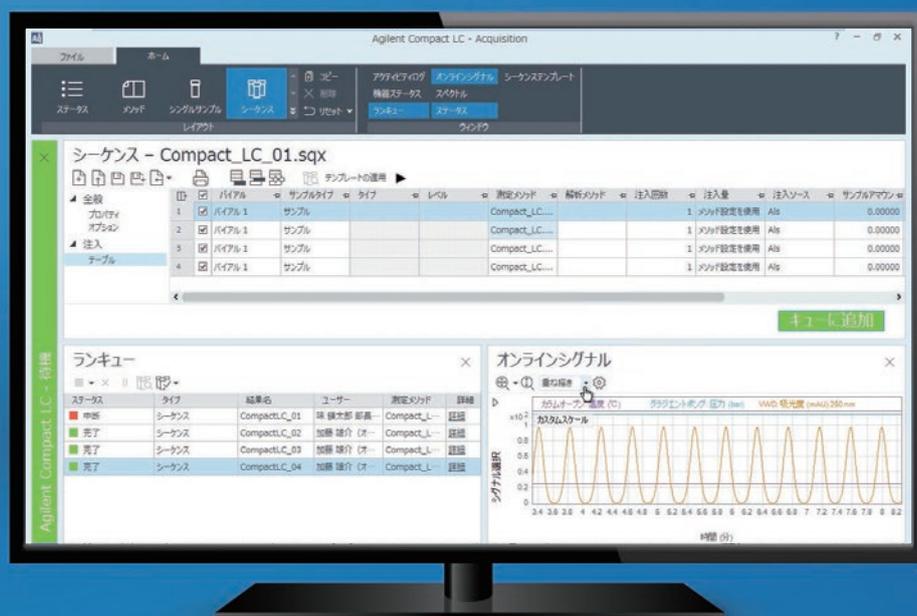


# Agilent OpenLab CDS 2 クロマトグラフィーデータシステム

新世紀 クロマトグラフィーデータシステム 登場





## 高機能で新しいソフトウェア ラボのニーズに合わせた設計

アジレントは、30年以上にわたって分析装置の最先端企業として業界をリードし、お客様を長年サポートしてきました。また、歴史を通して変遷するラボの姿を、データインテグリティに関する規制の進化を目にしてきました。だからこそ、ラボが継続的に成果を上げていくには何が必要なのか、ラボがどんな課題を抱えているのか、ラボの運用維持に必要なものは何かを熟知しています。

現代のラボは、スタッフの確保や予算の管理といった問題に対処しなければなりません。また、より短時間でより大きな成果を求める要求にも応えなければなりません。もちろん、正確性を犠牲にすることは許されません。

アジレントが、次世代の OpenLab クロマトグラフィーデータシステム (CDS) を開発した理由は、ここにあります。この高機能なソフトウェアによって、ネットワーク環境でもスタンドアロン環境でも、確実にコンプライアンスを準拠しつつ、効率性と生産性を維持しながら、アジレントの装置を全体的にコントロールします。

# ラボの課題を解決する OpenLab CDS 2

アジレントの原動力は、お客様の声です。実際、最新の OpenLab CDS 2 は、ラボからのフィードバックを元に開発が進められました。このソフトウェアを使用することで、アジレントの分析装置を最大限に活用し、今後何年にも渡ってラボの生産性と効率を高めていくことができます。

## 習得も操作も簡単

必要な時に必要なコントロールのみが表示される、直観的で画期的なインターフェースを備えています。また、オンデマンドの学習ツールと組み合わせることで、新しいスタッフでもすぐに使いこなせるため、トレーニングの時間とコストが最小限で済みます。

## 科学的視点を重視

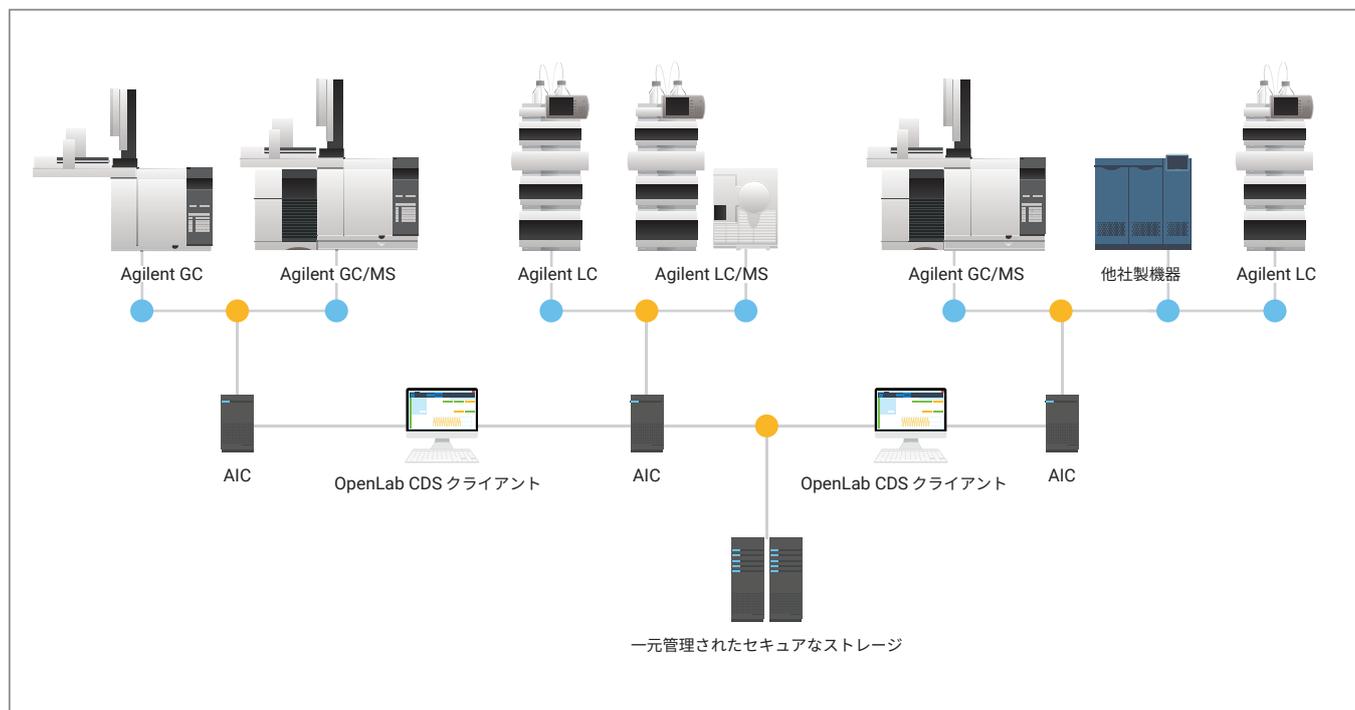
分析データを、装置ではなく、サンプルを中心とした観点から捉えることができます。IT に関連する作業は IT 担当者に任せ、貴重な時間を科学の解明に費やすことができます。ラボに導入されている全ての装置のデータバックアップと、セキュリティが適切かつ自動的に処理されるため、安心して解析作業に専念できます。

## 1つのラボに1つのソフトウェアシステム

OpenLab CDS 2 では、分析現場で使用されている装置にアクセスし、コントロールすることができます。アジレントのクロマトグラフやシングル四重極質量分析計だけでなく、他社製のクロマトグラフの制御も可能です。装置ごとに異なるソフトウェア製品のトレーニングに時間を費やす必要がないため、ラボの生産性を高めることができます。

## 操作の一元化による時間の節約

クライアント / サーバー環境では、装置の状態や分析中のサンプルをその場で確認できます。ラボ内はもちろん、世界各地のラボ間での情報共有も可能です。そのすべては、デスクから離れることなく行うことができます。



OpenLab CDS 2 は、個々のワークステーションから大規模な分散ネットワークラボ環境に至るまで、お客様のニーズにぴったりの規模でご導入できます。

# 直観的に操作できるユーザーインターフェース

お客様の声を元にして作られた OpenLab CDS 2 のインターフェースは、どこに何があるのかが分かりやすく、必要な時に必要な情報だけを表示させるようになっています。必要最小限の情報と色彩による表示を用いることで、一目で分析の内容を把握することができます。

The screenshot displays the OpenLab CDS 2 software interface. At the top, there is a navigation bar with tabs for 'ファイル' (File), 'ホーム' (Home), and 'コントロール' (Control). Below this is a toolbar with icons for 'ステータス' (Status), 'メソッド' (Method), 'シングルサンプル' (Single Sample), and 'シーケンス' (Sequence). A 'コントロール' (Control) panel is visible on the right, containing buttons for 'コピー' (Copy), '削除' (Delete), 'リセット' (Reset), 'アクティビティログ' (Activity Log), 'オンラインシグナル' (Online Signal), '機器ステータス' (Instrument Status), 'スペクトル' (Spectrum), 'ランキュー' (Run Queue), and 'ステータス' (Status). A 'ウィンドウ' (Window) menu is also present.

The main window is titled 'ランキュー' (Run Queue) and contains a table with the following data:

ステータス	タイプ	名前	ユーザー	測定メソッド	詳細
■ 測定中	シングルサンプル	test-toluene-...	cdsadmin2	test-gc-ms59...	詳細

Below the table is a 'オンラインシグナル' (Online Signal) window showing a chromatogram. The y-axis is labeled 'シグナル選択' (Signal Selection) and 'x10<sup>3</sup>'. The x-axis is labeled '時間 (分)' (Time (min)) and ranges from -50 to 8. A single sharp peak is visible at approximately 2.5 minutes. The window includes a toolbar with icons for zooming and a '重ね描き' (Overplot) dropdown menu.

At the bottom of the interface, a status bar displays: '現在のユーザー: cdsadmin2, アクティブプロジェクト: test-GC-MS(5977A)'.

## 装置のステータスバー

装置のステータスはそれぞれの状態で色が異なり、分析中は青、プレランは紫、待機は緑など、視覚的に分かりやすく表示されます。

## ステータスバー

使用中のソフトウェアのステータスが表示されます。どのユーザー名で操作しているのか、他に動いているソフトウェアやファイルがあるのかが示されます。

## ツールバーアイコン

各ウィンドウ内での作業は、アイコンをクリックして行います。作業内容に関連した図アイコンになっているため、スムーズに次の作業へ移行できます。

## タブとリボン

操作の種類がタブで分かれ、作業に必要なコマンドがリボンに配置されていることで、速やかに作業を行うことができます。

## ヘルプ & ラーニング

操作で困ったときに使用するヘルプ機能は、対話的なオンデマンドチュートリアルガイドになっています。特定のタスクやプロセスのみを手順に従って覚えられるので、短時間で必要な操作のみを確認できます。

機器ステータス

ダッシュボード Agilent 7890B MSD

78xx ALS 待機  
アイドル

Agilent 7890B オンライン 分析 EMF

バック注入口 流路

バック SS 注入口 200 °C [200 °C] 18.6 psi [18.6 psi]  
カラム #1 50 °C [50 °C] 1.5 mL/min  
PCM C 3.8 psi [3.8 psi]  
カラム #2 50 °C [50 °C] 1.3 mL/min  
カラム #6 50 °C [50 °C] 1.3 mL/min  
FID 250 °C [250 °C]  
MSD

MSD 分析

チューニングファイル: atune

実行中 (35 μA [#1])  
230°C [230°C] 1400V  
100.0% 8.05E-6 Torr

分析 5.21 / 13.00 min

機器 分析 [?] オン オフ

スペクトル

MSD

スキャン, EI+  
 SIM, EI+

スペクトル選択

スキヤン, EI+  
質量: (m/z) 69.20, 高さ: 160  
69.20

SIM, EI+  
質量: (m/z) 91.00, 高さ: 57  
91.00 92.00

## ウィンドウ選択

画面に表示させたいウィンドウを、ここで選択します。必要なウィンドウだけを表示させ、不要なウィンドウを非表示にすることで、画面を効率よく整理できます。

## ウィンドウ

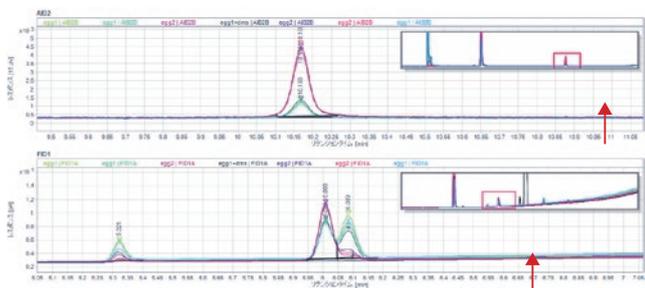
各ウィンドウのサイズ、配置場所は自由に設定可能です。ウィンドウのレイアウトは各ユーザーごとに保存できるため、各ユーザーが使いやすい、慣れ親しんだレイアウトで作業できます。また、このウィンドウレイアウトは、ファイルやソフトウェアを閉じても維持されます。

# 複雑なデータ解析を簡単に実行

OpenLab CDS 2 に搭載された最先端のデータ解析ツール、Data Analysis により、大量なデータの高速度処理と迅速なデータ確認が実現します。数千ものピークや成分の中から、不自然な結果を瞬時に突き止め、ワンクリックで素早く積分ができます。

## 柔軟性の高いクロマトグラムの拡大と軸スケール

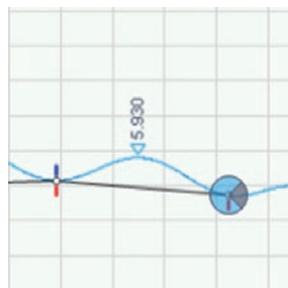
OpenLab CDS 2 では、「ズーム概要ウィンドウ」アイコンをクリックすると、クロマトグラム全体の中でどの部分が拡大表示されているのかが一目でわかります。クロマトグラムを分割表示した時でも、この機能はそれぞれのクロマトグラムで独立に作用します。異なるメソッドや異なる検出器で、同じサンプルを分析して比較する時などに役立つ機能です。



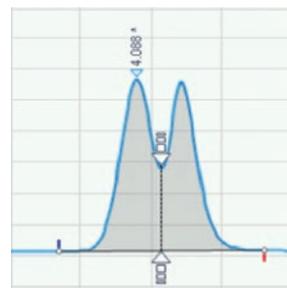
クロマトグラムの拡大箇所が赤枠で表示されます

## マニュアル積分でもベースラインは思いのまま

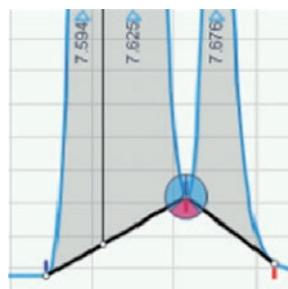
OpenLab CDS 2 では、マウスカーソルをクロマトグラム上に合わせると、ソフトウェアが自動で判断して、適切なマニュアル積分処理が表示されます。どのようにベースラインを定義すればよいのか一瞬でわかるだけでなく、思い通りのベースラインを簡単に定義できます。食品、環境、天然物分析などでは、非常に便利な機能です。



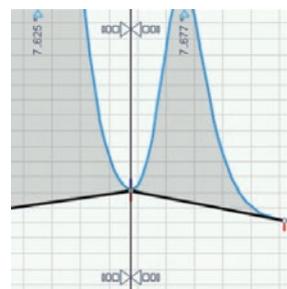
新規ベースラインの作成



ピークの分割



ベースラインの修正

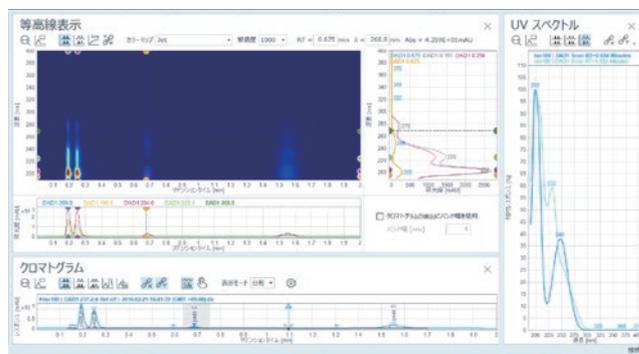


ピークのマージ

## DAD のデータを可視化する等高線表示

未知サンプルに対するメソッドを開発する際には、他のパラメータ同様、最適な検出波長も決めなければなりません。等高線表示では、DAD で取得した三次元の情報を 1 つの画像で表現することが可能です。これにより、目的のサンプルに最適な検出波長が分かるだけでなく、そのサンプルに含まれる不純物の有無も調べることができます。

等高線表示画面にマウスカーソルを移動させると、右図のような直感的に操作可能なホイールが出現します。このホイール操作では、任意のクロマトグラムやスペクトルを選択して等高線表示画面の下と右に表示させるほか、選択したクロマトグラムやスペクトルの解除、また抽出したクロマトグラムの情報をメソッドに追加させることもできます。



- 240 クロマトグラム・スペクトルの選択 (複数選択可)
- 235 選択したクロマトグラム・スペクトルの選択解除
- 230
- 225 抽出したクロマトグラムの情報をメソッドに追加

## 自在なクロマトグラム表示

クロマトグラムを画面に表示させるモードとして、一般的な分割モードや重ね書きモードの他に、検出器ごと、サンプルごと、シグナル名ごと、データごとに表示させるモードも選べます。スプリッタやハートカットなどを用いて複数の検出器から信号を取り込んだ際、それぞれの検出器ごとにクロマトグラムを重ね書きすることが可能になります。

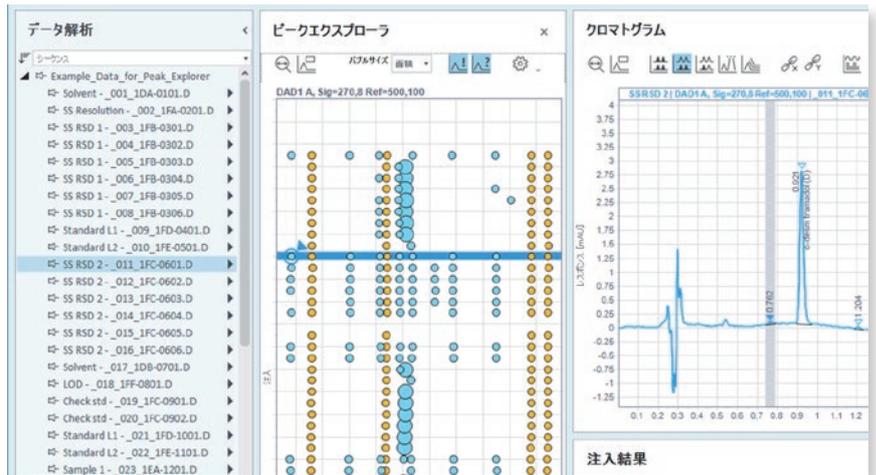
また、「ズーム概要ウィンドウ」アイコンをクリックすると、クロマトグラム全体の中での部分が拡大表示されているのかが一目でわかります。クロマトグラムを分割表示した時でも、この機能はそれぞれのクロマトグラムで独立に作用します。異なるメソッドや異なる検出器で、同じサンプルを分析して比較する時などに役立つ機能です。



## バブルチャートによる傾向の可視化

ルーチン分析でも、予想外の結果が出てしまった場合には、たくさんのクロマトグラムを参考にして原因を究明する必要が出てきます。ピークが消えてしまったり、逆に増えていたり、リテンションタイムがずれていたり、積分値が不自然だった場合、ピークエクスプローラ機能ならすぐに判断することができます。

数字の羅列から異常な傾向を発見するには困難が伴いますが、ピークエクスプローラではバブルチャートで表現することができるため、一目で発見できるだけでなく、それが異常なのか自然現象なのかを判断する材料にもなります。

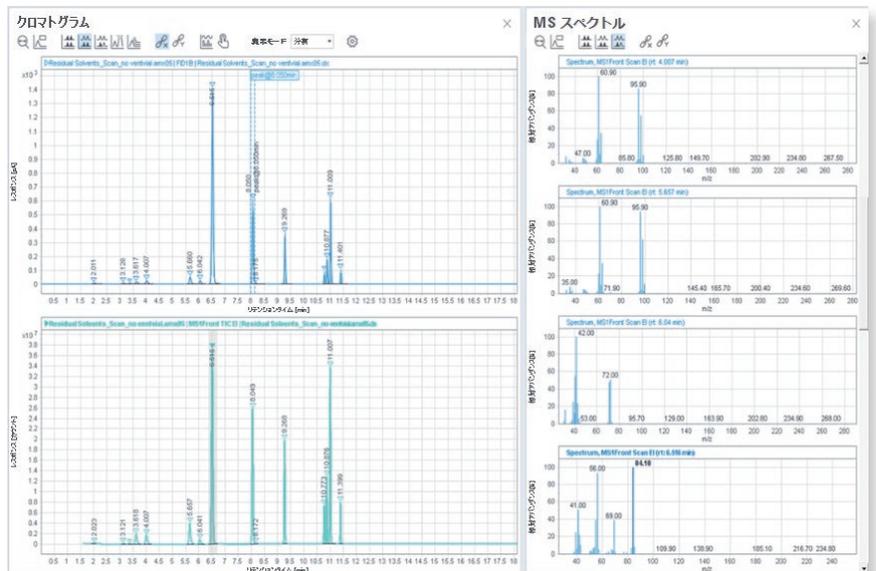


## 1つのソフトウェアでMSも解析

従来では、クロマトグラムの解析とMSスペクトルの解析は別のソフトウェアで行うことがあり、両方の情報を扱う科学者にとっては2つのソフトウェアの操作法を覚えなければなりません。

OpenLab CDS 2では、GCとLCだけでなく、シングル四重極GC/MSとLC/MSのデータも解析できるため、操作法を覚えるべきソフトウェアの数が少なくなります。

また、クロマトグラムの情報とMSの情報も1つの画面に並べて表示できるため、データやサンプル同士の比較を今まで以上に多角的に行うことが可能になります。

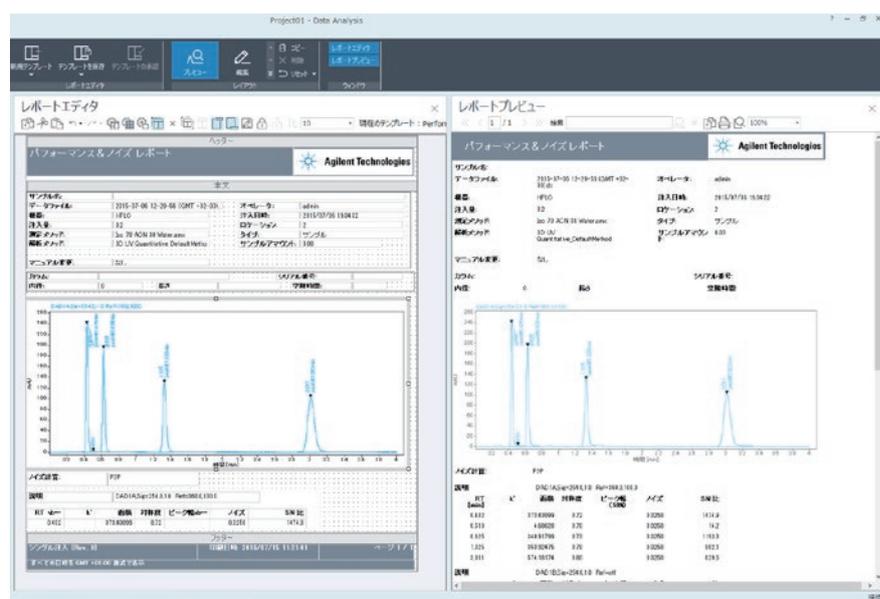


# お好みのレポートを自由自在に作成

OpenLab CDS 2 には、Excel などで作成するようなレポートを、そのままソフトウェア内で行うことができるインテリジェントレポート機能が標準で備わっています。簡単な操作で、各部署や依頼者の要望に沿ったレポートが作成できるだけでなく、手作業やデータ移行で発生する時間のロスやミスをなくすることが可能です。また、作成したレポートは、PDF、Excel、Word、テキスト形式で保存することができます。

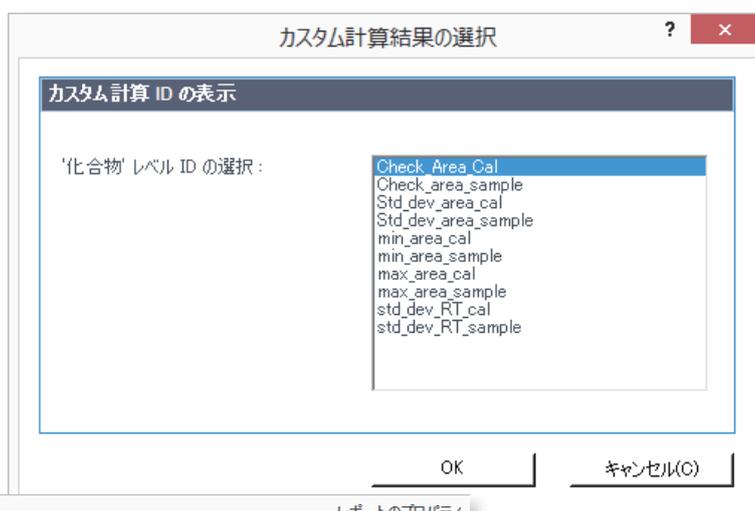
## 分かりやすい編集とプレビュー画面

インテリジェントレポートによるレポート作成は、直観的で分かりやすく、好きな場所に好きな情報を配置させることができます。その作成作業は、まるで PowerPoint でスライドを作成するような感覚で行えます。標準搭載されているテンプレートの数も多く、また、それらのカスタマイズも可能なため、誰が見ても分かりやすいレポートに仕上げることができます。レポートの編集画面とプレビュー画面を並べて表示させることができるため、編集中のレポートが実際にどのように出力されるのかを確認しながらレポート作成が行えます。



## カスタム計算で Excel 要らず

インテリジェントレポートの中には、頻繁に使用する計算式が標準インストールされていますが、自由に計算式を作成することもできます。この計算式の作成方法は、Excel の関数で計算式を作成するのと同じ感覚で行えます。インテリジェントレポートでは、レポート内で計算式の適用と作成が行えるため、計算結果を算出させるためにデータを Excel に移す必要はありません。そのため、データを移す際に起こる手作業での入力作業と入力ミス、入力した数値のダブルチェックといった心配はなくなり、レポート作成における作業時間が大幅に短縮されます。



## 合否判定を自動で可視化

最適な解析が行われた分析データでも、数字の羅列の中に埋もれてしまっは意味がありません。また、その中から必要なデータを目視で抽出することは至難の業です。

インテリジェントレポートでは、基準値から外れた結果に対し、数値やセルの色を自動で変更するよう設定することができます。この設定を行うことで、注目すべき結果を一目で判別できるようになるだけでなく、結果の見落としを防ぐことが可能になります。

また、レポートに数値を掲載させずに、計算結果を元にして「合格」「不合格」といった判定だけをレポートに記すこともできます。

基準値

ベンゼン	2.00
トルエン	10.20

化合物名 ベンゼン

	サンプル名	保持時間 [分]	ピーク幅	面積	高さ	濃度 [ng/ul]
1	再現性サンプル	11.447	0.020	516.2337	399.9391	2.000
1	再現性サンプル	11.447	0.021	514.949	394.4178	1.995
1	再現性サンプル	11.448	0.021	528.4286	406.1231	2.047
1	再現性サンプル	11.447	0.020	513.7901	392.5465	1.991
1	再現性サンプル	11.448	0.020	535.1037	411.8769	2.073

化合物名 トルエン

	サンプル名	保持時間 [分]	ピーク幅	面積	高さ	濃度 [ng/ul]
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2519.3979	2177.2207	10.000
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2519.2905	2172.5161	10.000
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2581.9165	2242.7595	10.248
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2521.7312	2172.7935	10.009
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2623.0469	2259.4985	10.411

## MS スペクトルもレポートに追加

このインテリジェントレポートでは、レポート上に GC/MS と LC/MS のスペクトルと TIC を掲載することができます。この時のスペクトルは、データ解析メソッドに基づいた結果が反映されるので、もしバックグラウンド補正を行っていれば、この結果がレポートに反映されます。また、GC/MS では NIST ライブラリでの検索結果や、ライブラリの参照スペクトルもレポートに掲載することもできます。

シグナル: MS1Front TIC EI

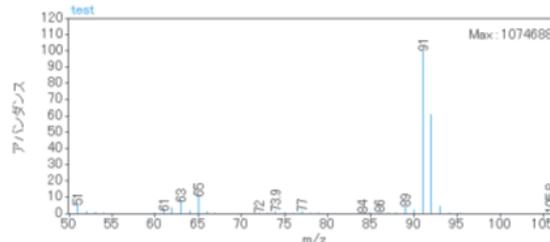
化合物名	シグナル名	RT [min]	面積	面積%	MS スペクトル比較一致ファクタ
test	MS1Front TIC EI	12.181	6532165.1903	100.0000	1000.000

リテンションタイム:

12.181

化合物名:

test



化合物名	スコア	リバーススコア	一致率 %	ライブラリ名	CAS #	ライブラリ ID
Toluene	946	946	53.42	mainlib	108-88-3	60525
Cyclobutene, 2-propenylidene-	914	923	14.27	mainlib	52097-85-5	60523

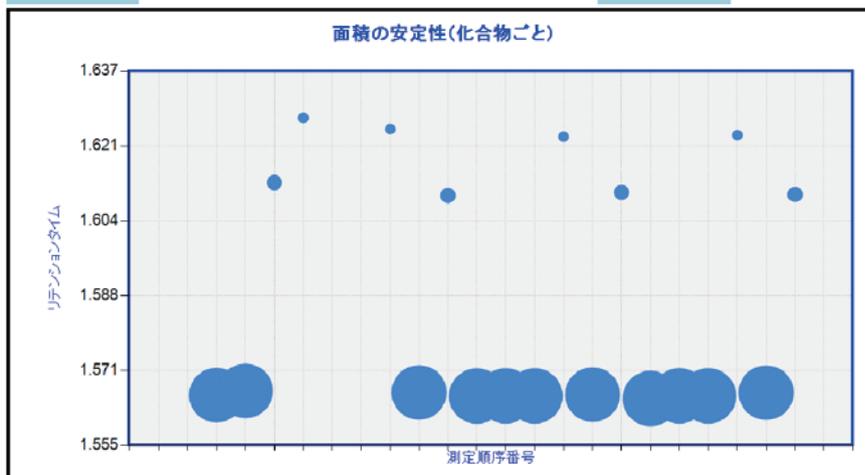
## 一目で違いが分かるバブルチャート

従来のクロマトグラムと表によるレポートだけでなく、インテリジェントレポートではバブルチャート形式で結果を表現することもできます。他のデータと異なる傾向を示す結果を、発見しづらい表と数字の羅列ではなく、バブルチャートで表現することで、一瞬で異常な結果を発見することが可能になります。

ルーチン分析における異常サンプルの検出や、化合物やサンプルの経時変化の追跡などで便利な表現方法になります。

化合物: TRAMADOL

予想 RT: 1.601



# データインテグリティ対策

アジレントは、データインテグリティに対して真剣に取り組んでいます。規制ガイドラインの遵守が必要なおお客様のニーズの変化に、常に対応しています。アジレントはお客様と緊密に連携して、お客様のラボが常にコンプライアンスに準拠し、規制違反のリスクを最小限に減らすことができる機能を提供します。

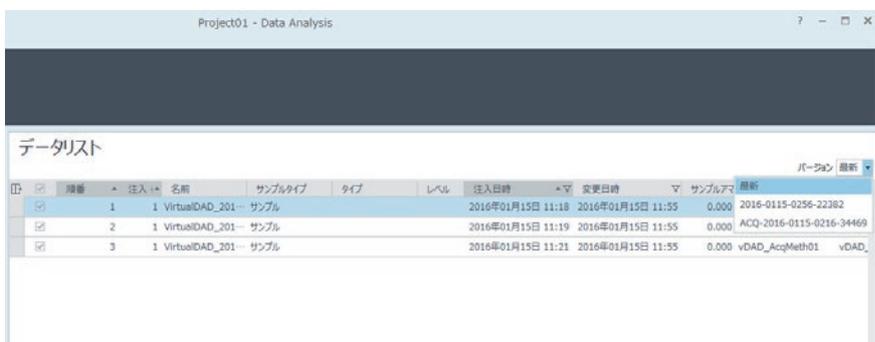
## 慎重なアクセス制御

各ユーザーとグループの役割を決定するルールは、各ルールによって権限が異なっています。OpenLab CDS 2 では、ユーザーとグループのルールや各ユーザーがアクセスできるデータに基づいて、アクセス権限を割り当てることができます。このため、ユーザーとそのアクセス権限、およびアクセスできる情報を適切に設定することが可能です。つまり、新たなユーザーやグループを設定する際にルールを割り当てれば、不正アクセスによる機器操作や設定変更、データの改ざんなどを防ぐことができます。



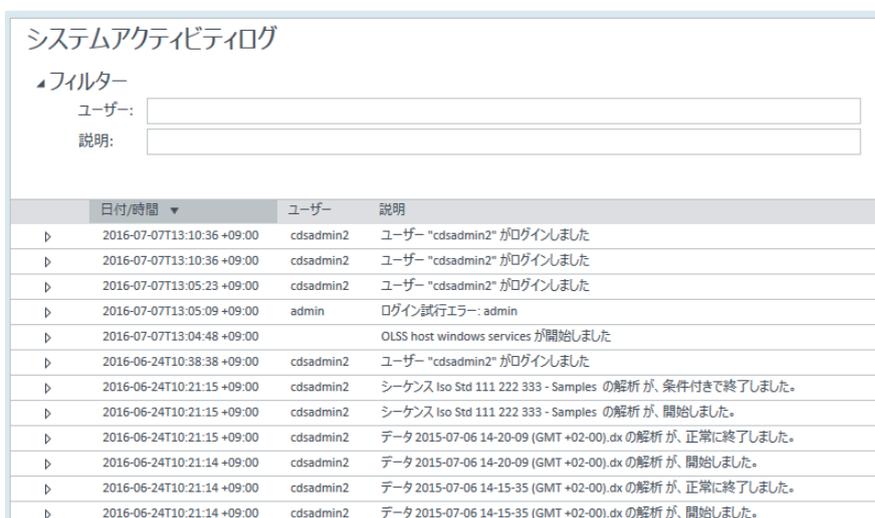
## データのセキュリティと完全性の確保

OpenLab CDS 2 は、21 CFR Part 11 に基づいた方法でデータを保存しているため、データのセキュリティと完全性を技術的に制御しています。また、データファイルにはバージョンが付与されるので、データのトレーサビリティも確保されます。そのため、手順管理の必要性を最小限に減らして、データの削除や改ざんを防ぐことができます。



## アクティビティログの保存

アクティビティログとは、誰がいつアクセスしたのか、誰がいつ何をしたのかなどの記録が保存されるデータです。また、ファイルを変更する際にはその理由を入力する必要がありますが、その入力した理由もアクティビティログに保存されます。管理者がアクティビティログを確認することにより、全てのファイルが適切に扱われているか、不正や改ざんがなかったかを追跡することができます。



## 監査証跡

OpenLab CDS 2 では、測定、解析、レポートに関するすべてのファイルに対して監査証跡を残すことができます。ファイルを変更して保存する際に、記録として保存されます。また、ファイルを保存する際には、例えばそれが自動保存であったとしても、ファイルを変更した理由の入力を求められます。これにより、各ファイルでどのような操作を行ったのが履歴として残ります。

ステータス	ユーザー名	日時 (GMT+09:00)	情報	ホスト名	確認済み	理由	カテゴリ
成功	admin	2016/01/15 11:56	結果を保存しました。	WIN-QQM803			保存
成功	admin	2016/01/15 11:55	データの再解析成功 メソッド /Project01/Results/Result03.rst/vDAD_D	WIN-QQM803			再解析
成功	admin	2016/01/15 11:55	データの再解析成功 メソッド /Project01/Results/Result03.rst/vDAD_D	WIN-QQM803			再解析
成功	admin	2016/01/15 11:55	データにメソッド 'VDAD_DA_Method1' を関連付けました	WIN-QQM803			メソッド関連付け
成功	admin	2016/01/15 11:18	注入 1 で測定が完了	WIN-QQM803			シーケンス
成功	admin	2016/01/15 11:16	メソッド 1 (バージョン /Project01/Results/Result03.rst/vDAD_AcqMet	WIN-QQM803			シーケンス
成功	admin	2016/01/15 11:16	シーケンス - Result03 で測定が開始	WIN-QQM803			シーケンス

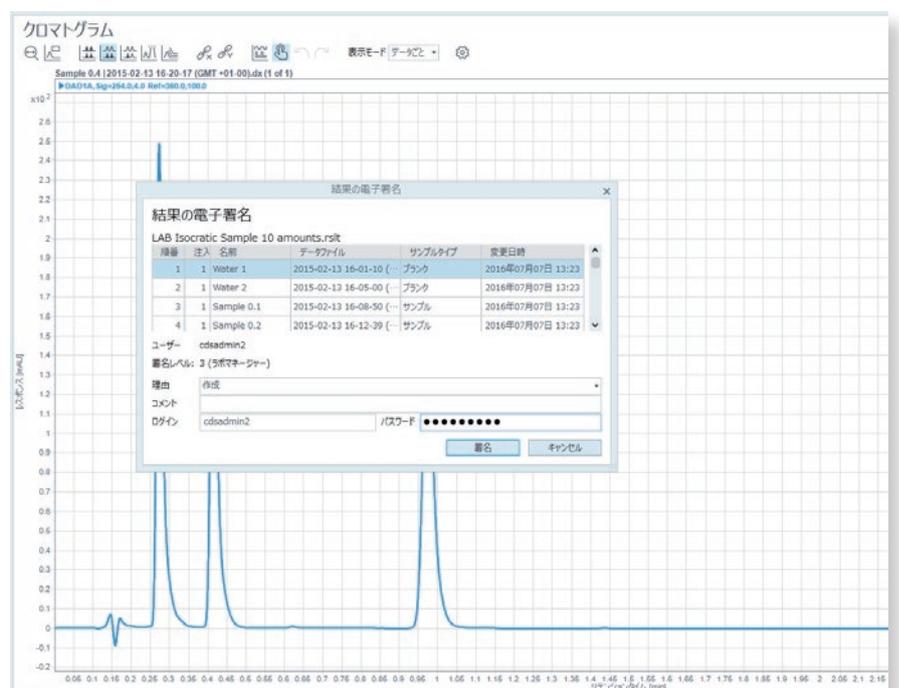
## 監査証跡レビューの簡素化

規制では、監査証跡レビューを含む記録を確認する必要があります。他のメーカーのクロマトグラフィーデータシステムを使用した場合、記録を組み合わせる必要があり、監査証跡レビューの印刷、署名も必要です。OpenLab CDS 2 を使用すれば、電子記録の一部として、監査証跡レビューの確認と文書化を行うことができます。

ステータス	ユーザー名	日時 (GMT+09:00)	情報	ホスト名	確認済み	理由	カテゴリ
成功	cdsadmin2	2016/07/07 13:20	レビュー担当 cdsadmin2	WIN-QQM803	cdsadmin2		監査証跡レビュー
成功	admin	2016/01/15 11:56	結果を保存しました。	WIN-QQM803	cdsadmin2		保存
成功	admin	2016/01/15 11:55	データの再解析成功 メソッド /Project01/Results/Result03.rst/vDAD_D	WIN-QQM803	cdsadmin2		再解析
成功	admin	2016/01/15 11:55	データの再解析成功 メソッド /Project01/Results/Result03.rst/vDAD_D	WIN-QQM803	cdsadmin2		再解析
成功	admin	2016/01/15 11:55	データにメソッド 'VDAD_DA_Method1' を関連付けました	WIN-QQM803	cdsadmin2		メソッド関連付け
成功	admin	2016/01/15 11:18	注入 1 で測定が完了	WIN-QQM803	cdsadmin2		シーケンス
成功	admin	2016/01/15 11:16	メソッド 1 (バージョン /Project01/Results/Result03.rst/vDAD_AcqMet	WIN-QQM803	cdsadmin2		シーケンス
成功	admin	2016/01/15 11:16	シーケンス - Result03 で測定が開始	WIN-QQM803	cdsadmin2		シーケンス

## 電子署名による規制遵守の円滑化

21 CFR Part 11 では、規制要件の遵守を円滑に進めるための電子署名機能が OpenLab CDS 2 には搭載されています。近年、ワークフローが自動化し、各種文書が電子化されているため、電子署名への対応を進める必要が出てきています。これにより、規制当局への電子ファイルの提出も容易になり、査察に要する時間も短縮することができます。



## OpenLab ソフトウェアで開かれる未来

ラボ管理を効率化する OpenLab ソフトウェア製品群により、ビジネスの価値を高めるために、データを収集、解析、共有できます。また、アジレントと知識豊富なプロフェッショナルサービスコンサルタントが、あらゆる段階でお客様をサポートします。

そのため、この包括的なソフトウェア製品群のメリットを導入直後から実感していただくことができます。

### クロマトグラフィーデータシステム - OpenLab CDS

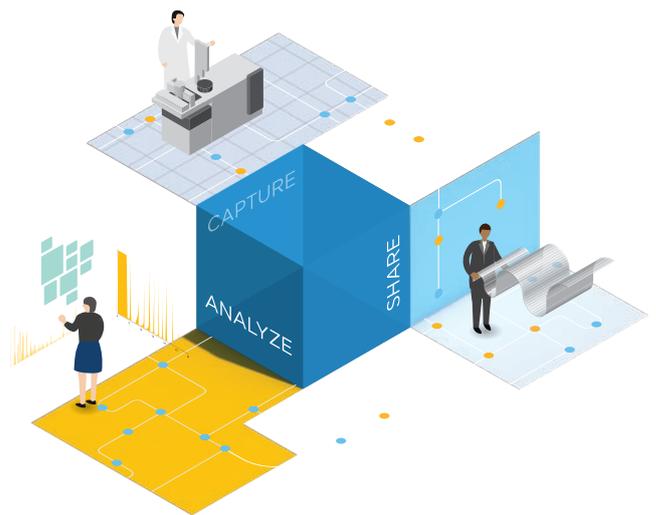
- ・アジレント製とアジレント製以外の両方の機器を制御
- ・データ解析及びレポート作成の高速化
- ・ラボ全体を一元表示できるビューで機器を監視
- ・ラボと IT のプロセスを合理化

### データ管理 - OpenLab ECM XT

- ・時間や場所に関係なく、データと情報にアクセス可能
- ・実験の開始から終了までファイルを保護
- ・規制遵守の業務をサポートし、知的財産を管理
- ・紙の使用量を削減

### カスタムトレーニングコース - OpenLab University

「OpenLab CDS ChemStation/EZChrom インテリジェントレポートの使い方」というトレーニングコースでは、ラップトップ PC を使用して、インテリジェントレポートの概要とテンプレートの作成方法を学習することができます。詳しくは、Agilent University をご覧いただくか、弊社または弊社販売店までご連絡ください。



[www.agilent.co.jp/chem/openlab](http://www.agilent.co.jp/chem/openlab)

カスタムコンタクトセンタ

0120-477-111

[email\\_japan@agilent.com](mailto:email_japan@agilent.com)

※本資料掲載の製品は、すべて研究用です。本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。アジレントは、本文所に誤りが発見された場合、また、本文書の使用により付随的または間接的に生じる損害について一切免責とさせていただきます。

アジレント・テクノロジー株式会社

〒192-8510 東京都八王子市高倉町 9-1

Printed in Japan. Sep. 1, 2018

5991-7243JAJP