グルーピングについて

複数のピークの面積値を合算したり、定量を行いたい場合にグルーピングを使います。 グルーピングには**グループ検量**と**濃度和**があります。

グループ検量	ま:いくつかのピークを1つのグループとして扱い、検量線を
	作成し定量する場合
濃度和	: 個々のピーク毎に検量線を用いて定量した後、濃度の和を表示
	させる場合

となり合う複数ピークをひとつのピークとして処理したい場合は、波形処理で[複数ピークの統合]も有効です。

- 化合物テーブルで個々のピークの波形処理と同定処理を行った後に、グルーピングにま つわる設定を付け加えます。(波形処理や同定処理ができていない場合は、LCsolution 取扱説明書 操作編 p64-77 を参考にしてください。)
- 2) グルーピングを行いたいデータファイルを[LC 再解析]画面で開き、[データ処理パラメ ータ]で設定を行います。[LC/PDA データ解析]画面クロマトグラム上の右クリックメ ニューもしくは、[メソッド]メニューー[データ処理パラメータ]、またはツールバ ーの [データ処理パラメータ] アイコンをクリックします。
- (定量処理)タブで、[グルー ピング]を[グループ検量]もし くは[濃度和]に設定します。
 [OK]ボタンをクリックします。

データ処理パラメータ(デ	今内メンッド)			X
 波形処理 同定処理 定量法(2): 外部標準法 使用データ(2): 検量線 最大レベル数(1): 検量線の種類(2): 原点通過(2): 重み付け(R): 	定量処理 カラムバフォーマンス ・ 面積 ○ 高さ 3 … 直線 通さない なし ▼	• •	濃度単位(U): me/L 濃度値のフォーマット(E) ・ 小数点以下桁数 ○ 有効桁数 5 ゲルービッグ(G): (使用しない アルーフ後星 濃度和	

4) 化合物テーブルの[設定]タブを開き、右上の[編集]をクリックします。化合物テーブル

に[グループ#]欄ができます。 (表示されていない場合は、 [データ処理パラメータ]で [グルーピング]が[使用しな い]になっているか、テーブル において[グループ#]が非表 示になっているかのどちらかです。 後者については、[化合物テーブル ビュー]右クリックメニューの[テ ーブルスタイル]の中で、[表示する アイテム]に[グループ#]を追加します。)

■化合物テーブルビュー				68表示 🛃	編集	
ID#	化合物名	\$17 *	保持時間	濃度(1)	グルーフな	-
1	Methyl_paraben	ターケット	2.651	1	1	
2	Ethyl_paraben	ターケット	3.238	1	2	
3	Propyl_paraben	ターケット	3.952	1	1	
4	Butyl-paraben	ターケット	4.647	1	2	-
▲▶\設定 (結果 (グループ設定) ▲						

このように設定すると Methyl_paraben と Propyl_paraben をグルーピング、Ethyl_paraben と Butyl_paraben をグルー ピングします。

- 5) [グループ#]にグルーピングしたいピーク同士に、0以外の同じ番号を入れます。複数の グループを作成したい場合は「1」から順に番号を使います。
- 6) [グループ設定]タブをあけ、[グループ名]を入力します。

[定量処理]で[グループ検量] にした場合は[グループ名] と[濃度]も設定します。

□ 化合物テーブルビュー					
グルーフロ	ゲループ名	濃度(1)	濃度単位	▲	
1	Methyl-Propyl	2			
2	Ethyl-Butyl	2			
				•	
✓ ▶ 、 設定 、結果 、 グルーフ 設定 、 グルーフ 結果 /					
[グループ設定]でグループ名をつけます。グループ 検量を行う場合は、濃度欄も設定します。					

- 7) [化合物テーブルビュー]右上の[表示]アイコンをクリックすると、設定が固定され、計算が行われます。メソッドを保存します。
- 8) 検量線情報がない場合でも、この時点で[グループ結果]タブを開くと、面積値や高さの 合算値は表示されます。

(注意)[データ処理パラメータ]と[化合物テーブル]はデータ内メソッドになります。メソッドファ イルへ適用を忘れずに行いましょう。

(メモ)[データ解析]画面でのやり方を紹介しましたが、はじめからメソッドファイルへの直接書き 込む方法もあります。[分析]ウィンドウの[データ採取]画面で、メソッドを開いておきて、[メソッド] メニューー[データ処理パラメータ]で行う方法や、[再解析]ウィンドウの[LC 検量線]画面の[データ 処理パラメータ]と[化合物テーブル]でも同様に行います。

9) バッチ処理もしくは[LC 検量線]画面で検量線を作成します。

([検量線]画面での検量線作成方法は、LCsolution 取扱説明書 操作編 p76-77 をご参考 にしてください。)

[化合物テーブルビュー]の[グループ設定](または[グループ結果])タブで指定したグル ープごとの検量線結果を[検量線ビュー]で確認できます。

10) グルーピング結果の検量線をレポートにする場合には、[レポート作成]画面の[検量線]

アイテムの右クリッ クメニュー[プロパテ ィ]、[位置]タブの中で 選択します。「検量線 の選択」で[グループ] にチェックを入れま す。

LC/PDA 検量線のプロパティ				
全般 位置 ヘッダー ケラフ	表 ファイル			
データ① 検出器A ▼	検量線の選択 ○ 化合物(C)	@ <u>\$76-7%@)</u>		
ID番号① □ ヘ…がー/山	ĥ			

11) 濃度結果をレポートに表示させる場合には、[グループ結果]アイテムを使います。また、[定量結果]アイテムでは、各化合物がどのグループとして計算させているか([プロパティ]-[定量結果]タブで表示内容に[グループ名]を設定する)表示させることもできます。

		「グルーピング結果」アイテム
「定量結果」アイテム		
	III 🔽 🏬 👬 🚮	1