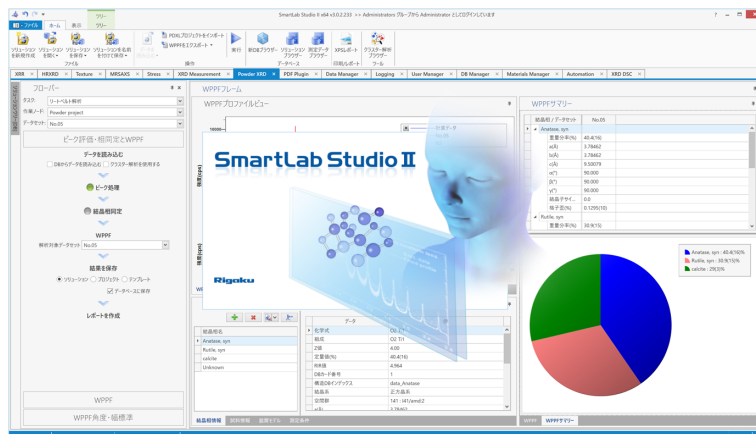


# 統合X線回折ソフトウェア

## SmartLab Studio II

### —新機能の紹介—



#### 1. はじめに

SmartLab Studio IIは、全自動多目的X線回折装置SmartLabによる測定、および得られたデータの解析を行う統合X線回折ソフトウェアです。以前<sup>(1)</sup>、ユーザーガイド、フローバー、チャートコントロール、レポートマネージャー、SQLデータベース<sup>\*1</sup>、プラグインモジュール、について紹介しました。今回は、2017年4月に販売開始となったSmartLab SEシステムにおけるSmartLab Studio IIの新しい機能について紹介します。

#### 2. 電子記録／電子署名（ER/ES）機能の充実

医薬品製造・販売における規制やガイドライン（21 CFR Part11, EU-GMP Annex11, 厚生労働省ER/ES指針）に完全対応しました。ユーザーIDとパスワードによるシステムへのアクセス制限と管理、ユーザー権限の設定、電子記録の完全性の保持、電子署名、すべての操作や動作の監査証跡、など必要なすべての機能を、User Manager プラグイン、Audit Trail Viewer<sup>\*2</sup> プラグイン、SQLデータベースが支援します。電子記録のバックアップ機能に加えて、アーカイブ機能も備えており、1台のPCで長期間に亘って測定・解析されたデータを保持しておくことが可能です。

#### 3. 新しいデータベースブラウザー

これまでのリスト形式のブラウザーから、Windows エクスプローラーと同等の機能を持つ新しいデータベースブラウザー（図1）を実装しました。データのコピー、フォルダーの作成、フォルダーへの移動、名前の変更など、SQLデータベース上のデータを、ファイルシステム上のファイルと同じように扱うことができます。データの共有設定により、データの作成者のみ閲覧可、などの設定も簡単に行えます。ER/ESモード<sup>\*3</sup>で使用する場合は、権限のないユーザーアカウントではデータの削除や上書きが禁止され、変更されたデータは同じ名前の新たなリビジョン番号で保存・管理されます。

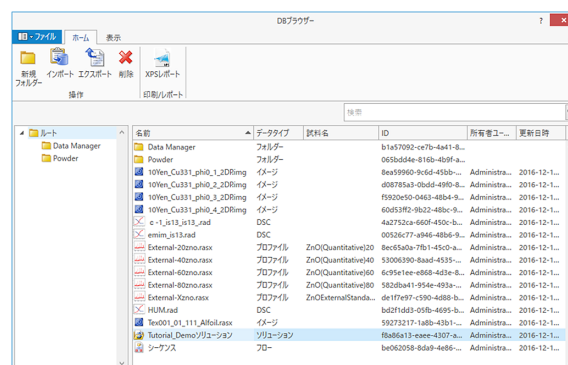


図1. 新データベースブラウザー。

#### 4. 解析プラグインへのデータ転送

SmartLab Studio IIの旧バージョンでは、測定から解析までを行うためには、①測定プラグインでデータ収集、②データを保存、③解析プラグインへ移動、④保存した測定データを開く、という手順を踏まなくてはなりませんでした。今回のバージョンから、①測定プラグインでデータ収集、②「[データを送る]」メニューから目的の解析プラグインを選択、するだけで、測定プラグインで表示されているデータを、解析プラグインで簡単に開くことができるようになりました。メインウィンドウに表示されているデータを開くため、データの開き間違いなどを軽減できるとともに、ユーザーの手順を簡略化します。

#### 5. 粉末XRDプラグインの新しい機能

##### 5.1. アプリケーションごとにフローバーを用意

統合X線粉末解析ソフトウェアPDXLでは、データ読み込みや保存、データ処理、レポート作成などの基本機能および、すべてのアプリケーションがひとつのフローバーに並べられており、ユーザーが必要な機能やアプリをフローバーから選択しながら解析を進める必要がありました。PDXLの後継の粉末XRDプラグインでは、結晶相同定、定量、結晶化度解析、リートベルト解析など、アプリケーションごとに必要な機能が並べられたフローバー（図2）が用意されており、ユーザーはフローバーに沿って解析を進めるだけで、データ読み込みから解析、結果保存、レポート作成までを行えます。異なるアプリケーションの間のデータの行き来も簡単に行えるよう設計されており、粉末回折に精通した人でも使いやすいフローバーとなっています。



図2. フローバー。

#### 5.2. XY マッピング表示

粉末XRDプラグインでのピークサーチ結果や解析結果などを、粉末XRDプラグイン内で簡単にXYマッピング表示できるようになりました。XYマッピング測定した多数の粉末回折データを読み込み、すべてのデータをまとめて解析した後、図3に示すようなマップデータを表示できます。XYマッピング測定のデータでなくても、X軸、Y軸にそれぞれ物理量（温度、軸の位置、など）を設定することで、様々なマッピングデータを表示することもできます。

#### 6. 2次元検出器を用いたTDIスキャン<sup>\*4</sup>データの解析

リガク社製HyPixシリーズ2次元検出器を用いてTDIスキャンを行うと、2次元データとともに、 $2\theta$ -I変換された1次元プロファイルデータが自動的に生成・保存されます。専用の2次元データ処理ソフトウェアを経由することなく、また3.の機能を使用すれば、2次元データ測定から直ちに粉末XRDプラグインなどの解析プラグインでデータを読み込むことができます。

#### 7. クラスタリング（クラスター解析）

SmartLab Studio IIでは、クラスター解析は1つのモジュールとして独立しています（図4）。粉末回折データだけでなく、反射率データ、ロッキングカーブデータ、2次元データなど、クラスタリングしたい多数のデータをクラスタリングモジュールで読み込めば、クラスター解析を行えます。クラスタリングの後、選択したクラスターに含まれるデータを解析プラグインで読み込んで、各種解析に進むこともできます。また、あらかじめレファレンスデータを設定しておく、レファレンスデータに類似したデータを、SQLデータベースやファイルシステムで設定したフォルダーから抽出する機能もあります。過去のデータから、必要なデータを抽出するのに便利な機能です。

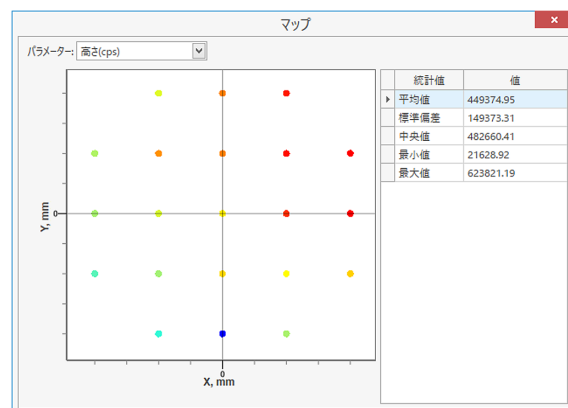


図3. XYマッピング表示。

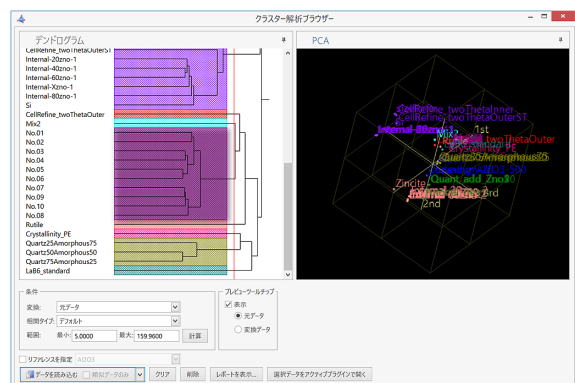


図 4. クラスター解析.

このように、新しい SmartLab Studio II を用いれば、測定や解析を簡単に行えるのはもちろんのこと、各種規制対応を含め、データの管理や扱いが非常に簡便になります。特に、多数のデータを扱う場面において必要と想定される機能が拡充され、レポート作成や分析時間短縮に貢献します。

#### \*1 SQL データベース

ユーザー設定情報や測定・解析データを効率的に一元管理する格納庫です。SmartLab Studio II では Microsoft SQL Server データベースを使用しています。ファイルシステムと異なり、セキュリティが強化されており、データベース内のデータの読み込み、削除などを管理できます。

#### \*2 Audit Trail Viewer

ER/ES モードにおいて、監査証跡を表示するプラグインです。このプラグインでは、監査証跡を一定の条件でフィルタリングする機能が備わっており、目的の監査証跡だけを簡単に表示することができます。

#### \*3 ER/ES モード

電子記録の完全性と電子署名付加機能が求められる規制において使用するモードです。このモードでは、解析データに対して、電子署名を行うことができます。署名された解析データをレポートにした場合、署名情報が付加されて出力されます。また、このモードで行った操作の履歴は、データベースに、監査証跡として記録されます。

#### \*4 TDI スキャン

1次元ストリップ検出器や2次元ピクセル検出器を利用した高速スキャン方法です。検出器の高い位置分解能を利用してスキャンを行うことで、ストリップやピクセルの見込み角度分の積算効果が得られるため、高速スキャンにおいても高強度のデータが得られます。

#### 参考文献

- (1) リガクジャーナル, **46** (2015), No. 1, 23–24.