



Agilent MicroLab 소프트웨어

작동 설명서

고지 사항

설명서 부품 번호

0020-410KO

2024 년 1 월 제 10 판

저작권

© Agilent Technologies, Inc. 2024

미국 및 국제 저작권법에 따라 이 매뉴얼의 어떤 부분도 Agilent Technologies, Inc.의 사전 동의 및 서면 동의 없이 어떠한 형태나 어떠한 수단(전자 저장 및 검색 또는 다른 언어로 번역 포함)으로도 복제할 수 없습니다.

Agilent Technologies Australia [M] Pty Ltd

679 Springvale Road

Mulgrave, Victoria 3170, Australia

www.agilent.com

소프트웨어 수정판

본 가이드는 대체되기 전까지 5.7 버전 이상의 Agilent MicroLab 에 적용됩니다.

보증

본 문서에 수록된 내용은 “있는 그대로” 제공되며 향후 발행물에서 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다. 또한, 관련 법률이 허용하는 최대한의 범위 내에서 애질런트는 이 설명서 및 이 설명서에 포함된 모든 정보와 관련해 명시적 또는 묵시적 보증을 포함해 어떠한 보증도 제공하지 않으며, 특정 목적에 대한 적합성 및 상품성에 대한 묵시적 보증이 포함되지만, 이에 국한되지 않습니다. 애질런트는 이 문서 또는 여기에 포함된 정보의 제공, 사용 또는 성능과 관련된 오류 또는 부수적이거나 결과적인 손상에 대해 책임을 지지 않습니다. 애질런트와 사용자가 이 문서의 내용을 포함하는 보증 조건과 관련해 별도의 서면 계약을 체결했고, 그러한 조건이 이 문서의 조건과 충돌하는 경우 별도의 계약에 포함된 보증 조건이 우선합니다.

기술 라이선스

이 문서에서 설명하는 하드웨어 및/또는 소프트웨어는 라이선스에 따라 제공되며, 이러한 라이선스 조건에 따라서만 사용 또는 복사할 수 있습니다.

제한된 권리 범례

미국 정부 제한 권리. 연방 정부에 수여한 소프트웨어 및 기술 데이터 권리는 최종 사용자 고객에게 관습적으로 제공되는 권리만을 포함합니다. 애질런트는 FAR 12.211 (기술 데이터) 및 12.212 (컴퓨터 소프트웨어)와 국방부의 경우, DFARS 252.227-7015 (기술 데이터 - 상용 품목), DFARS 227.7202-3(상업용 컴퓨터 소프트웨어 또는 컴퓨터 소프트웨어 문서에 포함된 권리)에 따라서 소프트웨어 및 기술 데이터에 대한 이러한 관습적인 상업 라이선스를 제공합니다.

안전 공지

주의

주의 공지는 위험을 나타냅니다. 작동 절차, 관행 등을 올바르게 수행하거나 준수하지 않는 경우, 제품 손상 또는 중요한 데이터 손실로 이어질 수 있으므로 주의를 기울여야 합니다. 명시된 조건을 완전히 이해하고 충족할 때까지 주의 공지의 범위를 넘어서는 작업을 수행하지 마십시오.

목차

1	소개	7
	지원 기기	8
2	MicroLab Mobile	9
	PDA 와 기기 간 Bluetooth 통신을 위한 연결	9
	처음으로 로그인하기	11
	4300 Handheld FTIR 의 소프트웨어 IQ	12
	사용자 관리	13
	추가	13
	역할 정의	14
	공통 아이콘	15
	Home(홈) 화면	15
	Status(상태)	15
	Start(시작)	16
	Method(메소드)	16
	Reference Method(참조 메소드)	16
	Log Off(로그아웃)	16
	Lock(잠금)	16
	Menu(메뉴)	16
	Method(메소드) 화면	17
	메소드 목록	18
	Activate(활성화)	18
	편집	18
3	MicroLab PC	19

목차

Home(홈) 화면	19
Status(상태)	19
Start(시작)	20
Method(메소드)	20
Reference Method(참조 메소드)	20
Logoff(로그아웃) 및 Exit(종료)	20
Lock(잠금)	20
Previous Results(이전 결과)	20
Advanced Features(고급 기능)	20
Method(메소드)	21
메인 페이지	21
새 메소드 생성/기존 메소드 편집	21
Advanced Features(고급 기능)	33
System Check(시스템 확인)	33
Diagnostics(진단)	34
MAC Addresses(MAC 주소)	34
Library Management(라이브러리 관리)	34
User Management(사용자 관리)	36
GRAMS PLS/IQ 에서 MicroLab PC 로 다변량 메소드 전송	36
PLS/IQ *.cal 파일을 ASCII 로 내보내기	36
메소드 파일 생성	37
MicroLab Expert 에서 MicroLab PC 로 MicroLab 정량 모델 이전	38
사전 시료 조정 확인 사용	39
편집한 메소드를 MicroLab Mobile 로 전송	41
MicroLab Lite 동기화 사용	41
내 컴퓨터를 통한 복사	42

목차

21 CFR Part 11 사용 환경에서 파일 이동	42
System Check(시스템 확인)	43
4 MicroLab Quant	45
Home(홈) 화면	45
Logoff(로그아웃)	45
Lock(잠금)	46
Start New Model(새 모델 시작)	46
Import Model(모델 가져오기)	50
21 CFR Part 11 기능	51
21 CFR Part 11	51
E-Sign(전자 서명)	51
5 MicroLab OQ	53
운영 적격성 평가(OQ)	53
운영 체제의 진단 검증	53
성능 검증	54
OQ 수행	54
OQ 보고서	55
6 21 CFR Part 11 이 포함된 MicroLab	57
SCM	57
SDA	58
MicroLab 의 21 CFR Part 11 소프트웨어 구성 요소	58
Lock(잠금)	59
E-sign(전자 서명)	59
변경 이유(Reason for Change)	60
21 CFR Part 11	61

목차

7	시료 측정	63
	시료 인터페이스 세척	63
	백그라운드 측정 수집	64
	시료 측정 수집	64
8	결과 검토	67
	MicroLab Mobile	67
	Results(결과) 화면	67
	Handling data(데이터 취급)	67
	Previous results(이전 결과)	69
	MicroLab PC/MicroLab Lite	70
	Results(결과) 화면	71
	GRAMS 로 스펙트럼 가져오기	77
	MicroLab 보고서 작성	78
	메소드에 보고서 템플릿 지정	78
	새 보고서 템플릿 만들기	79
9	업데이트 및 문제해결	81
	펌웨어 업데이트	81
	문제해결	81
	초기화 실패	81
	보고서 템플릿 생성 실패	82
	계인 변경 사항이 저장되지 않음	82
	데이터베이스 액세스 문제	82
	부록 A: MicroLab 파일 유형	83

Agilent MicroLab 소프트웨어 제품군은 Agilent 4100 ExoScan, 4200 FlexScan, 4300 휴대용 FTIR, 4500 시리즈, 5500 시리즈, Cary 630 FTIR 분광계 실행을 위해 고안되었습니다. 본 소프트웨어는 MicroLab FTIR 소프트웨어와 MicroLab Mobile 소프트웨어, 두 가지 패키지로 제공됩니다.

MicroLab FTIR 소프트웨어 패키지는 네 가지 모듈로 구성됩니다.

- MicroLab PC - 기기 연결 및 제어
- MicroLab Quant - 정량 메소드 개발 용도
- MicroLab OQ - 운영 적격성 평가(OQ) 용도
- MicroLab Lite - 데이터 검토 및 메소드 개발

MicroLab Mobile 소프트웨어 패키지와 함께 제공되는 소프트웨어:

- MicroLab Mobile
- MicroLab FTIR 소프트웨어 패키지

참고

MicroLab Mobile 소프트웨어 패키지는 4300 휴대용 FTIR 및 휴대용 PC(PDA)를 포함한 기기에만 사용 가능: Agilent 4100 ExoScan, 4200 FlexScan 및 4500 시리즈. 애질런트는 이러한 기기용 PDA 를 별도로 제공하지 않습니다.

옵션인 MicroLab Pharma 소프트웨어 패키지(부품 번호 G4984-64000)와 MicroLab Pharma Upgrade 소프트웨어 패키지(부품 번호 G4985-64000)는 데이터 보안을 보장하고 액세스를 통제하며 미국 FDA 21 CFR Part 11, EU Annex 11 및 이와 유사한 국가 전자 기록 규정의 규제 준수를 지원하는 내장된 기술 제어 기능을 제공합니다.

이 문서에서 언급된 21 CFR Part 11 소프트웨어와 환경, 기능 등은 MicroLab Pharma 소프트웨어를 사용하는 모든 데이터 무결성 환경/구성 요소입니다.

이러한 MicroLab 소프트웨어 패키지는 다음을 제외하고는 유사한 기능과 구조로 제공됩니다.

- 메소드는 MicroLab Mobile 소프트웨어에서 편집할 수 없습니다
- MicroLab Lite 소프트웨어에서는 데이터를 수집할 수 없습니다
- 기기가 연결되어 있어야 MicroLab PC와 MicroLab Mobile 소프트웨어를 PC에서 실행할 수 있습니다

이 소프트웨어는 사용자에게 분석 과정을 안내하는 메뉴 중심 화면과 지침으로 고급 및 초보 사용자가 쉽게 사용할 수 있도록 설계되어 있습니다.

소개

소프트웨어에는 사용자 로그인 기능이 통합되어 있으며, 각 사용자에게는 관리자가 할당한 정의된 '역할'이 있습니다. 관리자는 이러한 역할을 통해 낮은 수준의 사용자에게 허용되는 메소드와 작업을 제한할 수 있습니다.

지원 기기

이 소프트웨어 빌드는 Agilent Cary 630, 4100 ExoScan, 4200 FlexScan, 4300 Handheld, 4500 Portable 및 5500 Compact FTIR 기기에서 사용할 수 있습니다.

2 MicroLab Mobile

PDA와 기기 간 Bluetooth 통신을 위한 연결	9
처음으로 로그인하기	11
4300 Handheld FTIR의 소프트웨어 IQ	12
사용자 관리	13
공통 아이콘	15
Home(홈) 화면	15
Method(메소드) 화면	17

소프트웨어를 설치하거나 업그레이드하려면 소프트웨어와 함께 제공된 MicroLab 소프트웨어 설치 지침을 참조하십시오.

참고

MicroLab Mobile 소프트웨어 패키지는 PDA 와 함께 제공되는 4300 Handheld FTIR 및 기기에만 적용됩니다. Agilent 4100 ExoScan, 4200 FlexScan 및 4500 시리즈.

PDA 와 기기 간 Bluetooth 통신을 위한 연결

참고

이 섹션은 Agilent 4100 ExoScan, 4200 FlexScan 및 4500 FTIR 시리즈 기기에만 적용됩니다.

- 1 기기와 PDA 사이에 Bluetooth 연결을 구성하려면 홈 페이지에서 Bluetooth 아이콘을 클릭합니다. "flight mode(비행 모드)"가 활성화된 경우 비활성화합니다. Bluetooth가 "ON(사용)" 모드가 아닌 경우 Bluetooth 막대를 클릭하여 Bluetooth 통신을 활성화합니다
- 2 메뉴에서 Bluetooth Settings(Bluetooth 설정)를 선택합니다
- 3 장치를 지우려면 Devices(장치) 탭에서 스타일러스로 장치를 선택하고 메뉴가 표시될 때까지 누릅니다. 그런 다음 Delete(삭제)를 클릭합니다
- 4 장치가 지워지면 Add a New Device(새 장치 추가)를 클릭합니다. Bluetooth를 지원하는 장치 목록이 표시될 때까지 기다린 다음 적절한 장치를 선택합니다. 화면 하단에서 Next(다음)를 클릭합니다

MicroLab Mobile

- 5 휴대용 장치와 연결하려면 범용 패스코드를 입력해야 합니다. 필요한 패스코드는 7890입니다. 이 값을 입력하고 **Next(다음)**를 클릭합니다. 그러면 시스템에서 휴대용 FTIR 장치에 대한 연결을 테스트하고 장치를 추가합니다
- 6 장치가 추가되면 **Advanced(고급)**를 선택하고 Serial Port(직렬 포트) 구성 상자가 선택되었는지 확인합니다. 이 상자는 기본적으로 선택되어 있지 않으며 장치가 올바르게 작동하려면 반드시 선택되어 있어야 합니다. **Save(저장)**를 클릭합니다
 - 고급 옵션은 연결된 후에만 나타납니다. 이 옵션이 사라지고 다시 Device(장치) 탭이 표시될 경우 스타일러스로 방금 연결된 장치를 클릭하여 선택합니다. 그러면 직렬 포트 통신을 설정하는 위의 Advanced Portion(고급 부분)이 표시됩니다
- 7 직렬 포트를 설정하면 Bluetooth 설정 화면 아래쪽에 있는 **COM Ports(COM 포트)** 탭을 선택합니다
- 8 **New Outgoing Port(새 송신 포트)**를 선택합니다. 방금 Bluetooth 통신 구성에 추가한 장치를 선택하고 **Next(다음)**를 클릭합니다
- 9 MicroLab Mobile 버전 4.0 이후의 기본 COM 포트는 COM 1입니다. COM Port(통신 포트)를 COM 1로 설정하고 **Secure Connection(보안 연결)** 상자를 선택 취소합니다. 이 절차를 마쳤으면 화면 아래쪽에서 **Finish(마침)**를 선택합니다
 - 선택한 COM Port(통신 포트)와 통신 문제가 있을 경우 PDA에서 오류 메시지로 알려 줍니다. 통신용 기본 COM Port(통신 포트)는 휴대용/핸드헬드 장치의 통신 파일을 통해 변경할 수 있습니다. COM Port(통신 포트) 설정을 변경하는 데 추가 설치 지침이 필요할 경우 Agilent 지원 담당자에게 문의하십시오
- 10 그러면 초기 Bluetooth setting Configuration(Bluetooth 설정 구성) 화면이 다시 표시됩니다. 오른쪽 모서리에 있는 **OK(확인)**를 클릭하고 메인 홈 화면으로 돌아갈 때까지 열린 모든 프로그램을 닫습니다
- 11 시작 메뉴를 선택하면 MicroLab Mobile이 선택 항목으로 나타납니다

처음으로 로그인하기

MicroLab Mobile에 처음으로 로그인하기:

- 1 Agilent 4100 ExoScan FTIR 및 Agilent 4500 시리즈 FTIR 시스템과 함께 배송된 휴대용 및 내장형 PC는 시작 메뉴에 MicroLab Mobile 소프트웨어의 바로 가기가 설치된 상태로 제공됩니다. 소프트웨어를 시작하려면 **Start(시작)**을 클릭한 다음 **MicroLab Mobile** 아이콘을 클릭합니다. 이 소프트웨어는 내 장치\Program Files\MicroLab Mobile을 탐색하고 **MicroLabMobileEX.exe** 아이콘을 클릭하거나 시작 메뉴에서 프로그램을 선택하고 여기에서 적절한 아이콘을 선택하여 시작할 수도 있습니다

Agilent 4300 휴대용 FTIR은 내장형 컴퓨터에 MicroLab Mobile이 사전 로드된 상태로 출고됩니다. 4300 휴대용 FTIR을 켜면 MicroLab Mobile이 자동으로 시작됩니다.

- 2 소프트웨어가 시작되고 초기 동기화가 필요하다는 메시지가 표시됩니다. 이 동기화 과정에서 SCM으로 만든 프로필(21 CFR Part 11을 사용하는 소프트웨어의 경우)과 Public Mobile Methods 폴더의 모든 메소드가 PDA 또는 내장형 컴퓨터로 업로드됩니다. 21 CFR Part 11 환경에서 파일을 이동하는 방법에 대한 자세한 내용은 42페이지를 참조하십시오
- 3 PC에서 MicroLab Lite를 열고 로그인합니다
 - PDA 연결을 위해 Windows Mobile Device Center가 PC에 설치되어 있는지 확인하십시오. MicroLab 소프트웨어 설치 디스크에 있는 앱을 설치하십시오
- 4 PDA 또는 내장형 컴퓨터와 PC를 통신 케이블로 연결합니다
- 5 동기화가 자동으로 트리거되지 않을 경우 **Advanced Features(고급 기능)**를 클릭한 다음 **Synchronize(동기화)**를 클릭합니다
- 6 **New(새로 만들기)**를 클릭합니다
- 7 **Get Connected Device Name(연결된 장치 이름 가져오기)**을 클릭합니다. 필드에 장치 이름이 나타납니다
- 8 **Browse(찾아보기)**를 클릭한 다음 Public Mobile Results 폴더로 이동합니다. 수집된 모든 데이터가 이 폴더에 저장됩니다
- 9 **OK(확인)**를 클릭합니다
- 10 **Sync(동기화)**를 클릭한 다음 표시된 메시지에서 **Yes(예)**를 클릭하여 동기화를 시작합니다
- 11 동기화가 완료되면 **OK(확인)**를 클릭합니다

12 PDA 또는 내장형 컴퓨터에서 MicroLab Mobile을 다시 시작한 다음 Security(보안) 화면이 표시되면 로그인합니다. MicroLab Lite 또는 PC를 사용하여 만든 자격 증명을 사용합니다. 그러면 시스템에 Home(홈) 화면이 표시됩니다

21 CFR Part 11 환경의 경우: MicroLab Mobile 권한이 있는 프로필로 로그인합니다. SCM에서 만든 프로필에 대해 적절한 사용자 이름을 입력합니다. Groups(그룹) 및 Projects(프로젝트) 필드가 자동으로 채워집니다. 암호를 입력한 다음 Login(로그인)을 클릭합니다.

참고

사용자 이름과 암호는 대소문자를 구분합니다.

MicroLab Mobile 21 CFR Part 11 을 사용하는 경우 암호에 영숫자만 포함해야 합니다.

\$.@ 등의 특수 문자를 사용하지 마십시오.

PC 에 휴대용 장치가 연결되어 있을 때는 MicroLab Mobile 또는 MicroLab Lite 에 로그인하고 같은 프로필로 동시에 로그인하지 않는 것이 좋습니다.

4300 Handheld FTIR 의 소프트웨어 IQ

참고

이 섹션은 Agilent 4300 Handheld FTIR 에만 적용됩니다.

MicroLab Mobile의 기기 온보드 컴퓨터에는 IQ/OQ 기능이 내장되어 있습니다. 소프트웨어 설치 적격성 평가(IQ) 테스트를 수행하여 모든 관련 파일이 설치되었는지 확인하십시오.

IQOQ 실행 방법:

- 1 Login(로그인) 화면에서 **Exit(종료)**를 클릭하여 MicroLab Mobile을 닫으십시오
- 2 Exit Confirmation(종료 확인) 대화 상자가 나타나면 **OK(확인)**를 클릭하십시오
- 3 두 개의 아이콘을 볼 수 있는 'Pass Through'(통과) 모드로 화면이 바뀝니다. 위의 아이콘은 MicroLab Mobile, 아래 아이콘은 소프트웨어 IQ/OQ를 나타냅니다
- 4 하단 아이콘을 선택하여 IQ/OQ를 실행하십시오
- 5 Login(로그인) 화면이 나타납니다. 사용자 이름과 암호를 입력해 로그인하십시오
- 6 오른쪽 하단에 있는 **Next(다음)** 화살표 버튼을 클릭하여 IQ - Software(IQ - 소프트웨어) 테스트를 수행하십시오

- 7 결과 페이지가 나타납니다. 설치 적격성 평가 결과가 PASS(통과)인지 확인하십시오
- 8 **Next(다음)** 화살표 버튼을 클릭하여 IQ 보고서를 생성하십시오
- 9 **Exit(종료)**를 클릭하면 'Pass Through(통과)' 모드로 돌아갑니다

사용자 관리

관리자는 Advanced Features (고급 기능) 옵션을 통해 인증된 사용자를 관리하고 MicroLab 시스템 기능을 변경할 수 있습니다. 시스템은 Admin(관리자), Developer(개발자), Technician(기술자), E-signer(전자 서명자), Service(서비스)의 여러 사용자 수준으로 설치됩니다. 언제든지 사용자를 추가할 수 있습니다. 여러 운영자가 시스템을 공유하는 경우 첫 실행 시 원하는 사용자와 암호를 설정하는 것이 좋습니다.

참고

관리 권한이 있는 사용자만 User Management(사용자 관리)에 액세스할 수 있습니다.

21 CFR Part 11 환경을 사용하도록 설정한 경우에는 이 기능을 사용할 수 없습니다. 모든 사용자 관리 기능은 SCM(Spectroscopy Configuration Manager) 소프트웨어에서 수행합니다. 자세한 내용은 소프트웨어와 함께 제공된 SCM 사용 설명서를 참조하십시오.

추가

시스템에 사용자 추가:

- 1 MicroLab Mobile Home (홈) 화면에서 **Advanced Features(고급 기능)** 버튼을 누릅니다
- 2 **User Management(사용자 관리)**를 클릭합니다
- 3 **Add New User(새로운 사용자 추가)**를 클릭합니다
- 4 텍스트 상자에 맞춤 UserID를 입력합니다
- 5 사용자의 전체 이름을 입력합니다
- 6 새로운 암호를 입력합니다
- 7 새로운 사용자의 역할을 식별합니다(Admin(관리자), Service(서비스), Developer(개발자), Technician(기술자))
- 8 **Apply Changes(변경 사항 적용)**를 클릭합니다

- 9 시스템 로그아웃을 알리는 창이 표시됩니다. 변경 사항 적용 후에는 강제로 다시 로그인됩니다

참고

시스템에서 사용자가 자동으로 로그아웃됩니다. 새로운 UserID 가 Logon(로그인) 화면의 User Name(사용자 이름) 드롭다운 메뉴에 표시됩니다.

역할 정의

Service(서비스): 서비스 역할에서는 해당 메소드에 적용 가능한 샘플링 기술을 포함하여 메소드 내 모든 기기 매개 변수에 액세스할 수 있습니다.

Admin(관리자): 관리자 역할은 메소드 편집, 새로운 메소드 생성, 공개 메소드 정의, 기기 검증 수행, 사용자 액세스 제어를 포함하여 MicroLab 소프트웨어에 대한 지속적인 유지 관리 및 변경 사항을 담당하는 사람에게 주어집니다.

Developer(개발자): 개발자 역할에서는 시스템 성능 검증에 대한 액세스와 함께 메소드 편집 및 실행 권한이 허용됩니다. 하지만 이 역할에는 사용자 관리 기능 또는 시스템 진단에 대한 액세스 권한이 없습니다.

Technician(기술자): 기술자 역할은 시스템의 표준 사용자를 위한 역할입니다. 기술자에게는 관리자가 공개로 정의한 메소드를 실행하는 액세스 권한만 있습니다. 또한 기술자는 데이터를 검토하거나 시스템 확인을 수행하거나 메소드를 수정할 수 없습니다.

E-Sign(전자 서명): 사용자가 다양한 수준의 데이터 수집 및 데이터 검토에서 메소드와 결과를 전자 서명할 수 있도록 허용하기 위해 지정합니다. 이 수준은 일반적으로 MicroLab 소프트웨어의 21 CFR Part 11 버전에서만 사용합니다.

참고

Admin(관리자) 및 Developer(개발자) 역할만 고급 기능에 액세스할 수 있습니다.

User Management(사용자 관리) 화면

Add New User(새로운 사용자 추가): 시스템에 사용자를 추가합니다. 사용자 이름, 암호 및 액세스 수준을 할당해야 합니다. 전체 이름도 필요합니다.

Delete User(사용자 삭제): MicroLab Mobile 시스템에서 사용자 프로필을 영구 삭제합니다.

Reset Password(암호 재설정): 관리자가 현재 선택한 사용자의 암호를 변경할 수 있습니다.

Reset Security(보안 재설정): 사용자 지정된 사용자를 모두 삭제하고 3개의 사전 정의된 사용자인 Service(서비스), Admin(관리자), User(사용자)를 재설정합니다. 이

MicroLab Mobile

옵션은 Disable Security(보안 비활성화) 옵션을 통해 비활성화된 보안도 재설정합니다.

Disable Security(보안 비활성화): 모든 보안 기능을 제거합니다. 보안을 비활성화하면 암호가 필요 없고 모든 사용자가 관리자 권한을 갖게 됩니다. Reset Security(보안 재설정) 버튼을 누른 다음 초기 관리자 계정 정보를 입력하여 보안을 복원할 수 있습니다.

공통 아이콘

소프트웨어 전체에 표시되는 아이콘:

Home(홈): 초기 Home(홈) 화면으로 복귀합니다.

Menu(메뉴): 메뉴 옵션을 표시합니다.

Next(다음): 데이터 수집 프로세스의 다음 단계로 이동합니다.

Home(홈) 화면

Home(홈) 화면은 로그인한 다음 MicroLab에 처음 표시되는 화면입니다. Home(홈) 화면에서는 메소드를 시작하고, 참조 시료를 측정하고, Method Selection(메소드 선택) 대화 상자, Previous Results(이전 결과) 대화 상자 또는 Advanced Features(고급 기능) 대화 상자를 열 수 있습니다. 샘플링 모듈 또는 인터페이스는 Home(홈) 화면에서 변경해야 합니다.

Status(상태)

화면의 오른쪽 상단 모서리에 작은 원이 있습니다. 이 원의 색상이 MicroLab 소프트웨어에 연결된 기기의 상태를 알려줍니다. 시스템이 출고 시 정의된 매개 변수 내에서 작동 중이면 원이 녹색으로 표시됩니다. 빨간색이나 노란색은 매개 변수가 사양을 벗어났음을 나타냅니다. 빨간색 또는 노란색 상태를 해결할 수 없으면 애질런트에 문의하십시오. 시스템 준비 상태를 판단하는 데 사용하는 모든 매개 변수는 Advanced Features(고급 기능) > Diagnostics(진단)에 있습니다. 한도를 벗어난 매개 변수는 진단 화면에서 빨간색으로 표시됩니다.

준비 표시등 바로 위에는 배터리 표시기가 있습니다. 배터리 표시기는 기기 배터리의 남은 충전량을 알려줍니다. 휴대용 PC에서 사용하는 배터리의 충전량은 MicroLab 소프트웨어에 표시되지 않습니다.

Start(시작)

Start(시작) 버튼을 누르면 현재 선택한 메소드를 사용하여 시료 측정을 시작합니다. 현재 선택한 메소드가 Home(홈) 화면 왼쪽 상단 모서리에 표시됩니다.

Method(메소드)

Method(메소드) 버튼을 누르면 Method Selection(메소드 선택) 대화 상자가 열립니다. 관리자 권한이 없는 사용자는 관리자가 공개로 지정한 메소드만 선택할 수 있습니다. 아래의 메소드 선택 지침을 확인하십시오.

Reference Method(참조 메소드)

Reference Method(참조 메소드) 버튼을 통해 구성 요소 메소드에 대한 참조 시료를 수집할 수 있습니다. 일부 구성 요소 메소드는 백분율 증가 또는 감소로 농도를 나타냅니다. 이러한 계산을 위해, 사양 시료에 대한 참조가 시작 값 계산에 필요합니다. 또한 Reference Method(참조 메소드)는 나중에 눈으로 비교할 수 있도록 사양에 맞는 (새로운) 물질의 스펙트럼을 저장합니다.

Log Off(로그아웃)

Log Off(로그아웃) 버튼을 누르면 현재 사용자가 종료되고 MicroLab Mobile 소프트웨어가 로그인 화면으로 복귀합니다. 해당 화면에서 Exit(종료) 버튼을 누르면 소프트웨어를 닫을 수 있습니다.

Lock(잠금)

이 기능은 21 CFR Part 11 환경에서만 사용할 수 있으며 사용자가 자리에 없을 때 액세스 관리를 위해 소프트웨어를 잠그는 데 사용됩니다. 자세한 내용은 57페이지의 MicroLab 21 CFR Part 11 섹션을 참조하십시오.

Menu(메뉴)

메뉴에 포함된 항목:

- Previous Results(이전 결과)
- Advanced Features(고급 기능)

Previous Results(이전 결과)

이전에 수집한 데이터를 볼 수 있습니다. Service(서비스), Admin(관리자) 및 Developer(개발자) 역할만 이전 결과에 액세스할 수 있습니다.

21 CFR Part 11

Results 파일을 연 상태에서 21 CFR Part 11 버튼을 클릭하여 모델을 만들거나 편집하면서 수행한 작업 목록이 포함된 감사 추적을 표시합니다.

이 기능에 대한 자세한 내용은 57페이지의 MicroLab 21 CFR Part 11 섹션을 참조하십시오.

Advanced Features(고급 기능)

Advanced Features(고급 기능) 화면에서는 Diagnostics(진단), System Check(시스템 점검), User Management(사용자 관리), Library Management for Admin, Service and Developer(관리자, 서비스 및 개발자 역할의 라이브러리 관리)에 액세스할 수 있습니다.

System Check(시스템 확인)에는 Performance (Signal to Noise)(성능(신호 대 잡음 비)), Stability Test(안정성 테스트), Laser Frequency Calibration Check(레이저 주파수 보정 확인), Spectral Resolution Check(스펙트럼 분해능 확인) 등의 기기 테스트가 포함됩니다. Diagnostics(진단) 및 System Check(시스템 확인)에 대한 자세한 내용은 해당 기기 작동 설명서를 참조하십시오.

Sampling Interface(샘플링 인터페이스)

Advanced Features(고급 기능) 화면에서는 사용자가 4100 ExoScan FTIR 시스템의 Sampling Interface(샘플링 인터페이스) 선택 항목에 액세스할 수 있습니다. 이 기능은 샘플링 인터페이스에 직접 연결된 메소드에 중요하며 샘플링 장치에 성능 사양을 연결하는 데에도 중요합니다. 두 항목이 올바르게 작동하려면 적절한 샘플링 인터페이스를 선택해야 합니다.

Method(메소드) 화면

메소드는 MicroLab 소프트웨어 내에서의 기기 수집 매개 변수와 데이터 분석을 정의합니다. 데이터만 수집하거나, 데이터를 수집하고 수집된 데이터를 사전 정의된 라이브러리와 비교하거나, 데이터를 수집하고 해당 데이터에 대해 정량적 분석이나 피크 분석을 수행하도록 메소드를 정의할 수 있습니다. 사전 정의된 세 가지 메소드 유형은 Agilent 4500t/5500t 및 Cary 630 FTIR 분광계에 대한(1) 데이터 수집, (2) 정성적(라이브러리) 검색 및 (3) 구성 요소(정량적 또는 피크 분석) 메소드입니다. 사전 정의된 메소드 사양에 대해 질문이 있거나 추가 정보가 필요하면 애질런트에 문의하십시오.

MicroLab Mobile에서는 사전 정의된 메소드만 선택할 수 있습니다. 메소드 편집은 MicroLab PC 또는 MicroLab Lite 소프트웨어를 실행하는 별도의 컴퓨터에서

MicroLab Mobile

수행해야 합니다. PC 및 Lite 버전 소프트웨어에서 개발한 메소드를 Method(메소드) 대화 상자에서 볼 수 있으려면 해당 메소드를 휴대용 또는 내장형 컨트롤러의 @\Program Files\ MicroLab Mobile\Methods 디렉터리로 이동해야 합니다.

21 CFR Part 11 환경에서는 동기화 중에 메소드가 이동합니다.

메소드 목록

MicroLab PC 애플리케이션 소프트웨어용으로 생성된 메소드 목록을 표시합니다. 메소드 목록의 위/아래로 이동하려면 스타일러스를 목록에 대고 화면을 따라 드래그하면 됩니다.

참고

시스템 관리자는 메소드의 액세스 권한을 제한합니다. 시스템 관리자는 화면 왼쪽 가장자리에 있는 확인란을 선택해야 합니다. 그러면 모든 기술자 수준의 사용자가 메소드를 사용할 수 있게 됩니다. Technician(기술자) 역할을 가진 사용자의 경우 이 화면에는 이전에 시스템 관리자가 활성화한 메소드만 표시됩니다.

Activate(활성화)

Activate(활성화) 버튼을 누르면 강조 표시된 메소드가 선택되고 화면이 닫힙니다. 소프트웨어가 Home(홈) 화면으로 복귀합니다. 현재 메소드를 활성화되어 있는지 확인하십시오. 잘못된 메소드가 표시되면 메소드 화면으로 돌아가서 다른 메소드를 선택합니다. Select Methods(메소드 선택) 버튼을 누르고 원하는 메소드를 선택한 후 Activate(활성화)를 누르면 됩니다.

편집

MicroLab Mobile 소프트웨어에서는 메소드 편집을 할 수 없습니다. 메소드를 편집하려면 별도의 컴퓨터에 설치된 MicroLab Lite 소프트웨어를 사용해야 합니다. 메소드가 설정되면 휴대용 또는 내장형 PC로 전송하여 MicroLab Mobile에서 사용할 수 있습니다.

참고

PDA 가 장착된 기기의 경우 메소드 및 데이터를 쉽게 이전할 수 있도록 MicroLab Lite 소프트웨어를 Windows Mobile Device Center 가 있는 컴퓨터에 설치해야 합니다. Windows Mobile Device Center 는 MicroLab 소프트웨어 설치 디스크를 사용해 설치할 수 있습니다.

3

MicroLab PC

Home(홈) 화면	19
Method(메소드)	21
Advanced Features(고급 기능)	33
GRAMS PLS/IQ에서 MicroLab PC로 다변량 메소드 전송	36
MicroLab Expert에서 MicroLab PC로 MicroLab 정량 모델 이전	38
사전 시료 조정 확인 사용	39
편집한 메소드를 MicroLab Mobile로 전송	41
System Check(시스템 확인)	43

Home(홈) 화면

Home(홈) 화면은 로그인한 다음 MicroLab PC에 처음 표시되는 화면입니다. 모든 절차는 Home(홈) 화면에서 시작되고 종료됩니다.

Home(홈) 화면에서 다음 옵션을 선택할 수 있습니다.

- Start(시작)
- Methods(메소드)
- Reference Templates(참조 템플릿)
- Logoff(로그아웃)
- Previous Results(이전 결과)
- Advanced Features(고급 기능)

Status(상태)

화면 왼쪽 상단의 Status(상태) 버튼이 녹색이고 READY(준비)가 표시되어야 합니다. 노란색이거나 빨간색인 경우 Advanced Features(고급 기능) 옵션 밑에 있는 Diagnostics(진단) 버튼을 클릭하여 문제를 파악합니다. 빨간색 또는 노란색 상태를 해결할 수 없으면 애질런트에 문의하십시오.

참고

특정 인터페이스/기기 조합의 경우 데이터 수집 중에 상태가 노란색으로 표시될 것으로 예상됩니다(특히 외부 반사 인터페이스의 경우).

Start(시작)

Start(시작) 버튼을 누르면 활성화된 메소드를 사용하여 시료 측정을 시작합니다. 활성화된 메소드가 Home(홈) 화면 오른쪽 상단 모서리에 표시됩니다.

Method(메소드)

Method(메소드) 버튼을 누르면 Method Selection(메소드 선택) 대화 상자가 열립니다. 관리자 권한이 없는 사용자는 관리자가 Public(공개)으로 지정한 메소드만 활성화할 수 있습니다.

메소드에 대한 자세한 내용은 [21페이지](#)를 참조하십시오.

Reference Method(참조 메소드)

Reference Template(참조 템플릿) 버튼을 사용하면 새 참조 메소드 템플릿을 만들고 기존 참조 메소드 템플릿을 편집하고, 선택한 참조 메소드 템플릿을 활성화할 수 있습니다.

Logoff(로그아웃) 및 Exit(종료)

다른 사용자는 로그아웃 화면을 통해 시스템에 로그인하고 로그아웃할 수 있습니다. Exit(종료) 버튼을 누르면 MicroLab PC 소프트웨어가 닫힙니다.

Lock(잠금)

이 기능은 21 CFR Part 11 환경에서만 사용할 수 있으며 사용자가 자리에 없을 때 액세스 관리를 위해 소프트웨어를 잠그는 데 사용됩니다. 자세한 내용은 57페이지의 MicroLab 21 CFR Part 11 섹션을 참조하십시오.

Previous Results(이전 결과)

분석을 수행하고 나면 Home(홈) 화면을 통해 이전 결과에 액세스할 수 있습니다. Previous Results(이전 결과)를 클릭하면 이전에 분석했던 시료를 나열하는 화면이 표시됩니다. 시료에는 선택한 이름 지정 용례를 기반으로 이름이 지정됩니다.

Advanced Features(고급 기능)

Advanced Features(고급 기능) 화면에서 다음 옵션을 선택할 수 있습니다.

- System Check(시스템 확인)
- Diagnostics(진단)
- MAC Addresses(MAC 주소)
- Library Management(라이브러리 관리)

MicroLab PC

- User Management(사용자 관리)
- Change Password(비밀번호 변경).

Advanced Features(고급 기능)에 대한 자세한 내용은 19페이지를 참조하십시오.

Method(메소드)

메인 페이지

메소드 목록: MicroLab PC 애플리케이션 소프트웨어용으로 생성된 메소드 목록을 표시합니다. 여기에서 제시되는 모든 메소드는 MicroLab Lite에도 표시됩니다.

Delete(삭제): 현재 선택한 메소드를 삭제합니다. Admin(관리자) 권한이 있는 사용자만 액세스할 수 있습니다. 21 CFR Part 11 환경에서는 이 기능을 사용할 수 없습니다.

Import(가져오기): 이 기능은 21 CFR Part 11 환경에서만 사용할 수 있으며 CFR 및 비-CFR 메소드를 가져옵니다. 모든 서명이 제거되는 경우에도 CFR 메소드는 기존 감사 추적을 유지합니다. 가져온 메소드는 CFR 환경에서 사용할 수 있습니다. 가져온 비-CFR 메소드는 읽기 전용입니다.

New(새로 만들기): 새로운 메소드를 만듭니다. Admin(관리자) 권한이 있는 사용자만 액세스할 수 있습니다.

Print(인쇄): 이 시스템 기능을 통해 사용자는 선택한 메소드의 중요한 상세 내역 및 메소드 상세 내역의 사본을 인쇄할 수 있습니다.

Edit(편집): 현재 선택한 메소드를 편집을 위해 엽니다. Admin(관리자) 권한이 있는 사용자만 액세스할 수 있습니다.

Activate(활성화): 현재 강조 표시된 메소드를 사용할 메소드로 선택합니다. 특정 메소드를 사용하여 데이터를 수집하려면 먼저 활성화해야 합니다.

참고

관리자가 아닌 사용자는 Public(공개) 체크 상자 옆에서 선택된 메소드만 보거나 활성화할 수 있습니다.

새 메소드 생성/기존 메소드 편집

Info(정보) 페이지

Info(정보) 페이지를 통해 선택한 메소드와 관련된 기본 정보를 설정할 수 있습니다. 이 페이지는 기본적으로 기본 메소드로 설정됩니다.

MicroLab PC

Method Name(메소드 이름): 이 필드에서는 메소드 이름을 지정합니다. 메소드 이름은 메소드 목록에 표시됩니다. 메소드 이름은 Info(정보) 페이지에서 편집할 수 없습니다. 메소드 이름은 새 메소드의 최초 **Save(저장)** 또는 이전에 편집된 기존 메소드로 **Save As(다른 이름으로 저장)**를 선택할 때 정의됩니다.

Developer(개발자): 이 필드에서는 메소드를 개발한 사용자를 지정합니다.

Comment(주석): 이 필드에서는 사용자가 메소드에 관한 특별 정보를 입력할 수 있습니다.

참고

MicroLab 소프트웨어와 함께 제공되는 기본 메소드는 자리 표시자용에 한합니다. 애질런트는 이 메소드의 사용을 권장하지 않습니다.

Type(유형) 페이지

Type(유형) 페이지는 모든 유형의 메소드에 대해 공통적이며 사전 데이터 수집 검사 매개 변수를 지정하는 데 사용됩니다.

Method Type(메소드 유형): MicroLab PC 소프트웨어에서는 3가지 메소드 유형을 사용할 수 있습니다.

- **Component(구성 요소):** 정량적 예측 메소드 또는 스펙트럼 분석이 있습니다. 적외선 스펙트럼을 수집한 다음 해당 데이터나 피크 높이/면적 유형 분석으로부터 사전 정의된 정량적 예측을 시행합니다. 단일 메소드에서 각자 고유의 정량적 보정으로, 여러 구성 요소를 정의할 수 있습니다. 또한 피크 높이/면적/무게 중심/노이즈 측정 기능도 있습니다
- **Data Collect Only(데이터 수집 전용):** 적외선 스펙트럼만 수집하고 표시합니다. 수집한 데이터에 대한 추가 분석을 수행하지 않습니다
- **Qualitative Search(정성적 검색):** 적외선 스펙트럼을 수집하고 사전 정의된 스펙트럼 라이브러리 또는 여러 라이브러리에서 검색합니다. 이 메소드 결과는 선택한 검색 알고리즘을 기반으로 스펙트럼 라이브러리에 대한 상위 일치 결과가 됩니다

Check for Clean Crystal Prior to Collecting Background(백그라운드 수집 이전에 크리스탈 청결 상태 확인): 이 옵션에서는 백그라운드 수집 이전에 시스템의 ATR 크리스탈 또는 시료 셀의 청결 상태 검사를 활성화하거나 비활성화합니다. 이 옵션은 ATR 인터페이스에만 권장됩니다.

- **Clean Scans(클린 스캔):** 수행하는 클린 스캔의 수를 설정합니다
- **Threshold(임계값):** 클린 스캔의 흡광도 상한 임계값을 설정합니다

참고

클린 스캔 임계값은 실험 요구 사항에 따라 시간에 따른 조정이 필요할 수 있습니다.

Background(백그라운드): 백그라운드 수집에는 2가지 옵션이 있습니다.

- **Collect new Background on every Sample(시료마다 새로운 백그라운드 수집):** 이 옵션에는 모든 시료에 대해 새로운 백그라운드 스펙트럼 수집이 필요합니다. 이 옵션은 수증기, 이산화탄소 및 기타 대기 변동에 대해 가장 정확한 결과를 제공하므로 최상의 데이터 품질을 위한 권장 옵션입니다
- **Background Valid time limit(백그라운드 유효 시간 제한):** 이 옵션을 선택하면 시간 간격을 두고 백그라운드를 수집하고 시료 간 백그라운드 스펙트럼을 측정하지 않고 시료를 순차적으로 수집할 수 있습니다. 시간 제한은 분, 시간 및 일 단위로 설정할 수 있습니다

참고

유효 시간 제한은 응용 요건과 실험 조건의 예상 변화에 기반하여 설정할 수 있습니다. 백그라운드 스펙트럼을 수시로 시기적절하게 수집하는 것이 데이터 품질을 위해 중요합니다.

Y-Axis Units(Y축 단위): 이 옵션 기능은 Y축 눈금을 지정합니다.

Absorbance(흡광도), Transmittance(투과율) 또는 Reflectance(반사율)를 지정합니다.

Clamp Max. Y-value(클램프 최대 Y값): 이 옵션은 지정된 값에 대한 흡광도 값을 클램프 최대 y값으로 표시합니다. 분석에 사용되지 않는 대역이 범위를 벗어날 때 유용한 옵션입니다. 이 기능이 선택된 경우, 범위를 벗어난 대역은 '평탄'해 보이고 표시된 눈금에 부정적 영향을 미치지 않습니다. 이 옵션은 Absorbance(흡광도)가 Y-Axis Units(Y축 단위)로 선택된 경우에만 사용할 수 있습니다.

Minimum Y Threshold(최소 Y 임계값): Y축의 최소 임계값을 설정합니다. 이 옵션은 Absorbance(흡광도)가 Y-Axis Units(Y축 단위)로 선택된 경우에만 사용할 수 있으며 불충분한 신호를 알리는 데 사용됩니다. 이 옵션을 활성화하면 검출된 신호가 데이터 수집 시작 시 지정된 값보다 낮은 경우 스캔을 계속하기 전에 시료를 재배치하라는 알림이 나타납니다. 이 기능은 처음의 스펙트럼 스캔에서만 수행됩니다.

참고

Y 축 클램프 작업은 가장 높은 값으로 기록된 흡광도를 제한하여 스케일 피크에서 모델링을 개선하기 위해 일반적으로 전송 인터페이스에서 사용합니다. 일반적으로 2의 값을 사용합니다. 기본 최댓값은 0.00001T(0.001%T)에 해당하는 5Abs 입니다.

Show Pre-Sample Alignment Check(사전 시료 조정 확인 표시): 이 옵션은 Pre-Sample Alignment Check(사전 시료 조정 확인)를 활성화하고 시작합니다. Pre-Sample Alignment Check(사전 시료 조정 확인)에 대한 자세한 내용은 39페이지를 참조하십시오.

Show Sampling Continuity Check(샘플링 연속성 확인 표시): 이 옵션은 Sampling Continuity Check(샘플링 연속성 확인)를 활성화 또는 비활성화합니다. 이 확인은 측정 중에 시료가 샘플링 기술에 계속 집중되도록 휴대용 장치에서 활성화할 수 있습니다.

참고

Show Pre-Sample Alignment(사전 시료 조정 표시) 및 **Show Sampling Continuity(샘플링 연속성 표시)** 검사는 외부 반사 인터페이스/모듈만을 위한 기능입니다. 이 검사는 ATR 인터페이스에 해당하지 않습니다.

Enable Classic View(클래식 보기 사용): 이 옵션은 그래픽 창의 보기를 켜거나 끕니다. 메소드가 Data Collect Only(데이터 수집 전용)로 설정되어 있을 때만 사용할 수 있습니다.

Data Collect Only(데이터 수집 전용) 그래픽 창 옵션에 대한 자세한 내용은 73페이지를 참조하십시오.

기기 페이지

기기 페이지는 모든 메소드 유형에 공통으로 해당되며 수집한 데이터를 처리하는 데 사용되는 기기 설정을 지정하는 장소입니다.

Spectral Range(스펙트럼 범위)(cm^{-1}): 스펙트럼 범위의 상한과 하한을 파수 단위로 지정합니다. **Full(전체)**을 선택하면 데이터 수집을 위한 기본 검출기 범위가 활성화 됩니다. 범위는 기기의 시리즈에 따라 달라질 수 있으며 증가하거나 감소할 수 있습니다.

Background Scan(백그라운드 스캔): 백그라운드 측정에서 수집할 스캔 수를 지정합니다. 스캔 수가 늘어날수록 신호 대 잡음 비가 높아지며 측정 시간도 비례적으로 늘어납니다.

Sample Scans(시료 스캔): 시료 측정에서 수집할 스캔 수를 지정합니다. 백그라운드 측정과 마찬가지로 스캔 수가 늘어날수록 신호 대 잡음 비와 측정 시간이 모두 늘어납니다. 시료 수는 백그라운드 스캔 수보다 작거나 같아야 합니다. 일반적으로 백그라운드와 시료는 같은 수의 스캔으로 수집됩니다.

Resolution(분해능) (cm^{-1}): 스펙트럼 분해능을 지정합니다. 응축상 시료의 경우 4cm^{-1} 해상도로 대부분의 측정이 가능합니다.

참고

적절한 분해능 선택은 응용 요건에 따라 달라집니다. 분해능 값이 높을수록(파수 값이 낮을수록, 예: 2cm^{-1}) 스캔 속도가 약간 느려지고 데이터 밀도와 포인트 수가 증가합니다. 제로 필 없이 4cm^{-1} 에서 수집된 일반적인 스펙트럼은 약 32Kb의 파일입니다.

Zero Fill Factor(제로 필 팩터): 인터페로그램을 에너지 스펙트럼으로 푸리에 변환하는 데 사용되는 제로 필팩터를 지정합니다.

MicroLab PC

Apodization(아포다이제이션): 인터페로그램을 에너지 스펙트럼으로 푸리에 변환하는 데 사용되는 다음과 같은 아포다이제이션 함수를 지정합니다:
None(없음)(Boxcar), Triangular(삼각) 또는 Happ-Genzel(합-겐젤).

Phase Correct(위상 보정): 위상 차이 보정을 위해 표준 Mertz 메소드가 적용됩니다.

Sampling Technology(샘플링 기술): 다음과 같은 샘플링 기술을 선택합니다:
Transmission Cell(투과 셀), Reflectance(반사율), ATR, Gas Cell(가스 셀) 또는 기타.
이는 옵션 필드입니다. 메소드에서 선택한 샘플링 기술이 실제 인터페이스와 일치하지 않으면 메소드가 활성화되지 않을 수 있습니다.

Set Method Gain(메소드 게인 설정): 이 옵션은 일반 분석에서 메소드의 게인 값을 저장하는 데 사용됩니다. 이는 일반적으로 적절한 백그라운드 캡이 사용되는 곳에서 특정 인터페이스와 함께 특정 기기 설정에 사용됩니다.

Normalize Quantitative results to Pathlengths(정량 결과를 경로 길이로 정규화)(μm): 이 옵션은 Transmission Cell(투과 셀)과 Gas Cell(가스 셀) Sampling Technology(샘플링 기술)에만 적용됩니다

Sampling Subtype(샘플링 하위 유형): 선택한 Sampling Technology(샘플링 기술)에 따라 샘플링 하위 유형을 선택합니다.

- **Transmission Cell(투과 셀):** Tumbler, DialPath 또는 630 Transmission Module
- **Reflectance(반사율):** Diffuse(확산), Specular(정반사) 또는 Grazing Angle(입사 여각)
- **ATR:** 1-Bounce, 3-Bounce, 5-Bounce, 9-Bounce, ZnSe 5-Bounce, Ge 1-Bounce, Diamond 1-Bounce 또는 ZnSe 1-Bounce

Detector Type(검출기 유형): 기기의 검출기 유형을 선택합니다.

Store GPS Data(GPS 데이터 저장): 이 기능은 Agilent 4300 Handheld FTIR에만 적용됩니다. 이 옵션을 사용하면 스펙트럼을 수집할 때 GPS(Global Positioning System) 데이터를 저장할 수 있습니다. GPS 데이터는 스펙트럼이 기록된 장소의 경도와 위도를 표시합니다.

Require GPS Data(GPS 데이터 필요): 이 기능은 Agilent 4300 Handheld FTIR에만 적용됩니다. 이 옵션을 사용하면 스펙트럼을 수집할 때마다 GPS 데이터를 필수 정보로 지정하는 것을 활성화 또는 비활성화할 수 있습니다. 기기가 GPS 데이터 제공을 지원하지 않는 경우 이 옵션을 비활성화해야 합니다. 그렇지 않으면 데이터 수집이 거부됩니다. 실내에서 또는 위성 범위가 부족한 지역에서는 이 옵션을 사용하지 마십시오.

Libraries(라이브러리) 페이지

Libraries(라이브러리) 페이지는 Qualitative Search(정성적 검색) 메소드 유형을 선택한 경우에만 사용할 수 있습니다. 표시된 목록의 첫 번째 열은 라이브러리 이름을 표시하고 두 번째 열은 라이브러리에 ATR 스펙트럼이 포함되어 있는지 여부를 나타냅니다. 이 페이지에서 라이브러리를 추가하거나 제거할 수 있습니다.

라이브러리에 대한 자세한 내용은 33페이지의 Library Management(라이브러리 관리) 섹션을 참조하십시오.

검색 페이지

검색 페이지는 Qualitative Search(정성적 검색) 메소드 유형을 선택한 경우에만 사용할 수 있습니다. 이 페이지에서 선택한 메소드를 통해 선택한 라이브러리를 검색하는 방법을 구성할 수 있습니다.

Search Algorithm(검색 알고리즘): 검색 알고리즘 드롭다운 메뉴는 검색 기능을 조작할 수 있는 다음과 같은 옵션을 제공합니다.

- Euclidean(유클리드)
- Absolute Value(절대값)
- Derivative Absolute Value(도함수 절대값)
- Least Squares(최소제곱법)
- Derivative Least Squares(도함수 최소제곱법)
- Correlation(상관)
- Derivative Correlation(도함수 상관)
- Similarity(유사성)
- Derivative Similarity(도함수 유사성)
- Extended Correlation(확장 상관)

파생 알고리즘 갭: 이 필드는 도함수 유형 검색 알고리즘을 선택한 경우에만 사용할 수 있습니다. 이 필드는 도함수가 적용되는 공백의 크기(연산에 사용되는 점 사이의 공백)를 선택하는 데 사용됩니다. '1'의 값은 표준 Norris Gap(노리스 갭) 도함수를 적용하는 것과 같습니다. 값은 1보다 클 수 있으며 최적의 효과를 위해 인터페이스와 스펙트럼 특성에 따라 달라집니다.

Minimum high quality(최소 고품질): 이 필드는 표시할 라이브러리 검색 결과 수의 품질에 대한 최소 임계값을 0에서 100% 사이로 지정하는 데 사용됩니다. 지정된 값보다 낮은 품질 값 결과(지수 x 100)는 검색 결과에서 제외됩니다.

Maximum Hits Displayed(표시된 최대 검색 결과 수): 이 필드는 최소 고품질 라이브러리 검색 결과 수의 목록 크기를 지정된 수량으로 제한하는 데 사용됩니다. 예를 들어, 12를 선택하면 최소 검색 결과 품질을 초과한 상위 12개 등급의 지표 결과가 표시됩니다.

Quality Critical Threshold(품질 중요 임계값): 이 필드는 품질 검색 결과 내에서 색상 코딩 기능의 상한 임계값을 설정합니다. **Quality Marginal Threshold(품질 한계 임계값)** 옵션을 선택하지 않은 경우 품질 중요 임계값 미만의 모든 검색 결과가 빨간색으로 표시됩니다(값은 소수점을 포함한 0과 1 사이의 값이어야 함). 이 매개 변수는 지수 값에 연결됩니다. Quality Critical Threshold(품질 중요 임계값)가 설정되지 않은 경우 색상 코딩이 적용되지 않습니다.

Quality Marginal Threshold(품질 한계 임계값): 이 선택 필드는 한계 검색 결과에 대한 하한 임계값을 설정합니다. 품질 한계값과 품질 중요 임계값 사이에 있는 모든 결과는 노란색으로 표시됩니다(값은 소수점을 포함한 0과 1 사이의 값이어야 함).

참고

임계값 품질 지침 및 색상 등급은 선택한 알고리즘에 맞게 자동으로 조정됩니다.

Display Metadata(메타데이터 표시): 선택한 시료에 해당하는 메타데이터를 표시하려면 이 확인란을 선택합니다. 여기에는 시료 등급, 설명 및 위험 상태와 같은 정보가 포함됩니다. 21 CFR Part 11 환경에서는 이 기능을 사용할 수 없습니다.

Auto Residual Search(자동 잔류 검색): 이 확인란을 활성화하면 수집된 스펙트럼에 잔류 검색 기능이 자동으로 적용됩니다.

- “Top Hit(상위 검색 결과 수)”를 선택하면 자동 잔류 기능이 스펙트럼에서 처음의 상위 라이브러리 검색 결과 수를 뺀 후 선택한 라이브러리를 다시 검색하여 그에 따른 상위 잔류 검색 결과 수를 표시합니다

참고

“Top Hit(상위 검색 결과 수)”를 선택하면 그에 따른 상위 잔류 검색 결과 수만 표시됩니다(실제 상위 검색 결과 수는 표시되지 않음).

- “Defined Spectrum(정의된 스펙트럼)”을 선택하면 자동 잔류 기능이 수집한 스펙트럼에서 사용자가 정의한 스펙트럼을 뺀 후 선택한 라이브러리를 다시 검색하여 그에 따른 상위 정의된 잔류 검색 결과 수를 표시합니다

참고

정의된 스펙트럼 파일은 *.a2r 형식의 애질런트 결과 파일이어야 하며 결과 폴더에서 선택해야 합니다.

Exclude Search Regions(검색 영역 제외)(cm⁻¹): 이 선택 필드는 검색 제외 영역을 스펙트럼에 추가하는 데 사용됩니다. 이렇게 하면 불필요한 파수 영역(크리스탈 고유 흡수 영역 등)이 스펙트럼에서 제거되어 더 깨끗한 결과를 얻을 수 있습니다. 예를 들어 지문 영역만 집중적으로 검색하는 데 사용할 수도 있습니다.

Components(구성 요소) 페이지(구성 요소 메소드)

Components(구성 요소) 페이지는 해당 메소드에 대해 정의된 구성 요소를 나열합니다. 구성 요소는 시료의 구성 성분에 대한 정량적 보정입니다. 각 메소드에 대해 여러 구성 요소를 정의할 수 있습니다.

Add(추가): 이 버튼은 메소드에 새로운 사용자 구성 요소를 추가합니다. 이 버튼은 Add Component(구성 요소 추가) 대화 상자를 표시합니다(아래 참조).

Remove(제거): 선택한 구성 요소를 메소드에서 제거하는 버튼입니다.

Edit(편집): 이 버튼을 사용하면 선택한 구성 요소 보정에 사용할 파라미터를 편집할 수 있습니다. 이 버튼은 Edit Component(구성 요소 편집) 대화 상자를 표시합니다(아래 참조).

Add Component(구성 요소 추가) 대화 상자: Add Component(구성 요소 추가) 대화 상자를 사용하면 구성 요소를 추가 또는 편집할 수 있습니다. 이 대화 상자는 구성 요소 보정을 위한 설정을 제공하고 해당 구성 요소의 설정과 제한을 표시합니다. 구성 요소 제한으로 구성 요소 결과를 색상 코드로 표시할 수 있습니다.

Component Name(구성 요소 이름): 구성 요소 목록과 결과에 모두 표시할 구성 요소의 이름을 지정합니다. 명확성을 위해 이름에 결과의 단위가 포함되어야 합니다.

Calculation Type(계산 유형): 이 필드에서는 사용할 계산 유형을 지정합니다. 계산 유형에는 일변량(피크 높이, 단일 기준선 피크 높이, 이중 기준선 피크 높이, 피크 넓이, 단일 기준선 피크 넓이, 이중 기준선 피크 넓이), 노이즈 계산(RMS 노이즈), 피크 위치(피크 위치(무게 중심)) 및 다변량(Quant 모델)이 있습니다. Quant 모델 계산 유형은 MicroLab Quant 일변량 또는 다변량 보정에도 사용됩니다.

참고

피크 높이, 피크 넓이 또는 피크 비율을 이용한 일변량 보정을 위한 선형 근사는 타사 소프트웨어(Microsoft Excel 등)에서 수행해야 합니다. MicroLab Quant 소프트웨어를 사용하면 타사 소프트웨어를 사용하지 않고 완전한 일변량 보정을 만들 수 있습니다.

참고

다변량 보정은 Thermo Galactic PLS/IQ Plus 소프트웨어에서 수행되며 MicroLab PC 소프트웨어에서 읽을 수 있는 텍스트 형식 또는 Eigenvector Solo Plus Model Exporter 의 XML 형식으로 내보내거나 MicroLab Expert(Quant 모듈 포함)에서 수행할 수 있습니다. 보정 내보내기에 대한 자세한 내용은 아래 지침을 참조하십시오.

Peak Start(피크 시작), Peak Stop(피크 중지):

- 이는 일변량과 피크 위치 계산에서 사용될 피크를 정의합니다

MicroLab PC

- 피크 높이 계산의 경우 이 영역 간에 가장 큰 값이 선택됩니다
- 피크 넓이의 경우 영역 계산 제한이 있습니다
- 무게 중심의 경우 이는 무게 중심이 계산되는 두 피크 사이의 제한입니다
- 다변량(Quant)의 경우 이는 표시 범위 제한이 됩니다

Baseline 1 Start, Baseline 1 Stop(기준선 1 시작, 기준선 1 중단): 이 지점은 기준선의 첫 번째 지점을 계산할 영역을 정의합니다. 단일 지점 기준선의 경우 기준선 1만 사용됩니다. 기준선이 이 범위 내의 최소 값으로 간주됩니다.

Baseline 2 Start, Baseline 2 Stop(기준선 2 시작, 기준선 2 중단): 이 지점은 기준선의 두 번째 지점을 계산할 영역을 정의합니다. 기준선이 이 범위 내의 최소 값으로 간주됩니다.

Constituent(성분): 이 기능은 'Quant Model(정량 모델)'이 Calculation Type(계산 유형)으로 선택된 경우에만 적용되며 Agilent MicroLab Expert Quant Model(*.a2q)에만 적용됩니다. 다변량 모델에 사용된 성분은 드롭다운 메뉴에 표시됩니다.

참고

Agilent MicroLab Expert Quant Models(*.a2q) 파일을 사용하려면 동일한 장치에 Quant 기능이 있는 MicroLab Expert 를 설치해야 합니다.

Scaling(비율 조정): 이 섹션은 데이터에 적용할 선형 보정을 정의합니다. 모든 피크 정의(피크 높이, 피크 넓이 등)와 함께 사용하거나 다변량(Quant) 메소드로 생성된 값을 수정하는 데 사용할 수 있습니다. 값을 적절한 척도로 변경하는 데 종종 사용됩니다.

- **Scale (x value)(척도(x 값)):** 척도는 선형 보정 방정식의 기울기입니다. 선형 근사 방정식 $y=mx+b$ 에서 척도는 'm'입니다
- **Offset(오프셋):** 오프셋은 선형 보정에 대한 Y-축 오프셋입니다. 선형 근사 방정식 $y=mx+b$ 에서 오프셋은 'b'입니다
- **Decimal Digits to Report(보고할 소수 자리):** 답변에 보고될 소수 자리 수를 정의합니다

Thresholds(임계값): 이 섹션은 MicroLab PC 소프트웨어가 표시된 결과와 보고서의 색상 코드 지정에 사용할 제한을 정의합니다. Marginal High(높음-한계)와 Critical High(높음-심각), 또는 Marginal Low(낮음-한계)와 Critical Low(낮음-심각) 임계값 사이의 값은 노란색으로 표시됩니다. Marginal High(높음-한계) 임계값보다 높은 값이나 Marginal Low(낮음-한계) 임계값보다 낮은 값은 빨간색으로 표시됩니다. 그 외 다른 값은 모두 녹색으로 표시됩니다.

Calc Value As(값 계산 방식): 값은 다음 옵션에서 계산할 수 있습니다.

- Actual Value(실제 값)

- Percent Low(백분율 낮음)
- Percent High(백분율 높음)

참고

Percent High(백분율 높음) 및 Percent Low(백분율 낮음) 옵션에서는 Critical High(높음-심각) 참조 값이 필요합니다. 참조 값은 사실상 100% 참조 값입니다. 계산된 값은 참조 값의 %로 보고됩니다.

Component Reporting(구성 요소 보고) 페이지

메소드 개발자는 구성 요소 보고를 통해 Results(결과) 화면과 보고서에서 언제 구성 요소를 표시할지 결정할 수 있습니다. Display(표시) 열에서 선택한 구성 요소만이 화면과 보고서에 표시됩니다.

Edit Component Reporting Condition(구성 요소 보고 조건 편집) 대화 상자

또한 메소드 개발자는 특정 조건에서만 구성 요소를 보고하도록 선택할 수 있습니다. 예를 들어 개발자는 구성 요소의 값이 보정된 범위 내에 들어올 때만 보고하도록 지정할 수 있습니다. 이렇게 하면 한 메소드에서 몇몇 범위(높음, 중간 및 낮음)에 대해 보정이 가능합니다. 범위를 지정하면 소프트웨어에서 범위 내 보정의 농도만 보고합니다. 다변량 메소드의 경우 모든 메소드 통계 측정(마하라노비스 거리, F-검정 등)을 사용하여 값의 보고 여부를 판단할 수 있습니다.

Report As(값 보고 방식): 이 섹션에서는 개발자가 구성 요소를 계산된 값으로 보고할지, 아니면 해당 값을 기반으로 한 텍스트 문자열로 보고할지 선택할 수 있습니다. 조건 설정에서 부울 논리와 함께 사용할 경우 숫자 결과 대신 'out of specification(사양을 벗어남)' 또는 'good(양호함)'과 같은 텍스트 기반 결과를 표시할 수 있습니다.

Component/Diagnostic(구성 요소/진단): 이 드롭다운 목록에는 표시 논리를 선택하는 데 사용할 수 있는 모든 진단 정보가 표시됩니다.

Test State(테스트 상태): 진단 상태에 대한 사양 지정을 할 수 있습니다. 아래 '값'과 함께 사용됩니다.

Value(값): 구성 요소를 표시할지 판단하기 위해 테스트 상태와 함께 사용할 진단 값입니다.

예시 1: 간단한 일변량 메소드의 경우 하나의 분석 물질에 대해 2개의 구성 요소를 지정할 수 있습니다. 구성 요소 하나는 낮은 범위에 대해 유효한 보정을 갖고 다른 하나는 높은 범위에 대해 유효 보정을 갖게 됩니다. 개발자가 적정 범위만 보고하는 것을 선호할 수도 있습니다. 이 예에서는 구성 요소를 '영역'이라고 하고 높은 범위는 1,000~5,000ppm에서 유효합니다. 이 예에서는 구성 요소/진단에 대해 영역을 선택합니다. 먼저 값 1000과 함께 ">="의 테스트 상태가 선택됩니다. 이 값이 추가되면 "And" 한정자가 선택됩니다. 그런 다음 값

MicroLab PC

5000과 함께 "<"의 테스트 상태가 선택됩니다. 이 예에서는 값이 1,000~5,000 사이인 경우 이제 영역 구성 요소만 보고됩니다.

예시 2: 다변량(PLS) 메소드의 경우 몇 가지 구성 요소가 지정되어 있을 수 있습니다. 이때 각 구성 요소에는 서로 다른 다변량 보정이 있을 수 있습니다. 알려지지 않은 시료와 가장 밀접하게 관련된 보정 세트가 있는 구성 요소만 원할 수 있습니다. 이 경우 개발자는 구성 요소/진단을 MDistance(마하라노비스 거리)로, 테스트 상태를 <=으로, 값을 3으로 선택합니다. 이렇게 하면 해당 시료가 통계적으로 보정 세트 그룹 내에 있음을 의미하는 3 미만의 마하라노비스 거리를 가진 값만 보고됩니다.

Custom Fields(사용자 지정 필드) 페이지

사용자 지정 필드는 선택한 메소드의 시작 부분에 나타나는 관리자 정의 필드입니다. 그런 다음 메소드의 사용자가 필드를 채웁니다. 필드는 날짜, 텍스트 또는 숫자일 수 있으며 관리자만 필드를 추가하거나 삭제할 수 있습니다. 이 필드는 Results(결과) 화면과 보고서에 표시됩니다. 특정 사용자 요건에 따라 많은 선택 필드를 메소드에 추가할 수 있습니다.

Recommend(권장) 페이지

시료 분석에 뒤이어 Results(결과) 화면에 권장 사항이 표시됩니다. 사용자는 고유한 메시지 기능을 사용하여 특정 요구 사항과 매개 변수에 맞게 결과를 사용자 지정할 수 있습니다.

Reports(보고서) 페이지

보고서 페이지는 모든 메소드 유형에 공통으로 적용되며 Available Report Template(사용 가능한 보고서 템플릿)을 현재 메소드에 할당하거나 현재 메소드에서 Selected Report Template(선택한 보고서 템플릿)를 제거하는 데 사용됩니다. 사용 가능한 경우 여러 보고서 템플릿을 동시에 추가하거나 제거할 수 있습니다.

Available Report Templates(사용 가능한 보고서 템플릿): 보고서 템플릿은 특정 메소드 유형에 맞게 제공됩니다.

- Data Collect Only(데이터 수집 전용)에서는 스펙트럼 보고서 템플릿을 사용할 수 있습니다
- Component(구성 요소) 메소드는 Spectrum(스펙트럼) 또는 Component Report(구성 요소 보고서) 템플릿을 사용할 수 있습니다
- Qualitative(정성적) 검색 메소드는 Oil Report(오일 보고서), Spectrum Overlaid(스펙트럼 오버레이), Spectrum Stacked(스펙트럼 누적), Zoomed

MicroLab PC

Spectrum Overlaid(확대/축소 스펙트럼 오버레이) 및 Zoomed Spectrum Stacked(확대/축소 스펙트럼 누적) 템플릿을 사용할 수 있습니다

사용자 정의 보고서 템플릿을 직접 생성할 수도 있습니다. 보고서 템플릿에 대한 자세한 내용은 79페이지 **섹션8**을 참조하십시오.

- **Results Folder(결과 폴더):** 이 옵션은 다음 폴더의 위치에 결과를 저장할 위치를 지정합니다.
- 버전 5.3으로 시작하는 모든 시스템에서 사용자 정의 가능한 모든 인터랙티브 콜 파일은 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab이나 C:\Users\Public\Public Documents\Agilent\MicroLab에 저장됩니다.

이 필드를 비워두면 Results(결과) 폴더에 파일이 바로 저장됩니다:

C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results.

21 CFR Part 11에서, 이 필드를 비워둘 경우 기본 결과 폴더는 VAIMDB_Public(000)\Public Results입니다.

Results 디렉터리 내에 파일을 저장하기 위한 다른 폴더를 만들 수 있습니다. 메소드를 MicroLab Mobile을 실행하는 시스템으로 전송하는 경우 폴더가 모바일 장치의 해당 폴더로 자동 업데이트됩니다. 자동 보고 기능을 위한 옵션도 있습니다. 이 확인란을 선택하면 어떤 메소드를 이용한 시료가 수집될 때 해당 메소드와 관련된 모든 보고서가 자동으로 생성됩니다.

현재 메소드에서 보고서 추가/제거

“Available Report Templates(사용 가능한 보고서 템플릿)” 열에 나열된 보고서는 메소드에 추가될 때까지 활성화되지 않습니다. 현재 메소드에 보고서 추가:

- 1 Available Report Templates(사용 가능한 보고서 템플릿) 열에서 원하는 보고서를 강조 표시합니다
- 2 **Add(추가)** ->를 클릭합니다

메소드가 완료되면 “Available Report Templates(사용 가능한 보고서 템플릿)” 열에 추가된 모든 보고서를 사용자가 선택할 수 있습니다. **Auto-Report All Selected Reports(선택한 모든 보고서 자동 보고)** 옵션을 선택하면 사용 가능한 보고서 템플릿 열에 나열된 모든 보고서가 자동으로 인쇄됩니다.

현재 메소드에서 보고서 제거:

- 1 “Selected Report Templates(선택한 보고서 템플릿)” 열에서 원하는 보고서를 강조 표시합니다
- 2 **<- Remove(제거)**를 클릭합니다

이제 제거된 보고서가 사용 가능한 보고서 템플릿 열에 다시 나타납니다.

Results Folder(결과 폴더): 선택한 보고서를 저장할 파일 경로를 지정합니다.

Results Naming(결과 이름 지정): MicroLab에는 각 분석에 고유한 식별 번호를 생성하는 자동 저장 기능이 있습니다. 인증된 모든 사용자가 모든 파일을 이용할 수 있으며, Previous Results(이전 결과) 버튼 아래에서 확인할 수 있습니다. 관리자에게는 필요에 가장 잘 맞는 형식을 선택하는 옵션이 있습니다.

- **Sample ID + increment (Sample ID required)[시료 ID + 증가(시료 ID 필요)]:** 결과 이름은 시료 ID 및 4자리 증가 값(예: Sample_0000)과 일치합니다
- **Date Time(날짜 시간):** 결과 이름이 분석의 시간과 날짜 스탬프에 상응합니다
- **Sample ID + Date Time(시료 ID + 날짜 시간):** 결과 이름에 시료 ID, 분석 날짜 및 시간이 포함됩니다

Auto-Export(자동 내보내기): MicroLab에는 사용자가 데이터 수집 시 자동으로 결과를 내보낼 수 있는 자동 내보내기 기능이 있습니다. MicroLab은 다양한 타사 소프트웨어 프로그램에서 가져올 수 있는 *.csv, *.spc 및 *.asp 파일 형식을 생성할 수 있습니다. *.spc는 GRAMS 또는 Eigenvector에서 데이터를 사용하는 데 필요한 범용 스펙트럼 데이터 파일입니다. *.asp 파일 형식은 헤더가 X로 정의된 단순한 Y 데이터의 ASCII 출력입니다.

참고

시료 ID 는 분석 중 사용자가 입력합니다. 사용자가 시료 ID 를 입력하지 않을 경우 날짜 및 시간 스탬프가 자동으로 생성됩니다. 여러 시료를 실행할 때는 사용자가 항상 시료 ID 를 업데이트해야 합니다. MicroLab PC 에는 이전에 입력한 시료 ID 가 저장됩니다.

Advanced Features(고급 기능)

System Check(시스템 확인)

System Check(시스템 확인)에는 다음과 같은 기기 테스트가 포함됩니다.

- Performance (Signal to Noise)(성능(신호 대 잡음 비))
- Stability Test(안정성 테스트)
- Laser Frequency Calibration Check(레이저 주파수 보정 확인)
- Spectral Resolution Test(스펙트럼 분해능 테스트)

System Check(시스템 확인)에 대한 자세한 내용은 해당 기기 작동 설명서를 참조하십시오

Diagnostics(진단)

진단 페이지에는 다음과 같이 기기에 대한 중요한 진단 및 일반 정보가 표시됩니다.

- 기기 상태
 - 에너지(카운트)
 - 배터리(AC 전원 또는 배터리 %)
 - 소스(전류/전압)
 - 레이저(카운트)
- 구성 요소 온도(°C)
- 버전 정보

이 페이지에서는 또한 다음을 수행할 수 있습니다.

- 세척 및 백그라운드 유효성 재설정
- 날짜 시간 형식 구성

MAC Addresses(MAC 주소)

MAC Addresses(MAC 주소) 페이지에서는 시스템의 현재 MAC 주소를 표시하고 내보낼 주소를 클립보드로 복사할 수 있습니다.

Library Management(라이브러리 관리)

라이브러리 관리 페이지에는 저장된 라이브러리 이름 및 내용과 같은 라이브러리 정보가 표시됩니다. 또한 이 페이지에서는 새 라이브러리를 만들고, 기존 라이브러리를 삭제하고, 현재 라이브러리 항목을 편집할 수 있습니다.

참고

라이브러리 항목은 승인된 라이브러리에서 편집하거나 삭제할 수 없습니다.

새 라이브러리 생성

- 1 라이브러리 목록 창의 오른쪽에 있는 **New Library(새 라이브러리)** 버튼을 선택합니다

“Create Library(라이브러리 생성)” 창이 나타납니다.

- 2 **Library Name(라이브러리 이름)**을 입력합니다
- 3 필요한 경우 라이브러리에 첨부할 **Comment(주석)(옵션)**를 입력합니다
- 4 다음과 같은 **Library Spectra(라이브러리 스펙트럼)** 유형을 선택합니다
 - 베이스라인 보정
 - ATR 스펙트럼

- 5 다음과 같은 Y Type(Y 유형)을 선택합니다
 - 흡광도
 - 반사율
 - 투과율
- 6 Lib Bytes(Lib 바이트)를 선택합니다. 이는 각 스펙트럼을 저장하는 데 사용되는 바이트 수를 나타냅니다. 일반적으로 사용자가 생성한 라이브러리에는 2의 값이 적합합니다
- 7 Auto detect from first library entry(첫 번째 라이브러리 항목에서 자동 검색) 여부를 선택합니다. 이 기능을 활성화하면 라이브러리의 첫 번째 스펙트럼을 사용하여 첫 번째 $X(\text{cm}^{-1})$, 마지막 $X(\text{cm}^{-1})$ 및 포인트 수를 결정합니다. 이 기능을 비활성화하면 사용자는 라이브러리 일치 범위와 포인트 수를 수동으로 선택할 수 있습니다
- 8 Create(생성)를 클릭합니다

참고

애질런트는 정반사 데이터, 입사 여각 데이터 또는 확산 반사 데이터에 ATR 보정을 적용하는 것을 권장하지 않습니다.

현재 라이브러리 편집

기존 라이브러리에 항목 추가:

- 1 고급 기능 및 라이브러리 관리에서 기존 라이브러리 파일(.lib)을 선택합니다
- 2 "Add to Library(라이브러리에 추가)"를 클릭합니다
- 3 적절한 *.a2r 라이브러리 항목 파일을 선택합니다
- 4 "Open(열기)"을 클릭합니다

"Importing Results Entry(결과 항목 가져오기)" 대화상자가 나타납니다. 이 상자를 사용하여 이름과 선택적 CAS#를 항목에 적용할 수 있습니다.

- 5 "Ok(확인)"를 클릭합니다

참고

한 라이브러리에서 시료에 대한 사용자 정의 정보를 편집하면 동일한 라이브러리와 다른 모든 라이브러리에 있는 해당 CAS#의 모든 항목에 대한 정보가 자동으로 편집됩니다.

기존 라이브러리에서 항목 제거:

- 1 목록에서 기존 라이브러리 파일(.lib)을 선택합니다
- 2 "Delete From Lib(Lib에서 삭제)"를 클릭합니다
- 3 "OK(확인)"를 클릭합니다

참고

삭제된 라이브러리 항목은 라이브러리에서 제거되지 않습니다. 이러한 항목은 향후 라이브러리 검색에서 누락된 것으로 식별하기 위해 "Deleted(삭제됨)" 열에 확인 표시와 함께 라이브러리 색인에 남아 있습니다.

참고

애질런트는 동일한 샘플링 유형(예: ATR)의 스펙트럼만 하나의 라이브러리에 추가할 것을 권장합니다.

Custom Information(사용자 정의 정보)

사용 가능한 경우, Custom Information(사용자 정의 정보) 창에는 선택한 라이브러리 항목과 관련된 Identification(ID) 및 Data(데이터) 정보가 표시됩니다. 이 페이지에서는 사용자가 해당 라이브러리 항목과 관련된 클래스, 참조 및 처리 정보를 추가할 수도 있습니다.

User Management(사용자 관리)

사용자 관리 페이지를 통해 사용자 이름, 역할을 편집하고 사용자 보안 사항을 수정할 수 있습니다.

사용자 관리에 대한 자세한 내용은 13페이지를 참조하십시오.

GRAMS PLS/IQ 에서 MicroLab PC 로 다변량 메소드 전송

PLS/IQ *.cal 파일을 ASCII 로 내보내기

PLS/IQ *.cal 파일을 ASCII로 내보내기:

- 1 PLS/IQ 모듈을 사용하여 PLS/IQ *.cal 파일을 생성합니다. PLS/IQ에서 보정을 저장하려면 GRAMS 도움말 파일의 'Galactic GRAMS: Saving a Calibration from the Experiment(Galactic GRAMS: 실험의 보정 저장하기)' 절차를 따르십시오. GRAMS 도움말 파일에 대해 질문이 있거나 추가 정보가 필요할 경우 애질런트에 문의하십시오
- 2 GRAMS 메인 화면에서 Add-ons(추가 기능) > PLS/IQ > Export Calibration(보정 내보내기)을 클릭합니다. 'Open(열기)' 대화 상자가 표시됩니다
- 3 적절한 *.cal 파일을 선택하고 Open(열기)을 클릭합니다. Export(내보내기) 대화 상자가 표시됩니다
- 4 첫 번째 섹션에는 선택한 보정 파일이 나열됩니다. 두 번째 섹션에는 내보낸 파일 유형이 나열됩니다. 출력 파일 유형은 ASCII Text(ASCII 텍스트) (*.txt)여야 합니다

MicroLab PC

- 5 Next(다음)를 클릭합니다. 'Save As(다른 이름으로 저장)' 대화 상자가 표시됩니다
- 6 파일을 저장하기 전에 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\models로 이동합니다
- 7 적절한 이름을 입력하고 Open(열기)을 클릭합니다. 보정 파일이 내보내집니다. 소프트웨어가 Export(내보내기) 대화 상자로 복귀합니다
- 8 Cancel(취소)을 클릭하여 GRAMS로 돌아갑니다

메소드 파일 생성

MicroLab PC에서 메소드 파일 생성하기:

- 1 MicroLab PC 또는 MicroLab Lite에서 Method(메소드) 버튼을 클릭하십시오
- 2 Method(메소드) 대화 상자에서 New(새로 만들기) 버튼을 클릭하십시오
- 3 메소드 Type(유형) 페이지의 Method Type(메소드 유형) 드롭다운 목록에서 Components(구성 요소)를 선택하십시오
- 4 Components(구성 요소) 페이지를 클릭하십시오
- 5 Components(구성 요소) 페이지에서 Add(추가) 버튼을 클릭하십시오
- 6 Add Component(구성 요소 추가) 대화 상자에서 구성 요소의 Name(이름)을 지정하십시오. 구성 요소 이름은 최종 사용자가 메소드를 실행할 때 값 옆에 표시되는 텍스트입니다. 이름은 예측 중인 속성을 설명하는 내용이어야 합니다.
- 7 다변량(PLS) 메소드의 경우 Quant Model(Quant 모델)을 계산 유형으로 선택합니다. Open file(파일 열기) 대화 상자가 나타납니다
- 8 적절한 보정 텍스트 파일('PLS/IQ *.cal 파일을 ASCII로 내보내기'의 7단계에서 Galactic GRAMS에서 내보낸 파일)을 선택하고 Open(열기)을 클릭합니다
- 9 Add Component(구성 요소 추가) 대화 상자에서 사용할 수 있는 다른 옵션은 다음과 같습니다

Add/Edit Component(구성 요소 추가/편집) 대화 상자에서 사용할 수 있는 옵션은 다음과 같습니다.

- a Quant Start and Quant Stop(정량 시작 및 정량 중지): Results(결과) 화면에서 구성 요소를 선택할 때 표시되는 주파수 범위를 설정합니다. 비워두면 전체 스펙트럼이 표시됩니다
- b Scaling(비율 조정): 비율 조정 섹션은 Quant 모델에서 생성된 결과에 선형 비율 조정을 적용합니다

- c **Thresholds(임계값):** 이 값에 따라 구성 요소 결과에 대한 표시 색상이 설정됩니다. 구성 요소 값이 Critical(심각) 값보다 높거나 낮으면 결과가 빨간색으로 표시됩니다. 구성 요소 값이 Critical(심각) 값과 Marginal(한계) 값 사이에 있으면 결과가 노란색으로 표시됩니다. 그 외의 값은 녹색으로 표시됩니다
 - d **Calc Value As(값 계산 방식):** 실제 구성 요소 값 사이의 표시를 높음-심각 값이나 낮음-심각 값의 백분율(%)로 변경합니다
- 10 모든 값을 적절히 설정했으면 OK(확인)를 클릭합니다
- 11 **Save As(다른 이름으로 저장)**를 클릭합니다. 메소드 이름을 입력하고 적절한 위치에 저장합니다. 기본 파일 경로는 다음 위치에 있습니다
- C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods.

참고

21 CFR Part 11에서, 메소드를 데이터베이스에 저장하라는 메시지가 표시됩니다.

- 12 이제 메소드를 MicroLab PC에서 사용할 수 있습니다. 메소드를 사용하려면 활성화 되어 있는지 확인하십시오

MicroLab Expert 에서 MicroLab PC 로 MicroLab 정량 모델 이전

MicroLab PC에서 MicroLab Expert의 모델 파일 활용 방법:

참고

21 CFR part 11 환경의 경우 모델을 메소드에 포함시키기 전에 MicroLab Quant 를 사용해 데이터베이스로 가져와야 합니다. 자세한 내용은 50 페이지의 Import Model(모델 가져오기)을(를) 참조하십시오.

- 1 MicroLab PC 또는 MicroLab Lite에서 **Method(메소드)** 버튼을 클릭하십시오
- 2 Method(메소드) 대화 상자에서 **New(새로 만들기)** 버튼을 클릭하십시오
- 3 메소드 **Type(유형)** 페이지의 Method Type(메소드 유형) 드롭다운 목록에서 **Components(구성 요소)**를 선택하십시오
- 4 **Components(구성 요소)** 페이지를 클릭하십시오
- 5 Component(구성 요소) 페이지에서 **Add(추가)** 버튼을 클릭하십시오
- 6 Add Components(구성 요소 추가) 대화 상자에서 구성 요소 이름을 지정합니다
- 7 Calculation Type(계산 유형)으로 **Quant Model(정량 모델)**을 선택하십시오. Open file(파일 열기) 대화 상자가 나타납니다

MicroLab PC

- 8 모델 파일이 있는 위치로 이동하십시오. 파일 유형 필드를 변경하여 파일 유형을 필터링하십시오. 허용되는 파일 유형:
- Agilent Model(*.mqm)
 - Thermo Model(*.txt)
 - Eigen Vector Model(*.xml)
 - Agilent MicroLab Expert Quant Model(*.a2q)

참고

Agilent MicroLab Expert Quant Model(*. a2q) 파일을 사용하려면 "Measurement Bundle(측정 번들)"(G8188AA)과 같은 워크플로 제품 번들의 일부로 제공되는 별도의 등록 코드가 필요합니다. 코드가 없으면 오류 대화 상자가 나타납니다.

- 9 모델 파일을 선택하고 **Open(열기)**을 클릭합니다. 이제 모델이 메소드에 포함됩니다
- 10 Add Component(구성 요소 추가) 대화 상자에 다른 사용 가능한 옵션을 입력하십시오. **OK(확인)**를 클릭합니다
- 11 **Save As(다른 이름으로 저장)**를 클릭합니다. 적절한 메소드 이름을 입력하고 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods에 저장하십시오
- 21 CFR Part 11에 메소드를 데이터베이스에 저장하라는 메시지가 표시됩니다
- 12 이제 메소드를 MicroLab PC에서 사용할 수 있습니다. 메소드를 사용하려면 활성화 되어 있는지 확인하십시오

사전 시료 조정 확인 사용

사전 시료 조정 확인에서는 측정된 시료의 신호 강도를 미리보기 화면에 시각적으로 표시합니다. 여기서 시료가 FTIR 기기 인터페이스 초점에 맞춰져 있는지, 시료에 밀착되어 있는지, 또는 신호를 최대화하기 위해 기기가 시료에 맞게 조정되어 있는지 확인할 수 있습니다. 이 절차에서는 사전 시료 조정 확인을 사용하는 메소드 생성에 대해 자세히 설명합니다. 이 메소드에서는 시료에서 행할 측정이 지정됩니다. 일반적으로 이것은 대상 시료에 반응하는 피크 높이 또는 넓이가 됩니다.

시료 조정 확인:

- 1 MicroLab PC 또는 MicroLab Lite에서 **Method(메소드)** 버튼을 클릭하십시오
- 2 Method(메소드) 대화 상자에서 **New(새로 만들기)** 버튼을 클릭하십시오

MicroLab PC

- 3 메소드 Type(유형) 페이지의 Method Type(메소드 유형) 드롭다운 목록에서 Components(구성 요소)를 선택하십시오
- 4 Components(구성 요소) 페이지를 클릭하십시오
- 5 Component(구성 요소) 페이지에서 Add(추가) 버튼을 클릭하십시오
- 6 Add Components(구성 요소 추가) 대화 상자에서 구성 요소 이름을 지정합니다
- 7 구성 요소에 대한 계산 유형을 선택합니다
일반적으로 Peak Area With Dual Baseline(이중 기준선 포함 피크 넓이) 또는 Peak Height With Dual Baseline(이중 기준선 포함 피크 높이)가 시료 조정을 가장 잘 보여줍니다.
- 8 측정할 피크(영역)를 정의합니다
 - 피크 영역의 경우 Peak Start(피크 시작) 및 Peak Stop(피크 중지)은 피크의 가장자리를 정의합니다
 - 기준선 1과 기준선 2에서, 기준선은 시작 지점과 중단 지점 사이의 가장 낮은 지점으로 설정됩니다
- 9 측정 지점이 1보다 높도록 척도를 설정하십시오
피크 높이에 대해 척도를 1000으로 설정할 경우 대부분의 측정값이 표시됩니다.
- 10 OK(확인)를 클릭합니다
- 11 메소드 Type(유형) 페이지에서 Show Pre-Sample Alignment Check(사전 시료 조정 확인 표시)를 선택합니다. 드롭다운 목록에서 6단계에서 정의한 구성 요소를 선택합니다
- 12 또한 Sample Continuity Check(시료 연속성 확인)를 사용하여 측정 전반에서 시스템이 시료에 맞게 조정되도록 보장할 수 있습니다
- 13 Save As(다른 이름으로 저장)를 클릭하고 메소드를 저장합니다
- 14 휴대용 PC에서 사용하려면 메소드를 모바일 장치의 MicroLab Mobile/Methods 폴더로 전송해야 합니다
- 15 MicroLab Mobile에서 Pre-Sample Alignment Check(사전 시료 조정 확인)는 Sample Alignment(시료 조정) 페이지에서 빨간색/노란색/녹색 막대그래프로 표시됩니다. 막대그래프에서 최대 값에 도달하려면 시료를 회전하거나 조정해야 합니다.

편집한 메소드를 MicroLab Mobile 로 전송

MicroLab PC 또는 MicroLab Lite에서 메소드 수정을 마친 후에는 파일을 내장형 또는 휴대용 PC로 전송해야 합니다. 파일 복사 방법에는 내 컴퓨터를 사용하거나 MicroLab Lite를 통해 자동으로 전송하는 두 가지 방법이 있습니다.

MicroLab Lite 동기화 사용

MicroLab Lite 동기화를 사용하여 MicroLab Mobile로 메소드 전송:

- 1 휴대용 또는 내장형 PC를 MicroLab Lite가 설치된 컴퓨터에 연결합니다
 - 4300 Handheld FTIR의 경우 장치에서 MicroLab Mobile 소프트웨어를 종료하여 'Pass Through(통과)' 모드로 들어가고 USB를 사용하여 컴퓨터에 연결하십시오. MicroLab Mobile을 종료하려면 Home(홈) 화면에서 Logoff(로그아웃)를 선택하고 Exit(종료)를 클릭한 다음 Exit Confirmation(종료 확인) 대화 상자가 나타나면 OK(확인)를 클릭하십시오
- 2 컴퓨터에서 MicroLab Lite를 엽니다
- 3 Advanced Features(고급 기능)를 클릭합니다
- 4 Synchronize(동기화)를 클릭합니다
- 5 연결이 목록에 없으면 New(새로 만들기)를 클릭합니다
- 6 대화 상자에서 Get Connected Device Name(연결된 장치 이름 가져오기)을 클릭하면 연결된 PDA 또는 4300 휴대용 FTIR 기기의 일련번호가 대화 상자에 자동으로 입력됩니다
- 7 표준 구성의 경우 동기화할 옵션을 선택합니다. 보고서, 결과 및 메소드를 동기화할 수 있습니다. 또한 원하는 프린터를 지정하여 자동으로 보고서를 인쇄할 수 있습니다
 - 21 CFR Part 11이 활성화된 시스템에서는 Browse(찾아보기)를 클릭한 다음 Public Mobile Methods 또는 Results 폴더로 이동합니다
 - 21 CFR Part 11이 활성화된 MicroLab Mobile로 메소드 파일을 업로드하려면 파일이 Public Mobile Methods 폴더에 있어야 합니다. 해당 폴더의 모든 메소드 파일이 업로드됩니다
- 8 동기화할 장치를 선택했으면 OK(확인)를 클릭합니다
- 9 파일을 전송하려면 목록에서 원하는 휴대용 PC를 선택하고 Synchronize(동기화) 또는 Sync(동기화)를 클릭한 다음 Yes(예)를 클릭합니다

내 컴퓨터를 통한 복사

참고

21 CFR Part 11 환경에서 '내 컴퓨터'를 통해 비-메소드를 복사할 경우 해당 메소드가 모바일 환경에 표시되기는 하지만 활성화할 수 없습니다.

내 컴퓨터를 이용하여 MicroLab Mobile로 메소드 전송:

1 휴대용 또는 내장형 PC를 MicroLab PC가 설치된 컴퓨터에 연결합니다

참고

이 절차는 4300 Handheld FTIR 에서는 적용되지 않습니다. 41 페이지에 명시된 Synchronize(동기화) 기능을 사용하십시오

- 2 컴퓨터에서 My Computer(내 컴퓨터)를 열고
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods를 탐색합니다
- 3 원하는 메소드를 선택하고 Edit(편집) > Copy(복사)를 선택합니다
- 4 내 컴퓨터 제목에서 Mobile Device(모바일 장치) 드라이브를 선택합니다
- 5 Program Files\MicroLab Mobile\Methods\ 폴더로 이동합니다
- 6 Edit(편집) > Paste(붙여넣기)를 클릭합니다
- 7 컴퓨터의 C:\ 드라이브로 돌아와
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Models로 이동합니다
- 8 Models 폴더의 전체 내용을 복사합니다
- 9 내 컴퓨터 제목에서 Mobile Device(모바일 장치) 드라이브를 선택합니다
- 10 Program Files\MicroLab Mobile\Models 폴더로 이동한 다음 Edit(편집) > Paste(붙여넣기)를 클릭합니다
- 11 덮어쓰기 경고가 표시되면 Yes to All(모두 예)을 클릭합니다

21 CFR Part 11 사용 환경에서 파일 이동

이 절차는 메소드 또는 결과 파일에 적용할 수 있습니다.

폴더 사이에서 파일 이동하기:

- 1 로그인한 사용자는 '메소드/결과 잘라내기/붙여넣기' 권한이 있어야 합니다
- 2 MicroLab Lite 또는 MicroLab PC에서 원하는 파일을 선택하고 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 '잘라내기'를 선택합니다
- 3 적절한 폴더로 이동한 다음 파일을 '붙여 넣'습니다

참고

파일은 다른 폴더로 복사할 수 없습니다.

System Check(시스템 확인)

System Check(시스템 확인) 수행 방법:

- 1 Home(홈) 화면에서 **Advanced Features(고급 기능)**를 클릭하십시오
- 2 **System Check(시스템 확인)**를 선택합니다. 수행할 수 있는 테스트는 네 개이며 각 테스트에 대한 자세한 내용은 기기 작동 설명서를 참조하십시오
- 3 수행할 테스트(들)를 선택하십시오
 - 필요하면 Number of Tests(테스트 횟수), Number of user(사용자 수) 또는 Number of Runs(분석 횟수) 파라미터를 조정할 수 있습니다
 - 여러 테스트를 함께 분석하도록 선택할 수 있습니다
- 4 **Next(다음)**를 클릭하여 테스트를 시작하십시오
- 5 화면의 지시에 따르십시오. 각 단계 완료 후 **Next(다음)**를 클릭합니다
- 6 테스트가 완료될 때까지 위의 단계를 반복하십시오

이 페이지는 의도적으로 비워 두었습니다.

4 MicroLab Quant

Home(홈) 화면	45
Logoff(로그아웃)	45
Lock(잠금)	46
Start New Model(새 모델 시작)	46
Import Model(모델 가져오기)	50
21 CFR Part 11 기능	51

Home(홈) 화면

MicroLab PC v 5.1 이상을 설치할 경우 MicroLab Quant 모듈도 함께 설치됩니다. 이 모듈은 사용자가 MicroLab PC의 MicroLab Component(구성 요소) 메소드 모듈에서 사용할 메소드와 모델을 만들 수 있도록 설계되었습니다.

MicroLab Quant는 MicroLab PC에 적용되는 것과 동일한 보안 설정과 사용자 관리 도구를 사용합니다. 로그인하려면 사용자가 MicroLab PC에 로그인하는 경우와 같은 방식으로 사용자 이름과 암호를 입력합니다. 21 CFR Part 11 환경에서는 그룹과 프로젝트도 입력해야 합니다.

다음 옵션을 사용할 수 있습니다.

- Start New Model(새 모델 시작)
- Previous Project/Model(이전 프로젝트/모델)
- Evaluate Model(모델 계산)
- Import Models(모델 가져오기)(21 CFR Part 11에서만 사용 가능)

MicroLab Quant를 사용하기 전에 새 프로젝트/모델의 데이터를 수집해야 합니다. 이 작업은 MicroLab PC에서 수행해야 합니다. 모든 데이터는 미리 동일한 데이터 수집 매개 변수를 사용하여 수집해야 합니다.

Logoff(로그아웃)

다른 사용자는 로그아웃 화면을 통해 시스템에 로그인하고 로그아웃할 수 있습니다. Exit(종료) 버튼을 누르면 MicroLab PC 소프트웨어가 닫힙니다.

Lock(잠금)

이 기능은 21 CFR Part 11 환경에서만 사용할 수 있으며 사용자가 자리에 없을 때 액세스 관리를 위해 소프트웨어를 잠그는 데 사용됩니다. 자세한 내용은 57페이지의 MicroLab 21 CFR Part 11 섹션을 참조하십시오.

Start New Model(새 모델 시작)

새 모델 만들기

- 1 Start New Model(새 모델 시작)을 선택합니다. 이 소프트웨어는 새 프로젝트의 이름을 자동 생성하지만 사용자도 이름을 만들고 입력할 수 있습니다
- 2 데이터 선택 메뉴가 나타나고 사용자가 데이터가 현재 저장되어 있는 폴더를 선택할 수 있습니다. 그런 다음 데이터가 획득 메소드별로 그룹화됩니다
 - a 모델 생성에 사용할 데이터를 선택합니다. 데이터를 클릭하여 선택할 수 있습니다. 사용자는 Windows 환경에서 파일을 선택하는 방법과 같이 Ctrl 및 Shift 키를 사용하여 여러 파일을 강조 표시할 수 있습니다
 - b 파일을 선택한 다음에는 화면 아래쪽의 [Next(다음)>>] 버튼을 클릭하여 계속합니다
- 3 각 기준의 농도 열에서 농도를 입력합니다
- 4 [Quant Algorithm(Quant 알고리즘)] 드롭다운 메뉴에서 데이터에 적용할 알고리즘 유형을 선택한 후 [Next(다음)>>]를 클릭합니다. 선택한 알고리즘은 다음 옵션으로 구성됩니다
 - a Simple Beer's Law(간단한 비어의 법칙): 일반적으로 단일 구성 요소의 선형 방정식으로 표시합니다. 구성 요소는 일련의 알려진 농도와 Absorbance(흡광도) 유닛에 표시된 특정 스펙트럼 특징의 변화로 정의합니다. 이러한 변화는 최대 높이, 넓이 또는 비율이 해당됩니다. 그런 다음 비어의 법칙 $A=ebc$ 식에서 $[y = mx+b]$ 의 형식으로 선형 방정식을 결정합니다. 그런 다음 이 방정식을 사용하여 알려진 보정 방정식과 비교하여 알려지지 않은 농도를 결정합니다
 - b Classical Least Squares(기존 최소제곱법): 혼합물 안에 여러 구성 요소가 있을 경우 사용합니다. 이 분석 유형도 모든 구성 요소에서 발생하고 있는 모든 변화를 포착하기 위해 여러 주파수를 선택하는 비어의 법칙을 기반으로 합니다. 보정 모델에서 예상 농도와 실제 농도의 최적의 상관관계를 결정하는 데 각 주파수를 함께 사용합니다

- 1 여러 주파수를 정의하며 주파수에 대한 제한은 없습니다. 각 성분의 알려진 농도를 정의해야 합니다
 - 2 CLS는 다른 구성 요소와 상호 작용하는 구성 요소에 대해 매트릭스 효과가 있는 혼합물에는 사용하지 않습니다. 또한 기준 효과에도 취약할 수 있습니다
 - 3 CLS는 혼합물에서 한 가지 구성 요소를 식별하는 데 가장 효과적입니다.
- c 역최소제곱법(역 비어의 법칙 또는 다중선형회귀분석):** 매트릭스 효과가 있는 여러 구성 요소의 혼합물에 사용합니다. 이 분석 유형은 비어의 법칙을 기반으로 합니다. 여러 주파수를 사용하여 비어의 법칙의 역수 방정식인 $C = P \cdot A + e_c$ 보정을 정의하는 데 사용합니다
- 1 관심 성분만 확인해야 할 경우 다변량 모델로 사용하는 데 가장 적합합니다. 복잡한 분석 유형에 적합합니다
 - 2 보정에 사용하는 주파수는 보정에 사용된 알려진 기준 수보다 많을 수 없습니다. 이러한 주파수는 관심 성분의 변화에 대응해야 합니다
 - 3 ILS는 일반적으로 충분한 수의 보정 스펙트럼을 사용할 수 있을 경우 가장 정확한 보정이 가능합니다
- 5 Quant 알고리즘을 선택하면 피크 정의가 필요합니다. 소프트웨어에서 피크 높이, 넓이, 비율을 선택할 수 있습니다
- a Peak Height Definition(피크 높이 정의):** 데이터 창에 표시된 스펙트럼의 피크 높이 아이콘을 끌어서 놓습니다. Spectral Display(스펙트럼 표시)의 화살표를 사용하면 사용자가 기준과 피크 위치를 대화식으로 변경할 수 있습니다
- 1 위쪽 방향을 가리키는 **빨간색 화살표**는 기준 위치(시작점, 끝점)를 정의합니다
 - 2 아래쪽 방향을 가리키는 **파란색 화살표**는 피크 위치를 나타냅니다.
- b 피크 넓이 정의:** 데이터 창에 표시된 스펙트럼의 피크 넓이 아이콘을 끌어서 놓습니다. Spectral Display(스펙트럼 표시)의 화살표를 사용하면 사용자가 기준과 피크 위치를 대화식으로 변경할 수 있습니다
- 1 위쪽 방향을 가리키는 **빨간색 화살표**는 기준 위치(시작점, 끝점)를 정의합니다
 - 2 아래쪽 방향을 가리키는 **파란색 화살표**는 피크 위치(시작점, 끝점)를 나타냅니다

- c **Peak Ratio Definition(피크 비율 정의):** 이 소프트웨어에서는 보정 목적으로 피크 또는 면적 비율을 사용할 수 있습니다. 이 경우 2개 이상의 피크를 넓이 또는 높이 기준으로 정의해야 합니다. 관심 피크를 정의한 후에는 데이터 창 아래의 피크 비율 아이콘을 클릭합니다. 그러면 사용자에게 비율 방정식의 분자와 분모를 정의하라는 대화 상자가 표시됩니다
- d **Scaling(비율 조정):** 사용자는 표시된 스펙트럼 데이터를 클릭하여 확대/축소할 수 있습니다. "확대/축소를 취소"하려면 마우스 오른쪽 버튼으로 스펙트럼 표시 창을 클릭하고 [Full Scale(최대 크기)]을 클릭합니다
- e **Data Table(데이터 테이블):** 테이블에 표시된 데이터는 사용자가 대화형 스펙트럼 표시 창을 통해 추가한 피크 정의를 나타냅니다. 특정 값이 필요할 경우 사용자가 표의 값을 직접 변경할 수 있습니다
 - 1 **Include in Model Option(모델 옵션에 포함):** 사용자가 개발 중인 모델에 포함할 연산을 결정할 수 있습니다. 이 옵션은 전체 데이터 집합을 기준으로 합니다
 - 2 **Delete(삭제):** 사용자가 모델에서 피크 정의를 영구 삭제할 수 있습니다
- f **Standards Table(기준 테이블):** 사용자가 보정 알고리즘에서 사용할 특정 기준을 대화식으로 선택할 수 있습니다. 제거할 스펙트럼 데이터의 해당 확인란을 선택 취소하여 도표 또는 모델에서 개별 스펙트럼 데이터를 제거할 수 있습니다. 또한 기준 창에서 개별 스펙트럼을 강조 표시하여 표시 창에서 해당 스펙트럼을 강조 표시할 수 있습니다
- g **Model Plot Window(모델 도표 창):** 모델 도표 창에는 기본적으로 실제값과 예측값의 도표가 표시됩니다. 사용자는 다음 두 가지 중 한 가지 방법으로 정의된 피크 대비 농도 도표로 전환할 수 있습니다
 - 1 마우스 오른쪽 버튼으로 모델 도표 창을 클릭하고 원하는 도표를 선택합니다
 - 2 분석 화면 아래쪽에서 Select Model Plot(모델 도표 선택)을 클릭합니다
- h **Model Evaluation(모델 계산):** Model Evaluation(모델 계산) 버튼을 클릭하면 소프트웨어에 두 가지 기능이 표시됩니다. 이러한 기능은 일반적으로 이상치와 보정 집합의 견고성을 결정하는 데 사용됩니다
 - 1 **Cross Validation(교차 검증):** 이 소프트웨어는 보정을 실행하면서 각 기준을 제거한 다음 해당 기준을 알 수 없는 값으로 실행할 경우 반환된 값을 결정합니다
 - 2 **Independent Set(독립 집합):** 사용자가 보정과 독립적으로 실행된 점검 기준의 [Add Files...](파일을 추가)하고 이러한 시료를 기준으로 값을

예측할 수 있습니다. 각 시료의 농도를 표에 입력한 다음 [Predict](예측) 버튼을 클릭합니다

- a 화면 아래쪽에 Total Standard Error(총 표준 오차), R-Squared for Actual V Predicted(실제값 및 예측값의 R-제곱)가 표시됩니다. Actual V Predicted(실제값 대 예측값) 그래프도 화면에 표시됩니다
 - b 이러한 값을 사용자가 선택한 위치에 CSV 파일 형식으로 Export(내보내기)할 수 있습니다
 - c 이제 사용자는 [Save(저장)]를 클릭하여 모델을 저장하거나 [Back(뒤로)]을 클릭하여 이전 데이터 분석 화면으로 돌아갈 수 있습니다
- i Finalize Model(모델 최종 결정): 사용자가 보정 모델에 만족하는 경우 [Finalize Model(모델 최종 결정)] 버튼을 선택합니다. 그런 다음 기준과 모델이 포함된 프로젝트(*.mpq)를 저장할 수 있습니다. 이때는 데이터를 MicroLab 메소드로 저장할 수도 있습니다. 여기에는 사용자가 관련 모델에서 모든 보정 매개 변수를 사용하여 정의한 구성 요소가 포함됩니다
- 1 Model Files(모델 파일): 여러 구성 요소를 정의해야 할 경우 개별 모델/프로젝트에서 수행합니다. 프로젝트 파일을 저장할 때 각 구성 요소를 개별 모델 또는 *.mqm 파일로 정의합니다
 - 2 Save Method(메소드 저장): 관심 구성 요소를 포함하여 파일을 *.a2m 파일 확장자로 저장합니다. 메소드는 보정 파일로 모델을 만들 때 사용한 것과 같은 데이터 수집 매개 변수가 지정됩니다. 메소드 파일에 여러 구성 요소가 필요할 경우 MicroLab Lite 또는 PC를 통해 메소드에 수동으로 추가해야 합니다. MicroLab PC에서 다변량 메소드 전송에 대한 섹션을 참조하십시오. 모델은 GRAMS 모델과 같은 방식으로 추가되지만 위에서 설명한 것과 같이 *.mqm 파일로 정의됩니다
 - 3 Print(인쇄): 기준 및 모델 정보가 포함된 PDF를 만들 경우 선택합니다. 이 파일은 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results 폴더에 저장됩니다
- 6 Previous Project/Model(이전 프로젝트/모델): 사용자가 이전에 시작한 프로젝트를 선택하고 매개 변수를 편집할 수 있습니다. 이 작업은 위의 Start New Model(새 모델 시작) 섹션과 유사하지만 일부 작업이 이미 완료되어 있습니다. 일반적으로 기준이 이미 추가되어 있고 몇 가지 피크 정의가 추가되어 있을 수 있습니다

이제 사용자는 동일한 단계를 따라 메소드를 정의, 계산, 최종 결정할 수 있습니다.

- 7 Evaluate Model(모델 계산) 여기서는 사용자가 계산할 메소드를 선택할 수 있습니다. Independent Set Evaluation(독립 집합 계산) 화면이 표시되며 사용자가 알려진 기준을 로드하고 New Model(새 모델) 설정의 모델 계산 섹션에서 이미 수행한 방법과 같이 농도를 예측할 수 있습니다

Import Model(모델 가져오기)

MicroLab Quant를 사용하여 모델 파일 가져오는 방법:

참고

이 기능은 21 CFR part 11 환경에서만 사용할 수 있습니다.

MicroLab Quant 는 MicroLab PC 를 사용하는 메소드에서 모델 활용을 위해 모델을 데이터베이스로 가져오는 기능이 있는 유일한 애플리케이션입니다.

21 CFR part 11 이 아닌 환경에서 모델을 이전하는 방법은 38 페이지를 참조하십시오.

- 1 MicroLab Quant에 로그인하십시오
- 2 Import models(모델 가져오기)를 선택하십시오
- 3 모델이 저장된 위치로 이동하여 관심 대상의 모델을 선택하십시오. 필요하다면 모델 유형을 필터링하십시오
허용되는 파일 유형:
 - Agilent Model(*.mqm)
 - Thermo Model(*.txt)
 - Eigen Vector Model(*.xml)
 - Agilent MicroLab Expert Quant Model(*.a2q)

참고

Agilent MicroLab Expert Quant Model(*. a2q) 파일을 사용하려면 "Measurement Bundle(측정 번들)"(G8188AA)과 같은 워크플로 제품 번들의 일부로 제공되는 별도의 등록 코드가 필요합니다. 코드가 없으면 오류 대화 상자가 나타납니다.

- 4 Open(열기)을 클릭합니다. 'Select database/folder(데이터베이스/폴더 선택)' 창이 나타납니다
- 5 모델 파일을 가져올 데이터베이스 폴더를 선택하고 OK(확인)를 클릭하십시오
- 6 모델 파일을 데이터베이스로 성공적으로 가져왔으면 OK(확인)를 클릭하십시오
- 7 MicroLab PC를 사용하는 메소드에 모델을 포함시키려면 38페이지에 설명된 단계를 따르십시오

21 CFR Part 11 기능

이러한 기능에 대한 자세한 내용을 보려면 57페이지의 MicroLab 21 CFR Part 11 섹션을 참조하십시오.

21 CFR Part 11

모델을 만들거나 편집할 때 수행할 작업 목록이 표시됩니다.

E-Sign(전자 서명)

모델에 전자 서명을 적용하고 주석을 추가하려면 E-sign(전자 서명)을 클릭합니다.

이 페이지는 의도적으로 비워 두었습니다.

5 MicroLab OQ

운영 적격성 평가(OQ)	53
OQ 수행	54
OQ 보고서	55

MicroLab OQ 소프트웨어는 진단 값과 성능 검증 테스트를 제공하여 시스템이 의도한 대로 작동하는지 확인합니다. 각 기기의 진단 값 및 성능 검증 테스트에 대한 자세한 내용은 해당 기기 작동 설명서를 참조하십시오.

운영 적격성 평가(OQ)

운영 체제의 진단 검증

Diagnostic(진단) 화면에는 기기에 대한 다음 정보가 표시됩니다:

- Instrument Status(기기 상태): Energy(에너지), Battery(배터리), Source(소스), Laser(레이저) 및 Current Gain(현재 게인)
- Temperatures of(온도): Detector(검출기), CPU, IR board(IR 보드), Power(전원), Block(블록)
- Version Information(버전 정보)

참고

Advanced Features(고급 기능) 화면을 통해 MicroLab PC 및 MicroLab Mobile 에서 진단 상태를 확인할 수도 있습니다.

결과는 색상으로 표시됩니다.

- 녹색: 결과가 최적 값 범위 내에 있습니다. 기기가 제대로 작동하고 있습니다
- 노란색: 결과가 한계 범위 내에 있습니다. 기기가 작동하지만 성능 수준이 낮습니다
- 빨간색: 결과가 임계 범위 내에 있습니다. 기기가 제대로 작동하지 않습니다

성능 검증

수행 가능한 테스트:

- Signal to Noise (Performance) Test[신호 대 잡음 비(성능) 테스트]
- Stability Test(안정성 테스트)
- Laser Frequency Calibration Check(레이저 주파수 보정 확인)(주파수 정확도 및 반복성)
- Spectral Resolution Test(스펙트럼 분해능 테스트)

참고

MicroLab PC 와 MicroLab Mobile 모두에서 **Advanced Features(고급 기능)** 화면을 통해 **System Check(시스템 확인)**에 사용된 것과 같은 테스트입니다.

OQ 수행

운영 적격성 평가 시작 방법:

- 1 **Next(다음)**를 클릭하여 테스트를 시작하십시오
- 2 올바른 기기를 선택했는지 확인하십시오
- 3 적절한 액세서리를 모두 선택하십시오. **Make Primary(기본 항목으로 지정)**를 클릭하여 부수장치를 기본 부수장치로 정의하십시오. 그러면 기기가 선택된 다른 부수장치로 테스트를 수행할 수 있습니다
기본 부수장치는 모든 성능 검증 테스트를 실행할 수 있는 부수장치여야 합니다. 이는 기기가 올바르게 작동하는지 확인하기 위한 것입니다.
- 4 **OK(확인)**를 클릭하여 테스트를 시작하십시오
- 5 Diagnostic(진단) 페이지가 나타납니다. 진단 결과 중 하나라도 FAIL(실패)이면 성능 테스트를 진행할 수 없습니다
 - Instrument Status(기기 상태) 아래의 Energy(에너지) 필드가 FAIL(실패)로 나타나면 **Gain Adjust(게인 조정)** 버튼을 클릭하고 신호가 최적(녹색) 범위에 들어오도록 게인 값을 조정하십시오. 신호가 최적 범위 내에 있으면 Status indicator(상태 표시기)도 녹색으로 나타납니다
 - **Set Instrument Default Gain(기기 기본 게인 설정)**을 클릭하여 해당 게인 값을 기기의 기본값으로 저장하십시오
 - **Back(뒤로)**을 클릭하여 Diagnostic(진단) 페이지로 돌아갑니다
- 6 **Next(다음)**를 클릭합니다
- 7 실행할 성능 테스트를 선택하십시오. **Next(다음)**를 클릭합니다
- 8 화면의 지시에 따르십시오. 준비가 완료되면 **Next(다음)**를 클릭하십시오
- 9 OQ가 완료될 때까지 위의 단계를 반복하십시오

OQ 보고서

결과 요약

운영 적격성 평가(OQ가 완료되면 Results Summary(결과 요약)) 화면이 나타나며 각 테스트 결과가 표시됩니다.

OQ 보고서는 다음을 표시하는 PDF 양식으로 생성됩니다.

워크스테이션 ID 및 소프트웨어 버전과 같은 System Information(시스템 정보).

사용자 정보 및 보고서 파일 이름과 같은 Reporting Information(보고 정보).

기기에 연결된 모든 액세서리와 같은 Accessories(액세서리) 정보.

MicroLab OQ의 결과는 다음 파일 경로에 있습니다.

C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\IQOQ.

이 페이지는 의도적으로 비워 두었습니다.

6

21 CFR Part 11 이 포함된 MicroLab

SCM	57
SDA	58
MicroLab의 21 CFR Part 11 소프트웨어 구성 요소	58

MicroLab Pharma Software의 21 CFR part 11 구성 요소는 두 개의 프로그램으로 구성됩니다:

- SCM(Spectroscopy Configuration Manager)
- SDA(Spectroscopy Database Administration)

측정이 발생한 후에는 결과를 삭제할 수 없습니다.

CFR을 설치한 다음에는 CFR 기능을 해제할 수 없습니다. MicroLab 소프트웨어와 SCM을 제거한 다음 MicroLab 소프트웨어를 다시 설치할 경우 CFR 규정이 유지됩니다. 따라서 CFR 환경 무결성을 유지할 수 있습니다.

설치 지침은 소프트웨어와 함께 제공된 '21 CFR Part 11 환경용 MicroLab 소프트웨어 설치 지침'을 참조하십시오.

참고

MicroLab Expert 옵션 소프트웨어는 21 CFR Part 11 환경에서 사용할 수 없습니다. 자세한 내용은 MicroLab Expert 소프트웨어 설치 지침, MicroLab Pharma 설치 지침 및 Agilent MicroLab Expert 1.1.0.1 소프트웨어 릴리스 노트를 참조하십시오.

SCM

SCM(Spectroscopy Configuration Manager)은 시스템 관리자와 Agilent 분광계 소프트웨어 애플리케이션의 Server and Acquisition Server 부분 사이의 소프트웨어 인터페이스입니다. SCM은 시스템 보안, 사용자 관리, 데이터 경로와 관련된 데이터를 만들고 구성, 유지 관리하는 수단입니다.

애질런트는 21 CFR Part 11 규정 준수에 필요한 보안을 제공하기 위해 보안 및 사용 권한에 SCM을 사용합니다. 이러한 보안 기능은 다음을 제공합니다.

- 사용자 ID 코드 및 암호를 사용하여 액세스 관리 및 권한 검사
- 데이터베이스를 사용하여 전자 기록 보안
- 시간 및 날짜 스탬프 감사 추적

21 CFR Part 11 이 포함된 MicroLab

사용자 ID 코드와 암호를 사용할 경우 시스템에 로그인할 수 있는 사용자와 Agilent 애플리케이션 소프트웨어 내에서 특정 기능을 수행할 수 있는 사용자를 관리할 수 있습니다. 또한 전자 기록에 전자 서명을 추가하는 메커니즘을 제공합니다. SCM과 함께 데이터베이스를 사용함으로써 권한 없는 사용자가 파일을 변경 또는 삭제할 수 없도록 방지합니다. SCM 이벤트 로그를 사용하면 애플리케이션 소프트웨어에 더 많은 감사 추적을 유지할 수 있습니다. SCM 관리자는 필요한 사용자를 설정해야 합니다. 이 작업을 수행할 때는 21 CFR Part 11 규정을 계속 준수할 수 있도록 여러 간단한 요구 사항을 준수하는 것이 중요합니다.

SCM 구성에 대한 자세한 내용은 SCM 도움말을 참조하십시오. SCM 도움말에 액세스하려면 SCM 애플리케이션을 열고 키보드에서 F1을 누르거나 C:>Program Files (x86) > Varian > 21 CFR 11 > Configuration manager > Server > Configuration Manager Database Help로 이동합니다.

SDA

SDA(Spectroscopy Database Administrator)는 시스템 관리자가 Agilent 애플리케이션 소프트웨어에서 데이터를 저장하는 데 사용하는 데이터베이스를 설정 및 유지 관리하도록 설계되었습니다.

SDA와 Agilent SCM(Spectroscopy Configuration Manager) 애플리케이션 소프트웨어 및 각자의 SOP(Standard Operating Practice)를 함께 사용하여 Agilent 기기 관리를 위한 21 CFR Part 11 지원 환경을 구축할 수 있습니다.

SDA를 사용하면 Agilent 기기로 수집한 데이터를 로컬(Agilent 애플리케이션 소프트웨어와 동일한 PC)로 저장하거나 클라이언트/서버 환경에 원격으로 저장할 수 있습니다.

구성은 시스템 관리자 또는 SDA 실행에 대한 관리자 권한이 있는 담당자가 수행해야 합니다.

SDA 구성에 대한 자세한 내용은 SDA 도움말을 참조하십시오. SDA 도움말에 액세스하려면 SDA 애플리케이션을 열고 키보드에서 F1을 누르거나 시작 > 모든 프로그램 > Agilent > Database Utilities > SDA Help를 클릭합니다.

MicroLab 의 21 CFR Part 11 소프트웨어 구성 요소

21 CFR Part 11 소프트웨어를 설치하면 추가 버튼을 사용할 수 있습니다.

Lock(잠금)

이 대화 상자에서는 21 CFR Part 11 소프트웨어 패키지를 사용할 때 MicroLab 소프트웨어를 잠글 수 있습니다. 이 대화 상자는 Home(홈) 화면에서 액세스합니다.

잠긴 화면에서는 Unlock MicroLab PC(MicroLab PC 잠금 해제) 대화 상자가 표시되며 확인된 사용자가 로그인하고 소프트웨어를 잠금 해제할 때까지 어떤 작업도 할 수 없습니다. 처음에 MicroLab PC/Lite/Quant/OQ를 '잠근' 사용자 외의 사용자만 홈 페이지에서 소프트웨어를 잠금 해제할 수 있습니다. 소프트웨어에 처음에 로그인한 사용자만 모든 페이지에서 소프트웨어를 잠금 해제할 수 있습니다. 이렇게 해야 권한이 올바르게 적용되고 감사 추적 정보가 MicroLab 및 Configuration Manager에서 정확성이 보장되며 결과 파일이 올바르게 저장됩니다.

User Identification(사용자 ID) — 사용자 ID를 입력합니다.

Group(그룹) — 드롭다운 목록에서 그룹을 선택합니다.

Project(프로젝트) — 드롭다운 목록에서 프로젝트를 선택합니다.

Password(암호) — 암호를 입력합니다.

참고

MicroLab Mobile 21 CFR Part 11 을 사용하는 경우 암호에 영숫자만 포함해야 합니다. \$, @ 등의 특수 문자를 사용하지 마십시오.

OK(확인) — 로그인하고 대화 상자를 닫으려면 OK(확인)를 클릭합니다. 이제 소프트웨어가 잠금 해제되었습니다.

Cancel(취소) — 로그인하지 않고 대화 상자를 닫으려면 Cancel(취소)을 클릭합니다. 소프트웨어가 잠긴 상태를 유지합니다.

E-sign(전자 서명)

전자 서명을 적용하려면 E-sign(전자 서명)을 클릭합니다. 모든 사용자가 메소드 또는 결과에 "Sign(서명)"할 수 있습니다. Approval - 1(승인-1) 및 Approval - 2(승인-2)를 수행하려는 사용자는 Spectroscopy Configuration Manager에서 적절한 권한을 부여받아야 합니다. 승인하기 위해 MicroLab 소프트웨어에 로그인할 필요는 없지만 Signature(서명) 대화 상자가 표시되면 Approval - 1(승인-1) 또는 Approval - 2(승인-2)를 수행할 수 있는 자격 증명을 입력해야 합니다. Approval(승인)을 수행하기 전에 로그인되어 있던 원래 사용자가 계속 로그인 상태를 유지합니다. MicroLab 소프트웨어에 로그인한 사용자의 계정이 비활성화되거나 잠긴 경우, 전자 서명 대화 상자에서 취소하면 Lock(잠금) 대화 상자가 나타납니다. MicroLab 소프트웨어를 잠금 해제하기 전에 Configuration Manager Administrator가 원래의 사용자 계정을 잠금 해제해야 합니다.

21 CFR Part 11 이 포함된 MicroLab

User Identification(사용자 ID) — 이 필드에는 현재 사용자의 이름이 표시됩니다. 운영자/승인자는 전자 서명을 적용하기 전에 이 필드에 자신의 사용자 ID를 입력해야 합니다.

Group(그룹) — 사용자 ID 필드를 입력하면 그룹이 자동으로 채워집니다. 사용자가 둘 이상의 그룹에 연결되어 있는 경우 적절한 그룹을 선택합니다.

Project(프로젝트) — 사용자 ID 필드를 입력하면 프로젝트가 자동으로 채워집니다. 사용자가 둘 이상의 프로젝트에 연결되어 있는 경우 적절한 프로젝트를 선택합니다.

Password(암호) — 운영자/승인자가 전자 서명을 적용하려면 이 필드에 자신의 암호를 입력해야 합니다.

Comment(코멘트) — 이 필드에는 서명하는 작업에 대한 정보 또는 서명의 의미를 입력합니다. 코멘트는 반드시 입력해야 하며, 이 필드를 비워두고 'Sign(서명)', 'Approval-1(승인-1)' 또는 'Approval-2(승인-2)' 버튼을 클릭하면 필수 필드라는 메시지가 표시됩니다.

Approval-1(승인-1) — Approval-1(승인-1) 수준에서 전자 서명을 적용하려면 클릭합니다. 메소드를 실행한 사용자는 해당 데이터를 승인할 수 없으며, 그럴 경우 메시지가 표시됩니다.

Approval-2(승인-2) — Approval-2(승인-2) 수준에서 전자 서명을 적용하려면 클릭합니다. 애플리케이션을 실행하고 데이터를 만든 사용자는 해당 데이터를 승인할 수 없으며, 그럴 경우 메시지가 표시됩니다.

Approval-2(승인-2)가 수행되면 메소드 또는 결과가 잠깁니다. 이 메소드 또는 결과는 열고 볼 수 있지만 추가 수정을 수행할 수 없습니다. 이렇게 잠긴 메소드에서 새 메소드를 만들 수 있습니다.

Approval-2(승인-2)를 수행해야만 MicroLab 메소드 및 결과 파일을 잠글 수 있습니다. 작업자와 승인자-1이 문서에 서명한 후 파일에 대한 추가 수정이 이루어지지 않았음을 보장하도록 회사 SOP가 필요할 수 있습니다. 전자 서명 이벤트를 포함하여 전자 서명 간에 이루어진 모든 수정은 Audit Trail(감사 추적)에 상세하게 명시됩니다.

변경 이유(Reason for Change)

메소드를 변경하는 즉시 이 대화 상자가 열립니다. 'Reason for change(변경 이유)' 대화 상자를 완료하는 즉시 메소드가 저장됩니다.

사용자는 이 대화 상자를 사용하여 메소드의 변경 이유를 입력할 수 있습니다. 여기서 입력하는 정보는 SCM의 MicroLab 보고서, 데이터로그 및 감사 로그에 표시됩니다.

대화 상자의 아래쪽에는 변경 사항을 포함한 메소드의 로그가 표시됩니다.

21 CFR Part 11

Audit Trails(감사 추적), Collect Parameters(수집 매개 변수), Analysis Parameters(분석 매개 변수)에 액세스하려면 클릭합니다.

Audit trail(감사 추적)

다음은 포함하여 기록된 모든 작업을 보여주는 메소드 및 결과 감사 추적이 표시됩니다.

- 메소드 및 결과 저장 위치
- 재분석에 사용된 메소드
- 메소드 매개 변수 변경 사항
- 변경 이유(Reason for Change)
- 메소드 실행 시작 시점
- 메소드 실행 정지 시점
- 예기치 않은 기기 오류, 중단된 메소드 실행
- 승인된 메소드 또는 결과
- Residual Applied(적용된 잔류물)

위의 각 항목에 대해 다음 정보의 조합도 함께 로깅됩니다.

- SDA 관리자 서버/데이터베이스/파일 이름
- 로컬 날짜 및 시간
- GMT 날짜 및 시간
- 워크스테이션 이름
- 사용자: 그룹/프로젝트/사용자 ID
- 사용자 이름
- 사용자 설명
- 기기 일련번호
- 확인된 주석
- 소프트웨어 버전 번호
- 펌웨어 버전 번호

이 페이지는 의도적으로 비워 두었습니다.

7

시료 측정

시료 인터페이스 세척	63
백그라운드 측정 수집	64
시료 측정 수집	64

MicroLab PC 및 MicroLab Mobile 소프트웨어는 사용자에게 시료 측정을 안내하도록 설계되었습니다. 이 소프트웨어는 시료 측정을 위해 사용자에게 필요한 작업을 그림과 지침으로 알려줍니다. 화면의 지침을 꼼꼼하게 따르면 일관된 측정 결과를 얻을 수 있습니다. 모든 시료 측정에서 다음 단계를 밟아야 합니다.

- 시료 인터페이스를 세척합니다
- 백그라운드를 수집합니다
- 측정할 시료를 놓습니다
- 시료 측정을 수집합니다

시료 인터페이스 세척

시료 측정의 첫 번째 단계는 시료 장착 인터페이스에 이전의 시료가나 일반적인 사용과 보관에 따른 잔여물이 없는지 확인하는 것입니다. 자세한 세척 지침은 시스템과 함께 제공된 적절한 기기 작동 설명서를 참조하십시오.

주의

분광계 봉인을 제거하고 내부 표면을 세척하지 마십시오. 봉인을 제거하면 보증이 적용되지 않습니다.

백그라운드 측정 수집

매질런트는 모든 시료에 앞서 백그라운드를 수집하도록 시스템을 구성할 것을 권장합니다.

메소드가 권장하는 대로 구성되어 있으면 분석을 시작하기 전에 소프트웨어가 자동으로 백그라운드 스펙트럼을 수집합니다. 백그라운드 측정(시료 없음)은 현재 시스템 상태에 대한 기준선 프로필을 제공하고 백그라운드와 시료 스펙트럼 모두에서 발생하는 이상 현상을 제외할 수 있게 해줍니다.

참고

백그라운드를 수집하기 전에 시료 인터페이스가 깨끗한지 확인하십시오. 시료 인터페이스를 세척하려면 메탄올, 아세톤 또는 이소프로필알코올과 같은 적절한 용액을 사용해야 합니다. 자세한 정보는 기기 작동 설명서를 참조하십시오.

백그라운드 측정 수집:

- 1 Home(홈) 화면에서 적절한 메소드가 활성 상태인지 확인하고 **START(시작)**를 클릭하여 백그라운드 시료 분석을 초기화합니다
- 2 **Next(다음)**를 클릭합니다. 간단한 시료 인터페이스(크리스탈) 확인이 실시됩니다. 테스트가 성공적으로 끝나면 시스템에서 '백그라운드'를 수집합니다. 백그라운드 진행 상황은 상태 표시줄로 알 수 있습니다

참고

분석을 다시 시작하고 싶은 경우에만 HOME(홈)을 클릭하여 기본 홈 화면으로 돌아가십시오.

시료 측정 수집

시료 측정:

- 1 시료 측정을 시작하려면 Home(홈) 화면의 **Start(시작)** 버튼을 클릭합니다
- 2 소프트웨어의 지시에 따라 ATR 또는 투과 측정용 시료 인터페이스를 세척합니다
 - Agilent 4100 ExoScan FTIR에서 반사율을 측정하려면 시료 인터페이스에 반사 기준을 배치해야 합니다

참고

시료 표면은 부드러운 티슈와 메탄올, 에탄올 또는 아세톤과 같은 적절한 용액을 사용하여 세척해야 합니다.

시료 측정

- 3 Next(다음)** 버튼을 클릭합니다. Home(홈) 버튼을 클릭하면 측정이 중단되고 Home(홈) 화면으로 돌아갑니다
메소드에서 선택한 경우 Clean Crystal Check(크리스탈 세척 상태 확인)가 수행됩니다. 저장된 참조 물질에 대해 흡광도를 확인합니다. 흡광도가 있다는 게 발견되면 시료 인터페이스를 세척하고 다시 시작하라는 메시지가 표시됩니다.

참고

크리스탈 세척 상태 확인에 계속 실패하면 저장된 백그라운드 스캔이 손상될 수 있습니다. 이런 경우, Diagnostics(진단) 대화 상자에서 Advanced Features(고급 기능) > Diagnostics(진단)를 클릭하고 Reset Clean Check(세척 상태 확인 재설정)를 클릭하면 백그라운드 세척 상태를 재설정할 수 있습니다. 이렇게 하면 저장된 백그라운드 스캔이 삭제됩니다.

- 4** 크리스탈 확인(지정된 경우)에 뒤이어, 소프트웨어에서 백그라운드 시료를 수집합니다. 백그라운드 시료는 메소드에서 지정한 대로 스캔마다 또는 지정된 시간 간격 이후에 수집됩니다
소프트웨어에서 시료를 시료 인터페이스에 바르라고 안내합니다. 표시된 그림이 시스템의 구성과 일치할 것입니다. 시료가 제자리에 있으면 **Next(다음)**를 클릭합니다.
- 5** 소프트웨어가 시료 측정의 강도(흡광도)를 표시하는 그래프를 보여줍니다. 이 화면은 시료가 샘플링 인터페이스에 올바르게 놓였는지 확인하는 데 사용됩니다
 - Agilent 4500t FTIR을 사용하여 오일을 분석할 경우에는 값을 최대화해야 합니다
 - 반사율을 사용하는 Agilent 4100 ExoScan FTIR의 경우 값이 0.1에서 2AU 사이여야 하고 ATR 측정은 0.05에서 1AU 사이여야 합니다
- 6** 시료 ID 필드에 파일 이름을 입력합니다. 여기서 입력하는 이름은 시료 데이터를 저장할 때 해당 파일 이름이 됩니다. Comment(주석) 필드에 시료에 관한 추가 정보를 입력합니다
- 7 Next(다음)** 버튼을 클릭하여 시료 측정을 시작합니다. 메소드에 지정된 대로 시료 스캔이 추가됩니다
- 8** 시료 측정 중에는 시료가 샘플링 기술의 초점에 남아 있어야 합니다
 - Agilent 4500t FTIR의 경우 측정 중에 시료 셀을 조정하면 안 됩니다
 - Agilent 4100 ExoScan FTIR의 경우에는 측정 중에 기기를 시료 표면에서 움직이면 안 됩니다

소프트웨어가 측정 중에 시료 신호를 모니터링합니다. 신호가 사전 설정된 임계값 밑으로 떨어지면 수집이 중단됩니다. 시료 초점이 회복되면 소프트웨어가 즉시 데이터 수집을 시작합니다.

시료 측정

참고

진행 상태 표시줄은 데이터 수집 진행 상황을 보여줍니다. 진행 상태 표시줄이 가득 차면 프롬프트가 데이터 전송으로 바뀝니다. 그러면 측정이 완료된 것이고 시료를 기기에서 제거할 수 있습니다.

- 9 시료 측정이 완료되면 소프트웨어가 Results(결과) 화면에 메소드 결과를 표시합니다. 시료 스펙트럼과 계산된 메소드 결과가 자동으로 저장됩니다. 언제든지 Previous Results(이전 결과) 화면에서 데이터를 반환할 수 있습니다.

8

결과 검토

MicroLab Mobile	67
MicroLab PC/MicroLab Lite	70
MicroLab 보고서 작성	78

MicroLab Mobile

Results(결과) 화면

구성 요소 메소드의 경우 Results(결과) 화면에서 계산된 구성 요소 값을 표시합니다. 구성 요소 값은 '심각' 제한에 비례하여 순서가 지정됩니다. '심각' 범위 밖의 값이 먼저 표시되고 '한계' 범위 밖에 있는 값이 뒤이어 표시됩니다. 수용 가능한 범위 내 구성 요소는 마지막에 녹색으로 표시됩니다.

- 녹색 결과는 시료가 조정 가능한 제한 내에 있음을 나타냅니다
- 노란색 결과는 시료가 '한계'와 '심각' 제한 사이에 있음을 나타냅니다
- 빨간색 결과는 시료가 '심각' 제한보다 높거나 낮음을 나타냅니다

Home(홈): 이 버튼을 누르면 소프트웨어가 Home(홈) 화면으로 복귀합니다.

Next(다음): 이 버튼을 누르면 소프트웨어가 추가 시료 측정을 위해 시료 수집 페이지로 돌아갑니다.

Handling data(데이터 취급)

데이터 취급을 선택할 수 있는 메뉴 버튼입니다. 이전에 시료 ID와 주석을 입력하지 않은 경우 이 버튼을 사용하여 해당 내용을 입력할 수 있습니다. Comment(주석) 필드가 입력되어 있는 경우 해당 필드가 저장되고 시료 ID를 기준으로 새 파일이 생성됩니다.

참고

자동 저장 기능은 항상 현재 파일과 함께 시료 ID 및 시간 날짜 스탬프를 저장합니다. 이를 통해 이전 시료 결과를 덮어쓰는 사고를 방지합니다.

Home(홈): 소프트웨어가 Home(홈) 화면으로 돌아갑니다.

Next(다음): 소프트웨어가 다음 시료를 측정할 수 있도록 시료 시작 화면으로 돌아갑니다.

결과 검토

Re-Analyze(재분석): 현재 확인 중인 데이터를 다른 메소드로 계산할 수 있습니다. 이 기능은 시료 데이터를 다시 수집할 수 없을 때 유용합니다. 재분석할 때마다 새 데이터 파일이 생성됩니다.

참고

재분석 기능은 선택한 메소드와 동일한 스펙트럼 분해능으로 수집된 데이터에만 사용해야 합니다. 스펙트럼 분해능 차이는 정량 결과에 영향을 줄 수 있습니다.

Export(내보내기): 수집한 데이터를 다른 분석 소프트웨어 패키지로 내보낼 수 있습니다. 내보낸 파일은 시료와 동일한 파일 이름에 확장자만 *.csv, *.asp 또는 *.spc로 저장됩니다. Results(결과) 디렉터리에 저장됩니다.

Peak Picking(피크 선택): 검토 중인 스펙트럼에 표시할 피크를 정의할 수 있습니다. 스펙트럼을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하고 메뉴에서 Peak Pick(피크 선택)를 선택하면 됩니다. 스펙트럼에서 피크를 표시하려면 클릭하고 드래그하고 다시 클릭하여 임계값 라인을 그립니다. 이 과정을 여러 번 반복하여 스펙트럼에서 여러 피크를 정의할 수 있습니다. 피크는 생성된 모든 보고서에 인쇄되며 데이터 파일과 함께 유지됩니다. 완료했다면 다시 오른쪽 버튼을 클릭하고 메뉴에서 Peak Pick(피크 선택)를 선택 해제합니다.

보고서 템플릿에는 피크 선택 표가 포함되어 있습니다. 선택한 피크의 경우 피크 값이 선택한 순서대로 표에 나타납니다.

GRAMS 로 스펙트럼 가져오기

데이터를 SPC 형식으로 가져오기:

- 1 컴퓨터에서 GRAMS/AI를 열고 **File(파일) > Import/Export(가져오기/내보내기)**를 클릭합니다. ASCII 파일 변환기를 선택합니다. **Import(가져오기)** 버튼을 클릭합니다
- 2 드라이브와 디렉터리를 탐색하여 가져오려는 파일을 찾습니다. 파일을 가져올 때 대부분의 파일 변환기는 특정 입력 파일 이름 확장자를 찾습니다. 예를 들어 ASCII 변환기는 *.ASP 파일 이름 확장자가 있는 파일을 찾습니다. (필요한 경우 파일 유형을 모든 파일(*.*)로 바꾸십시오.)

Ctrl 키를 누른 상태에서 각 파일 이름을 클릭하면 여러 파일을 선택할 수 있습니다.

Open(열기)을 클릭합니다. 파일 가져오기 대화 상자가 가져올 파일 이름을 표시합니다. (파일을 1개 이상 가져오는 경우 첫 번째 파일 이름이 표시됩니다.)

- 3 원하는 경우 파일 이름을 바꾸십시오. 새로 생성된 파일을 다른 디렉터리에 쓰려면 전체 디렉터리 경로를 파일 이름 앞에 붙입니다. 그렇게 하지 않으면 ASP 파일과 같은 폴더에 저장됩니다. (출력 디렉터리에 대한 읽기/쓰기 액세스 권한이 있어야 합니다.)

결과 검토

- 4 출력 파일 유형 목록에서 실험 키 확장자를 선택합니다. 기본 Spectra(*.spc)로 설정된 상태로 두십시오
- 5 Output Rename(출력 이름 바꾸기) 옵션을 선택합니다. Manual(수동)로 두십시오
- 6 Auto-open(자동 열기)을 클릭하여 변환된 파일을 자동으로 GRAMS/AI에서 엽니다. (Auto-open(자동 열기)으로는 여러 파일을 열 수 없으며 마지막으로 변환된 파일에만 적용됩니다.)
- 7 File Import(파일 가져오기) 대화 상자에서 OK(확인)를 클릭합니다

파일이 변환되면 GRAMS 변환 애플리케이션이 가져올 파일을 읽고 디스크에 새로운 파일을 씁니다. 변환 프로세스가 완료되면 File(파일) > Open Trace(트레이스 열기) 명령을 사용하여 파일을 GRAMS/AI로 로드할 수 있습니다.

변환이 진행되면서 메시지나 오류가 있으면 표시됩니다. 여러 파일을 변환하는 경우 GRAMS/AI 또는 다른 Windows 프로그램으로 다시 전환할 수 있으며 이후에도 계속 변환할 수 있습니다. 변환 프로그램은 GRAMSC32.EXE라는 별도의 애플리케이션이며 Windows에서 GRAMS/AI와 독립적으로 실행할 수 있습니다. File(파일) > Import/Export(가져오기/내보내기) 명령은 변환 후 자동 종료되는 특수 명령줄 스위치와 함께 이 애플리케이션을 실행합니다.

Report(보고서): Data Handling(데이터 취급) 버튼을 클릭하면 보고서를 저장할 수 있습니다. 보고서는 구성 요소 메소드에 대한 구성 요소 결과 또는 정량적 검색 메소드에 대한 라이브러리 검색 결과를 자세히 설명하는 *.PDF 파일입니다. 보고서는 Results 디렉터리에 저장되며 MicroLab Lite를 사용하여 동기화할 수 있습니다.

Previous results(이전 결과)

MicroLab Mobile의 이전 결과를 통해 수집을 수행한 후 데이터를 검토할 수 있습니다. 이전 결과는 Home(홈) 화면에 있는 메뉴 아이콘 아래에서 이용할 수 있습니다. 이전에 수집한 시료 목록이 이전 결과 화면에 표시됩니다. 목록에서 이동하려면 목록을 클릭하고 드래그하여 스크롤하십시오.

Home(홈): 소프트웨어가 Home(홈) 화면으로 돌아갑니다.

View(보기): 보고자 하는 데이터 파일을 엽니다. 67페이지의 Reviewing Results(결과 검토) 섹션에 표시되는 Results(결과) 화면과 동일한 데이터를 볼 수 있습니다.

Report(보고서): Menu(메뉴) 버튼에서 Report(보고서) 버튼을 누르면 31페이지의 Reports(보고서) 페이지 섹션에 지정된 PDF 보고서가 생성됩니다.

MicroLab PC/MicroLab Lite

MicroLab PC/MicroLab Lite는 MicroLab Mobile 내에서 지원되는 데이터 분석보다 더 자세한 분석 기능을 제공합니다. 화면 크기로 인해 현재 MicroLab Mobile 소프트웨어에서는 스펙트럼이 표시되지 않습니다. MicroLab PC/MicroLab Lite에서는 스펙트럼을 보고 구성 요소 계산에 사용된 스펙트럼 영역을 검토할 수 있습니다. 데이터가 컴퓨터로 전송된 후에는(페이지 41페이지의 '편집한 메소드를 MicroLab Mobile로 전송' 참조, 결과 전송은 메소드 전송과 유사함), MicroLab PC 또는 MicroLab Lite의 Previous Results(이전 결과) 기능으로 검토할 수 있습니다. MicroLab PC Home(홈) 화면에서 Previous Results(이전 결과) 버튼을 클릭하면 모든 시료 파일 이름이 나열된 화면이 표시됩니다.

Home(홈): 소프트웨어가 Home(홈) 화면으로 돌아갑니다.

Import(가져오기): Results(결과) 화면에 항목을 추가할 수 있습니다.

Report(보고서): 메소드의 Reports(보고서) 페이지에 보고서 템플릿이 배정된 경우 시료에 대한 보고서를 생성합니다. 메소드에 보고서 템플릿을 배정하려면 78페이지를 참조하십시오.

View(보기): 소프트웨어가 Sample Results(시료 결과) 화면으로 돌아갑니다. 시료 결과는 MicroLab 소프트웨어에서 항상 검토할 수 있습니다.

Overlay(오버레이): Overlay(오버레이) 버튼은 하나 이상의 스펙트럼 파일을 선택한 경우 표시됩니다. 최대 5개의 시료 스펙트럼을 겹치거나 누적한 형태로 비교하여 볼 수 있습니다. 함께 보려면 파일의 가로 좌표 유형이 같아야 합니다.

Export(내보내기): 수집한 데이터를 다른 분석 소프트웨어 패키지로 내보낼 수 있습니다. 내보낸 파일은 시료와 동일한 파일 이름에 확장자만 *.asp 또는 *.spc로 저장됩니다. Results(결과) 디렉터리에 저장됩니다.

Diag Info(진단 정보): MicroLab 소프트웨어에 연결된 분광계의 진단 정보를 표시합니다.

참고

이전 결과 섹션에서 소프트웨어는 결과 섹션이 작동하는 대로 작동합니다. 화면이 동일합니다. 운영자는 이 기능을 통해 데이터를 검토할 수 있습니다.

결과 검토

Results(결과) 화면

실행이 완료되면 표시되는 결과 화면은 선택한 메소드 유형에 따라 달라집니다.

Components Method Type(구성 요소 메소드 유형)

Test2				Sample	←	→
Name	Value	Low Threshold	High Threshold			
Test	Outside Data Range	0				
Test2		0.15	0.32			

그림 1. 구성 요소 메소드 결과 화면.

구성 요소 메소드 검색 결과는 명확성을 위해 색상으로 구분되어 있습니다. 지정된 범위를 벗어난 결과는 빨간색으로 강조 표시되고 목록의 맨 위로 이동합니다.

- 녹색 결과는 시료가 조정 가능한 제한 내에 있음을 나타냅니다
- 노란색 결과는 시료가 수용 가능한 제한에 근접함을 나타냅니다
- 빨간색 결과는 시료가 수용 가능한 제한을 벗어났음을 나타냅니다

Results(결과) 표에는 시료명, 값, 낮음 및 높음 임계값이 표시됩니다

Data Collect Only Method Type(데이터 수집 전용 메소드 유형)

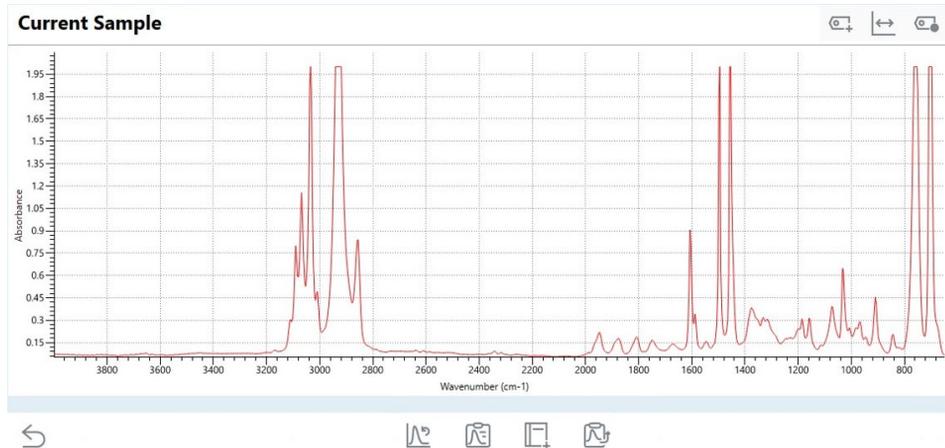


그림 2. Data Collect Only(데이터 수집 전용) 메소드 유형 결과 화면.

결과 검토

기본 Data Collect Only(데이터 수집 전용) 메소드 유형 창에는 MicroLab 결과 인터페이스가 표시됩니다(그림 2). 결과 창 상단의 도구 모음에는 데이터 표시를 조작하는 데 사용할 수 있는 다양한 아이콘이 포함되어 있습니다.

-  아이콘을 선택하여 홈 화면으로 돌아갑니다
-  아이콘을 선택하여 결과 스펙트럼에서 Data Labels(데이터 레이블)를 추가하고 삭제합니다

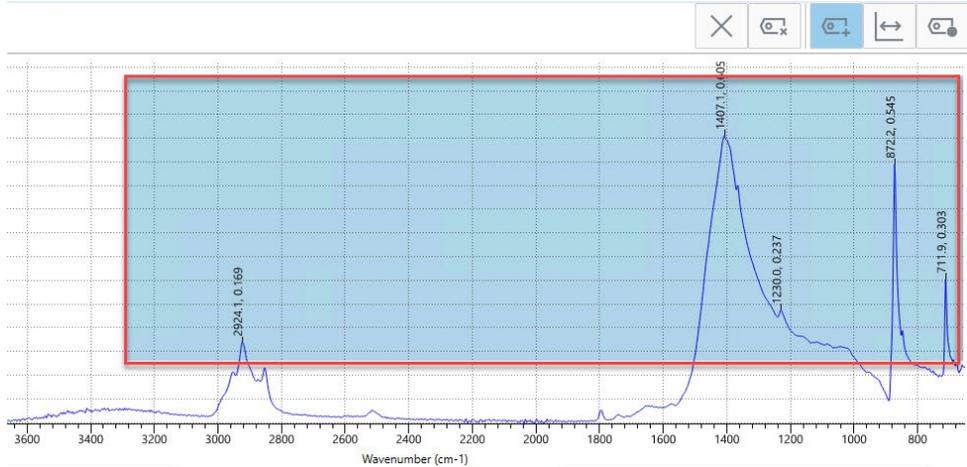


그림 3. Peak Picking(피크 선택) 데이터 레이블 기능.

- **Peak Picking(피크 선택):** 편의를 위해 **Data Labels(데이터 레이블)**  아이콘을 선택하고 선택 영역을 끌어서 관련 피크를 포함함으로써 데이터 레이블을 스펙트럼의 여러 피크로 동시에 추가할 수 있습니다. 이는 키보드 단축키 **Ctrl + F**를 통해 활성화할 수도 있습니다.
- 스펙트럼 표시를 기본 보기에서 압축 보기로 변경하려면  아이콘을 선택하십시오. 이 기능은 표시된 스펙트럼의 특정 영역에서 더 높은 명확성이 필요할 때 유용할 수 있습니다.
압축 보기의 경우:
 - **Position(위치)** 값은 압축 파수 및 정상 파수(x축) 사이의 경계 위치를 정의합니다
 - **Factor(요인)** 값은 선택한 파수(x축) 위치의 왼쪽 영역에 적용되는 압축 요인을 정의합니다
- 적용된 데이터 레이블의 가시성과 형식을 편집하려면  아이콘을 선택합니다

결과 검토

데이터 표시 하단의 도구 모음에는 데이터를 처리하고 소프트웨어를 통해 탐색하는 데 사용할 수 있는 다양한 아이콘이 포함되어 있습니다.

- 데이터를 다시 분석하려면  아이콘을 선택합니다(이전 결과에 대해서만 사용 가능)
- 보고서를 생성하려면  아이콘을 선택합니다.
- 현재 결과를 라이브러리에 추가하려면  아이콘을 선택합니다.
- 현재 보고서를 전자 서명하려면  아이콘을 선택합니다. (21 CFR Part 11 모드에만 해당).
- 결과 파일을 내보내려면  아이콘을 선택합니다.
- 다음 시료에 대한 워크플로를 시작하려면  아이콘을 선택합니다(측정 워크플로의 일부로만 사용 가능).
- 시료 ID와 수집 전에 첨부된 주석을 표시하려면  아이콘을 선택합니다.

'Classic View(클래식 보기)' 데이터 수집 전용 그래픽 창

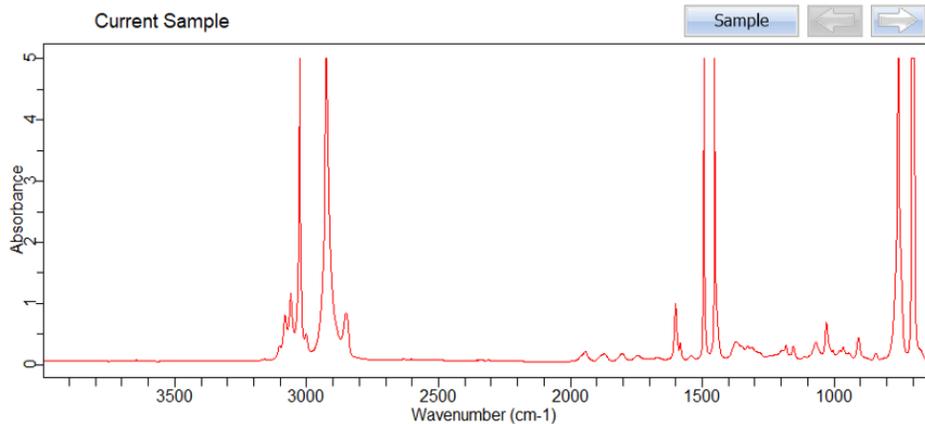


그림 4. Data Collect Only Classic View(데이터 수집 전용 클래식 보기) 메소드 유형 결과 화면.

Data Collect Graphics Window(데이터 수집 그래픽 창)의 Classic View(클래식 보기)는 "Data Collect Only(데이터 수집 전용)" 메소드 유형을 선택한 경우 결과를 조회할 수 있는 대안 방법을 제공합니다. 이 기능을 켜거나 끄려면 메소드 편집 창에서 "Enable Classic View(클래식 보기 사용)" 확인란을 선택하십시오.

Qualitative Search Method Type(정성적 검색 메소드 유형)

결과 검토

Results:

Warning	Rank	Quality	Library	CAS#	Name
	1	0.18933	TIC TAC (523)		Table Salt
	2	0.26196	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (280)		Natural-Rubber - Blair Run#5
	3	0.30146	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (139)		Gasket-SBR 10053333 Run#4 edge
	4	0.36079	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (278)		Natural-Rubber - Blair Run#3
	5	0.38287	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (279)		Natural-Rubber - Blair Run#4
	6	0.38513	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (138)		Gasket-SBR 10053333 Run#3 edge
	7	0.42246	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (258)		Natural-PureGum-Rubber - US Flex Run#2
	8	0.44293	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (347)		Neoprene U S Flexible Run#3

Rank 10

그림 5. 정성적 검색 메소드 결과 화면.

정성적 검색 결과는 명확성을 위해 색상으로 구분될 수 있습니다.

- 녹색 결과는 품질 한계 임계값 미만의 검색 결과 수를 나타냅니다
- 주황색 결과는 품질 한계 임계값과 품질 중요 임계값 사이의 라이브러리 검색 결과 수를 나타냅니다
- 빨간색 결과는 품질 중요 임계값을 초과하는 검색 결과 수를 나타냅니다.

색상 코딩 임계값 설정에 대한 자세한 내용은 21페이지의 메소드 섹션을 참조하십시오.

Viewing spectra regions(스펙트럼 영역 보기)

특정 영역의 시료를 비교할 수 있는 MicroLab 소프트웨어의 고유 기능입니다. 개별 매개 변수를 두 번 클릭하면 됩니다. 참조 스펙트럼이 시료 스펙트럼과 함께 표시됩니다. 우측 상단 모서리의 왼쪽 화살표와 오른쪽 화살표를 이용하여 범주 간에 전환할 수 있습니다. Overlay(오버레이) 또는 Stacked(누적) 보기에서 시료 스펙트럼과 참조 스펙트럼을 비교할 수 있습니다.

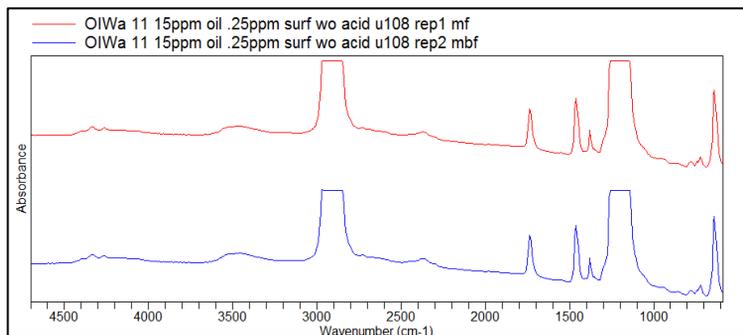


그림 6. Stacked(누적) 옵션의 예.

결과 검토

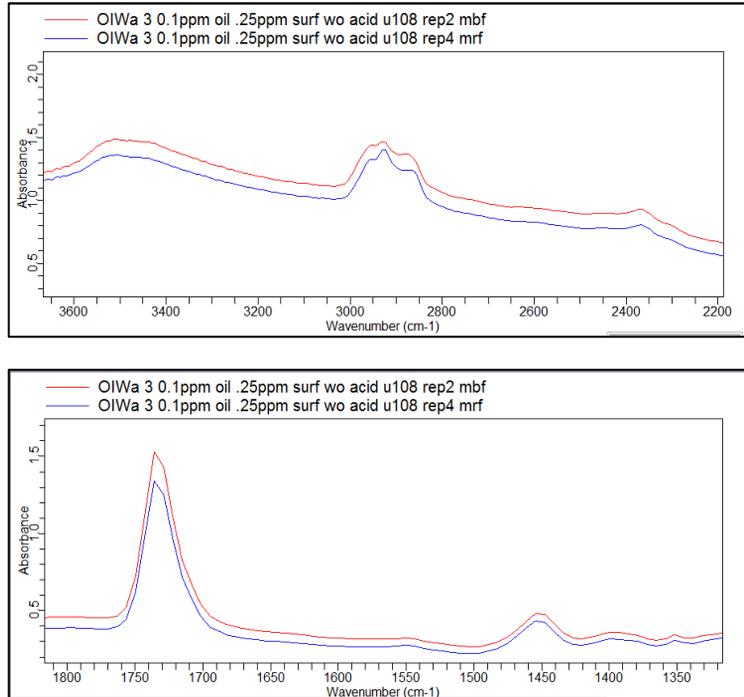


그림 7. Overlay(오버레이) 옵션의 예.

참고

범주 사이를 전환하려면 마우스 오른쪽 버튼을 클릭하고 원하는 옵션 중 하나로 스크롤합니다. 선택한 보기가 화면에 반영됩니다.

세부 정보

시료의 스펙트럼을 보려면 **Details(디테일)**를 클릭합니다. MicroLab 소프트웨어가 시료 스펙트럼을 참조 스펙트럼과 비교하여 표시합니다.

Qualitative search(정성적 검색)를 선택하면 스펙트럼 아래의 표에 품질별로 순위가 매겨진 라이브러리 검색 결과 수가 표시됩니다.

또한 다음 탭이 표시됩니다.

- **TextFind(텍스트 찾기)**: 이름이나 CAS 번호를 통해 특정 라이브러리 항목을 검색할 수 있습니다. 선택한 라이브러리 입력 스펙트럼은 세부 정보 탭의 시료 스펙트럼과 대조됩니다. 또한 이 항목은 라이브러리 품질 검색 결과 수 목록의 맨 위에 표시됩니다
- **Residual(잔류물질)**: 선택한 라이브러리 검색 결과에 비교하여 현재 분석된 시료를 잔류물질로 표시합니다

결과 검토

참고

스펙트럼의 어느 부분이라도 확대할 수 있습니다. 마우스나 터치패드를 사용하여 그래프를 클릭하고 원하는 부분을 강조 표시합니다. 화면이 확대된 부분에 따라 자동으로 변경됩니다.

전체 스펙트럼으로 돌아가려면 마우스 오른쪽 버튼으로 한 그래프를 클릭하고 Undo Zoom(확대/축소 취소)을 클릭합니다.

Params(파라미터)

Params(파라미터)를 클릭하여 다음 탭을 확인하십시오:

- Collect Parameters(수집 파라미터): 메소드 파라미터 요약을 표시합니다
- Analysis Parameters(분석 파라미터): 수집된 데이터의 분석 요약을 표시합니다

Data handling(데이터 취급)

다음 기능에 액세스하려면 Data Handling(데이터 취급)을 클릭합니다.

Report(보고서): 메소드의 Reports(보고서) 페이지에 보고서 템플릿이 배정된 경우 시료에 대한 보고서를 생성합니다. 보고서는 사전 설정된 파라미터를 요약하고 적절한 경우 기준 오일 또는 ASTM(American Society for Testing and Materials) 메소드와 비교하여 관련 단위로 결과를 보여줍니다. 메소드에 보고서 템플릿을 배정하려면 78페이지를 참조하십시오.

Add To a Library(라이브러리에 추가): 시료 스펙트럼을 적절한 라이브러리에 추가할 수 있습니다. 라이브러리에 액세스하려면 'Browse(찾아보기)'를 클릭합니다. 사용 가능한 라이브러리가 나열된 목록이 표시됩니다.

Add To Library(라이브러리에 추가)를 클릭하면 프로세스가 완료됩니다. 사용자 라이브러리에 새 스펙트럼을 추가하면 소프트웨어에서 후속 시료가 유사한지 판단할 수 있습니다.

Export(내보내기): 수집한 데이터를 다른 분석 소프트웨어 패키지로 내보낼 수 있습니다.

Re-Analyze(재분석): 현재 확인 중인 데이터를 다른 메소드로 계산할 수 있습니다. 이 기능은 시료 데이터를 다시 수집할 수 없을 때 유용합니다.

참고

재분석 기능은 선택한 메소드와 동일한 스펙트럼 분해능으로 수집된 데이터에만 사용해야 합니다. 스펙트럼 분해능 차이는 정량 결과에 영향을 줄 수 있습니다.

E-Sign(전자 서명)

이 기능은 21 CFR Part 11 환경에서만 사용할 수 있으며 전자 서명을 적용하려면 E-sign(전자 서명)을 클릭합니다. 자세한 정보는 59페이지를 참조하십시오.

결과 검토

21 CFR Part 11

메소드 또는 결과를 실행 또는 편집할 때 수행하는 작업 목록이 표시됩니다. 자세한 정보는 61페이지를 참조하십시오.

GRAMS 로 스펙트럼 가져오기

데이터를 SPC 형식으로 가져오기:

- 1 컴퓨터에서 GRAMS/AI를 열고 **File(파일) > Import/Export(가져오기/내보내기)**를 클릭합니다. ASCII 파일 변환기를 선택합니다. **Import(가져오기)** 버튼을 클릭합니다
- 2 드라이브와 디렉터리를 탐색하여 가져오려는 파일을 찾습니다. 파일을 가져올 때 대부분의 파일 변환기는 특정 입력 파일 이름 확장자를 찾습니다. 예를 들어 ASCII 변환기는 *.ASP 확장자가 있는 파일을 찾습니다. (필요한 경우 파일 유형을 모든 파일(*.*)로 바꾸십시오.)

Ctrl 키를 누른 상태에서 각 파일 이름을 클릭하면 여러 파일을 선택할 수 있습니다.

Open(열기)을 클릭합니다. File Import(파일 가져오기) 대화 상자에 가져올 파일의 이름이 표시됩니다(하나 이상의 파일을 가져오는 경우 첫 번째 파일 이름이 표시됨).

- 3 원하는 경우 파일 이름을 바꾸십시오. 새로 생성된 파일을 다른 디렉터리에 쓰려면 전체 디렉터리 경로를 파일 이름 앞에 붙입니다. 그렇게 하지 않으면 ASP 파일과 같은 폴더에 저장됩니다. (출력 디렉터리에 대한 읽기/쓰기 액세스 권한이 있어야 합니다.)
- 4 출력 파일 유형 목록에서 실험 키 확장자를 선택합니다. 기본 Spectra(*.spc)로 설정된 상태로 두십시오
- 5 Output Rename(출력 이름 바꾸기) 옵션을 선택합니다. **Manual(수동)**로 두십시오
- 6 **Auto-open(자동 열기)**을 클릭하여 변환된 파일을 자동으로 GRAMS/AI에서 엽니다. (Auto-open(자동 열기)으로는 여러 파일을 열 수 없으며 마지막으로 변환된 파일에만 적용됩니다.)
- 7 File Import(파일 가져오기) 대화 상자에서 **OK(확인)**를 클릭합니다

파일이 변환되면 GRAMS 변환 애플리케이션이 가져올 파일을 읽고 디스크에 새로운 파일을 씁니다. 변환 프로세스가 완료되면 File(파일) > Open Trace(트레이스 열기) 명령을 사용하여 파일을 GRAMS/AI로 로드할 수 있습니다.

변환이 진행되면서 메시지나 오류가 있으면 표시됩니다. 여러 파일을 변환하는 경우 GRAMS/AI 또는 다른 Windows 프로그램으로 다시 전환할 수 있으며 이후에도 계속

결과 검토

변환할 수 있습니다. 변환 프로그램은 실제로 GRAMSC32.EXE라는 별도의 애플리케이션이며 Windows에서 GRAMS/AI와 독립적으로 실행할 수 있습니다. File(파일) > Import/Export(가져오기/내보내기) 명령은 변환 후 자동 종료되는 특수 명령줄 스위치와 함께 이 애플리케이션을 실행합니다.

Done(완료): 샘플링 영역과 샘플링 장치를 세척하라는 메시지가 표시되는 화면으로 돌아갑니다. 그러면 분광계가 다음 시료를 준비할 수 있습니다. 'Done(완료)'을 클릭하면 Home(홈) 화면으로 돌아가지 않아도 여러 시료를 실행할 수 있습니다.

참고

이 옵션에서는 단위 정보를 변경할 수 없습니다. 다른 기계에서 시료를 실행하는 경우 Home(홈) 화면으로 돌아가야 합니다.

참고

분석을 중단하려면 HOME(홈) 버튼을 클릭합니다.

MicroLab 보고서 작성

메소드에 보고서 템플릿 지정

MicroLab에서는 사용자가 보고서 템플릿 목록에서 템플릿을 선택하고 특정 메소드에 연결할 수 있습니다. 각 보고서 템플릿은 만들 때 메소드 유형 또는 소프트웨어의 특정 기능에 지정됩니다.

메소드에 보고서 템플릿 지정하기:

- 1 Home(홈) 화면에서 Methods(메소드)를 선택한 다음 보고서 템플릿을 지정할 메소드를 선택합니다. Edit(편집)를 선택합니다
- 2 Method(메소드) 탭에서 Reports(보고서)를 선택합니다
- 3 *Available Report Templates(사용 가능 보고서 템플릿)* 목록에서 메소드에 연결할 하나 이상의 템플릿을 선택합니다. 그런 다음 Add(추가) 버튼을 클릭합니다
- 4 자동 보고서 생성을 원할 경우 *Auto-Report All Selected Reports(선택된 모든 보고서 자동 보고)* 확인란을 선택합니다. 그러면 데이터 분석을 마칠 때 관련된 모든 보고서가 생성됩니다
- 5 불필요한 보고서를 제거하려면 원하지 않는 보고서를 선택하고 Remove(제거) 버튼을 클릭합니다
- 6 모든 항목을 변경했다면 Save(저장) 버튼을 클릭하여 메소드를 저장하거나 Save As(다른 이름으로 저장)를 클릭하여 메소드를 다른 메소드 이름으로 저장합니다

결과 검토

새 보고서 템플릿 만들기

MicroLab PC를 설치하면 Microsoft Office Word 플랫폼에 추가 기능이 설치됩니다. 사용자는 이 추가 기능을 사용하여 MicroLab 소프트웨어 플랫폼 내에서 사용할 보고서 템플릿을 사용자 정의하거나 만들 수 있습니다.

참고

이 기능은 Microsoft Word 2010 이상 32 비트 설치 환경에서만 지원됩니다.

이 기능을 사용하려면 이 설명서에서 다루지 않는 Microsoft Word 지식이 필요합니다.

새 보고서 템플릿 만들기:

- 1 Microsoft Word를 열고 새 문서를 만듭니다
- 2 이 문서를 만든 다음 보기 메뉴/탭으로 이동합니다
- 3 보기 메뉴에 MicroLab Reporting(MicroLab 보고)이라는 새 기능이 추가되었습니다. 여기에는 두 버튼, Report Designer(보고서 디자이너)와 Perform Merge(병합 수행)가 포함되어 있습니다
- 4 문서 만들기를 시작하려면 Report Designer(보고서 디자이너) 기능을 선택합니다. MicroLab과 연결된 스키마가 화면 오른쪽에 메뉴로 나타납니다
- 5 필요한 보고서의 유형을 결정하고 Report Type(보고서 유형)에서 선택합니다. 보고서 유형은 다음과 같습니다
 - a Component Report(구성 요소 보고서): 메소드 편집기에서 메소드가 Component(구성 요소) 메소드로 지정된 경우에만 표시됩니다
 - b Qualitative Search(정성적 검색): 이 보고서 템플릿은 메소드 편집기에서 메소드가 Qualitative Search(정량적 검색)로 지정된 경우에만 표시됩니다
 - c Data Collect Only(데이터 수집 전용): 이 보고서 템플릿은 메소드 편집기에서 메소드가 Data Collect(데이터 수집)로 지정된 경우에만 표시됩니다
 - d Method Report(메소드 보고서): 메소드 매개 변수 인쇄를 위한 시스템 수준 보고서입니다
 - e Log Report(로그 보고서): 시스템 로그 파일을 인쇄하기 위한 시스템 수준 보고서입니다
- 6 MicroLab Reporting Parameters(MicroLab 보고 매개 변수) 블록에서 보고서 템플릿 이름을 지정합니다
- 7 Report(보고서) 필드는 MicroLab 소프트웨어와 관련된 매개 변수 필드로 구성되어 있습니다. 필드는 Results(결과)부터 Method(메소드) 매개 변수까지 사용자의 다양한 범주로 찾을 수 있습니다. 사용자는 다양한 범주를 잘 알아

결과 검토

두어야 합니다. 각 메소드 유형에는 자체의 Method(메소드) 범주 및 Result(결과) 범주가 있습니다. 예를 들어 Qualitative Search(정량적 검색) 메소드에는 이 메소드와 관련된 두 가지 범주, 즉, Hit List(적중 목록)와 Method Library(메소드 라이브러리)가 있습니다. 이 유형의 메소드와 관련된 정보 및 결과 파일은 여기에서 찾을 수 있습니다. Results(결과) 또는 Method(메소드) 범주에서 더 일반적인 정보를 찾을 수 있습니다

- 8 보고서에 새 필드를 추가하려면 원하는 필드를 클릭하여 보고서 템플릿 페이지로 끌어 놓습니다
 - a 추가된 파일은 요청된 정보만 인쇄합니다. 이 정보는 Word 파일에 포함되므로 사용자가 언제든지 텍스트를 추가하여 필드를 식별하거나 자료의 레이블을 정할 수 있습니다
 - b 사전 정의 테이블이 아닌 테이블을 사용할 경우 Report(보고서)에 오류가 발생할 수 있습니다
- 9 Component Reports(구성 요소 보고서) 및 Search Hit Lists(검색 결과 목록)에는 사용자가 간단히 클릭해서 보고서 템플릿으로 끌어 놓을 수 있는 Predefined Tables(사전 정의 테이블)가 구성되어 있습니다
- 10 작성된 보고서를 미리 보려면 언제든지 MicroLab Reporting(MicroLab 보고) 메뉴의 아래쪽에 있는 Preview Rep(보고서 미리 보기) 버튼을 선택합니다
 - a Perform Merge(병합 수행) 기능을 사용해도 수행할 수 있습니다
 - b 보고서에 필요한 모든 값이 표시되는지 확인하려면 보고서를 저장한 다음 보고서의 지정 메소드에 대해 실제 데이터를 실행하는 것이 좋습니다
- 11 Report(보고서)를 적절히 편집하면 파일을 MicroLab 보고서 템플릿 폴더로 저장해야 합니다. 이 폴더는 일반적으로 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\rptTemplates에 있습니다
 - a 파일을 docx 파일 형식으로 저장합니다
- 12 소프트웨어를 설치할 때 기본 제공되는 몇 가지 보고서 템플릿이 있으며 편집도 가능합니다. 하지만 편집한 보고서 템플릿은 Word의 "다른 이름으로 저장" 기능을 사용하여 다른 파일 이름으로 저장하는 것이 좋습니다. 그러면 원래 템플릿이 원본 그대로 유지됩니다

9

업데이트 및 문제해결

펌웨어 업데이트	81
문제해결	81

펌웨어 업데이트

애질런트에서는 시스템이 제공할 수 있는 기능을 수정하거나 확장하기 위해 펌웨어(FTIR 분광계에 내장된 소프트웨어) 업데이트를 릴리스하는 경우가 있습니다. 펌웨어 업데이트는 Microsoft Windows 실행 가능 파일로 제공됩니다. 이러한 파일은 고객에게 직접 제공되거나 Agilent MicroLab PC 애플리케이션 업데이트의 일부로 이용할 수 있습니다.

Agilent 4300 Handheld FTIR 펌웨어의 경우 업데이트가 제공되며 MicroLab Mobile Software 내에서 별도의 실행 파일로 설치됩니다. 시스템과 함께 제공된 해당 기기 작동 설명서를 참조하고 자세한 내용은 애질런트에 문의하십시오.

문제해결

초기화 실패

다음 오류 메시지가 표시되는 경우:

기기 초기화 실패:

기기에서 다음 오류 코드 반환: -2.

애플리케이션이 종료되면 기기의 전원을 껐다 다시 켜고 애플리케이션을 다시 시작하십시오.

소프트웨어를 열 때 분광기의 전원이 켜져 있고 USB 케이블이나 Bluetooth(해당하는 경우)를 통해 제어 PC에 연결되어 있는지 확인하십시오. 기기의 전원이 켜져 있는지 확인하십시오(녹색 LED 표시). MicroLab PC를 통해 4300 FTIR을 제어하는 경우 기기가 'Pass-Through(통과)' 모드에 있는지 확인하십시오. 4300 FTIR을 동기화하는 경우 기기가 USB를 통해 PC에 연결되어 있고 'Pass-Through(통과)' 모드에 있으며 MicroLab Lite 소프트웨어를 사용 중인지 확인하십시오.

업데이트 및 문제해결

보고서 템플릿 생성 실패

보고서 템플릿을 작성하거나 사용자 지정하기 위한 요구 사항 및 단계에 대한 자세한 내용은 79페이지를 참조하십시오.

게인 변경 사항이 저장되지 않음

메소드를 활성화하거나 데이터 수집을 시작할 때 업데이트된 게인 값이 저장되지 않고 기기 상태 표시기가 녹색에서 노란색으로 바뀌면 다음을 확인하십시오.

- MicroLab PC/MicroLab Mobile 소프트웨어의 **Methods(메소드)**에서 메소드를 선택하고 **Edit(편집)**을 클릭한 다음, **Instrument(기기)** 페이지로 이동하여 'Set Method Gain(메소드 게인 설정)' 확인란의 선택이 취소되어 있는지 확인하십시오
- **Diagnostics(진단)** 페이지(MicroLab OQ에서 또는 MicroLab PC/MicroLab Mobile의 **Advanced Features(고급 기능)**을 통해)에서 **Gain Adjust(게인 조정)**를 클릭하고 게인 값을 조정한 다음, **Set Instrument Default Gain(기기 기본 게인 설정)**을 클릭하여 해당 게인을 기기 기본값으로 저장하십시오.
Set Method Gain(메소드 게인 설정)을 선택하면 사용 중인 메소드의 게인만 저장됩니다

데이터베이스 액세스 문제

SDA 설치 후 서버에 연결하려고 할 때 이 오류 메시지가 표시되는 경우(21 CFR part 11 환경에서):

Error(오류): Server Connection Error(서버 연결 오류)

시나리오 1 설치의 경우 PC를 다시 시작하고 SDA를 다시 열어 서버를 성공적으로 연결하십시오.

시나리오 2 및 3 설치의 경우 네트워크에 PC가 표시되는지 확인하고 모든 방화벽을 비활성화한 후 PC를 다시 시작하십시오. SDA 서버에 다시 연결해 보십시오.
자세한 내용은 21 CFR part 11 설치 지침을 참조하십시오.

MicroLab PC 또는 MicroLab OQ에서 System Check(시스템 확인) 테스트를 실행하는 경우 System Check Database(시스템 확인 데이터베이스)와 Public Database(공용 데이터베이스) 모두에 액세스할 수 있는 그룹 및 프로젝트에 사용자가 할당되어 있는지 확인하십시오. 자세한 사항은 SCM 사용자 가이드를 참조하십시오.

부록 A: MicroLab 파일 유형

다음 표는 MicroLab 에서 사용하고 허용되는 다양한 파일 유형을 설명합니다.

표 1 MicroLab 파일 유형

파일 유형	파일 확장명	코멘트
애질런트 라이브러리 파일	*.a2l *.a2x *.lib	MicroLab PC/Lite 에서 라이브러리가 생성되면 세 파일이 모두 생성되어 함께 저장됩니다. 라이브러리를 내보낼 때는 세 파일이 모두 포함되어야 합니다. <ul style="list-style-type: none"> *.a2l 파일은 실제 라이브러리 내용을 포함합니다 *.a2x 파일은 관련된 빈 결과 홀더입니다 *.lib 파일은 식별을 위한 라이브러리 제목을 포함합니다
애질런트 메소드 파일	*.a2m	메소드 파일은 다음 메소드 유형 중 하나를 저장하는 데 사용됩니다. <ul style="list-style-type: none"> 데이터 수집 전용 또는 정성적(라이브러리) 검색 또는 구성 요소 유형 메소드
애질런트 결과 파일	*.a2r	스펙트럼 파일 형식이며 선택한 메소드 유형에 따라 가능한 세 가지 결과 파일 하위 유형 중 하나를 생성하십시오: <ul style="list-style-type: none"> 스펙트럼 결과 정규화된 스펙트럼을 가진 라이브러리 결과 구성 요소 결과 및 스펙트럼
애질런트 보안 설정 파일	*.a2s	이 파일은 사용자 로그인 설정과 비밀번호를 저장합니다. 내부 파일이므로 이동하거나 삭제해서는 안 됩니다.
MicroLab 호환 파일 유형		
스펙트럼 파일	*.aspr	MicroLab PC/Lite 는 이 스펙트럼 파일 유형을 보고 가져오거나 이 파일 유형을 자동으로 내보내거나 둘 다를 수행할 수 있습니다.
Thermo Galactic / GRAMS	*.spc	MicroLab PC/Lite 는 이 스펙트럼 파일 유형을 보고 가져오거나 이 파일 유형을 자동으로 내보내거나 둘 다를 수행할 수 있습니다.
GRAMS PLS1 Text Model	*.txt	GRAMS 모델 지침의 텍스트 형식은 구성 요소 메소드로 구현됩니다. 이 파일은 적절한 모델 구축 후 GRAMS IQ 소프트웨어에 의해 생성됩니다.
Eigen Vector Model	*.xml	MicroLab PC/Lite 는 XML 파일 형식을 사용하여 구성 요소 메소드 내에서 정량 결과를 생성합니다. PLS1 다변량 모델 유형에만 적용됩니다.
Agilent MicroLab Quant Model	*.mqm	MicroLab Quant 에 의해 생성되며 MicroLab Quant/PC/Lite 에서 구성 요소 메소드로 숫자 결과를 생성하는 데 사용할 수 있습니다.
MicroLab Quant 프로젝트	*.mqp	MicroLab Quant 워크플로를 저장하는 데 사용되며 MicroLab Quant 에만 적용됩니다.
Agilent MicroLab Expert Quant Model 파일	*.a2q	이 파일은 MicroLab PC 에 사용되며 MicroLab Expert 소프트웨어 패키지 v1.1 이상에서만 생성됩니다.

부록

이 페이지는 의도적으로 비워 두었습니다.

본 문서의 내용

다음은 이 설명서에서 다루는 내용입니다.

- 소개
- MicroLab Mobile
- MicroLab PC
- MicroLab Quant
- MicroLab OQ
- 21 CFR Part 11이 포함된 MicroLab
- 시료 측정
- 결과 검토
- 업데이트 및 문제해결

www.agilent.com

© Agilent Technologies, Inc. 2024

2024년 1월 제10판



0020-410K0

