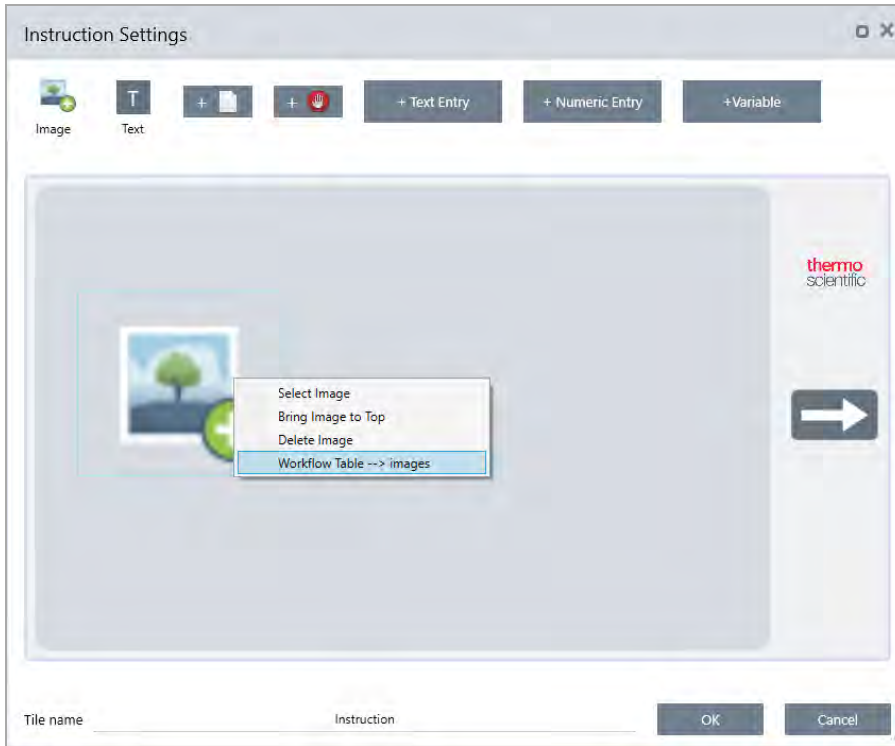
1. Workflow Table(ワークフロー表) タイルからデータを使用する別のタイルを選択します。Workflow Table(ワークフロー表) タイルの値をどのように使用するかは、特定のニーズによって異なります。以下の例を検討してください:

- **QNTファイルを使用するには:** TQ Analystタイル設定で、「+」アイコンを選択して変数を選択します。CSVファイルのQNTファイルに対応するWorkflow Table(ワークフロー表) 変数を選択します。

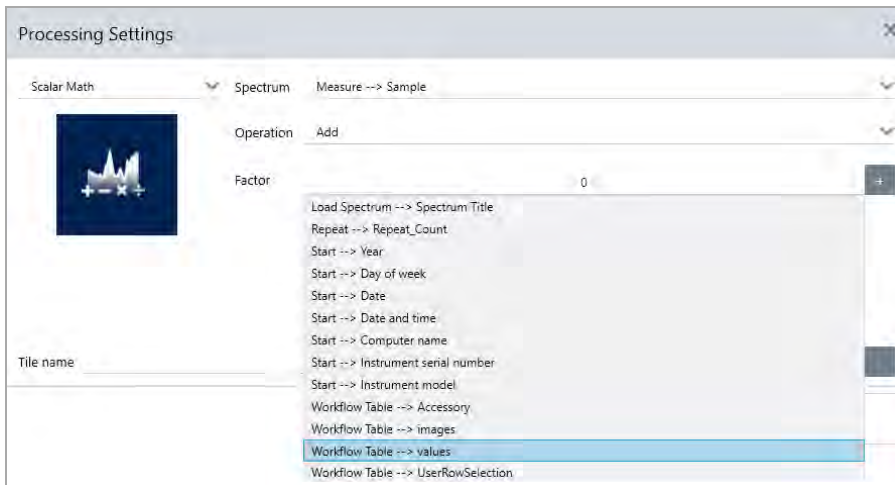


4. ハウソーガイド

- **Instruction(指示) タイルでイメージを使用するには。** Instruction(指示) タイルで、**Image(イメージ)** をクリックしてイメージを追加します。イメージのプレースホルダーを右クリックして、適切なWorkflow Table(ワークフロー表) 値を選択します。



- **数値を変数として使用するには。** タイル設定で「+」アイコンを選択し、Workflow Table(ワークフロー表) 変数を選択します。



2. ワークフローを保存します。

手順4: お使いのワークフローをテストする

お使いのワークフローをテストして、すべてが開かれ、予想通りに機能していることを確認することをお勧めします。

4. ハウザーガイド

ワークフローに測定データが含まれている場合は、Simulator(シミュレータ)モードを使用してテストを簡素化することをお勧めします。

1. (オプション)。Simulator(シミュレータ)モードに切り替えます。
 - a. ダッシュボードに戻ります。
 - b. **Configure(構成) > Connectivity(接続)**に移動します。
 - c. **Simulator(シミュレータ)**を選択し、**Connect(接続)**を選択します。
 - d. シミュレートする機器を選択し、**OK**を選択します。本ソフトウェアが新規シミュレートされた機器に切り替わるまで、少し時間がかかる場合があります。
2. お使いのWorkflow Editor(ワークフローエディタ)でワークフローを開きます。
3. **Run(実行)**を選択してワークフローを実行します。

お使いのワークフローがデータを測定する場合、測定値は通常のワークフローの場合と同じようにデータベースに保存されることに注意してください。シミュレートされたデータを使用するこれらの測定値を削除することをお勧めします。

4.5.4 ワークフロータイルリファレンス

ワークフロータイルはワークフローを実行できるタスクを表すアイコンです。各タイルには、ワークフローの実行時にタイルが実行する内容を定義する設定があります。タイルの設定を表示するには、そのタイルをワークフローキャンパスのワークフローに追加してから、そのタイルをダブルクリックします。

このワークフロータイルのリファレンスはアルファベット順に整理されています。各タイルの説明には利用可能な設定の説明が含まれています。

ATR Correction(ATR補正)

ATR技術により生じる浸透深度と赤外線吸収帯の変動効果のATRスペクトルを補正します。

設定	説明
Crystal type(クリスタルタイプ)	サンプル測定に使用するクリスタルのタイプを選択します。
Angle of incidence(入射角)	サンプル測定に使用された入射角を入力します。この値を取得するには、アクセサリーの仕様を参照してください。 The Everest ATR Accessory(エベレストATRアクセサリー) : 45° 初期値は45.00です
Sample refractive index(サンプルの屈折率)	サンプルの屈折率を1,000cm ⁻¹ で入力します。ほとんどの有機材料の屈折率は、1,000 cm ⁻¹ で1.45 ~ 1.55の範囲です。カーボンブラックを含む材料は、より高い屈折率値(1.7以上)を有しています。1,000 cm ⁻¹ でのサンプル材料の屈折率がわからない場合は、初期値の1.5を使用することをお勧めします。
Number of bounces(反射回数)	ATRクリスタルで発生した赤外線ビームの予想内部反射回数を入力します。クリスタル材料、入射角、および反射回数に関する情報については、お使いのATRアクセサリーの文書を参照してください。 初期値は1.00です

4. ハウソーガイド

設定	説明
Select spectrum (スペクトルを選択)	ATR Correction(ATR補正) は指定のスペクトルに適用されます。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。

Decision(決定)

Decision(決定) タイルを使用すると、指定した基準に基づいてワークフローのフローを制御できます。例えば、コリレーションサーチ結果のマッチ率が指定されたしきい値を超えているかどうかに基づいて、2つの別々のパスを提供できます。

設定	説明
Pass/Fail (合格 / 不合格)	以前に生成された合格 / 不合格結果を決定基準として使用するには、合格 / 不合格の決定タイプを選択します。 例えば、ピーク分析タイルは、ピーク高の測定に基づいて合格 / 不合格結果を生成できます。例えば、ピーク高が指定された値を上回っている場合は合格結果を生成し、それがその値を下回っている場合は不合格結果を生成するように指定できます。次に、Decision(決定) タイルを使用して、その結果に応じて、2つの別々のパスでワークフローを続行できます。
Numeric Value(数値)	決定に使用する数値を選択します。この値は、以前のワークフロータイルで生成されたデータでも、オペレーターがInstruction (指示) タイルを使用して入力した値でもあり得ます。 例えば、サーチ結果のマッチ率が指定されたしきい値を超えているかどうかを確認し、その基準に基づいてワークフローを続行できます。
String Value(文字列値)	決定に使用する文字列値を選択します。この文字列は、以前のワークフロータイルで生成されたデータであることも、オペレーターがInstruction(指示) タイルを使用して入力したテキストであることも可能です。 文字列値を使用すると、選択した値がテスト文字列と等しいか、テスト文字列を含んでいるかどうかを確認できます。 例えば、Contains(含む) を選択し、テスト文字列として「Poly(ポリ) 」を指定した場合、選択した値がポリスチレンの場合、Decision(決定) タイルはTrue(真) と評価されます。
Spectrum Age(スペクトル寿命)	スペクトルの寿命に応じて、ワークフローのフローを制御します。 例えば、ワークフローの別の手順に進む前に、バックグラウンドスペクトルが20分を超える前のものであるかどうかを確認してから、必要であれば新規バックグラウンドを測定することができます。
Tile name (タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。

Delay(待ち時間)

続行する前に、指定された時間ワークフローを一時停止します。

設定	説明
Delay (seconds)(待ち時間(秒))	ワークフローが一時停止された状態になる秒数。
Message(メッセージ)	このメッセージは、遅延中にオペレーターに表示されます。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。

Embedded Workflow(組み込みワークフロー)

Embedded Workflow(組み込みワークフロー) タイルを使用して、一つのワークフローを別のワークフローに含めます。

4. ハウソーガイド

Embedded Workflow(組み込みワークフロー) タイルを使用すると、一般的なタイルまたはプロセスのサブセットに対して一つのワークフローを作成し、そのワークフローを他の多くのワークフローで再利用できます。組み込みワークフローで設定を変更したりタイルをアップデートしたりする場合は、すべてのワークフローで設定を手動で編集するのではなく、一度に変更することができます。

Workflow Editor(ワークフローエディタ) で、組み込みワークフローをアップデートできます。Embedded Workflow(組み込みワークフロー) タイルを含むワークフローを開き、キャンバス上の空白のスペースを右クリックして、Update Embedded Workflow(s)(組み込みワークフローのアップデート) をクリックします。次に、アップデートする任意の組み込みワークフローを選択します。

ワークフローが期待どおりに動作するように、組み込みワークフローを常に最新の状態に保つことをお勧めします。

設定	説明
Select a Workflow file to import(インポートするワークフローファイルを選択します)	組み込みワークフローとして使用するワークフローファイルを参照します。 組み込みワークフローをアップデートする場合は、ワークフローを参照して再開する必要があります。そうしないと、変更がこのワークフローに反映されません。

End(終了)

すべてのワークフローには、少なくとも一つのEnd(終了) タイルがあります。お使いのワークフローにDecision(決定) タイルまたはSelection(選択肢) タイルが含まれている場合、複数のエンディングが発生する可能性があります。

設定	説明
End(終了)タイプ	ワークフローの終了状態を視覚的に示すには、Success(成功) または Failure(失敗) を選択します。終了タイプは、ワークフローのデータには影響しません。ワークフロー開発者に視覚的な手がかりを提供するだけです。
Note(注)	メモフィールドを使用して、ワークフローキャンバスのタイルにカーソルを合わせたときに表示されるツールチップのテキストを入力します。これは、ワークフロー開発者にリマインダーを提供するのに役立ちます。例えば、Failure(失敗) 終了タイプとともに使用する場合、メモは失敗の原因となったテストを要約できます。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンバスのタイルの名前を設定します。

Equation(方程式)

方程式タイルは、複雑な方程式を評価するための高度なタイルです。方程式に他のタイルの変数を含めたり、平均の計算や値の丸めなどの一般的な問題に組み込み関数を使用することができます。関数を使用して、ピーク高やピーク位置を見つけたり、スペクトルに対して他の操作を実行したりすることもできます。

以下の表に、有効な演算子と関数を一覧表示します。

表4-1:

Arithmetic Operations(算術演算)

オペレーター	説明	例
+	加算	15 + 4 = 19
-	減算	15 - 4 = 11
*	乗算	15 * 4 = 60
/	除算	15 / 4 = 3.75

4. ハウソーガイド

オペレーター	説明	例
-	否定	-15 + 4 = -11
mod(モジュロ)	モジュロ除算 (余りを返す)	15 mod 4 = 3
&	テキスト連結	"abc" + "def" = "abcdef"

比較演算子は、False(偽)の場合は0を返し、True(真)の場合は1を返します。

表4-2:

Comparison Operations(比較演算)

オペレーター	説明	例	計算結果
<	未満	2 < 3	True(真)
>	超	3 > 2	True(真)
<=	以下	2 <= 3	True(真)
>=	以上	3 >= 2	True(真)
=, ==	等しい	3 = 3, 3 == 3	True(真)、True(真)
!=, <>	等しくない	3 != 3	False(偽)
True(真)		True(真) = 1	True(真)
False(偽)		False(偽) = 0	True(真)

表4-3:

Logical Operations(論理演算)

オペレーター	説明	例
AND	両方のオペランドが真の場合にTrue(真)を返す	x AND y
OR	いずれかのオペランドが真の場合にTrue(真)を返す	x OR y

以下の表では、角括弧 ([]) で囲まれたパラメータはオプションです。

表4-4:

機能 / 関数

オペレーター	説明
Average(list)	数リストの平均(総和を項目数で除算した商)
Avg(list)	数リストの平均(総和を項目数で除算した商)
Max(list)	数リスト内の最高値
Min(list)	数リスト内の最低値
AMax(list)	最大値の絶対値
AMin(list)	最小値の絶対値

4. ハウソーガイド

オペレーター	説明
Sum(list)	数リストの総和
StdDeviation (list)	標準偏差
Std(list)	標準偏差
acos(number)	ラジアン単位数値のアルコサイン
asin(number)	ラジアン単位数値のアークサイン
atan(number)	ラジアン単位数値のアークタンジェント
aTan2(X1,X2)	ラジアン単位のX1をX2で除算した商のアークタンジェント両引数の符号は、戻り値の象限を決定するために使用されま す。
cos(radians)	ラジアンで測定された角度のコサイン。
cosh(radians)	ラジアンで測定された角度の双曲線コサイン。
sin(radians)	ラジアンで測定された角度の正弦。
sinh(radians)	ラジアンで測定された角度の双曲線サイン。
tan(radians)	ラジアンで測定された角度のタンジェント。
tanh(radians)	ラジアンで測定された角度の双曲線タンジェント
Pi()	円の直径に対する円周の比率
abs(number)	数値の絶対値。
Ceiling (number)	<number>以上の最小の整数。例: Ceiling(2.2)は3.0です
Floor(number)	<number>以下の最大の整数。 例: Floor(2.7)は2.0です
Round (number)	浮動小数点値を最も近い整数値に丸めます。(最も近い偶数の整数に丸めます。3.5 -> 4、4.5 -> 4
sqrt(number)	数値の2乗根。
Truncate (number)	切り捨てられる数。小数点の右側のすべてが削除され、数値の整数部分のみが残ります。戻り値は四捨五入されませ ん。
Random()	0から1までのランダムな小数。
exp(number)	定数e(2.7182818)を指定された数(e^{number})の累乗にした結果
pow(base, power)	累乗された基本値。 例: pow(2,3) = 8
log10(number)	数値の基数10ログ
log(number)	数値の基数10ログ
ln(number)	数の自然対数(基数e対数)
expneg(power)	定数e(2.7182818)を指定された数値($e^{-\text{number}}$)の負の累乗にした結果
ten(power)	10の累乗
tenneg(power)	10の負の累乗

4. ハウソーガイド

オペレーター	説明
negln(number)	負の自然対数
neglog (number)	負の基数-10ログ
invsqrt (number)	逆2乗根
toNumber(text)	テキスト番号を方程式で使用できる数字に変換します。(「10」から10)
textLength (text)	指定されたテキスト内のスペースを含む文字数。CRLFは2文字としてカウントされます。
Y(location [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインの特定の場所でのY軸値
Area(start,end [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインを使用した2つのスペクトル限界間の領域
Pmin(start,end [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインでスペクトルを補正してから、2つのスペクトル制限間の最小Y軸値をレポートします
Pmax(start,end [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインでスペクトルを補正してから、2つのスペクトル制限間の最大Y軸値をレポートします
Ploc(start,end [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインでスペクトルを補正してから、2つのスペクトル限界の間に最大Y軸値が発生する位置 (X軸値) をレポートします
Pavg(start,end [,baseline] [,baseline2])	2つのスペクトル限界間のスペクトルの平均値を決定します
PkHgt (start,end [,baseline] [,baseline2])	Peak Height(ピーク高さ)を見つけます
PkArea (start,end [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインを使用した2つのスペクトル限界間の領域
PkLoc (start,end [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインでスペクトルを補正してから、2つのスペクトル限界の間に最大Y軸値が発生する位置 (X軸値) をレポートします
PkMin (start,end [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインでスペクトルを補正してから、2つのスペクトル制限間の最小Y軸値をレポートします

4. ハウソーガイド

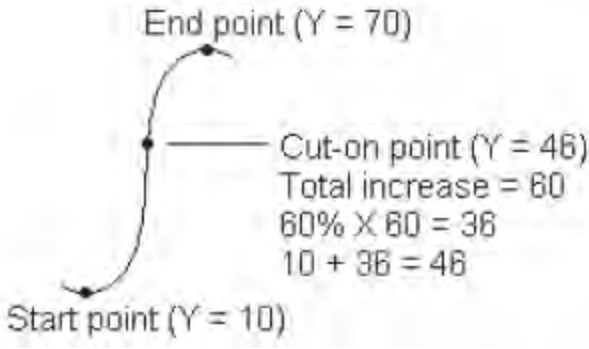
オペレーター	説明
PkMax (start,end [,baseline] [,baseline2])	2点 ベースラインでスペクトルを補正してから、2つのスペクトル制限間の最大Y軸値をレポートします
Pwidth(start, end [, %height])	2つのスペクトル限界間のピーク幅を決定します。ピークがピーク最大値の指定されたパーセンテージに達する幅をReports (レポート) します。
Pcut(start, end [, %height])	<p>指定されたスペクトル領域内のカットオンポイントまたはカットオフポイントの位置 (X軸値) を決定します。例えば、Y値が増加している領域の場合、カットオンポイントが発生し、その増加が領域全体の合計増加の指定されたパーセンテージに達します。「パーセント」を60に設定したカットオンポイントを示す例を以下に示します。</p>  <p>The diagram shows a curve representing a peak. The start point is at Y=10, the end point is at Y=70, and the total increase is 60. A cut-on point is marked at Y=46. The calculation shown is: Total increase = 60, 60% X 60 = 36, 10 + 36 = 46.</p>
Ghalfwidth (start, end)	ピーク高の半分でピークの幅を見つけます
Slope(x1, y1, x2, y2, x3, y3, ...):	傾きを返します (y = mx + b)
Intercept(x1, y1, x2, y2, x3, y3, ...):	インターセプトポイントを返します
ZSlope(x1, y1, x2, y2, x3, y3, ...):	zslope (y = mx) を返します
CorCoef(x1, y1, x2, y2, x3, y3, ...):	補正係数
Laser(x1, y1, x2, y2, x3, y3, ...)	<p>スペクトルが測定された条件下で、機器に最適なレーザー周波数を計算します。</p> <p>x1, x2, x3 ... はスペクトルのピークまたは特徴の測定値を指します。</p> <p>y1, y2, y3 ... は対応するピークまたは特徴のTrue (真) の値を参照します。</p> <p>関数の出力は、測定値をTrue (真)、実際値にできるだけ近いレーザー周波数値です。</p>
DoesFileExist (filename):	<p>引用符で囲まれた完全なファイルパスを受け入れ、True (真) (1) またはFalse (偽) (2) を返します。</p> <p>例: DoesFileExist("C:\Users\MyFiles\MyMethod.qnt")</p>

表4-5:

TQ関数:これらの関数を使用すると、TQ方法からの情報を操作できます

オペレーター	説明
M(name)	使用した測定方法を返します
V(name)	コンポジット成分を返します
C(name)	成分(名前)の濃度を返します
U(name):	成分(名前)の濃度に関連する不確かさを返します
TQ_Y(value):	Yファイルのインデックス値を入力します。最初の要素はインデックス1です。
TQ_Z(value)	Zファイルのインデックス値を入力します。最初の要素はインデックス1です。
U_Set(index, value)	インデックスに値を設定します
TQ_UU(value)	TQ方法に関連付けられたユーザー値にアクセスします
UU_Set(index, value)	指定されたインデックスにユーザー値を設定します

Export(エクスポート)

ユーザーが指定した場所にデータとレポートを送信します。この場所は、お使いのローカルシステム上、または代替ストレージ用のネットワークワークまたはフラッシュドライブ上にあります。

設定	説明
Select data to archive(アーカイブするデータを選択)	ワークフロー中に作成またはインポートされた利用可能なスペクトルとレポートから選択します。
File base name(ファイルベース名)	<p>ベース名は完全なファイル名の前に付加されます。</p> <p>ファイルがアーカイブされると、以下のテンプレートに従って名前が付けられます。</p> <p><base name>_<workflow name>.<tile name of data creation>.<variable name>_YYYY_MM_DD_HHMMSS_<time zone in GMT>.<file extension></p> <p>例えば、「example」というベース名と「myworkflow」というワークフローを使用すると、Measure(測定)タイルで収集されたスペクトルは以下のようにアーカイブされます。</p> <p>“example_my workflow.Measure.Sample_2019_06_25_104928_GMT-0500.spa”</p>
Append date and time to file name(ファイル名に日付と時間を追加する)	<p>選択した場合、システムはデータが保存された日付と時間をファイル名に追加します。これにより、ワークフローが実行されるたびに新規ファイルが作成されます。</p> <p>選択しない場合、ワークフローを実行するたびに、以前にエクスポートされたファイルが新規ファイルで上書きされます。これは、新規ファイルを作成するのではなく、一つのファイルをアップデートする場合に役立ちます。</p>
File location(ファイルの場所)	ファイルがアーカイブされるディレクトリ。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンバスのタイルの名前を設定します。

4. ハウザーガイド

Instruction(指示)

Instruction(指示) タイルを使用して、ワークフローオペレーターに追加の手順を与えます。また、Instruction(指示) タイルには、オペレーターがテキストや数値データを入力するための入力フィールドを含めることもできます。これらのエントリは、後でワークフローで使用できます。例えば、オペレーターが入力したテキストをカスタムレポートに追加できます。

設定	説明
Add image(イメージを追加)	ワークフロー中に指示画面上にオペレーターに表示されるイメージを追加します。有効なファイルタイプは次のとおりです。 .PNG .JPG .GIF .BMP
Add Text Box(テキストボックスの追加)	テキストを追加するために使用します。これは、オペレーターに指示を与えたり、テキストフィールドや数値入力フィールドにラベルを追加する場合に有用です。
Add or Remove PDF(PDFを追加または削除)	オペレーターがクリックまたはタッチして指定されたPDFを表示できるボタンを提供します。 文書ボタンを追加したら、ボタンをクリックしてPDFファイルを指定します。
Add or Remove Cancel Button(キャンセルボタンを追加または削除)	オペレーターがクリックまたはタッチしてワークフローを停止できるキャンセルボタンを提供します。
+ Text Entry(+テキスト入力)	オペレーターがワークフローの後半で使用できるテキストを入力できるようにします。 例えば、オペレーターはアーカイブタイトルで使用できるファイルパスを入力できます。
+ Numeric Entry(+数値入力)	オペレーターが数値を入力できるようにします。この数値は、後で他のタイルで変数として使用できます。 例えば、入力された数値は、数値決定の条件としてDecision(決定) タイルで使用できます。
+ Value(+値)	コリレーションサーチに起因するマッチ率など、変数のデータを表示します。
Tile Name(タイル名)	ワークフローキャンバスのタイルの名前を設定します。

Load Spectrum(スペクトルを読み込む)

ワークフロー中に使用するSPAファイルを読み込みます。機器コンピュータまたはフラッシュドライブまたはネットワーク上の場所でファイルの場所を参照するか、データベースからスペクトルを開くことができます。

これは、保存されたスペクトルをインポートして参照として使用する場合に役立ちます。例えば、減算操作で使用するリファレンススペクトルをインポートしたい場合があります。

設定	説明
From file (ファイルから)	お使いのシステムまたはネットワーク上の場所からSPAファイルを読み込みます。 ファイル名: SPAファイルを参照して、スペクトルを含めます。

4. ハウザーガイド

設定	説明
From database (データベースから)	<p>データベースからスペクトルを開く場合に選択します。</p> <p>Selected spectrum(選択されたスペクトル) : データベースからスペクトルを選択します。</p> <p>Choose during workflow execution(ワークフローの実行中に選択) : ワークフロー中にオペレーターがスペクトルを選択できるようにします。</p> <p>Show only experiments containing this text(このテキストを含む実験のみを表示) : オペレーターの選択を、タイトルまたはタグに指定されたテキストを含むスペクトルのみに制限します。</p>
Import spectrum every run (実行毎にスペクトルをインポート)	<p>選択した場合、ワークフローの実行時にスペクトルがファイルシステムからインポートされます。スペクトルファイルがアップデートされると、ワークフローは常に最新バージョンのスペクトルを使用します。</p> <p>選択されていない場合、ワークフローの作成時にスペクトルファイルのコピーがインポートされます。このスペクトルは、ワークフローを手動で編集してスペクトルファイルを更新した場合にのみ変更されます。</p> <p>このワークフローを共有するか、パッケージに追加する場合は、SPAファイルを個別に共有する必要があり、他のシステムでは、Import Spectrum(スペクトルのインポート) タイルで指定されたのとまったく同じファイルパスで保存する必要があります。</p>
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。

Measure(測定)

測定タイルを使用して、バックグラウンドとサンプルを測定し、測定条件設定を設定します。ワークフロー中に作成されたスペクトルとレポートはデータベースに保存され、アーカイブタイルでアーカイブできます。

設定	説明
Background Settings(バックグラウンド設定)	ワークフローがオペレーターに新規バックグラウンドを取得するように促すか、ワークフロー内の別のタイルからのスペクトルを使用するか、サンプル測定を行うことなしにバックグラウンドのみを測定するかどうかを指定します。
Correction settings (コレクション設定)	大気圧補正および / またはKramers-Kronig補正を適用します。
Use internal polystyrene sample(内部ポリスチレンサンプルを使用)	選択した場合、機器に取り付けられた内部ポリスチレン参照サンプルを使用して、機器の性能を検証します。
Use sample prompt(サンプル入力を使用)	サンプル測定前に、オペレーターに指示を与えるために選選択します。サンプルを挿入するようにオペレーターに指示することもできます。
Use background prompt(バックグラウンド入力を使用)	バックグラウンド測定前に、オペレーターに指示を与えるために選択します。バックグラウンドを測定する準備をするようにオペレーターに指示することをお勧めします。
Allow other workflows to access result of measurement(他のワークフローが測定結果にアクセスできるようにする)	選択した場合、このワークフローのスペクトルを他のワークフローに含めることができます。例えば、このワークフローが実行されてサンプルが測定されると、別のワークフローで収集されたスペクトルをリファレンススペクトルまたはレポートで使用できます。
Show spectrum during measurement(測定中のスペクトルを表示)	測定中にスペクトルを表示する場合に選択します。選択されていない場合、オペレーターには進行状況インジケータのみが表示されます。
Progress text(進行テキスト)	バックグラウンドとサンプル測定中にオペレーターにカスタムメッセージを提供します。

4. ハウザーガイド

設定	説明
Other Measurement Settings(他の測定条件設定)	<p>このワークフローで使用される測定条件設定をカスタマイズするか、別のスペクトルで使用される測定条件をそろえます。</p> <p>Number of scans(スキャン回数): サンプルがスキャンされる回数。通常、スキャン回数が多いほど正確なデータが得られますが、測定に時間がかかります。</p> <p>Match Settings(測定条件をそろえる): 指定したSPAまたはQNTファイルで使用される測定条件設定とマッチするように選択します。この測定で使用されるすべての設定をレビューするには、All Settings(すべての設定)を選択します。</p> <p>Spectrum Title(スペクトルタイトル): スペクトルタイトルに変数データを追加する場合に選択します。</p> <p>追加設定の説明については、「Measurement Settings(測定条件設定)」および「Advanced Measurement(高度な測定条件)」設定を参照してください。</p>
Tile name(タイトル名)	ワークフローキャンパスのタイトルの名前を設定します。

Peak Analysis(ピーク分析)

スペクトルのピーク位置またはPeak Height(ピーク高)を分析します。

設定	説明
Peak height(ピーク高さ)	<p>ベースラインの位置に関係なく、またはベースラインから、ゼロ吸光度(または100%透過率)からPeak Height(ピーク高さ)を測定します。ベースラインから測定した場合、その測定値は「補正されたピーク高」と呼ばれます。</p> <p>Peak position(ピーク位置): 測定するピークの波数を入力します。</p> <p>Corrected(補正済み): ゼロ吸光度(または100%透過率)からではなく、スペクトルベースラインからピーク高を測定する場合に選択します</p> <p>Reference point(リファレンスポイント): ベースラインリファレンスとして1点を使用して、単一点補正を選択します。</p> <p>Reference range(リファレンス範囲): ピークのいずれかの側のポイントを使用してベースラインを計算し、二点補正を選択します。</p> <p>Generate pass/fail result(合格 / 不合格結果の生成): Decision(決定) タイルで使用できる合格 / 不合格結果を生成する場合に選択します。</p>
Peak Ratio(ピーク比)	<p>2つのピーク間の高さの比率を見つけます。ピークは、ゼロ吸光度単位または補正されたベースラインから計算できます。</p> <p>Not corrected(未補正): ピーク高さは、ゼロ吸光度(または100%透過率)から測定されます。</p> <p>Single-point corrected(単一点補正済み): ピーク高さは、入力した波数のベースラインから測定されます。</p> <p>Two-point corrected(二点補正済み): ピークのいずれかの側のポイントを、ベースラインを計算するために使用します。</p> <p>Generate pass/fail result(合格 / 不合格結果の生成): Decision(決定) タイルで使用できる合格 / 不合格結果を生成する場合に選択します。</p>
Find Peaks(ピーク検出)	スペクトルのピーク位置を検出します。ラベル付きピークの結果スペクトルは、Report(レポート) タイルのスペクトルとして、およびTemplate Report(テンプレートレポート) タイルのテンプレートオプションとして有用です。

4. ハウソーガイド

設定	説明
Select spectrum (スペクトルを選択)	ピーク分析で使用するスペクトルを選択します。ワークフローで生成されたスペクトル、またはLoad Spectrum(スペクトルを読み込む) タイルでインポートされたスペクトルから選択できます。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します

Processing(データ処理)

Processing(データ処理) タイルには、減算、正規化、コリレーション、基本的なスペクトル演算、ベースライン補正など、スペクトルデータを処理するためのいくつかのツールが含まれています。

設定	説明
Spectral Math(スペクトル演算)	サンプルスペクトルとリファレンススペクトルを使用して基本的な操作を実行します。スペクトル演算の詳細については、" 取得したデータに基本方程式を適用 "を参照してください。
Sample spectrum(サンプルスペクトル)	操作が適用される開始スペクトル。
Reference spectrum(リファレンススペクトル)	操作で使用されるリファレンススペクトル。
Operation (演算)	Add(加算) Subtract(減算) Divide(除算) Multiply(乗算)
Spectral Math Type (スペクトル演算タイプ)	スペクトル演算のタイプを選択してください。ご利用いただけるオプション <ul style="list-style-type: none"> Factor(係数) Pathlength(光路長) Range(範囲)
Normalization(正規化)	正規化を使用して、選択したスペクトルのY軸スケールを「通常」スケールに変更します。このスケールでは、吸光度スペクトルのようなスペクトルの場合はデータポイントのY値が最低点の0吸光度単位から最高ピークの1吸光度単位までの範囲になり、透過スペクトルのようなスペクトルの場合には、10%から100%までの透過率になります。これらの通常のスケールは、市販のスペクトルライブラリのスペクトルの典型です。 スペクトルが正規化された後は、拡大縮小係数を理解し、それに応じて定量結果を調整しない限り、定量分析に使用することはできません。
Select spectrum(スペクトルを選択)	操作が適用される開始スペクトル。
Max range (最大範囲) (cm-1)	正規化で使用される範囲を設定するために使用します。

4. ハウソーガイド

設定		説明
	Min range (最小範囲) (cm-1)	正規化で使用される範囲を設定するために使用します。
	Target value (目標値)	目標値は吸光度単位で指定します。
Derivative(微分)		スペクトルを1次または2次微分に変換して、ピークの位置または強度を見つけることができますようにします。
	Select spectrum(スペクトルを選択)	操作が適用されるスペクトル。
	Order(次数)	1次または2次微分のいずれかを選択します。
Correlation(コリレーション)		1次スペクトルと2次スペクトル間のマッチ率を返します。QCheck(Qチェック)と同様に、マッチ率は0.0から1.0の間で与えられ、1.0は完全マッチを反映します。
	First spectrum(1次スペクトル)	2次スペクトルを比較する開始スペクトルを選択します。
	Second Spectrum(2次スペクトル)	リファレンススペクトルを選択します。
	Spectral range(スペクトル領域)	スペクトル領域を使用して、完全吸収ピークをコリレーションサーチから除外します。
Scalar Math(スカラー計算)		シングルスペクトルに操作を適用します。
	Spectrum(スペクトル)	操作を適用するスペクトルを選択します。
	Operation(演算)	Add(加算) Subtract(減算) Divide(除算) Multiply(乗算)
	Factor(係数)	スペクトルの振幅を増減して、別のスペクトルと比較してより良いものにすることができます。
Baseline Correction(ベースライン補正)		シフトされたベースラインを補正するために使用します。
	Select spectrum(スペクトルを選択)	ベースラインを補正するスペクトルを選択します。
	Polynomial order(多項式の次数)	補正の多項式の次数を指定します。

4. ハウソーガイド

設定	説明
Conversion(変換)	スペクトルを別の単位に変換します。
Select spectrum(スペクトルを選択)	変換するスペクトルを選択します。
Conversion type(変換タイプ)	以下のいずれかに変換します。 <ul style="list-style-type: none"> Absorbance(吸光度) % Transmittance(透過パーセント) % Reflectance(反射率%) Log1/Reflectance(ログ1/反射率) Kubelka-Munk
Blank regions(ブランク領域)	スペクトルのひとつ以上の領域からデータをクリアします。領域のブランクの詳細については、 "スペクトルの領域をブランクにする" を参照してください。 ブランクにする領域に対して始点と終点の設定Add(追加)をクリックして領域を追加します。
Statistical spectra(統計的スペクトル)	2つ以上のスペクトルの平均および標準偏差を計算します。Report(レポート) タイルで結果スペクトルを見ます。スペクトルの平均または標準偏差の計算に関する詳細については、 "平均および標準偏差のスペクトルを計算する" を参照してください。 2つ以上のスペクトル、実行する計算、計算で使用するデータ形式を選択します。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します

Repeat(リピート)

ワークフローの一部をループして、手順をリピートします。

設定	説明
Repeat ___ times(リピート回数)	ワークフローのループ部分がリピートされる回数を設定します。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。

Report(レポート)

保存、アーカイブ、または印刷できるカスタムレポートを作成します。ワークフローで生成されたReports(レポート)は、ダッシュボードの「Reports(レポート)」セクションで利用できます。

設定	説明
Add image(イメージを追加)	ワークフロー中にオペレーターがレポート画面に表示するイメージを追加します。有効なファイルタイプは次のとおりです。 .PNG .JPG .GIF .BMP

4. ハウザーガイド

設定	説明
Add text(テキストの追加)	テキストを追加するために使用します。これは、オペレーターに指示を与えたり、テキストフィールドや数値入力フィールドにラベルを追加する場合に有用です。
Add or remove document(文書の追加または削除)	オペレーターがクリックまたはタッチして指定されたPDFを表示できるボタンを提供します。 文書ボタンを追加したら、ボタンをクリックしてPDFファイルを指定します。
Add spectrum(スペクトルを追加)	レポートにスペクトルを追加します。ワークフローの初期段階で生成または開かれたスペクトルを選択します。
Add variable(変数を追加)	別のワークフロータイルの値をレポートに追加します。例えば、ワークフローに測定とサーチが含まれている場合、サーチ結果のデータを含めることができます。
Add table(表を追加)	TQ Analyst / 定量方法やピーク分析などの結果の表を表示します。現在の実行だけでなく、ワークフローを実行した以前のインスタンスの結果を表示します。
Add or remove print button(印刷ボタンの追加または削除)	印刷ボタンを使用すると、オペレーターはレポート画面を見ながらレポートを印刷できます。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します

Run Program(プログラムの実行)

Run Program(プログラムの実行) タイルを使用して、お使いのワークフローに実行可能ファイルを実行させます。例えば、このタイルを使用して、サードパーティの自動サンプリングアクセサリーを実行するワークフローの手順を作成します。

このタイルをVariable(変数) タイルまたは他のタイルと組み合わせて、強力なワークフローを作成します。例えば、Repeat(リピート) タイルのカウント変数を使用して、実行可能ファイルに渡された引数を自動的にインクリメントします。

Run Program(プログラムの実行) タイルは、ユーザーの操作を必要とせず、ユーザーインターフェースを持たない実行可能ファイルのみを実行できます。

設定	説明
File name(ファイル名)	実行する実行可能ファイル。このワークフローを別のコンピュータで実行する場合、そのコンピュータのファイルパスはまったく同じである必要があることに注意してください。
Arguments(引数)	実行可能ファイルに引数を渡します。コマンドに変数を含めるには、リストから変数を選択し、Add to Arguments List(変数リストに追加) をクリックします。引数を入力するときは、以下の構文要件を守ってください。 <ul style="list-style-type: none"> 各引数は二重引用符 (“”) で囲む必要があります 引数はスペースで区切ります 例: “-p 6” “workflowname.variable.myVariable”
Verify program file integrity at run time(実行時にプログラムファイルの整合性を確認する)	実行可能ファイルが実行時にまったく同じファイルであることを確認します。 ワークフローを作成すると、本ソフトウェアは実行可能ファイルの場所と名前を保存します。 ファイルが同じ名前の新規実行可能ファイルに置き換えられた場合、そのファイルが代わりに実行されます。このオプションを選択すると、ワークフローの作成時に選択したファイルとまったく同じファイルになります。 exeが別のファイルに置き換えられていないことを確認するために、これを選択したままにしておくことをお勧めします。exeを意図的にアップデートする場合は、ワークフローもアップデートする必要があります。 この設定をオフにすると、EXEを定期的にアップデートする予定であり、ワークフローをアップデートしたくない場合に役立ちます。ただし、これはセキュリティリスクをもたらす可能性があります。

4. ハウソーガイド

Save Result(結果を保存)

収集したデータをCSVファイルにエクスポートします。

設定	説明
Select data to export(エクスポートするデータを選択)	ピーク高さやサーチ結果のマッチ率など、CSVファイルにエクスポートできる利用可能なデータを選択します。
Append to file(ファイルに付加する)	選択すると、エクスポートされたデータが既存のCSVファイルに追加されます。 既存のファイルにデータを追加するには、File Name(ファイル名)フィールドにファイル名を入力します。ファイルが存在しない場合は、入力した名前で作成された新規ファイルが作成されます。
File name(ファイル名)	(Append to File(ファイルに付加)が選択されている場合にのみ利用可能) データが追加されるファイル名を入力します。ファイルがまだ存在しない場合は、新規ファイルが作成されません。
File base name(ファイルベース名)	(Append to File(ファイルに付加)が選択されていない場合にのみ利用可能) ファイルベース名は、日付と時間の前にファイル名に追加されます。
File location(ファイルの場所)	ファイルが追加または作成されるディレクトリ。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。

Search(サーチ)

コリレーションまたは多成分サーチを実行します。

設定	説明
Available libraries(利用可能なライブラリ)	ライブラリをAvailable Libraries(利用可能なライブラリ)列からSelected Libraries(選択したライブラリ数)にドラッグして、サーチで使用します。 Refresh(リフレッシュ)をクリックして、利用可能なライブラリのリストをアップデートします。
Search type(サーチタイプ)	実行するサーチのタイプを設定します。 Correlation(コリレーション): 不明のサンプルを分析するために使用します。 Number of results(結果数): 表示される結果数を設定します。 Multi-component(多成分): サンプルの成分を分析するために使用します。 Number of components(成分数): 表示される成分数を設定します。
Spectral Ranges(スペクトル領域)	サーチする領域の開始値と終了値を追加します。
Select spectrum(スペクトルを選択)	サーチで使用するスペクトルを指定します。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します

Selection(選択肢)

Selection(選択肢)タイルを使用して、オペレーターはワークフローがたどるパスを選択します。

4. ハウソーガイド

設定	説明
Add image(イメージを追加)	ワークフロー中にオペレーターが選択画面に表示するイメージを追加します。有効なファイルタイプは次のとおりです。 .PNG .JPG .GIF .BMP
Add text(テキストの追加)	テキストを追加するために使用します。これはオペレーターに指示を与える場合に有用です。
Add value(値を追加)	別のワークフロータイトルの値をレポートに追加します。例えば、ワークフローに測定とサーチが含まれている場合、サーチ結果のデータを含めることができます。
Selection label(選択肢ラベル)	選択ラベルをEdit(編集)して、ワークフローキャンバスに表示されるテキストを変更します。

Start(開始)

これは、すべてのワークフローの最初のタイトルです。開始タイトルは毎回新規ワークフローが作成されるたびにワークフローキャンバスに自動的に追加されます。

設定	説明
Workflow image(ワークフローイメージ)	ワークフローの実行時に表示されるイメージを決定します。イメージファイルへのファイルパスを受け入れます。 以下のファイルタイプが有効です。 .PNG .JPG .GIF .BMP
Desired aspect ratio(希望アスペクト比)	アスペクト比を指定して、ワークフローの実行時の外観を最適化します。アスペクト比は、オペレーターが使用するディスプレイと可能な限りマッチしている必要があります。 例： 4:3は旧型コンピューターモニター用で、 16:9は高解像度ビデオの標準であり、現在のコンピューターモニターでは一般的です。 以下を受け入れます： 1:1 4:3 5:4 16:9 16:10 3:2 2:1

Tag Spectrum(タグスペクトル)

ワークフロー中に作成されたスペクトルにタグをApply(適用)します。

4. ハウソーガイド

設定	説明
Tag(タグ)	スペクトルにタグを適用します。
Select spectrum(スペクトルを選択)	タグが適用されるスペクトルを選択します。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。

Template Report(テンプレートレポート)

テンプレートからレポートを生成します。ワークフローで生成されたReports(レポート)は、ダッシュボードの「Reports(レポート)」セクションで利用できます。テンプレートレポートのほとんどの設定は、選択したテンプレートタイプによって異なります。

設定	説明
Template type(テンプレートタイプ)	以下のテンプレートタイプから選択します。 ValPro style(ValProスタイル) Single spectrum(シングルスペクトル) Multiple spectra(マルチスペクトル) Search results(サーチ結果) Single quantification(シングル定量) QCheck(Qチェック) Multiple run quantification(複数の実行定量化)
Automatically advance workflow after displaying report for 5 seconds(レポートを5秒間表示した後、ワークフローを自動的に進めます)	選択すると、レポートが5秒間表示された後、ワークフローが進行します。選択されていない場合、オペレーターは手動でワークフローを続行します。
Generate pass/fail result(合格 / 不合格結果を作成)	選択した場合、不合格結果をトリガーするテキストを指定します。例えば、「fail(不合格)」を指定した場合、レポートに「fail(不合格)」というテキストが含まれていると、テンプレートレポートタイルは不合格結果を生成します。

TQ Analyst

指定された定量メソッドタイトルを使用して、サンプルの成分をQuantify(定量)します。

設定	説明
Quantification method(定量メソッドタイトル)	定量メソッドタイトルのQNTファイルを選択します。
Select spectrum(スペクトルを選択)	定量に使用するスペクトルを選択します。
Tile name(タイル名)	ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。

Variable(変数)

変数タイルを使用して、既存の変数に新規値を割り当てるか、新規カスタム変数を作成します。変数タイルで作成または編集された変数は、他のタイルで使用できます。

4. ハウソーガイド

設定	説明
Operation(演算)	<p>操作タイプを選択します。選択した操作によって、利用可能な他の設定が決まります。</p> <p>Set Variable(変数の設定) : 現在の変数の値を設定するために使用します。</p> <p>Crate Variable(変数の作成) : 新規変数を作成するために使用します。</p>
Set Variable(変数の設定)	<p>Variable to set(変数へセット) : 変数を選択して値を変更します。</p> <p>Current variables(現在の変数) : ワークフロー内の現在の変数のリストを提供します。いずれかを選択し、Add to Expression(数式に追加) をクリックして、変数を式に含めます。</p>
Create Variable(変数を作成)	<p>Numeric or Text(数値またはテキスト) : この変数の値のタイプを選択します。タイプによって、この変数に有効な操作が決まります。例えば、タイプをテキストに設定すると、この変数の値を計算に使用できなくなります。</p> <p>Variable name(変数名) : 変数の名前を入力します</p> <p>Initial value(初期値) : この変数の開始値を入力します</p>

Workflow Table(ワークフロー表)

お使いのワークフローのテンプレートとして使用するCSVファイルをインポートします。

Workflow Table(ワークフロー表) タイルを使用すると、ワークフロー全体で使用するオプションの表をインポートできます。例えば、このタイルを使用すると、ワークフローの開始時に一つのオプションを選択し、そのオプションに対応する特定の変数、方法、イメージをワークフロー全体にわたって自動的に開くことができます。

設定	説明
CSV file(CSVファイル)	<p>インポートするCSVファイルを参照します。</p> <p>参照して新規ファイルを選択します。再開して、ファイルのアップデートの確認を行います。</p>
Select row automatically(自動的に行を選択)	<p>CSVファイルから行を自動的に選択します。</p>
Operator selection(オペレーターの選択肢)	<p>ワークフローオペレーターは、ワークフロー中に手動で行を選択します。</p> <p>Operator prompt(オペレータープロンプト) : オペレーターに表示するテキスト指示。</p> <p>Column index for selection options(選択オプションの列インデックス) : 利用可能なオプションとして使用する列を指定します。最初の列はインデックス1です。</p> <p>Column index for selection images(選択イメージの列インデックス) : 選択オプションと一緒にイメージを表示することもできます。イメージを使用しない場合は、インデックスを0に設定します。</p>
Included files(含まれるファイル)	<p>CSVファイルに基づいて予想されるファイルと、ワークフローに含まれているファイルの数を示します。</p> <ul style="list-style-type: none"> • Add(追加) を選択して、一つまたは複数のファイルを追加します。 • 管理を選択して含まれる、ファイルを表示または削除
Tile name(タイル名)	<p>ワークフローキャンパスのタイルの名前を設定します。</p>

4.6 カスタムソリューション

Package Editor(パッケージエディタ)を使用してワークフローをバンドルおよび共有し、Operator(オペレーター)インターフェースを使用してパッケージを開いて実行します。

4.6.1 カスタムソリューション

このページでは、OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア)のパッケージとOperator(オペレーター)インターフェースを使用してカスタムソリューションを開発および実行する方法の概要を説明します。利用可能な場合は、リンクをたどって、特定の機能の使用に関する詳細情報を見つけてください。

カスタムソリューションとは何ですか?

OMNIC Paradigmソフトウェアのカスタムソリューションを使用すると、他のオペレーターが使用できるワークフローを設計してバンドルできます。

開発者はワークフローを設計し、必要なすべてのファイルと一緒に**Packages(パッケージ)**にバンドルしてから、パッケージをRDEPファイルとして共有します。

次に、管理者がパッケージを開いて、Operator(オペレーター)インターフェースを使用してワークフローを実行できるようにします。

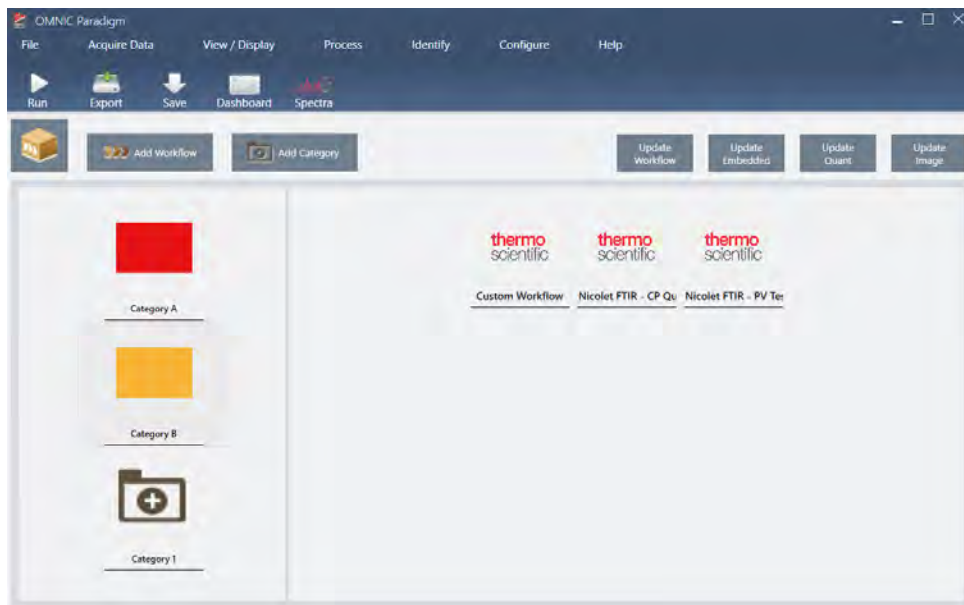
パッケージとPackage Editor(パッケージエディタ)

パッケージは、簡単に共有できるワークフローの整理されたコレクションです。ワークフローをパッケージにバンドルすると、パッケージには、リファレンススペクトル、イメージ、QNTファイルなど、別のシステムでワークフローを実行するのに必要なすべてのファイルと情報が含まれます。

パッケージを作成してエクスポートする場合、別のサイトの管理者は、Operator(オペレーター)インターフェースでパッケージを開いて、ユーザーが含まれているすべてのワークフローを実行できるようにすることができます。

パッケージの作成とエクスポートの詳細については、"[パッケージの作成または編集](#)"を参照してください。

図4-1: Package Editor(パッケージエディタ)



パッケージには2つの主要な要素があります:

- **Workflows(ワークフロー)**:ワークフローは、手順が毎回まったく同じ方法で実行されることを保証する、事前に決定された手順と設定のセットです。ワークフローの詳細については、"[ワークフローについて](#)"を参照してください。
- **Categories(カテゴリ)**:パッケージでは、ワークフローはカテゴリに編成されています。組織にとって意味のある方法でワークフローをカテゴリにグループ化できます。ただし、ワークフローを含めることができるのは1つのカテゴリのみです。同じワークフローを複数のカテゴリに含めることはできません。

パッケージをエクスポートすると、ワークフローで使用されるすべての必要なファイルもパッケージ化されるため、オペレーターはパッケージを開いたときにワークフローを実行するのに必要なすべてのファイルを確実に入手できます。

Operator(オペレーター) インターフェース

Operator(オペレーター) インターフェースは、パッケージから開かれた作動中のワークフローとパッケージの管理に使用されます。パッケージを開いた後、オペレーターには、パッケージワークフローを実行するように設計された簡略化されたインターフェースが表示されます。

Operator Administrator(オペレーター管理者) は、パッケージを開いたり削除したりすることで、利用可能なワークフローを制御できます。

図4-2: Operator(オペレーター) インターフェース



Operator(オペレーター) インターフェースはOMNIC Paradigmソフトウェアのタッチスクリーンインターフェースに似ていますが、開いているパッケージのワークフローのみを表示します。

Operator Administrator(オペレーター管理者) は、管理者コントロールを使用して、パッケージを開き、パッケージのアップデートや削除を行うことができます。パッケージのオープンと削除の詳細については、["オペレーター管理者"](#)を参照してください。

パッケージを操作するためのヒント

ワークフローとパッケージを作成する場合、定量方法や組み込みワークフローなどの依存関係を追跡するのは難しい場合があります。以下のヒントは、お使いのファイルを管理し、お使いのワークフローが最新で維持管理が容易であることを確認するのに役立ちます。

- **アップデートと保守が簡単になるようにお使いのファイルを整理します。**たとえば、お使いのワークフローで使用されるリソース用に単一のフォルダーを作成したい場合があります。次に、そのフォルダー内に、定量方法、イメージ、スペクトルファイルなどの関連項目用の特定のフォルダーを作成します。次に、フォルダを同じ場所に保持し、ファイル名を同じに保ちます。次に、Workflow Editor(ワークフローエディタ)のUpdate(アップデート)コマンドを使用して、ワークフローのすべての依存関係をすばやくアップデートできます。
- **お使いのワークフローをできるだけシンプルに保ちます。**たとえば、Embedded Workflow(組み込みワークフロー) タイルは強力なツールですが、あなたのプロジェクトをさらに複雑にします。組み込みワークフローがアップデートされるたびに、それを使用する他のすべてのワークフローを手動でアップデートする必要があります。

4.6.2 パッケージの作成または編集

Package Editor(パッケージエディタ)を使用して、新規パッケージを作成したり、既存のパッケージを開いて編集することができます。

パッケージを作成するには、少なくとも一つのワークフローが必要になります。ワークフローの作成と使用の詳細については、["ワークフローについて"](#)を参照してください。

パッケージはOMNIC ParadigmソフトウェアのDesktop(デスクトップ) インターフェースでのみ作成可能です。

新規パッケージを作成

◆ 新規パッケージを作成するには

1. デスクトップインターフェースを使用して、**File > Packages > Create(ファイル> パッケージ > 作成)**に移動します。
2. パッケージの名前を入力し、**OK**を選択します。Package Editor(パッケージエディタ)が開き、規定のカテゴリが一つ表示されます。さらにカテゴリを追加したり、カテゴリにワークフローを追加することができます。
3. ワークフローを追加するには、カテゴリを選択し、**Add Workflow(ワークフローの追加)**を選択します。

Workflows(ワークフロー)は単一のカテゴリにのみ含めることが可能です。複数のカテゴリで同じワークフローを使用することはできません。
4. カテゴリを追加するには、**Add Category(カテゴリの追加)**を選択します。
5. **Save(保存)**を選択してパッケージを保存します。保存したパッケージは、ダッシュボードのPackages(パッケージ) ペインで利用できます。パッケージはダッシュボードに戻ったときに自動的に保存されますが、Package Editor(パッケージエディタ)から本ソフトウェアを終了した場合は自動的に保存されません。
6. パッケージを共有するには、**Export(エクスポート)**を選択します。パッケージをエクスポートすると、ファイル名拡張子.rdepで保存されます。

ワークフローとカテゴリを整理するためのヒント

お使いのワークフローとカテゴリをパッケージに整理する際に考慮すべき重要な要素がいくつかあります。

- **ワークフローは一つのカテゴリにのみ含めることができます。** 同じワークフローを複数のカテゴリで使用することはできません。カテゴリ間で共有したいワークフローがある場合は、共有されるワークフロー専用に関別のカテゴリを作成することをお勧めします。これは、複数のパッケージの場合にもTrue(真)です。以前に開かれたパッケージに同じ名前のワークフローがすでに含まれている場合、そのワークフローが別のカテゴリに含まれていると、そのオペレーターのAdministrator(管理者)は新規パッケージを開くことができません。
- **カテゴリにも一意の名前を付ける必要があります。** オペレーターがパッケージを開くと、以前のパッケージのカテゴリと同じ名前を使用するカテゴリがマージされます。例えば、新規パッケージにCategory A(カテゴリA)という名前付きのカテゴリが含まれていて、以前のパッケージにすでにCategory A(カテゴリA)が含まれている場合、カテゴリは両方のカテゴリのすべてのワークフローを含む単一のカテゴリにマージされます。

以下の例を考えてみましょう:

- カテゴリA(1次パッケージ)
 - ワークフロー1
 - ワークフロー2
- Category A(カテゴリA)(2次パッケージ)
 - ワークフロー3

次のように表示されます:

4. ハウソーガイド

- カテゴリA
 - ワークフロー1
 - ワークフロー2
 - ワークフロー3

パッケージを編集

パッケージは、ダッシュボードのPackages(パッケージ) ペインまたは保存したRDEPファイルのいずれかから開いて編集することが可能です。

◆ パッケージを編集するには

- デスクトップインターフェースのダッシュボードから
 1. Workflow Pane(ワークフローペイン)にスクロールし、リストからPackages(パッケージ)を選択します。
 2. パッケージを右クリックして、Edit(編集)を選択します。パッケージはPackage Editor(パッケージエディタ)で開きます。
- 保存したRDEPファイルから
 1. ダッシュボードから、File(ファイル) > Packages(パッケージ) > Open(開く)に移動します。
 2. RDEPファイルを選択し、Open(開く)を選択します。そのファイルはダッシュボードのパッケージリストに追加されます。
 3. Packages(パッケージ) ペインで、パッケージを右クリックしてEdit(編集)を選択します。

Package Editor(パッケージエディタ)からRDEPファイルを開くと、パッケージはPackage Editor(パッケージエディタ)で自動的に開かれます。

ワークフローをアップデート

Package Editor(パッケージエディタ)には、ワークフローとそれに関連するファイルをアップデートするためのツールがいくつか含まれています。

パッケージにワークフローを追加すると、ワークフローファイルがそのパッケージにコピーされます。いかなるアップデートもこのパッケージコピーにのみ適用され、元のファイルまたはワークフローファイルをコピーした他のいかなるパッケージにも反映されません。

ワークフローファイルとそれに関連するファイル(イメージやQNTファイルなど)の同期を維持するには、Workflow Editor(ワークフローエディタ)でそれらを手動でアップデートする必要があります。予期しない動作や結果を回避するには、Workflow Editor(ワークフローエディタ)を使用してワークフローを直接アップデートしてから、Package Editor(パッケージエディタ)のUpdate Workflow(ワークフローをアップデート) コマンドのみを使用することをお勧めします。

コマンド	説明
Update Workflow(ワークフローをアップデート)	選択したワークフローを再開し、ワークフローに含まれる任意のファイル(例えば、変更されたイメージファイルなど)を含む変更をアップデートします

コマンド	説明
Update Embedded(組み込みワークフローをアップデート)	Embedded Workflow(組み込みワークフロー) タイルを使用して組み込まれた任意のワークフローをアップデートします。
Update Quant(定量をアップデート)	ワークフローに含まれていた.QNTファイルを再開します。
Update Image(イメージをアップデート)	ワークフローで使用されるすべてのイメージファイルを再開します。

テスト パッケージ

Run(実行) コマンドを使用して、パッケージをエクスポート前にテストします。パッケージを実行することにより、Operator(オペレーター) インターフェースに表示されるカテゴリとワークフローを実行することができます。

注記 パッケージを実行する際に、データを収集する任意のワークフローを実行すると、ワークフローを通常どおり実行した場合と同じように、測定値がデータベースに追加されます。

ワークフローを自動的に実行

Auto Run(自動実行)を使用して、ワークフローを自動的に実行するように設定できます。Auto Run(自動実行)が有効になっている場合、オペレーターの入力なしでワークフローが実行されます。このソフトウェア使用中に、ワークフローはバックグラウンドで実行されます。ワークフローがバックグラウンドで実行されている場合、オペレーターはワークフローが完了するのを待ってから別のワークフローを実行する必要があります。

ワークフローがユーザー入力を必要としない場合にのみ、ワークフローをAuto Run(自動実行)に設定することができます。

Auto Run(自動実行)で複数のワークフローを実行する予定になっている場合、それらのワークフローはキューに追加されます。例えば、一つのワークフローが1時間ごとに実行され、別のワークフローが2時間ごとに実行される場合、それらのワークフローのいずれも部分的に重複する時間に実行され、互いに干渉することはありません。

◆ Auto Run(自動実行)を有効にするには

1. Package Editor(パッケージエディタ)で、ワークフローを右クリックし、**Set Up Auto Run(自動実行の設定)**を選択します。
2. **Enable automatic running for this workflow(このワークフローの自動実行を有効にする)**を選択し、頻度値を時間単位で入力します。部分時間を入力することもできます。例えば、0.5を入力すると、ワークフローは30分ごとに実行されます。
3. **OK**を選択します。

そのワークフローは、パッケージがOperator(オペレーター) インターフェースで開かれた後に自動的に実行されます。

4.6.3 オペレーター管理者

Operator(オペレーター) インターフェースのAdministrator(管理者) 制御を使用して、パッケージを管理し、管理者パスワードの変更を行い、Desktop(デスクトップ) インターフェースに戻ります。

管理者コントロールにアクセスするには、Operator(オペレーター) インターフェースのメニューからAdministrator(管理者)を選択し、正しいパスワードを入力します。規定のパスワードはPassword(パスワード)です。管理者は、本ソフトウェアインストール後すぐにパスワードの変更を行う必要があります。

パッケージの管理

管理者ビューの [Package Maintenance(パッケージメンテナンス)] タブを使用して、パッケージを管理します。

パッケージを開く

パッケージを開くと、パッケージのカテゴリとワークフローがOperator(オペレーター) インターフェースにロードされます。パッケージが開かれると、オペレーターはカテゴリを選択してワークフローを実行できます。自動的に実行するように設定されたワークフローは、スケジュールどおりに実行を開始します。

新規パッケージを開くと、以前に開いたパッケージのカテゴリとワークフローに新規カテゴリとワークフローが追加されます。例えば、管理者が「パッケージA」を開き、後で「パッケージB」を開くと、オペレーターには両方のパッケージのカテゴリとワークフローが表示されます。

◆ パッケージを開くには

1. Operator(オペレーター) インターフェースを使用して、メニューを開き、**Administrator(管理者)**に移動します。
2. 管理者コントロールにアクセスするためのパスワードを入力します。
3. **Package Maintenance(パッケージメンテナンス)** タブで、**Open(開く)**を選択します。
4. パッケージファイルを選択し、**Open(開く)**を選択します。パッケージファイル名の拡張子は.rdepです。

パッケージをアップデート

以前に開いたパッケージと同じ名前のパッケージを開くと、パッケージがアップデートされます。

例えば、過去に「パッケージA」というパッケージを既に開いている場合、「パッケージA」とも呼ばれる新規パッケージを開くと、新規パッケージが以前のパッケージに置き換わります。

パッケージを削除

パッケージを削除すると、そのパッケージのカテゴリとワークフローがOperator(オペレーター) インターフェースから削除されます。

◆ パッケージを削除するには

1. Operator(オペレーター) インターフェースを使用して、メニューを開き、**Administrator(管理者)**に移動します。
2. 管理者コントロールにアクセスするためのパスワードを入力します。
3. パッケージのリストから一つまたは複数のパッケージを選択します。
4. **Delete(削除)**を選択し、確認ダイアログで選択肢を確認します。

管理者パスワードの変更

「Change Password(パスワードの変更)」タブを使用して、Operator Administrator(オペレーター管理者)のパスワードを変更します。

【このページは意図的に空白にしています】

4.7 データを保護

OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) とSecurity Suite(セキュリティスイート) ソフトウェアを組み合わせて、データの整合性とセキュリティを確保します。

4.7.1 OMNIC Paradigmソフトウェアによるデータのセキュリティと整合性

データのセキュリティと整合性を確保し、お使いのラボが21 CFR Part 11またはその他の規制に準拠できるようにするには、OMNIC™ ParadigmソフトウェアをThermo Scientific Security Suite(セキュリティスイート) ソフトウェアとペアリングします。

Security Suite(セキュリティスイート) は、包括的なデータセキュリティツールセットであり、以下のタスクを実行できます。

- OMNIC Paradigm software(OMNIC Paradigmソフトウェア) およびその他の機器アプリケーションの機能およびツールへのアクセスを制限および制御します。
- 適切なデータ処理を保証するためのセキュリティポリシーを設定および管理します。
- 責任を確立するために、デジタル署名をカスタマイズして適用します。
- セキュリティイベントをログに記録して表示します。

Security Suite(セキュリティスイート) ソフトウェアを購入して、単一のシステムを管理したり、ネットワーク上に分散された複数の機器を管理することができます。インストール後、セキュリティのためにOMNIC Paradigmアプリケーションを構成するのはほんの一瞬です。

Security Suite(セキュリティスイート) ソフトウェアが21 CFR Part 11への準拠にどのように役立つかについては、21 CFR Part 11への準拠を参照してください。

このページは意図的に空白にしています]