

PharmaReport Program
Instruction Manual

日本薬局方対応マクロプログラム
取扱説明書

Read this manual carefully before using this product. Please keep this manual for future reference.

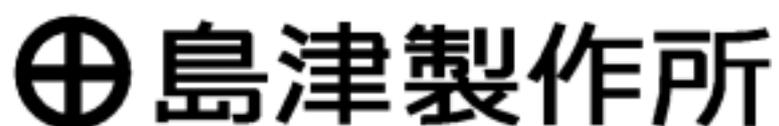
製品を使用される前にこの取扱説明書をよくお読みください。いつでも使用できるように大切に保管してください。

 **島津製作所**

分析計測機器事業部

Instruction Manual
IRsolution
PharmaReport Program

Read this manual carefully before using this product.
Please keep this manual for future reference.



Analytical & Measuring Instruments Division

Copyright © Shimadzu Corporation 2003

All rights are reserved, including those to reproduce this publication or parts there of in any form without permission in writing from Shimadzu Corporation.

1. Information in this publication is subject to change without notice and does not represent a commitment on the part of vender.
2. Any errors or omissions which many have occurred in this publication despite the utmost care taken in its production will be corrected as soon as possible, but not necessarily immediately upon detection.
3. Note the Shimadzu does not have any obligation concerning the effects resulting from the application of the contents of this manual.

Please acknowledge being not able to answer for the influence of the result of operation by the content of this book.

For safety use

IRsolution PharmaReport Program is an optional program for IRsolution to create a report for identification test for Pharmacopoeia works. Please remember the following items when using this product.

1. Please DO NOT use this product for purposes other than what is was designed for.
2. For safety reasons, follow the procedure described in the instruction manual
3. Obey warnings or caution descriptions.
4. DO NOT modify the product by yourself.

This instruction manual defines the levels of warning as follows;

Warning	Death or serious injury may result is this warning is not followed.
Caution	Injury may result if this caution is not followed.
Notice	This notice with increase the understanding and usefulness of the software.

Guide for using the Instruction Manual

The manual of the PharmaReport program for the IRsolution software is one this book composition.

This instruction manual explains functions of the PharmaReport program function offered as an option function of the IRsolution software in this book. For general operations of the IRsolution, refer to the Instruction Manual for the IRsolution software.

Contents

Chapter 1	Outline of the PharmaReport Program	6
1-1	Outline	6
1-2	Environment to operate the PharmaReport Program	6
Chapter 2	Setup.....	7
2-1	Confirmation of number.....	7
2-2	Setup	7
2-3	Print template	8
2-4	Notes	8
2-4-1	Selection of spectrum	8
2-4-2	Printed Scan parameter.....	9
Chapter 3	How to use of the program.	10
3-1	Data which should be prepared	10
3-2	Beginning of program	10
3-3	Outline of the operation.....	11
3-4	Load Standard (standard spectrum) button	12
3-5	Load Sample (sample spectrum) button	12
3-6	Peak table file.....	13
3-6-1	Load Peak Table (reading of peak table file).....	13
3-6-2	Edit Peak Table (making and edit of peak table file)	13
3-7	Calculation (calculation execution) button.....	15
Chapter 4	How to use of the program.	18
4-1	Data which should be prepared	18
4-2	Beginning of program	18
4-3	Outline of the operation	19
4-4	Operation method.....	19
Chapter 5	How to use of the program.	22
-	Peak detection function -	22
5-1	Data which should be prepared	22
5-2	Beginning of program	22
5-3	Outline of the operation.....	23
5-4	Load Sample (sample spectrum) button	23
5-5	Peak table file.....	24
5-5-1	Load Peak Table (reading of peak table file).....	24
5-5-2	Edit Peak Table (making and edit of peak table file)	25
5-6	Detection (peak detection) button	26
Chapter 6	How to use of the program.	28
-	Alteration check program -	28
6-1	Operation method.....	28

Chapter 1 Outline of PharmaReport Program

1-1 Outline

The PharmaReport Program for IRsolution is supplied as an option program which operates on the IRsolution software. The following functions are included in this program.

1. Report Creating

Creates an analysis report to compare a sample spectrum with a standard spectrum based on identification test in the pharmacopoeias. Peak wavenumbers and peak ratios are calculated and the program judges Pass (OK)/Fail (NG) based on the errors calculated Peak wavenumbers and Peak ratios.

2. Spectrum Comparison

Creates a report suitable to compare standard and sample spectra based on identification test in the pharmacopoeias.

3. Peak Detection

Detect peaks being described in identification test in the pharmacopoeias, and creates a report.

1-2 Environment to operate the PharmaReport Program

1. Version of IRsolution

The PharmaReport Program operates by IRsolution Version 1.10 or later. Please contact to you Shimadzu representatives to upgrade your IRsolution version, when you use older version of IRsolution.

2. Macro platform

The PharmaReport Program operates by using the Macro Platform of the IRsolution software. If the Macro Platform is not installed, the PharmaReport does not run. Please purchase and install the Macro Platform when it is not possession.

Chapter 2 Setup

2-1 Confirmation of parts

Check up necessary parts are included in your package before installation.

Name of articles	P/N	No.
Installation disk for PharmaReport	206-72488-91	1 set
Instruction Manual (this book)	206-95130	1

2-2 Setup

This paragraph describes the procedure to install the PharmaReport Program to the IRsolution software.

Please confirm the IRsolution software and Macro Platform has been correctly installed in the computer before the installation.

1. Insert the installation disk in the floppy disk drive.
2. Select "Run" on the start button menu of Windows.
3. Input to the file name as "A:setup", and then clicks < OK > button.
4. The installation program starts.
5. Click < OK > button, and the installation is finished.
6. "ParmReport.lcm" is copied to "... ¥Program files¥Shimadzu¥IRsolution¥macros" folder. "Kyokuhou3.ptm", "Kyokuhou2.ptm", "Kyokuhou1NG.ptm", and "Kyokuhou1OK.ptm" are copied onto "... ¥Program files ¥Shimadzu ¥IRsolution ¥PrintTemplates" folder.

2-3 Print template

When IRsolution is not installed in “C:\Program files\Shimadzu\IRsolution”, it is necessary to correct the print template file. Please correct four files of “Kyokuhou3.ptm”, “Kyokuhou2.ptm”, “Kyokuhou1NG.ptm”, and “Kyokuhou1OK.ptm” as follows.

1. Run the “Report” function, and click < No > button on the print screen once. As a result, “...\Program files\Shimadzu\IRsolution\data\kyokuhou\report.txt” and “report2.txt” are created.
2. Select the [Print] tab on IRsolution.
3. Select [File]-[Open] and open “Kyokuhou3.ptm”.
4. Select the evaluation result text frame.
5. Specify the “Report.txt” or “Report2.txt” to the result text frame on the “RTF Filename” column in object property window.
6. Select [File]-[Save].
7. Other “Kyokuhou2.ptm”, “Kyokuhou1NG.ptm”, and “Kyokuhou1OK.ptm” are similarly corrected.

2-4 Notes

Please note the following points when you use this program.

2-4-1 Selection of spectrum

In this program, data with an “active pointer” in the selected spectrum file is used to calculation.

In IRsolution, when various Data manipulation such as Baseline correction, Kubelka-Munk conversion, etc. are done to the measured data, the Data manipulation result is saved as a “Child” data of the original data in the has the tree-structured file. Data with an “Active pointer” is displayed first when a file consisted of two or more data is opened. In this program, data with an “active pointer” in the selected spectrum file is used to calculation. An active pointer is usually set to the data treated at the end. When an active pointer is not set to target data, the file is opened with IRsolution, and mouse’s right button is clicked on the tree view. Then select an active pointer of the displayed context menu, and close the file.

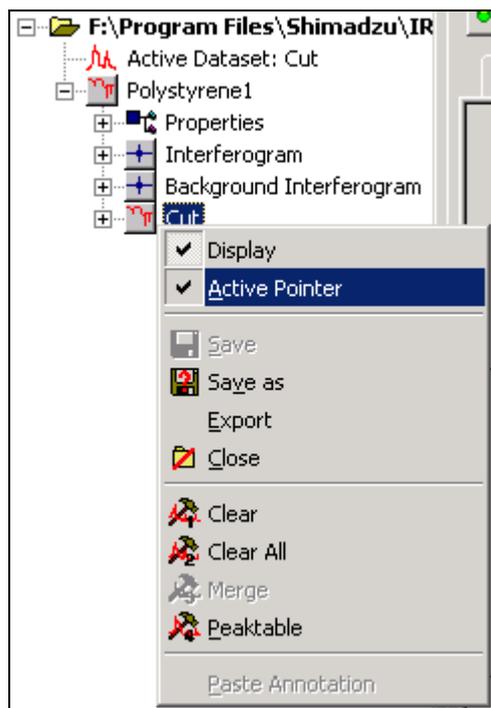


Figure 2-1 Tree view and Active pointer

2-4-2 Scan parameters on Report

When the Raw (scanned) data is used by this program, Scan parameters are printed on the report. However, when an active pointer is set to manipulated data, the Scan parameters are not printed, and leave blank. The reason is that Manipulated data does not include scan parameters because it is not raw data.

Chapter 3 How to use of the program. - Report creating function -

The Report function creates an analysis report to compare a sample spectrum with a standard spectrum based on identification test in the pharmacopoeias. Peak wavenumbers and peak ratios are calculated and the program judges Pass (OK)/Fail (NG) based on the errors calculated Peak wavenumbers and Peak ratios.

3-1 Data which should be prepared

- Standard spectrum (Transmittance)
- Sample spectrum (Transmittance)
- Peak table (It is made in this program.)

Note

- ◆ In this program, data with an “active pointer” in the selected spectrum file is used to calculation.
- ◆ When the Raw (scanned) data is used by this program, Scan parameters are printed on the report. However, when an active pointer is set to manipulated data, the Scan parameters are not printed, and leave blank.

3-2 Starting of program

1. Start IRsolution.
2. Click the [Macro] tab to display the macro platform screen.
3. Select [Macro]-[Open Macro Container] to open “...¥Program Files ¥Shimadzu ¥IRsolution¥Macros¥PharmaReport.lcm”. The program is displayed in the macro toolbar.
4. Select “PharmaReport” under the “PharmaReport.lcm”, and then select [Macro]-[Run] to execute the program.

Note The program does not start even if the  button in the macro toolbar is clicked.

5. The dialog box in Figure 3-1 opens.

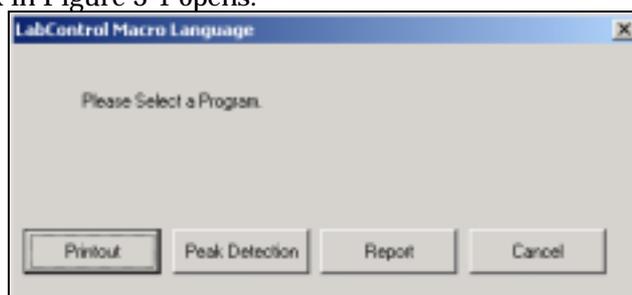


Figure 3-1. Selection of program

Button	Content
Printout	Runs the Spectrum Comparison function.
Peak Detection	Runs the Peak detection function.
Report	Runs the Report creating function.

6. Then, click < Report > to open the dialog box in Figure 3-2, and the Report creating function for Pharmacopoeias starts.

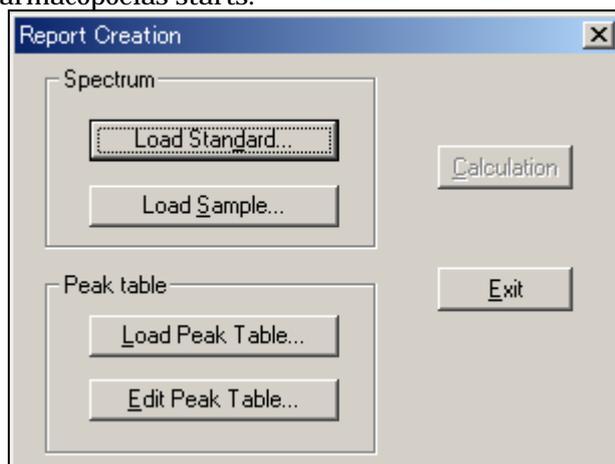


Figure 3-2. "Report creating function" screen

Button	Content
Load Standard	Loads a standard spectrum.
Load Sample	Loads a sample spectrum.
Load Peak Table	Loads a Peak table file which has already been made.
Edit Peak Table	Creates/Edits a Peak table file.
Calculation	Calculates and creates a Report.
Exit	Closes the program.

3-3 Outline of the operation

The outline of the operation of this program is as follows.

1. Load a standard spectrum with < Load Standard > button.
2. Load a sample spectrum with < Load Sample > button.
3. Load a Peak table file which has already been made with < Load Peak Table > button, or create a Peak table file with < Edit Peak Table > button.
4. Click the < Calculation > button to create a Report.

3-4 <Load Standard> Spectrum button

It is a button to prepare a standard spectrum file necessary for the calculation.

1. Click the < Load Standard > button to open the “Load Standard Spectrum” dialog box.
2. Select the standard spectrum
3. Clicking the <Open > button returns to the dialog box in Figure 3-2.

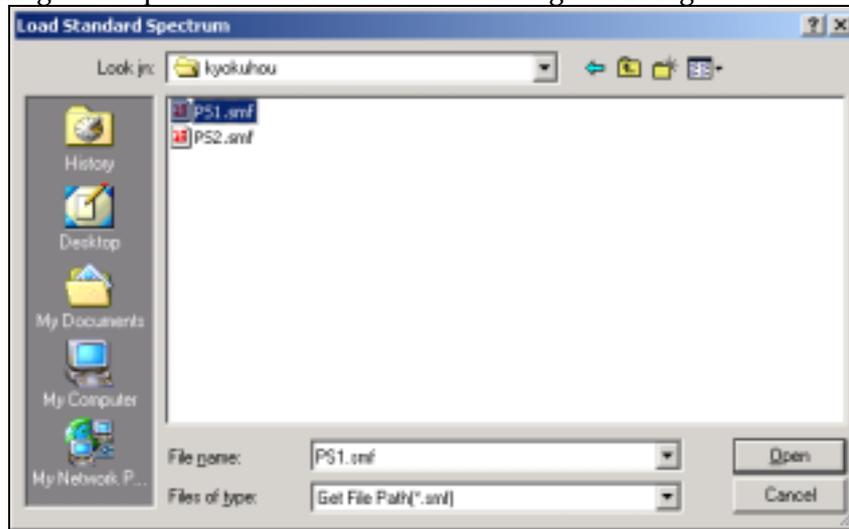


Figure 3-3. "Load Standard Spectrum" dialog box

3-5 <Load Sample> Spectrum button

It is a button to prepare a sample file necessary for the calculation.

1. Click the < Load Sample > button to open the “Load Sample Spectrum” dialog box.
2. Select the sample spectrum.
3. Clicking the <Open > button returns to the dialog box in Figure 3-2.

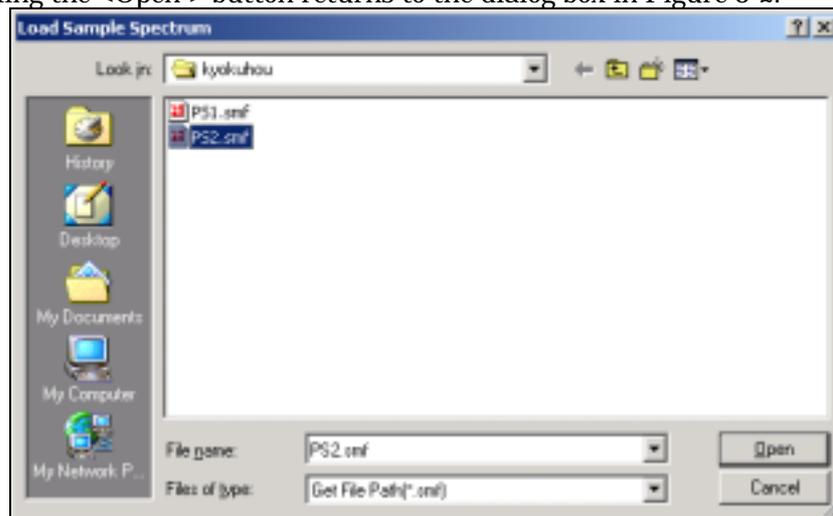


Figure 3-4. "Load Sample Spectrum" dialog box

3-6 Peak table file

Up to 10 peaks can be specified to detect. Up to 4 peaks can be specified to calculate the Transmittance Ratio to evaluate the intensity. The set of the peak wavenumber is saved as a data file.

The peak table file can be created by clicking < Load Peak Table > button in Figure 3-2, or edited by clicking < Edit Peak Table > button.

3-6-1 <Load Peak Table> button

The peak table file which has already been made can be loaded by clicking <Load Peak Table> button in Figure 3-2.

1. The dialog box in Figure 3-5 opens.

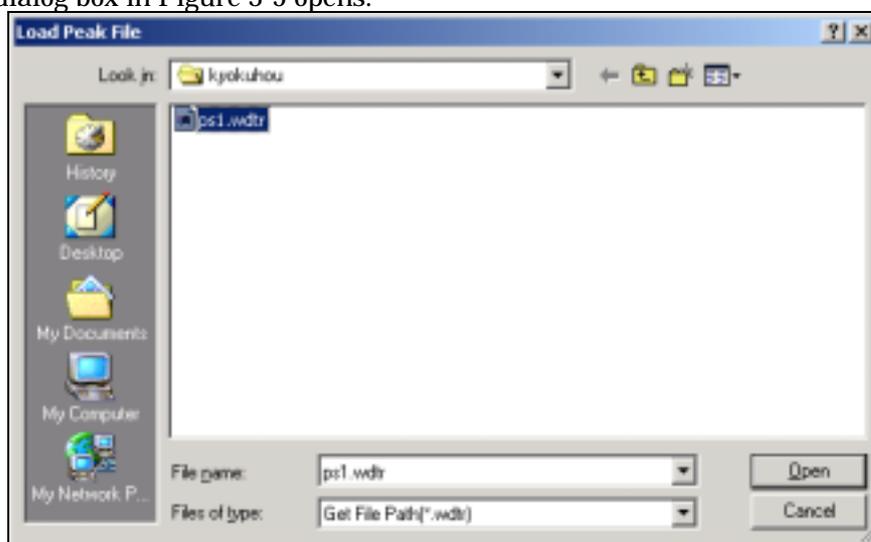


Figure 3-5. Load Peak File dialog box

2. The extension of the peak table file is “.wdtr”.
3. Select a Peak table file and then, click the <Open> button to return to the dialog box in Figure 3-2.
4. Clicking the < Edit Peak Table > button explains next is used to create the Peak table newly.

3-6-2 <Edit Peak Table> button

The peak table file can be created or edited by clicking < Edit Peak Table > button in Figure 3-2.

1. The dialog box in Figure 3-6 opens.

Use	No.	Wave No.	Tolerance(cm-1)
<input checked="" type="checkbox"/>	1	540	5
<input checked="" type="checkbox"/>	2	906	5
<input checked="" type="checkbox"/>	3	1028	5
<input checked="" type="checkbox"/>	4	1155	5
<input checked="" type="checkbox"/>	5	1370	5
<input checked="" type="checkbox"/>	6	1585	5
<input checked="" type="checkbox"/>	7	1600	5
<input checked="" type="checkbox"/>	8	1942	5
<input checked="" type="checkbox"/>	9	2850	5
<input checked="" type="checkbox"/>	10	3060	5

Evaluation Peak No. 4

A 1 B 3 C 7 D 10

Tolerance(0-1) 1+/- 0.3

Figure 3-6. "Edit Peak Information" dialog box

2. Input peak wavenumbers into "Wave No." column, and the range of the Tolerance of the peak wavenumber into the "Tolerance" column. It is possible to input up to ten peaks. The check mark is put to "Use" columns of the wavenumber used to calculate. Even if the wavenumber is input, the one without check mark is not used to calculate.
3. First of all, number of peaks to be used for Peak ratio evaluation to "Evaluation Peak No.". Then input the numbers of the peak wavenumber to be used for evaluation. It is possible to specify up to four peaks. The range of the Tolerance compared with the peak is input to the "Tolerance" column.
4. When the input ends, < OK > button is clicked. The dialog box in Figure 3-7 is displayed, and the created peak table file is saved. The extension of the peak table file is ".wdtr".
5. Clicking the <Save> button returns to the dialog box in Figure 3-2.

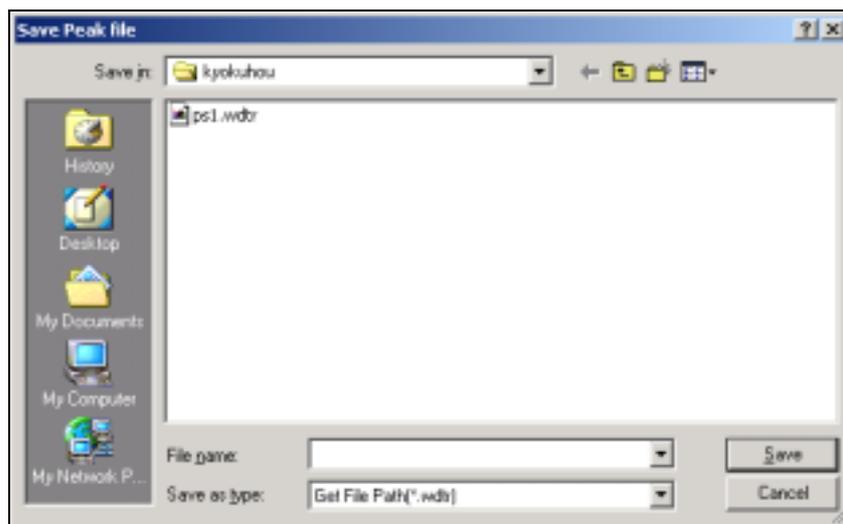


Figure 3-7. "Save Peak File" dialog box

3-7 <Calculation> button

The calculation is executed, and judged. The result is displayed on the screen and printed.

1. The <Calculation> button will be activated when all of Loading Peak Table, Loading Sample file and Loading Standard file are done.
2. When < Calculation > button is clicked, the calculation is executed according to the following procedures.
 - (1) The peak of standard spectrum is detected referring to the peak table.
 - (2) The peak of the sample spectrum is detected referring to the detected peak list of standard spectrum.
 - (3) Errors (differences of peak wavenumber of standard from one pf sample) are calculated.
 - (4) Peak ratios in Transmittance are calculated for the standard spectrum.
 - (5) Peak ratios in Transmittance are calculated for the sample spectrum.
 - (6) Ratio of peak ratios in (5) to peak ratios in (4) for evaluation.
 - (7) Prints out the result of (3) and (6). At this time, Judgment becomes "NG" when one of errors of peak wavenumber or one of errors of peak ratio is not satisfied Tolerance.
 - (8) When all of all listed errors are satisfied Tolerances, Judgment is "OK".
3. The spectrum and the Judgment ("OK" "NG") are displayed.



Figure 3-8. Evaluation

4. The dialog box in Figure 3-9 opens when < OK > button is clicked.



Figure 3-9. Print dialog box

5. Click <Yes> button to printout a Report such as Figure 3-10. The program ends if <No> button is clicked.

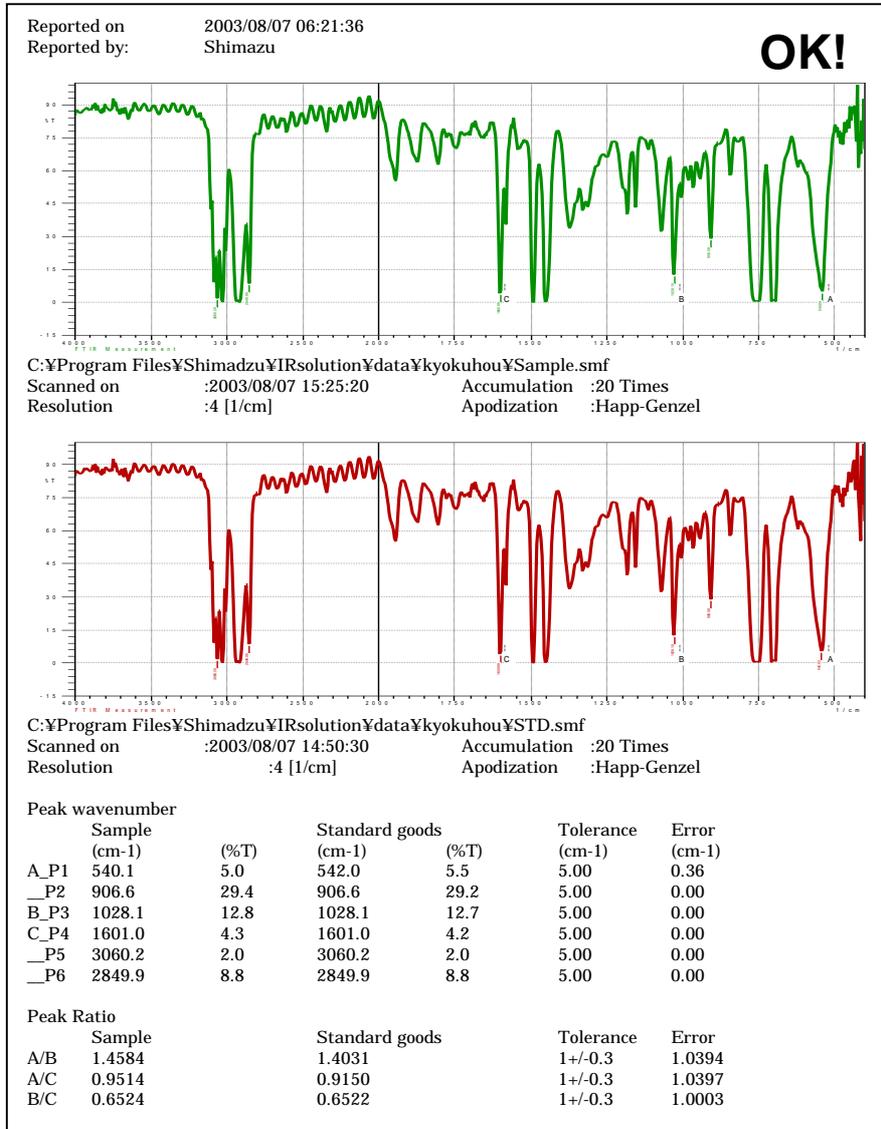


Figure 3-10. Printed report example

The report consists of the Scan parameter, Judgment (OK or NG), spectra of standard and sample, and calculated table.

Markers to show the selected peaks for detection and evaluation are displayed.

The upper part of the calculated table shows the detected peak wavenumbers and their transmittance for both sample and standard spectra. The right row shows error which is calculated by “[Peak wavenumber of sample] – [Peak wavenumber of standard]”.

The lower part shows Peak ratios of evaluation peaks for both sample and standard spectra. The right row shows a error which is calculated by “[Peak ratio of sample] / [Peak ratio of standard]”.

Chapter 4 How to use of the program. - Spectrum comparison function -

The Spectrum comparison function creates a report suitable to compare standard and sample spectra based on identification test in the pharmacopoeias.

4-1 Data which should be prepared

- Standard spectrum (Transmittance)
- Sample spectrum (Transmittance)

Note

- ◆ In this program, data with an “active pointer” in the selected spectrum file is used to calculation.
- ◆ When the Raw (scanned) data is used by this program, Scan parameters are printed on the report. However, when an active pointer is set to manipulated data, the Scan parameters are not printed, and leave blank.

4-2 Starting of program

1. Start IRsolution.
2. Click the [Macro] tab to display the macro platform screen.
3. Select [Macro]-[Open Macro Container] to open “...¥Program Files ¥Shimadzu ¥IRsolution¥Macros¥PharmaReport.lcm”. The program is displayed in the macro toolbar.
4. Select “PharmaReport” under the “PharmaReport.lcm”, and then select [Macro]-[Run] to execute the program.

Note The program does not start even if the  button in the macro toolbar is clicked.

5. The dialog box in Figure 4-1 opens.

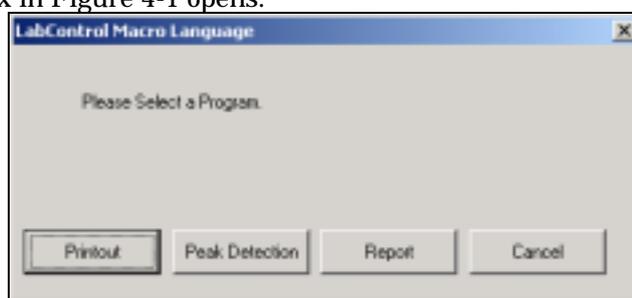


Figure 4-1. Selection of program

Button	Content
Printout	Runs the Spectrum Comparison function.
Peak Detection	Runs the Peak detection function.
Report	Runs the Report creating function.

- Then, click < Printout > button.

4-3 Outline of the operation

The outline of the operation of this program is as follows.

- Load a standard spectrum.
- Load a sample spectrum.
- The report is printed.

4-4 Operation method

- Click < Printout > button in Figure 4-1.
- The dialog box in Figure 4-2 opens.

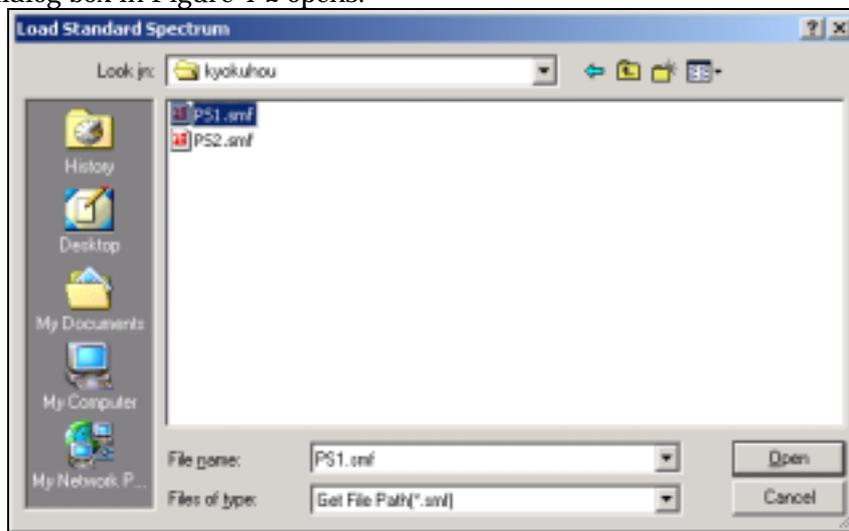


Figure 4-2. "Load Standard Spectrum" dialog box

- Select a standard spectrum, and then click <Open > button.
- The dialog box in Figure 4-3 opens.

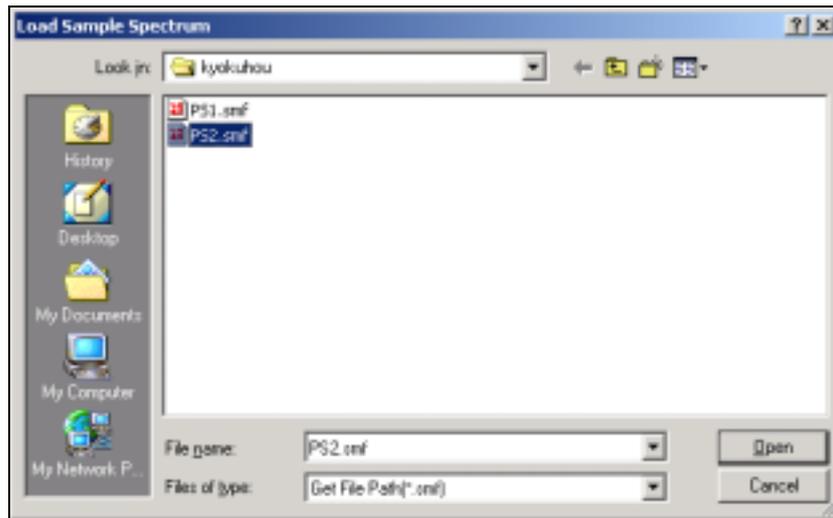


Figure 4-3. "Load Sample Spectrum" dialog box

5. Select a sample spectrum, and then click <Open > button.
6. The dialog box in Figure 4-4 opens.

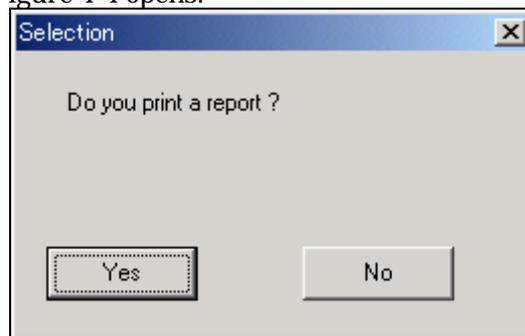


Figure 4-4. Print dialog box

7. Click <Yes> button to printout a Report such as Figure 4-5. The program ends if <No> button is clicked.

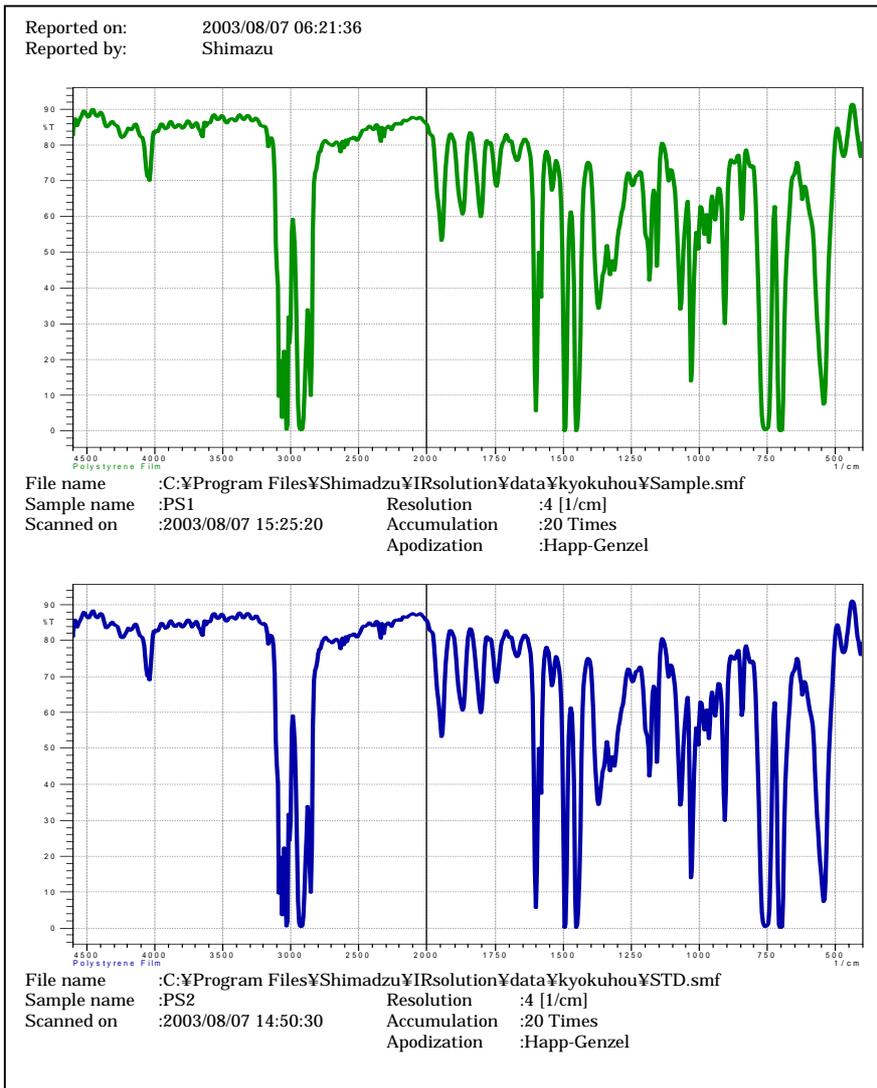


Figure 4-5. Printed report example

Chapter 5 How to use of the program. - Peak detection function -

The Peak detection function detect peaks being described in identification test in the pharmacopoeias, and creates a report.

5-1 Data which should be prepared

- Sample spectrum (Transmittance)
- Peak table (It is made in this program.)

Note

- ◆ In this program, data with an “active pointer” in the selected spectrum file is used to calculation.
- ◆ When the Raw (scanned) data is used by this program, Scan parameters are printed on the report. However, when an active pointer is set to manipulated data, the Scan parameters are not printed, and leave blank.

5-2 Starting of program

1. Start IRsolution.
2. Click the [Macro] tab to display the macro platform screen.
3. Select [Macro]-[Open Macro Container] to open “...¥Program Files ¥Shimadzu ¥IRsolution¥Macros¥PharmaReport.lcm”. The program is displayed in the macro toolbar.
4. Select “PharmaReport” under the “PharmaReport.lcm”, and then select [Macro]-[Run] to execute the program.

Note

The program does not start even if the  button in the macro toolbar is clicked.

5. The dialog box in Figure 5-1 opens.

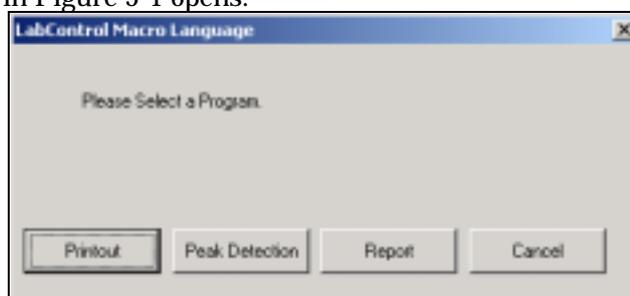


Figure 5-1. Selection of program

Button	Content
Printout	Runs the Spectrum Comparison function.
Peak Detection	Runs the Peak detection function.
Report	Runs the Report creating function.

6. Then, click < Peak Detection > to open the dialog box in Figure 5-2, and the Peak detection function for Pharmacopoeia starts.

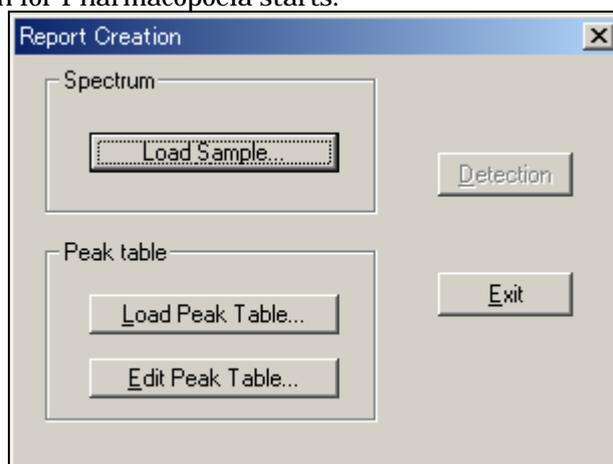


Figure 5-2. "Peak detection function" screen

Button	Content
Load Sample	Loads a sample spectrum.
Load Peak Table	Loads a Peak table file which has already been made.
Edit Peak Table	Creates/Edits a Peak table file.
Detection	Detects peak and creates a Report.
Exit	Closes the program.

5-3 Outline of the operation

The outline of the operation of this program is as follows.

1. Load a sample spectrum with < Load Sample > button.
2. Load a Peak table file which has already been made with < Load Peak Table > button, or create a Peak table file with < Edit Peak Table > button.
3. Click the < Detection > button to create a Report.

5-4 <Load Sample> Spectrum button

It is a button to prepare a sample file necessary for the calculation.

1. Click the < Load Sample > button to open the "Load Sample Spectrum" dialog box.

2. Select the sample spectrum.
3. Clicking the <Open > button returns to the dialog box in Figure 5-2.

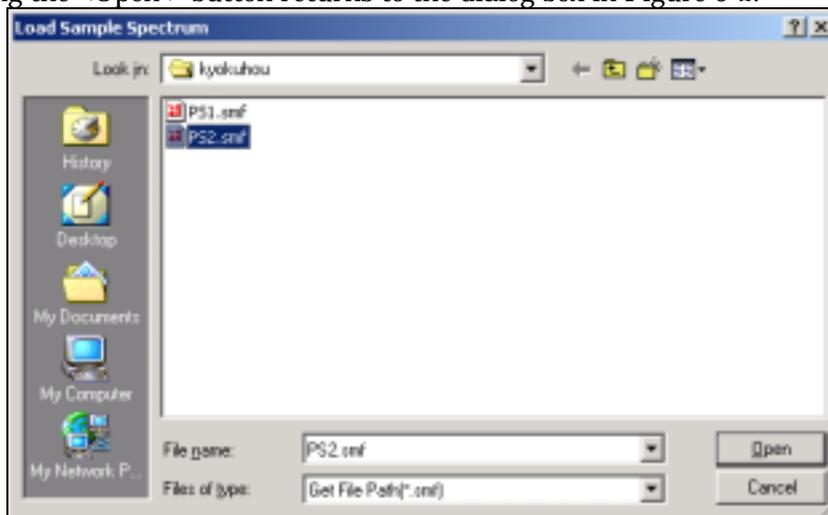


Figure 5-3. "Load Sample Spectrum" dialog box

5-5 Peak table file

Up to 10 peaks can be specified to detect. Up to 4 positions can be specified to remark. The set of the peak wavenumber is saved as a data file.

The peak table file can be created by clicking < Load Peak Table > button in Figure 5-2, or edited by clicking < Edit Peak Table > button

5-5-1 <Load Peak Table> button

The peak table file which has already been made can be read by clicking <Load Peak Table> button in Figure 5-2.

1. The dialog box in Figure 5-4 opens.

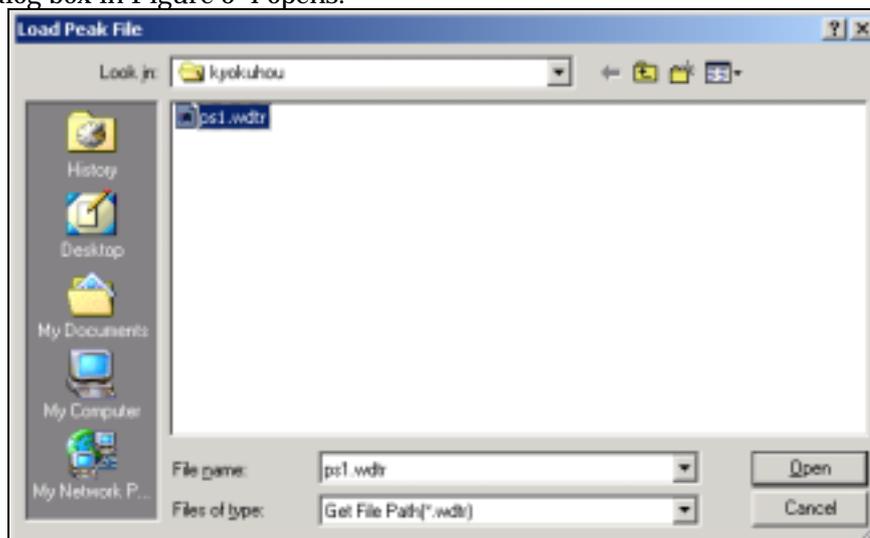


Figure 5-4. "Load Peak Table" dialog box

2. The extension of the peak table file is “.wdtp”.
3. Select a Peak table file and then, click the <Open> button to return to the dialog box in Figure 5-2.
4. Clicking the < Edit Peak Table > button explains next is used to create the Peak table newly.

5-5-2 <Edit Peak Table> button

The peak table file can be created or edited by clicking < Edit Peak Table > button in Figure 5-2.

1. The dialog box in Figure 5-5 opens.

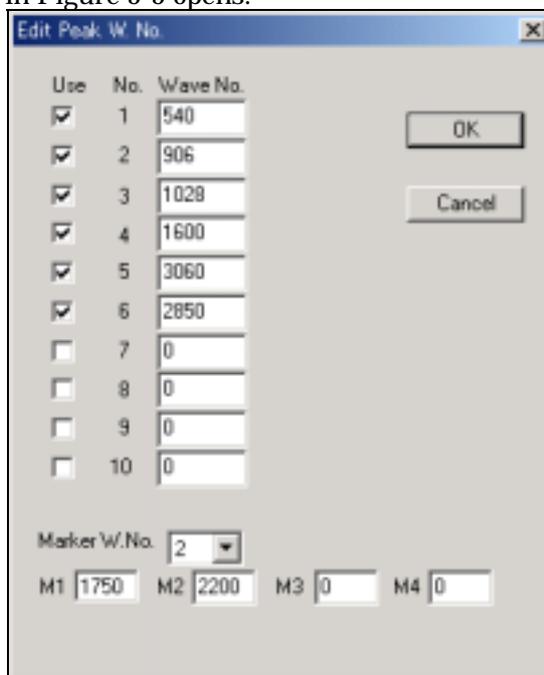


Figure 5-5. “Edit Peak W. No.” dialog box

2. Input peak wavenumbers into “Wave No.” column. It is possible to input up to ten peaks. The check mark is put to “Use” columns of the wavenumber used to calculate. Even if the wavenumber is input, the one without check mark is not used to calculate.
3. First of all, number of positions to be used for Remark. Then input the wavenumbers for Remarks. It is possible to specify up to four positions.
4. When the input ends, < OK > button is clicked. The dialog box in Figure 5-6 is displayed, and the created peak table file is saved. The extension of the peak table file is “.wdtp”.
5. Clicking the <Save> button returns to the dialog box in Figure 5-2.

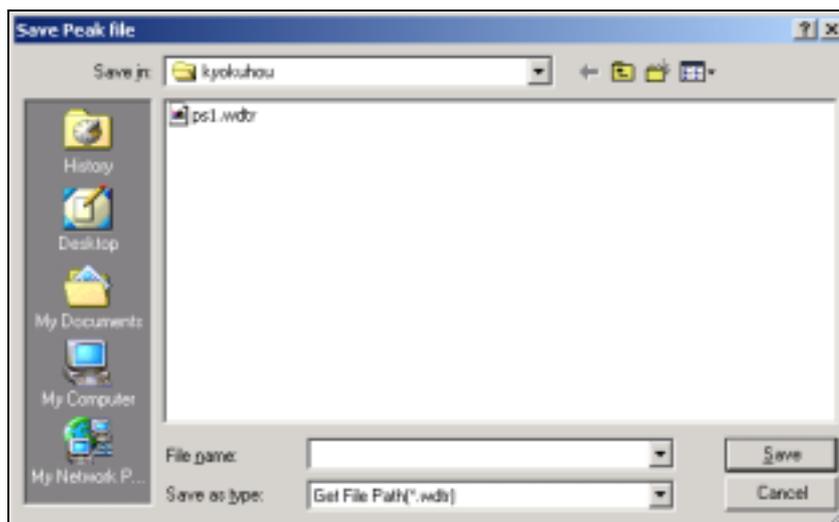


Figure 5-6. "Save Peak File" dialog box

5-6 <Detection> button

The peak detection is executed. The result is printed.

1. The <Detection> button will be activated when all of Loading Peak Table and Loading Sample file are done.
2. The dialog box in Figure 5-7 opens.

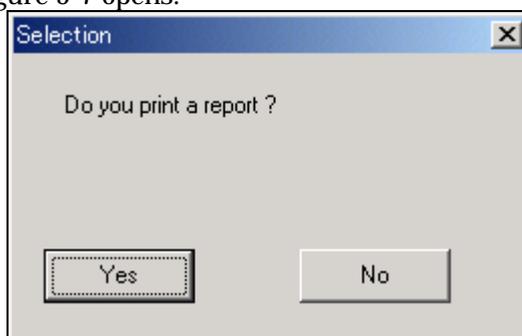


Figure 5-7 print dialog box

3. Click <Yes> button to printout a Report such as Figure 5-8. The program ends if <No> button is clicked.

The procedure from which the calculation is executed is as follows.

- (1) The peak of the sample spectrum is detected referring to the peak table.
- (2) When the peak is not detected, the error message is actually displayed.
- (3) The peak position is plotted on the screen.
- (4) When <detection> is selected, a spectrum, scan parameters, and peak information are printed such as Figure 5-8.
- (5) Close the program clicking "Cancel" button once, and select [File]-[SaveAs] command to save the spectrum with peak marks.



Figure 5-8. Printed report example

Chapter 6 How to use of the program. - Alteration check program -

The Alteration check function is included in this program. The Alteration check function is a program which checks whether this program is illegally altered.

6-1 Operation method

1. Select Alteration check from [Start]-[Program].
2. When “Shimadzu user authentication tool” is installed, Login dialog box of Figure 6-1 is displayed. Input User ID and password. When the tool is not installed, the dialog in Figure 6-2 is displayed.



Figure 6-1. “Log in” screen

3. “Alteration check program” screen in Figure 6-2 is displayed.

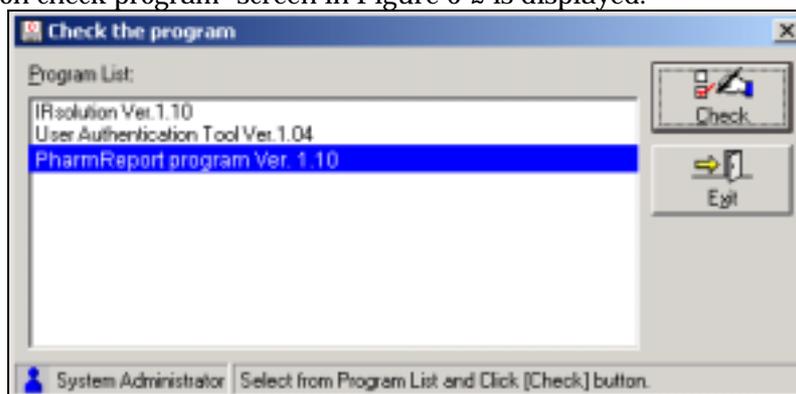


Figure 6-2 “Alteration check program” screen

4. Select “PharmaReport program”, and click < check > button.
5. When the screen in Figure 6-3 is displayed, click the < execution > button.

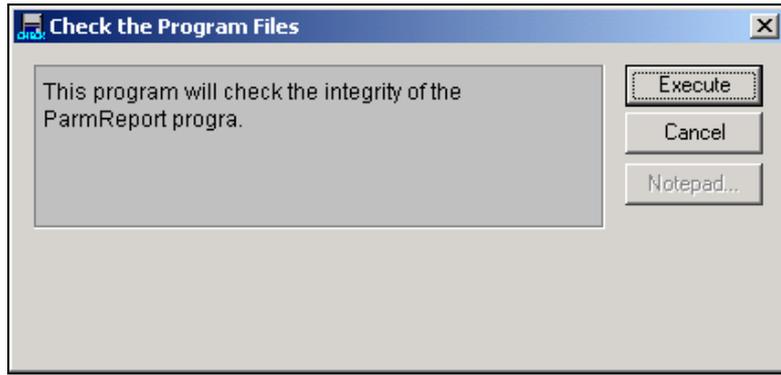


Figure 6-3. "Alteration check" screen

6. The Alteration check result is displayed in the dialog.

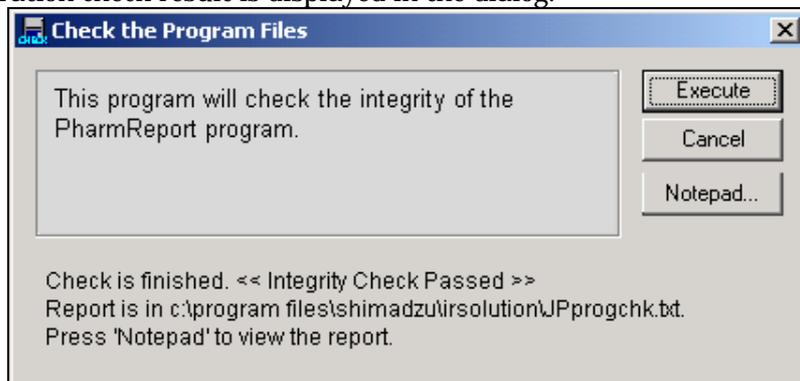


Figure 6-4. Check result

7. When < Note pad > button is clicked, the check result is displayed. It is possible to print from this screen. The check result cannot be corrected.

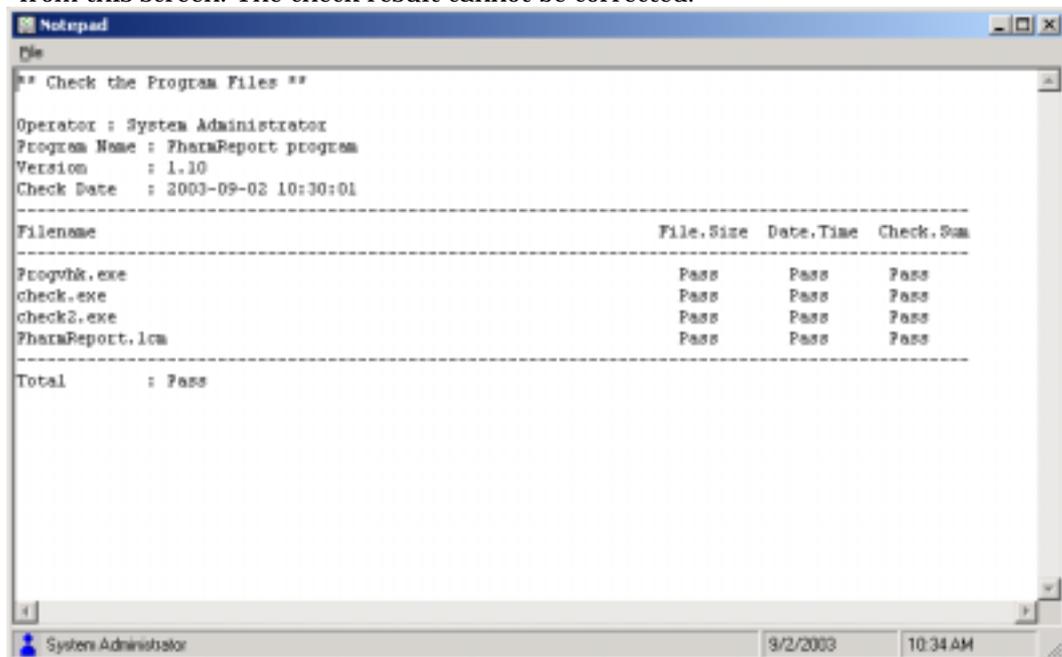


Figure 6-5. Check result

IRsolution
日本薬局方対応
マクロプログラム
取扱説明書

Read this manual carefully before using this product.
Please keep this manual for future reference.

製品を使用される前にこの取扱説明書をよくお読みください。いつでも使用できるように大切に保管してください。

 **島津製作所**

分析計測機器事業部

Copyright © 2002 株式会社 島津製作所

おことわり

- (1) 本書の著作権は、株式会社 島津製作所が所有します。したがって、当社の許可なく内容の一部または全部を転載・複製することはできません。
- (2) 本書の内容は改良のため将来予告なしに変更されることがあります。
- (3) 本書の内容は作成にあたり万全を期しておりますが、万一誤りや記載もれなどが発見されても、ただちに修正できないことがあります。

本書の内容による運用の結果の影響に関しては、責任を負いかねますのでご了承ください。

製品保証について

このたびは本製品をご購入いただきましたありがとうございます。
当社は本製品に対し、下記のとおり保証をいたします。

記

- | | |
|----------|--|
| 1.保証期間 | 据付けから起算して1年間といたします。ただし、日本国内に限ります。 |
| 2.保証内容 | 保証期間内に当社の責により故障が生じた場合は、その修理または部品の代替を無償で行ないます。 |
| 3.保証除外事項 | 保証期間内であっても、下記に該当する故障の場合は保証の対象から除外させていただきます。 <ol style="list-style-type: none">1. 誤ってお取り扱いになった場合2. 当社または当社指定会社以外で修理や改造などが行われたことに起因する場合3. 故障の原因が機器以外の理由による場合4. 高温多湿、腐食性ガス、振動など過酷な環境条件の中でご使用になった場合5. 火災、地震その他の天災地変による場合6. いったん据付けた後、移動あるいは輸送された場合7. 消耗品およびそれに順ずる部品
注) プログラムテープも消耗品です。 |

おことわり

- (1) 本書の著作権は、株式会社 島津製作所が所有します。従って、当社の許可なく内容の一部または全部を転載・複製することはできません。
- (2) 本書の内容は、改良のため将来予告なく変更されることがあります。
- (3) 本書の内容は、作成にあたり万全を期してはおりますが、万一誤りや記載漏れが発見されても、直ちに修正できないことがあります。
- (4) 当製品の補修部品の供給期間は、製造打ち切り後 7 年としております。この供給期間以降は、補修部品の供給にお応えできない場合がございますのであらかじめご了承ください。ただし、弊社純正部品でないものは製造した会社の定める供給期間とさせていただきます。

安全にお使いいただくために

IRsolution 日本薬局方対応マクロプログラムは FTIR 制御用ソフトウェア IRsolution のオプションプログラムです。本製品をお使いいただくために以下の点を厳守してください。

- 1 . 上記以外の目的で使用しないでください。
- 2 . 取扱説明書の手順に従ってください。取扱説明書に従わない場合は安全性が損なわれる恐れがあります。
- 3 . 警告、注意事項を守ってください。
- 4 . 無断で改造をしないでください。

この取扱説明書では、警告内容を次のように規定しています。

警告 その事象を避けなければ、死亡、重傷、または中程度の傷害を負う可能性のある場合に用いています。

注意 その事象を避けなければ、軽度の傷害を負う可能性のある場合、および物的傷害の可能性のある場合に用いています。

注記 作業能率をよくしたり、記事の理解を助ける場合に用いています。

本書の使用ガイド

IRsolution ソフトウェア用日本薬局方対応マクロプログラムの取扱説明書は本書1冊の構成となっております。

本書では IRsolution ソフトウェアのオプション機能として提供される、日本薬局方対応マクロプログラム機能について説明します。試料スペクトルの測定方法など、一般の IRsolution 操作に関しては、IRsolution ソフトウェアに付属の取扱説明書を参照してください。

目次

第1章	日本薬局方対応マクロプログラムの概要.....	8
1-1	概要.....	8
1-2	日本薬局方対応マクロプログラムが動作する環境.....	8
第2章	セットアップ.....	9
2-1	員数の確認.....	9
2-2	セットアップ.....	9
2-3	印刷テンプレート.....	10
2-4	注意事項.....	10
2-4-1	スペクトルの選択.....	10
2-4-2	印刷される測定パラメータ.....	11
第3章	プログラムの使い方 - レポート作成機能 -	12
3-1	用意しなければならないデータ.....	12
3-2	プログラムの開始.....	12
3-3	プログラムの流れ.....	13
3-4	Load Standard(標準スペクトル)ボタン.....	14
3-5	Load Sample(試料スペクトル)ボタン.....	14
3-6	ピーク波数テーブルファイル.....	15
3-6-1	Load Peak Table (ピーク波数テーブルファイルの読み込み).....	15
3-6-2	Edit Peak Table (ピーク波数テーブルファイルの作成・編集).....	15
3-7	Calculation(計算実行)ボタン.....	17
第4章	プログラムの使い方 - スペクトル出力機能 -	19
4-1	用意しなければならないデータ.....	19
4-2	プログラムの開始.....	19
4-3	プログラムの流れ.....	20
4-4	操作方法.....	20
第5章	プログラムの使い方 - ピーク検出機能 -	23
5-1	用意しなければならないデータ.....	23
5-2	プログラムの開始.....	23
5-3	プログラムの流れ.....	24
5-4	Load Sample(試料スペクトル)ボタン.....	25
5-5	ピーク波数テーブルファイル.....	25
5-5-1	Load Peak Table (ピーク波数テーブルファイルの読み込み).....	25
5-5-2	Edit Peak Table (ピーク波数テーブルファイルの作成・編集).....	26
5-6	Detection(ピーク検出)ボタン.....	27
第6章	プログラムの使い方 - 改ざんチェックプログラム -	29

6-1 操作方法.....	29
---------------	----

第1章 日本薬局方対応マクロプログラムの概要

1-1 概要

IRsolution 用日本薬局方対応マクロプログラムは、IRsolution ソフトウェア上で動作するオプションプログラムとして供給されています。本プログラムには、以下の機能が含まれています。

1. レポート作成機能
日本薬局方の「赤外吸収スペクトル測定法」に記載されている、標準品によるスペクトルの確認方法に基づいた分析結果報告書を、IRsolution ソフトウェア上で作成する。
2. スペクトル出力機能
日本薬局方の「赤外吸収スペクトル測定法」に記載されている、標準品によるスペクトルの確認方法に基づいたスペクトル出力を IRsolution ソフトウェア上で作成する。
3. ピーク検出機能
ピーク検出機能は、日本薬局方の「赤外吸収スペクトル測定法」に記載されている、ピーク検出を行ない、出力を IRsolution ソフトウェア上で作成する。

1-2 日本薬局方対応マクロプログラムが動作する環境

1. IRsolution のバージョン
日本薬局方対応マクロプログラムは IRsolution Version 1.10 またはそれ以降のバージョンで動作します。それよりも古いバージョンの IRsolution をご使用の場合は、弊社営業担当者にご連絡の上、バージョンアップしてください。
2. マクロプログラムオプション
日本薬局方対応マクロプログラムは IRsolution ソフトウェアのマクロプログラムオプションを利用して動作します。マクロプログラムオプションをインストールしていただかないと動作しません。もし、マクロプログラムオプションをお持ちでない場合は、弊社営業担当者にご連絡の上、ご購入いただき、インストールしてください。

第2章 セットアップ

2-1 員数の確認

開梱したら以下のものがそろっていることを確認してください。

品名	P / N	個数
日本薬局方対応マクロプログラム インストールディスク	206-72488-91	1
取扱説明書(本書)	206-95130	1

2-2 セットアップ

この節では IRsolution ソフトウェアに日本薬局方対応マクロプログラムを追加する手順を説明します。プログラムは弊社サービスマンによりあらかじめセットアップが行われている場合もあります。そのときは次の「プログラムの使い方」にお進みください。

インストールの前に、ご使用のコンピュータに IRsolution ソフトウェアが正しくインストールされていることをご確認ください。

1. インストールディスクをフロッピーディスクドライブに挿入します。
2. Windows の **スタート** ボタンをクリックし、**ファイル名を指定して実行** を選択します。
3. ファイル名に "a:setup" と入力して <OK> ボタンをクリックします。
4. インストールプログラムが設定を行います。
5. 最後に <OK> ボタンをクリックし、インストールを終了します。
6. 『日本薬局方.lcm』が "...¥Program files¥Shimadzu¥IRsolution¥macros" フォルダに『Kyokuhou3.ptm』、『Kyokuhou2.ptm』、『Kyokuhou1NG.ptm』と『Kyokuhou1OK.ptm』が "...¥Program files¥Shimadzu¥IRsolution¥PrintTemplates" フォルダにコピーされません。

2-3 印刷テンプレート

IRsolution が“c:\Program files\Shimadzu\IRsolution”にインストールされていない場合は、印刷テンプレートファイルを修正しなければなりません。『Kyokuhou3.ptm』、『Kyokuhou2.ptm』、『Kyokuhou1NG.ptm』と『Kyokuhou1OK.ptm』の 4 つのファイルについて、以下のように修正してください。

1. 一旦、『レポート出力機能』を実行し、印刷画面で<No>ボタンをクリックします。これにより、”....\Program files\Shimadzu\IRsolution\data\kyokuho\report.txt”と”report2.txt”が作成されます。
2. IRsolution 上で、[印刷]タブをクリックします。
3. [ファイル]-[開く]を選び、“Kyokuhou3.ptm”を開きます。
4. 評価結果テキストフレームを選択します。
5. オブジェクトプロパティ(Object Properties)ウィンドウの”RTF Filename”欄に上記 1 で作成された”report.txt”または”report2.txt”を指定します。
6. [ファイル]-[上書き保存]を選びます。
7. その他の『Kyokuhou2.ptm』、『Kyokuhou1NG.ptm』と『Kyokuhou1OK.ptm』についても同様に修正します。

2-4 注意事項

本プログラムを使用する際は以下の点にご注意ください。

2-4-1 スペクトルの選択

本プログラムでは、選択されたスペクトルファイルの中のアクティブポイントのついているデータを読み込み計算に使用します。

IRsolution では、測定されたデータにベースライン補正やクベルクムク変換などの各種データ処理を行なった場合、データ処理結果は処理前のデータの子供としてファイルの中に保存されるツリー上のファイル構造を持っています。複数のスペクトルがファイルの中に存在しますので、そのデータを代表するデータとして、『アクティブポイント』をつけ、ファイルを保存した場合に最初に表示するようになっています。本プログラムではこのアクティブポイントのついているデータを使用して処理を行ないます。通常、最後に扱われたデータにアクティブポイントが設定されます。目的のデータにアクティブポイントが設定されていない場合は、IRsolution でファイルを開き、ツリービュー上でマウスの右ボタンをクリックします。表示されるコンテキストメニューのアクティブポイントを選択し、そのままファイルを閉じてください。

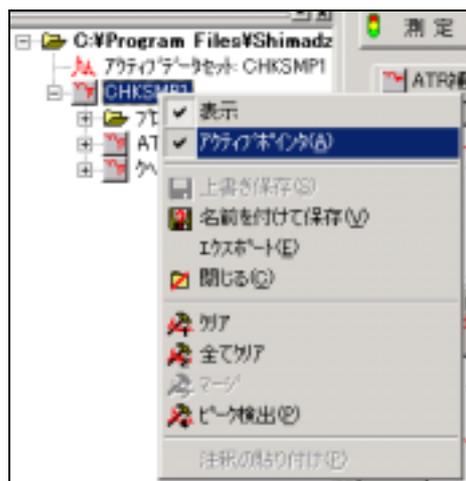


図 2-1 ツリービューとアクティブポイント

2-4-2 印刷される測定パラメータ

本プログラムで、測定された生データを用いた場合、レポートにスペクトルの測定パラメータが印刷されます。しかし、データ処理を行なったデータにアクティブポイントが設定されている場合は、測定パラメータは印刷されず、空白となります。これは、データ処理をしたデータは、生データではないので測定パラメータをもたないためです。

第3章 プログラムの使い方

- レポート作成機能 -

レポート作成機能は、日本薬局方の「赤外吸収スペクトル測定法」に記載されている、標準品によるスペクトルの確認方法に基づいた分析結果報告書を、IRsolution 上で作成するためのマクロプログラムです。

3-1 用意しなければならないデータ

- 標準スペクトルのデータ(透過率)
- 対応する試料スペクトルのデータ(透過率)
- ピーク波数テーブル(このプログラムの中で作成できます)

注記

- ◆ 本プログラムでは、選択されたスペクトルファイルの中のアクティブポイントのついているデータを読み込み計算に使用します。
- ◆ 本プログラムで、測定された生データを用いた場合、レポートにスペクトルの測定パラメータが印刷されます。しかし、データ処理を行なったデータにアクティブポイントが設定されている場合は、測定パラメータは印刷されず、

3-2 プログラムの開始

1. IRsolution を起動します。
2. [マクロ]タブをクリックして、マクロプログラミング画面を表示させます。
3. [マクロ] - [マクロコンテナを開く]を選び、”...:¥Program Files¥Shimadzu¥IRsolution¥Macros ¥日本薬局方.lcm”を選択します。マクロツールバーにプログラムが表示されます。
4. マクロツールバーの”日本薬局方.lcm”の下に表示されている”日本薬局方.bas”を選び、[マクロ] - [実行]を選ぶとプログラムを実行します。

注記 マクロツールバー上の  (実行)ボタンをクリックしても、プログラムは起動しません。

5. 図 3-1 のダイアログボックスが開きます。

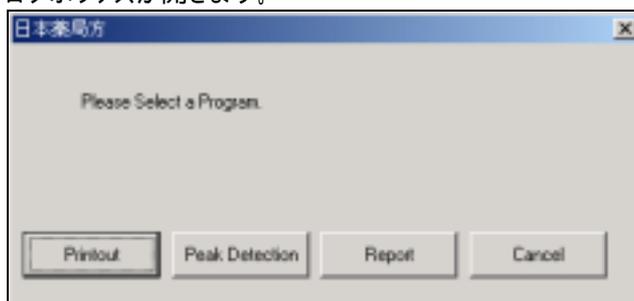


図 3-1 プログラムの選択

ボタン	内容
Printout	スペクトル出力機能を開始します。
Peak Detection	ピーク検出機能を開始します。
Report	レポート作成機能を開始します。

6. そこで、<Report>ボタンをクリックすると、図 3-2 のダイアログボックスが開き、日本薬局方対応レポート作成機能が開始します。

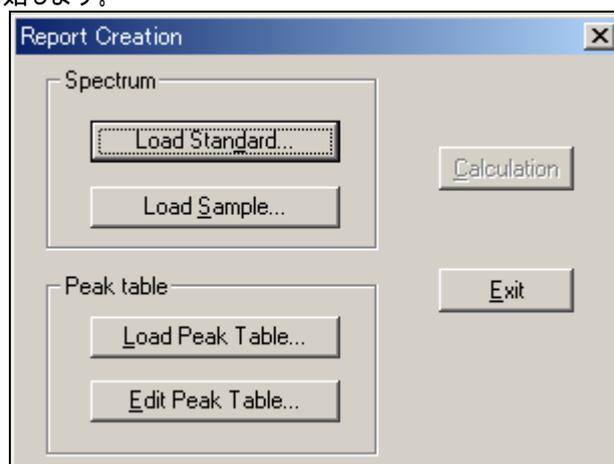


図 3-2 レポート作成機能初期画面

ボタン	内容
Load Standard	標準スペクトルを読み込みます。
Load Sample	試料スペクトルを読み込みます。
Load Peak Table	すでに作成されているピーク波数テーブルファイルを読み込みます。
Edit Peak Table	ピーク波数テーブルファイルを作成したり、編集したりします。
Calculation	レポート作成を実行します。
Exit	レポート作成を実行せずに、プログラムを終了します。

3-3 プログラムの流れ

このプログラムの操作の概要は以下のようになります。

1. <Load Standard>ボタンで標準スペクトルを読み込みます。
2. <Load Sample>ボタンで試料スペクトルを読み込みます。
3. <Load Peak Table>ボタンですでに作成されているピーク波数テーブルファイルを読み込むか、<Edit Peak Table>ボタンでピーク波数テーブルファイルを作成します。
4. <Calculation>ボタンをクリックしてレポート作成を実行します。

3-4 Load Standard(標準スペクトル)ボタン

計算に必要な標準品ファイルを用意するためのボタンです。

1. <Load Standard>ボタンをクリックすると『Load Standard Spectrum』ダイアログボックスが開きます。
2. 標準試料スペクトルを選択して<開く>ボタンをクリックしてください。
3. <開く>ボタンをクリックすると、図 3-2 のダイアログボックスに戻ります。

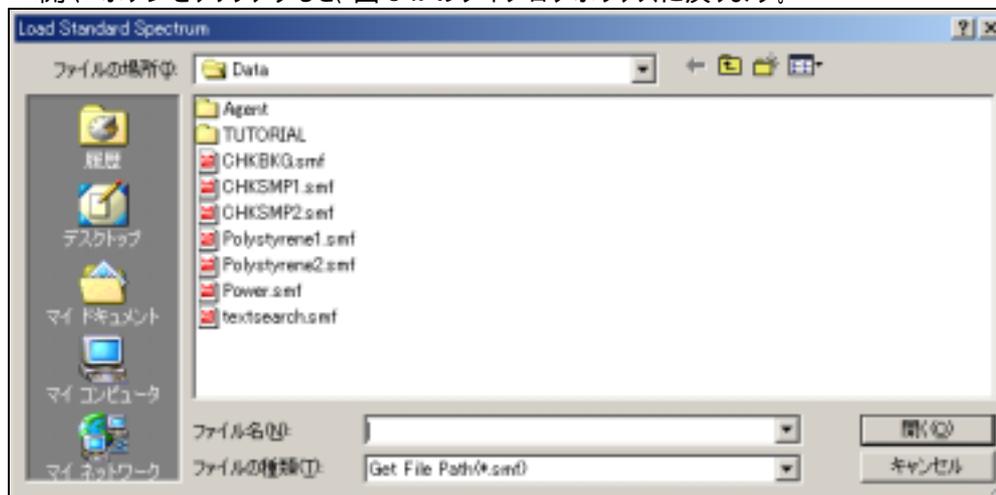


図 3-3 『Load Standard Spectrum』ダイアログボックス

3-5 Load Sample(試料スペクトル)ボタン

計算に必要な試料ファイルを用意するためのボタンです。

1. <Load Sample>ボタンをクリックすると『Load Sample Spectrum』ダイアログボックスが開きます。
2. 試料スペクトルを選択して<開く>ボタンをクリックしてください。
3. <開く>ボタンをクリックすると、図 3-2 のダイアログボックスに戻ります。

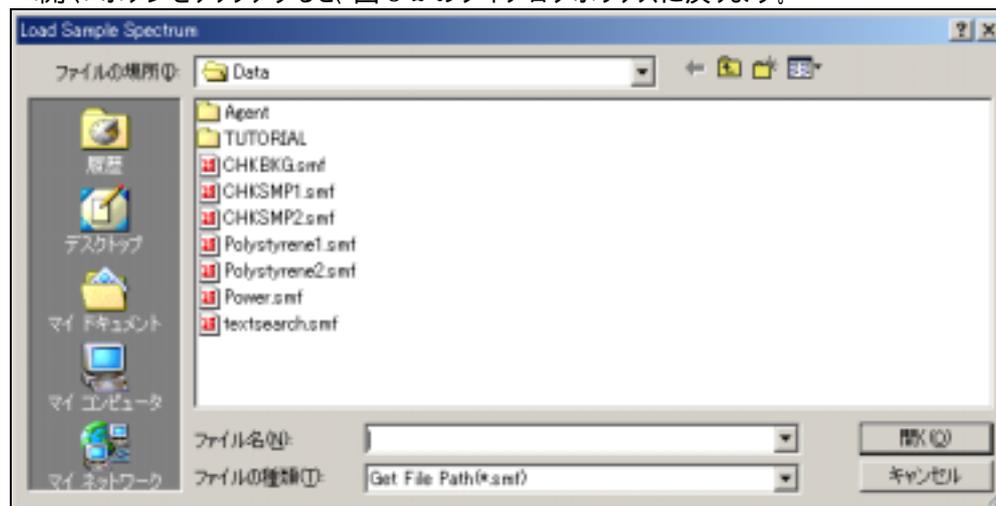


図 3-4 『Load Sample Spectrum』ダイアログボックス

3-6 ピーク波数テーブルファイル

日本薬局方の「赤外吸収スペクトル測定法」記載の標準品によるスペクトルの確認方法に基づき、検出するピーク波数は全部で10点まで指定することができます。また、透過率の比を評価するピークは、その中から4点まで選択できます。このプログラムでは、これら多くの数値を毎回入力する手間を省くため、ピーク波数のセットをデータファイルとして保存しておき必要に応じてそれを読み込んで使用しています。

図3-2で<Load Peak Table>ボタンをクリックするとすでに作成されているピーク波数テーブルファイルを読み込むことができ、<Edit Peak Table>ボタンをクリックするとピーク波数テーブルファイルを作成したり、編集したりできます。

3-6-1 Load Peak Table (ピーク波数テーブルファイルの読み込み)

図3-2で<Load Peak Table>ボタンをクリックするとすでに作成されているピーク波数テーブルファイルを読み込むことができます。

1. 図3-5のダイアログボックスが開きます。

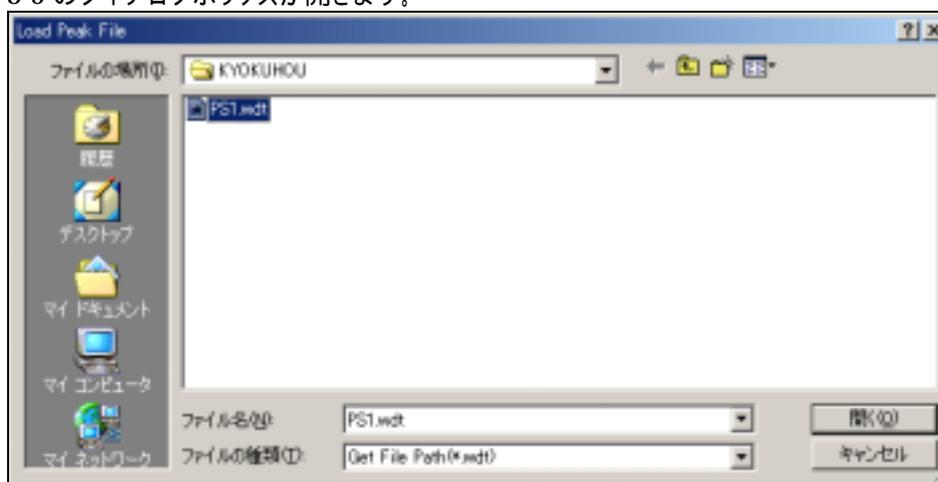


図3-5 Load Peak Table ダイアログボックス

2. ピーク波数テーブルファイルの拡張子は“.wdtr”です。
3. <開く>ボタンをクリックすると、図3-2のダイアログボックスに戻ります。
4. もちろん、あらかじめピーク波数テーブルのファイルは作成しておかなければなりません。同じデータを計算ごとに再入力する手間がはぶけます。新規にテーブルを作成するには、次に説明する<Edit Peak Table>ボタンを使用します。

3-6-2 Edit Peak Table (ピーク波数テーブルファイルの作成・編集)

図3-2で<Edit Peak Table>ボタンをクリックするとピーク波数テーブルファイルを作成したり、編集したりできます。

1. 図3-6のダイアログボックスが開きます。

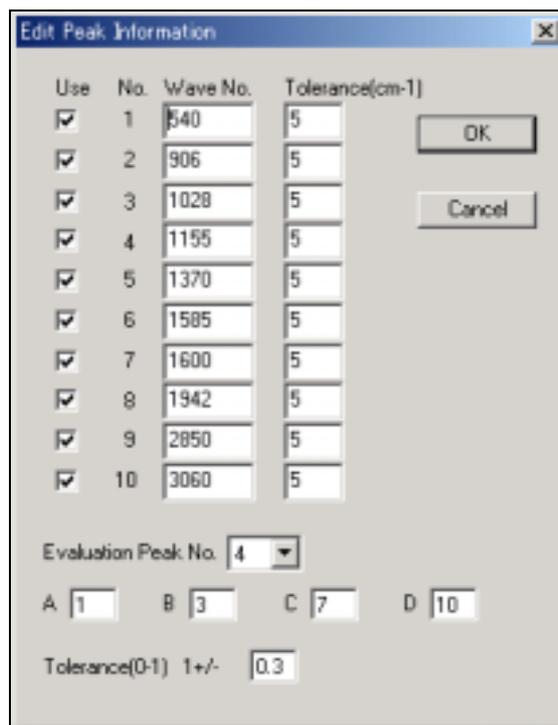


図 3-6 Edit Peak Information ダイアログボックス

2. ピーク波数を『WaveNo.』欄に入力し、波数の許容範囲を『Tolerance』欄に入力します。10個まで入力できます。計算に使用する波数の『Use』欄にチェックマークをつけます。波数が入力されていても、チェックマークがついていないものは計算に使用されません。
3. 透過率比評価ピークを計算する場合は、まず、使うピーク波数の数を『Evaluation Peak No.』に入力します。続いて、使用するピーク波数の番号を入力します。4 つまで指定できます。ピーク比の許容範囲を『Tolerance』欄に入力します。
4. 入力が終了したら、<OK>ボタンをクリックします。図 3-7 のダイアログボックスが表示され、作成したピーク波数テーブルファイルを保存します。ピーク波数テーブルファイルの拡張子は“.wdtr”です。
5. <保存>ボタンをクリックすると、図 3-2 のダイアログボックスに戻ります。



図 3-7 Save Peak File ダイアログボックス

3-7 Calculation(計算実行)ボタン

計算を実行し、判定を行いません。結果は画面およびプリンタに出力されます。

1. 標準スペクトルの読み込み(Load Standard)、試料スペクトルの読み込み(Load Sample)、ピーク波数テーブルファイルの読み込み(Load Peak Table)または作成(Edit Peak Table)がされると、<Calculation>ボタンが有効になります。
2. <Calculation>ボタンをクリックすると以下の手順で計算が実行されます。

ピーク波数テーブルを参照して、標準品スペクトルのピークを検出します。
実際に検出された標準品スペクトルのピーク波数を参照して、試料スペクトルのピークを検出します。
標準品スペクトルと試料スペクトルの、対応するピーク波数の誤差を計算します。
試料スペクトルの、選択された評価用ピークにおける透過率から評価ピーク透過率比を算出します。
標準品スペクトルの、選択された評価用ピークにおける透過率から評価ピーク透過率比を算出します。
の に対する比を評価値として算出します。
と の結果を画面に出力します。このとき、波数誤差が許容範囲(Tolerance)を越えるもの、および の評価値が許容範囲(Tolerance)を逸脱するものについては、"NG"となります。
すべての箇所で の基準を逸脱しなかったとき、総合評価を"OK"とします。もし一箇所でも"NG"となったものがあれば総合評価結果は"NG"となります。
3. スペクトルと総合評価結果("OK"または"NG")をメッセージ出力します。



図 3-8 評価

4. <OK>ボタンをクリックすると、図 3-9 のダイアログボックスが開きます。

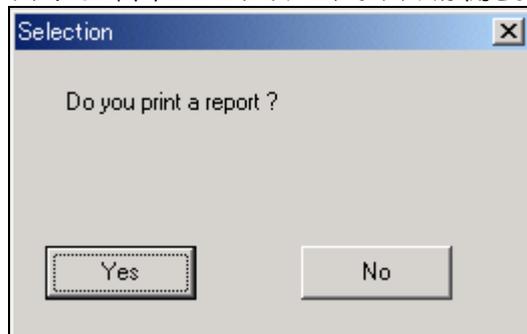


図 3-9 印刷ダイアログボックス

5. <Yes>ボタンをクリックするとプリンタ出力が実行され図 3-10 のようなレポートが出力され、<No>

ボタンをクリックするとそのままプログラムは終了します。

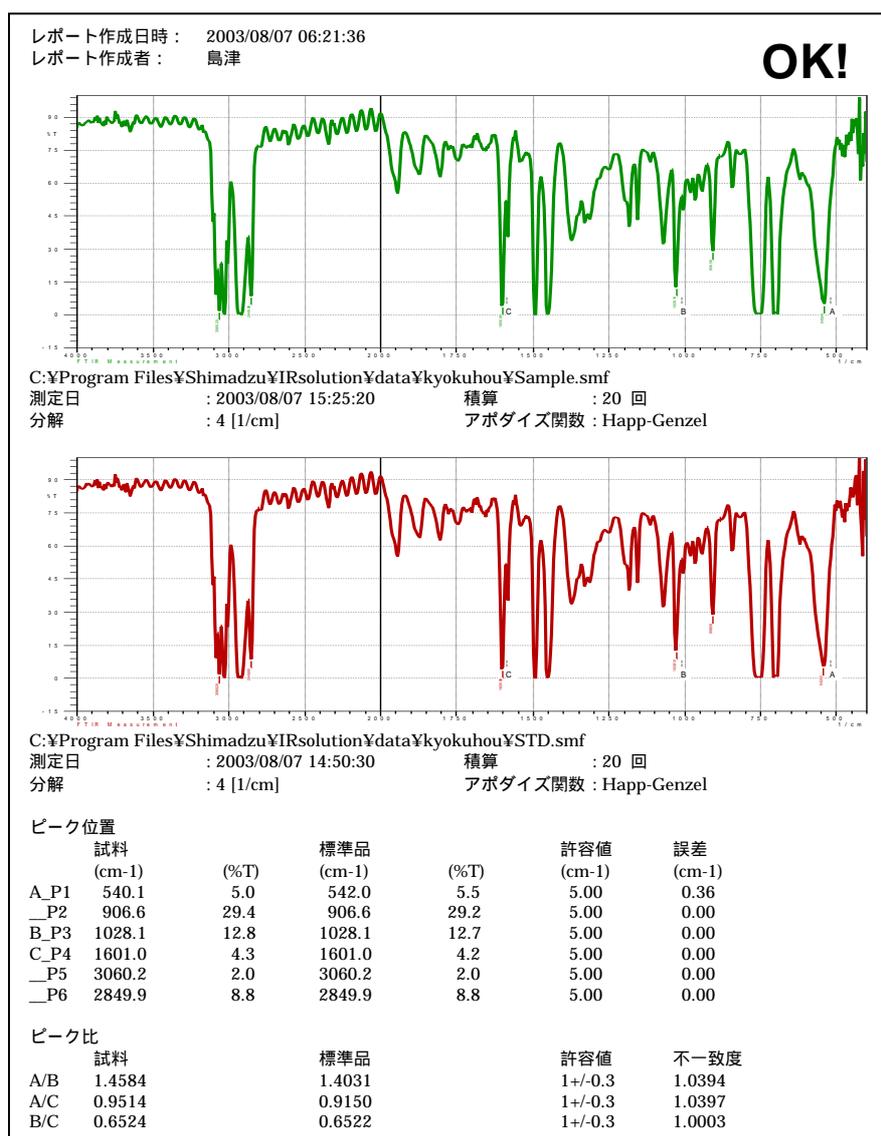


図 3-10 プリント出力の例

出力結果は、測定パラメータと「OK」か「NG」の判定結果、標準品および試料のスペクトル、および計算結果の表からなります。

検出したピークと評価のために選択されたピークを示すマーカーが表示されます。

計算結果は、上段に検出したピークを、試料および標準品について波数、透過率で示してあります。右端の列は誤差です。[試料のピーク波数] - [標準品のピーク波数]で計算され、許容値内なら合格となります。

下段は、各評価ピークにおける強度比を、これも試料および標準品について示してあります。右端の列は、不一致度です。[試料のピーク比] / [標準品のピーク比]で計算され、許容値内なら合格となります。

第4章 プログラムの使い方

- スペクトル出力機能 -

スペクトル出力機能は、日本薬局方の「赤外吸収スペクトル測定法」に記載されている、標準品によるスペクトルの確認方法に基づいたスペクトル出力を IRsolution 上で作成するためのマクロプログラムです。

4-1 用意しなければならないデータ

- 試料スペクトルのデータ(透過率)
- 対応する標準スペクトルのデータ(透過率)

注記

- ◆ 本プログラムでは、選択されたスペクトルファイルの中のアクティブポイントのついているデータを読み込み計算に使用します。
- ◆ 本プログラムで、測定された生データを用いた場合、レポートにスペクトルの測定パラメータが印刷されます。しかし、データ処理を行なったデータにアクティブポイントが設定されている場合は、測定パラメータは印刷されず、

4-2 プログラムの開始

1. IRsolution を起動します。
2. [マクロ]タブをクリックして、マクロプログラミング画面を表示させます。
3. [マクロ] - [マクロコンテナを開く]を選び、" ... :¥Program Files¥Shimadzu¥IRsolution¥Macros¥日本薬局方.lcm"を選択します。マクロツールバーにプログラムが表示されます。
4. マクロツールバーの"日本薬局方.lcm"の下に表示されている"日本薬局方.bas"を選び、[マクロ] - [実行]を選ぶとプログラムを実行します。

注記 マクロツールバー上の  (実行)ボタンをクリックしても、プログラムは起動しません。

5.  4-1 のダイアログボックスが開きます。

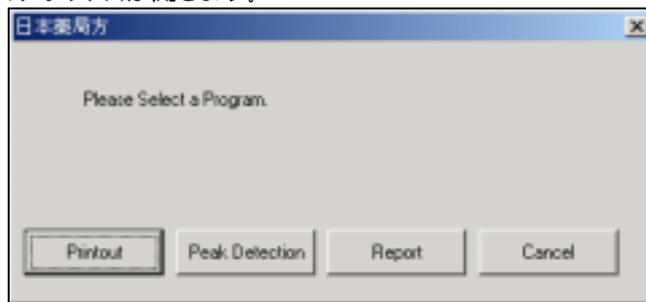


図 4-1 プログラムの選択

ボタン	内容
Printout	スペクトル出力機能を開始します。
Peak Detection	ピーク検出機能を開始します。
Report	レポート作成機能を開始します。

6. そこで、<Printout>ボタンをクリックします。

4-3 プログラムの流れ

このプログラムの操作の概要は以下のようになります。

1. 標準スペクトルを読み込みます。
2. 試料スペクトルを読み込みます。
3. レポートの印刷をします。

4-4 操作方法

1. 図 4-1 で、<Printout>ボタンをクリックします。
2. 図 4-2 のダイアログボックスが開きます。

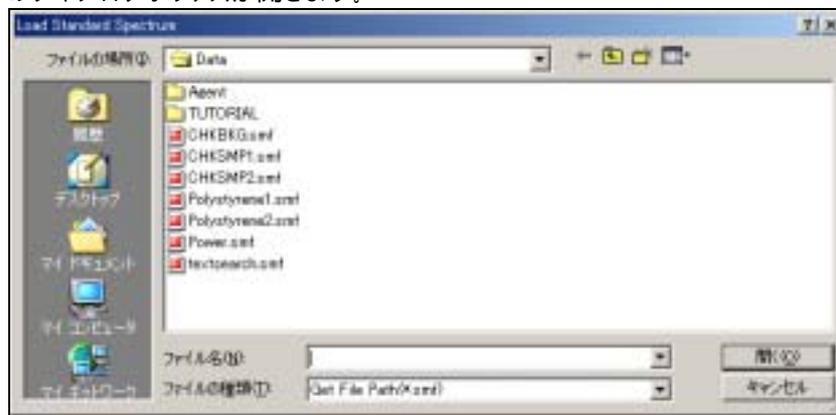


図 4-2 Load Standard Spectrum ダイアログボックス

3. 標準スペクトルを選んで<開く>ボタンをクリックします。
4. 図 4-3 のダイアログボックスが開きます。

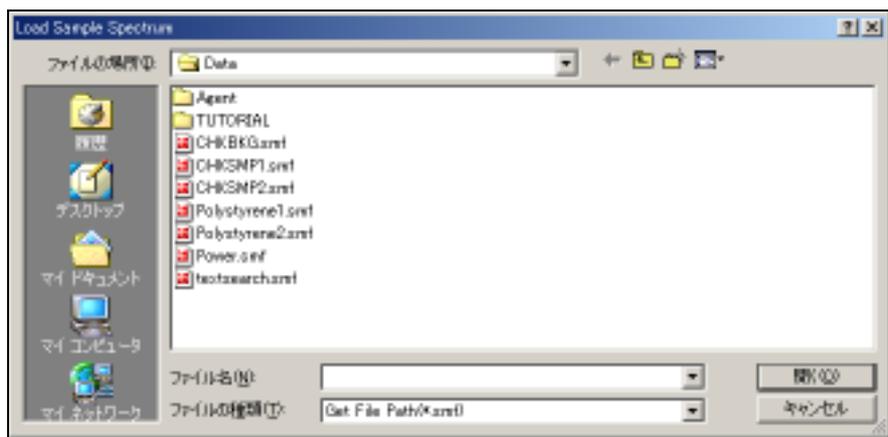


図 4-3 Load Sample Spectrum ダイアログボックス

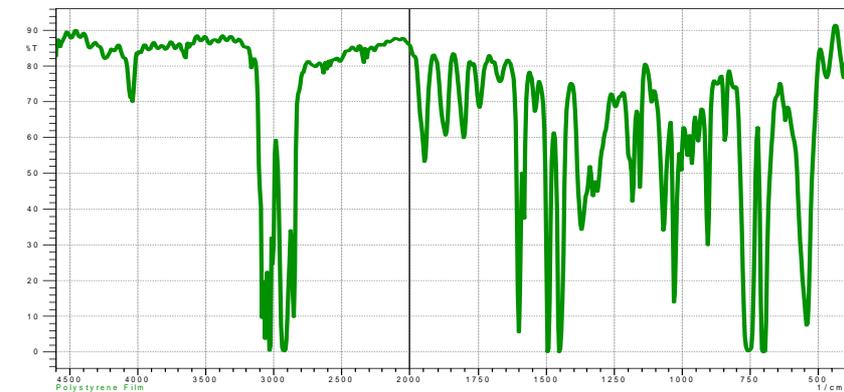
5. 試料スペクトルを選んで<開く>ボタンをクリックします。
6. 図 4-4 のダイアログボックスが開きます。



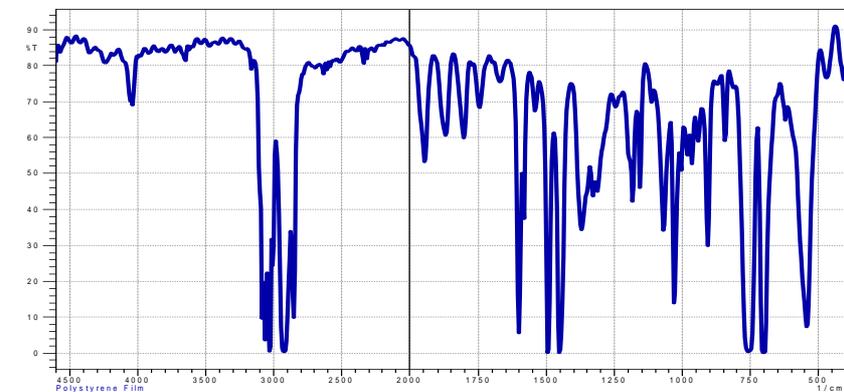
図 4-4 印刷ダイアログボックス

7. <Yes>ボタンをクリックするとプリンタ出力が実行され図 4-5 のようなレポートが出力され、<No>ボタンをクリックするとそのままプログラムは終了します。

レポート作成日時： 2003/08/07 06:21:36
レポート作成者： 島津



ファイル名 : C:\Program Files\Shimadzu\IRsolution\data\kyokuhou\Sample.smf
試料名 : PS1 分解 : 4 [1/cm]
測定日 : 2003/08/07 15:25:20 積算 : 20 回
アボダイズ関数 : Happ-Genzel



ファイル名 : C:\Program Files\Shimadzu\IRsolution\data\kyokuhou\STD.smf
試料名 : PS2 分解 : 4 [1/cm]
測定日 : 2003/08/07 14:50:30 積算 : 20 回
アボダイズ関数 : Happ-Genzel

図 4-5 プリント出力の例

第5章 プログラムの使い方

- ピーク検出機能 -

ピーク検出機能は、日本薬局方の「赤外吸収スペクトル測定法」に記載されている、ピーク検出を行ない出力を IRsolution ソフトウェア上で作成するためのマクロプログラムです。

5-1 用意しなければならないデータ

- 試料スペクトルのデータ(透過率)
- ピーク波数およびマーク波数テーブル(このプログラムの中で作成できます)

注記

- ◆ 本プログラムでは、選択されたスペクトルファイルの中のアクティブポイントのついてるデータを読み込み計算に使用します。
- ◆ 本プログラムで、測定された生データを用いた場合、レポートにスペクトルの測定パラメータが印刷されます。しかし、データ処理を行なったデータにアクティブポイントが設定されている場合は、測定パラメータは印刷されず、

5-2 プログラムの開始

1. IRsolution を起動します。
2. [マクロ]タブをクリックして、マクロプログラミング画面を表示させます。
3. [マクロ] - [マクロコンテナを開く]を選び、" ... :¥Program Files¥Shimadzu¥IRsolution¥Macros¥日本薬局方.lcm"を選択します。マクロツールバーにプログラムが表示されます。
4. マクロツールバーの"日本薬局方.lcm"の下に表示されている"日本薬局方.bas"を選び、[マクロ] - [実行]を選ぶとプログラムを実行します。

注記 マクロツールバー上の  (実行)ボタンをクリックしても、プログラムは起動しません。

5. 図 5-1 のダイアログボックスが開きます。

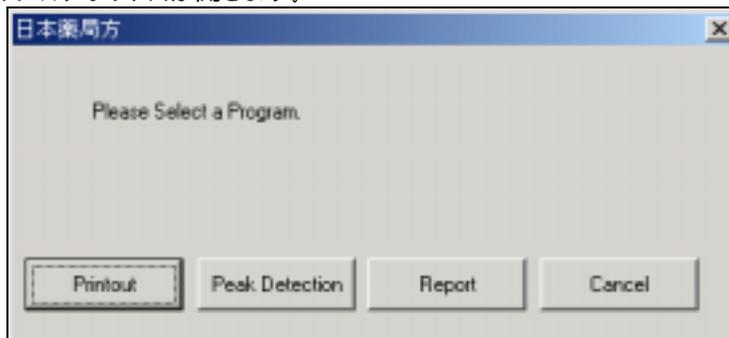


図 5-1 プログラムの選択

ボタン	内容
Printout	スペクトル出力機能を開始します。
Peak Detection	ピーク検出機能を開始します。
Report	レポート作成機能を開始します。

6. そこで、<Peak Detection>ボタンをクリックすると、図 5-2 のダイアログボックスが開き、日本薬局方対応ピーク検出機能が開始します。

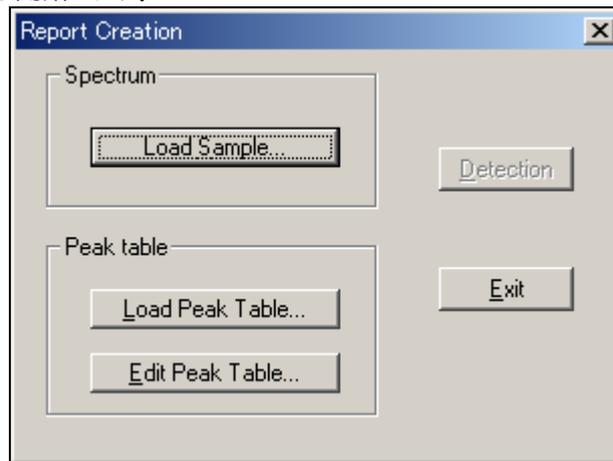


図 5-2 ピーク検出機能初期画面

ボタン	内容
Load Sample	試料スペクトルを読み込みます。
Load Peak Table	すでに作成されているピーク波数テーブルファイルを読み込みます。
Edit Peak Table	ピーク波数テーブルファイルを作成したり、編集したりします。
Detection	ピーク検出を実行します。
Exit	ピーク検出を実行せずに、プログラムを終了します。

5-3 プログラムの流れ

このプログラムの操作の概要は以下のようになります。

1. 試料スペクトルを読み込みます。
2. <Load Peak Table>ボタンですでに作成されているピーク波数テーブルファイルを読み込むか、<Edit Peak Table>ボタンでピーク波数テーブルファイルを作成します。
3. <Detection>ボタンをクリックしてピーク検出を実行し結果を印刷します。

5-4 Load Sample (試料スペクトル) ボタン

計算に必要な試料ファイルを用意するためのボタンです。

1. <Load Sample>ボタンをクリックすると『Load Sample Spectrum』ダイアログボックスが開きます。
2. 試料スペクトルを選択して<開く>ボタンをクリックしてください。
3. <開く>ボタンをクリックすると、図 5-2 のダイアログボックスに戻ります。



図 5-3 『Load Sample Spectrum』ダイアログボックス

5-5 ピーク波数テーブルファイル

日本薬局方の「赤外吸収スペクトル測定法」記載の標準品によるスペクトルの確認方法に基づき、検出するピーク波数は全部で 10 点まで指定することができます。また、4 つのマーク波数を入力することができます。

次にファイルの保存を行ないますこのプログラムでは、これら多くの数値を毎回入力する手間を省くため、ピーク波数のセットをデータファイルとして保存しておき必要に応じてそれを読み込んで使用しています。

図 5-2 で<Load Peak Table>ボタンをクリックするとすでに作成されているピーク波数テーブルファイルを読み込むことができ、<Edit Peak Table>ボタンをクリックするとピーク波数テーブルファイルを作成したり、編集したりできます。

5-5-1 Load Peak Table (ピーク波数テーブルファイルの読み込み)

図 5-2 で<Load Peak Table>ボタンをクリックするとすでに作成されているピーク波数テーブルファイルを読み込むことができます。

1. 図 5-4 のダイアログボックスが開きます。



図 5-4 Load Peak Table ダイアログボックス

2. ピーク波数テーブルファイルの拡張子は“.wdtp”です。
3. <開く>ボタンをクリックすると、図 5-2 のダイアログボックスに戻ります。
4. もちろん、あらかじめピーク波数テーブルのファイルは作成しておかなければなりません。同じデータを計算ごとに再入力する手間がはぶけます。新規にテーブルを作成するには、次に説明する<Edit Peak Table>ボタンを使用します。

5-5-2 Edit Peak Table (ピーク波数テーブルファイルの作成・編集)

図 5-2 で<Edit Peak Table>ボタンをクリックするとピーク波数テーブルファイルを作成したり、編集したりできます。

1. 図 5-5 のダイアログボックスが開きます。

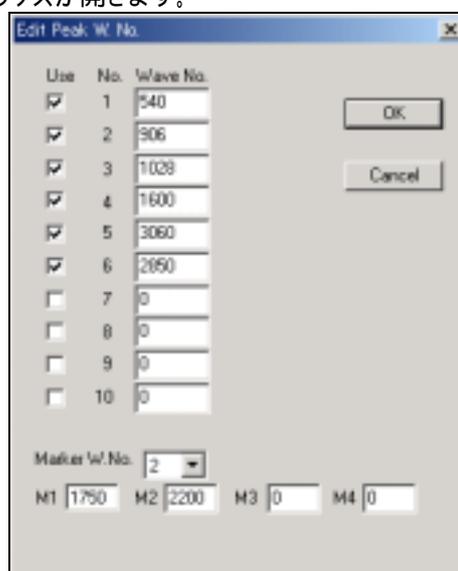


図 5-5 Edit Peak W.No.ダイアログボックス

2. ピーク波数を『WaveNo.』欄に入力します。10 個まで入力できます。計算に使用する波数の『Use』欄にチェックマークをつけます。波数が入力されていても、チェックマークがついていないものは計算に使用されません。

3. ピーク検出をする必要はないが、書き出したいマーク波数がある場合は、まずマークする波数の数を『Marker W.No.』に入力します。続いて、マークする波数を入力します。4つまで指定できます。
4. 入力が終了したら、<OK>ボタンをクリックします。図 5-6 のダイアログボックスが表示され、作成したピーク波数テーブルファイルを保存します。ピーク波数テーブルファイルの拡張子は “.wdtp” です。
5. <保存>ボタンをクリックすると、図 5-2 のダイアログボックスに戻ります。

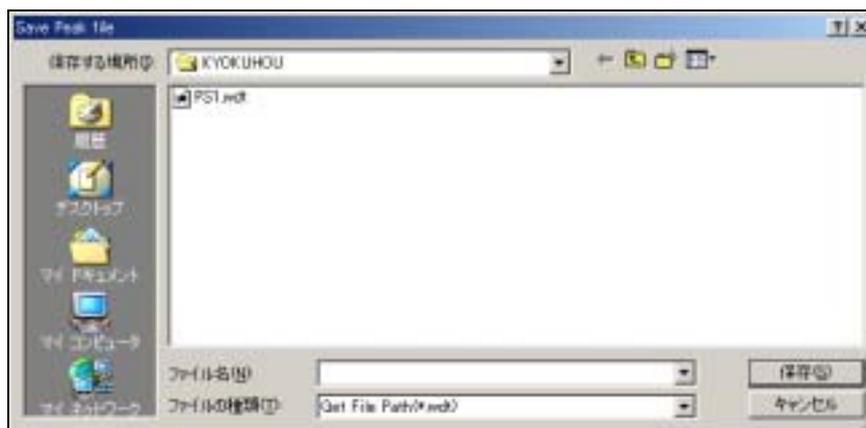


図 5-6 Save Peak File ダイアログボックス

5-6 Detection(ピーク検出)ボタン

ピーク検出を実行します。結果は画面およびプリンタに出力されます。

1. 試料スペクトルの読み込み(Load Sample)、ピーク波数テーブルファイルの読み込み(Load Peak Table)または作成(Edit Peak Table)がされると、<Detection>ボタンが有効になります。
2. 図 5-7 のダイアログボックスが開きます。

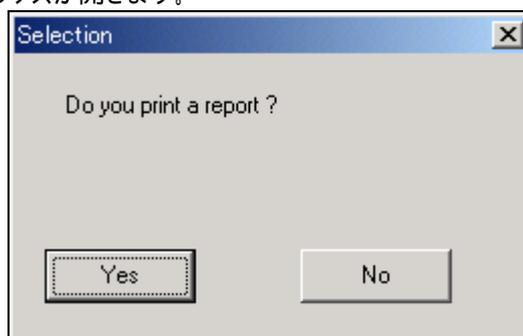


図 5-7 印刷ダイアログボックス

3. <Yes>ボタンをクリックするとプリンタ出力が実行され図 5-8 のようなレポートが出力され、<No>ボタンをクリックするとそのままプログラムは終了します。

計算が実行される手順は次の通りです。

ピーク波数テーブルを参照して、試料スペクトルのピークを検出します。

実際にはピークが検出されなかった場合、エラーメッセージを表示します。

ピーク位置を画面にプロットします。

実行を選択した場合、プリンタへスペクトル、スペクトル情報、ピーク情報を出力します(図 5-8)。

プリンタ出力が終わると、メイン画面に戻ります。

ピークやマーク位置の入ったスペクトルを保存したい場合は、「キャンセル」ボタンをクリックしてプログラムをいったん終了し、IRsolution の [ファイル] メニューの [保存] または [名前をつけて保存] を使用してください。

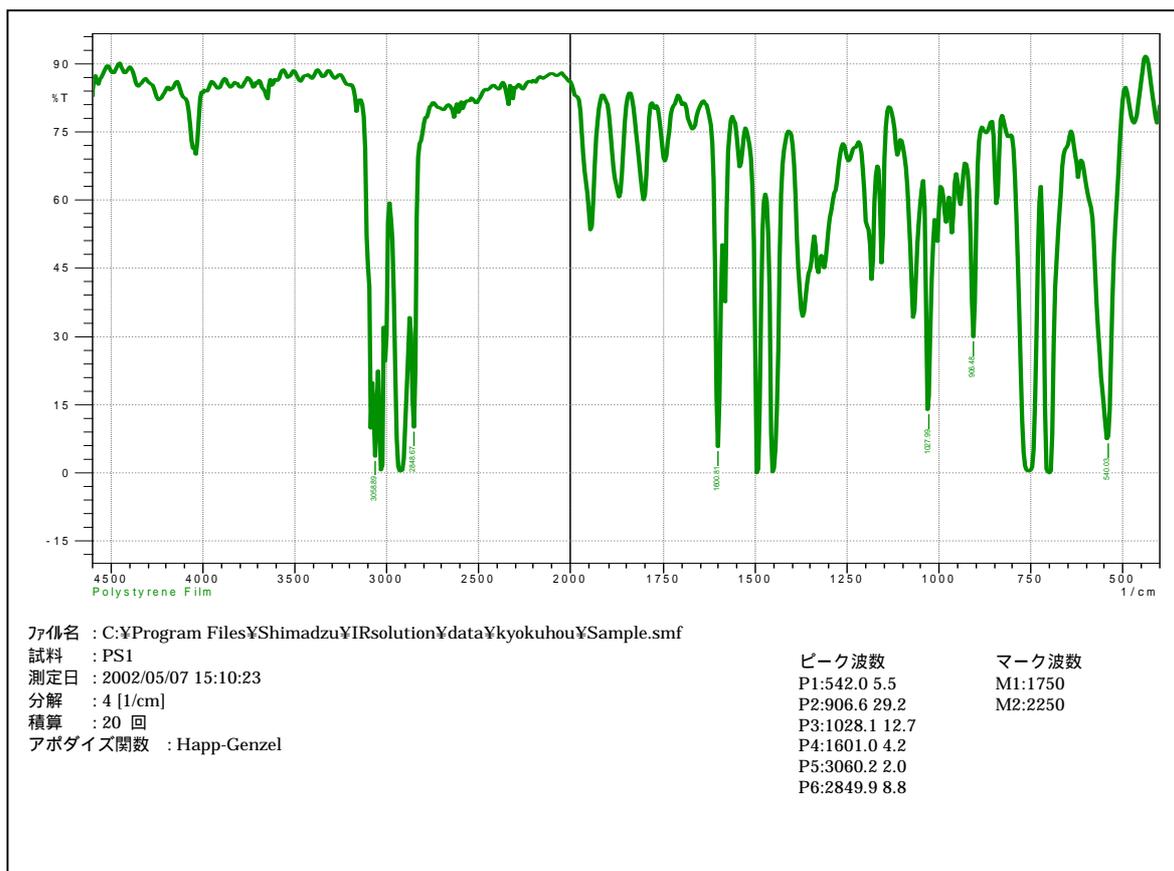


図 5-8 プリンタ出力の例

第6章 プログラムの使い方

- 改ざんチェックプログラム -

本プログラムには、改ざんチェック機能が含まれています。改ざんチェック機能は、本プログラムが不正に改ざんされていないかを点検するプログラムです。

6-1 操作方法

1. [スタート] - [プログラム] - [IRsolution] - [改ざんチェックソフトウェア]と選びます。
2. 『島津ユーザー認証ツール』がインストールされている場合は、図 6-1 のログインダイアログが表示され、登録されているユーザーIDとパスワードでログインします。『島津ユーザー認証ツール』がインストールされていない場合は、表示されずに図 6-2 に進みます。

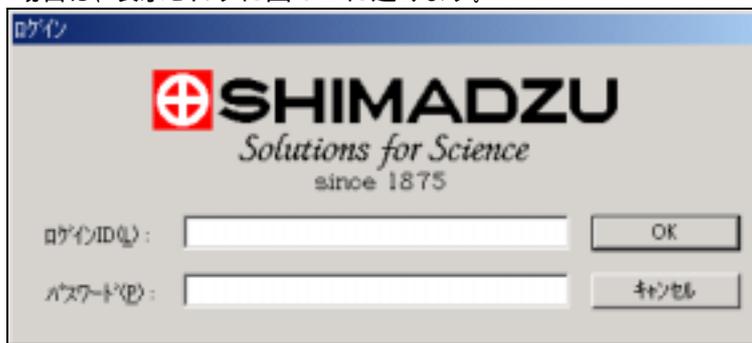


図 6-1 ログイン画面

3. 図 6-2 の『プログラム改ざんチェック』画面が表示されます。

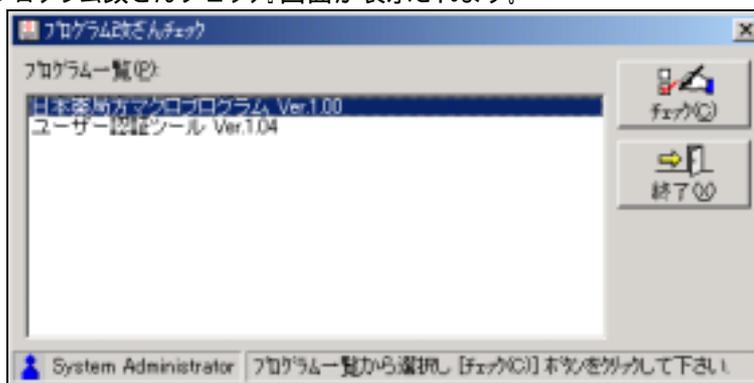


図 6-2 プログラム改ざんチェック画面

4. 『日本薬局方マクロプログラム』を選び、<チェック>ボタンをクリックします。
5. 図 6-3 の画面が表示されるので、<実行>ボタンをクリックします。

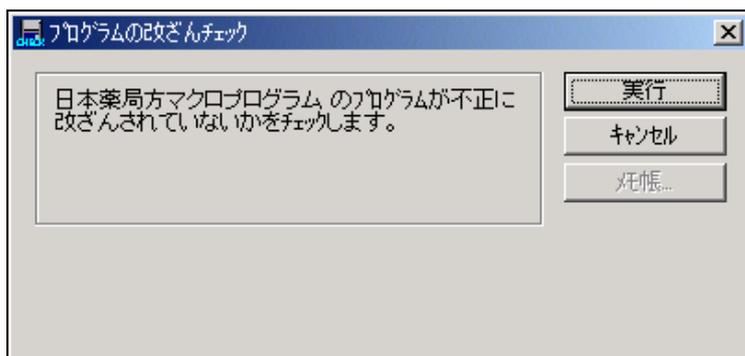


図 6-3 プログラム改ざんチェック画面

6. 改ざんチェック結果がダイアログ上に表示されます。

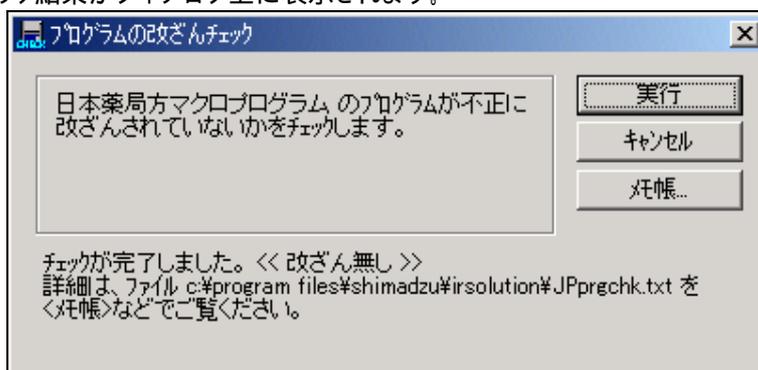


図 6-4 チェック結果

7. <メモ帳>ボタンをクリックすると、チェック結果が表示されます。この画面から印刷することができます。なお、チェック結果を修正することはできません。

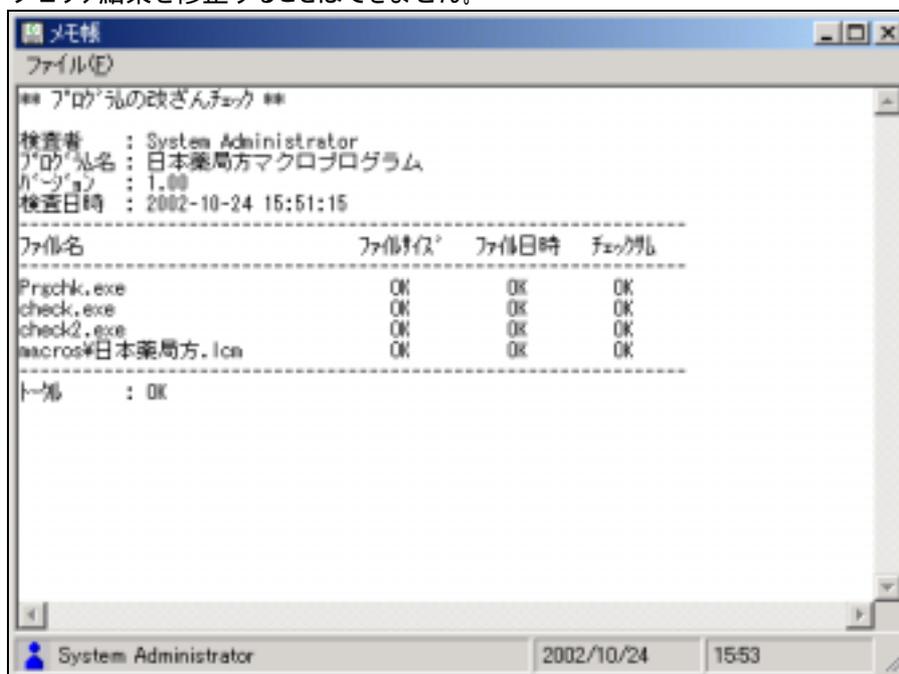


図 6-5 チェック結果