

# KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

---

## 官能基解析

## 官能基解析

---

## 化合物の構造や官能基に基づいてクラスを特定または区別する方法

### 目的

この演習では、Analyzelt IR、Analyzelt Raman、および Analyzelt Polymer IR のナレッジベースを使用して、化学物質を特定または区別し、構造に基づいてピークを関連付ける方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ナレッジベースの指定方法
- 官能基のブラウズ方法
- 構造の関連付け方法

### 背景

IR および Raman のナレッジベースには、600 以上のバンド割り当てが含まれており、これは 200 以上の機能基や一般的な化学クラスに分類されています。

#### ナレッジベースを指定

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

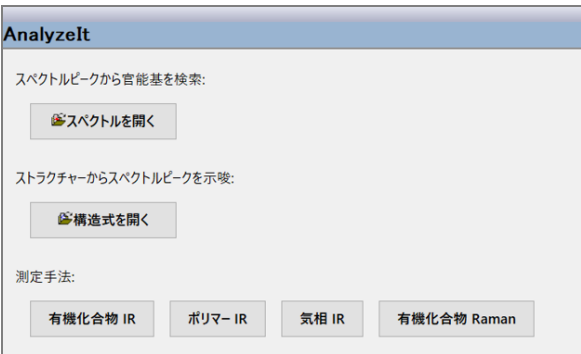
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Analyzelt IR

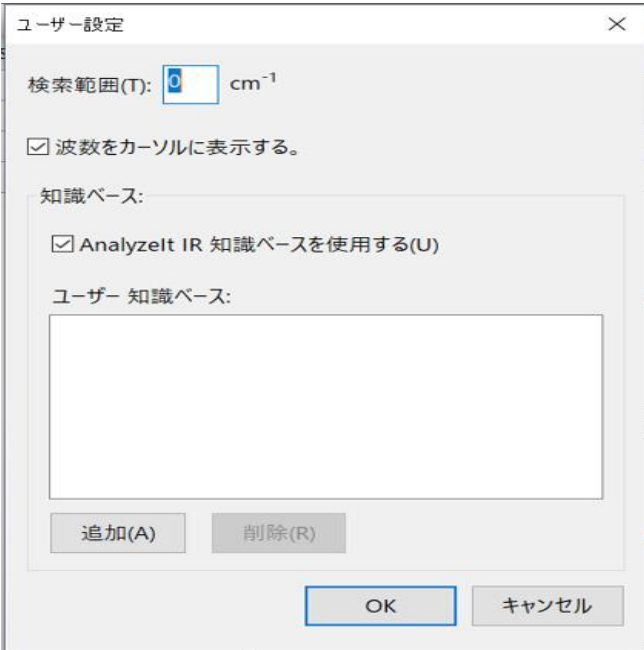
- Analyzelt IR Demo Structure.DSF

**KnowItAll 使用アプリケーション**

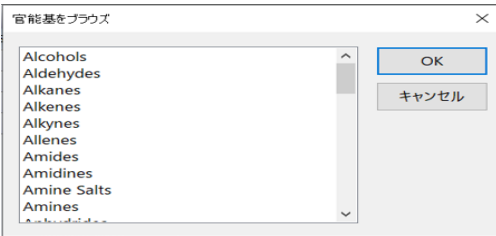
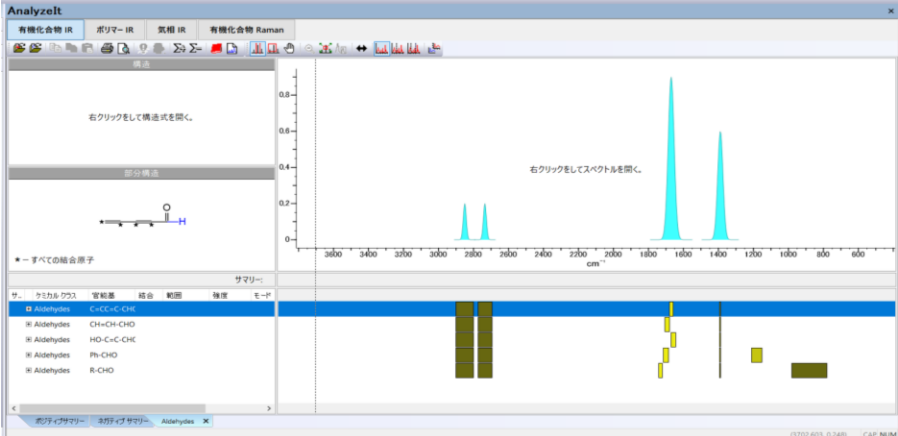
- Analyzelt™

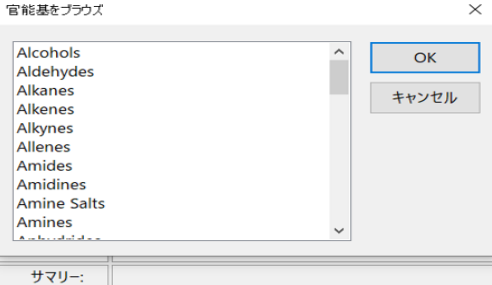
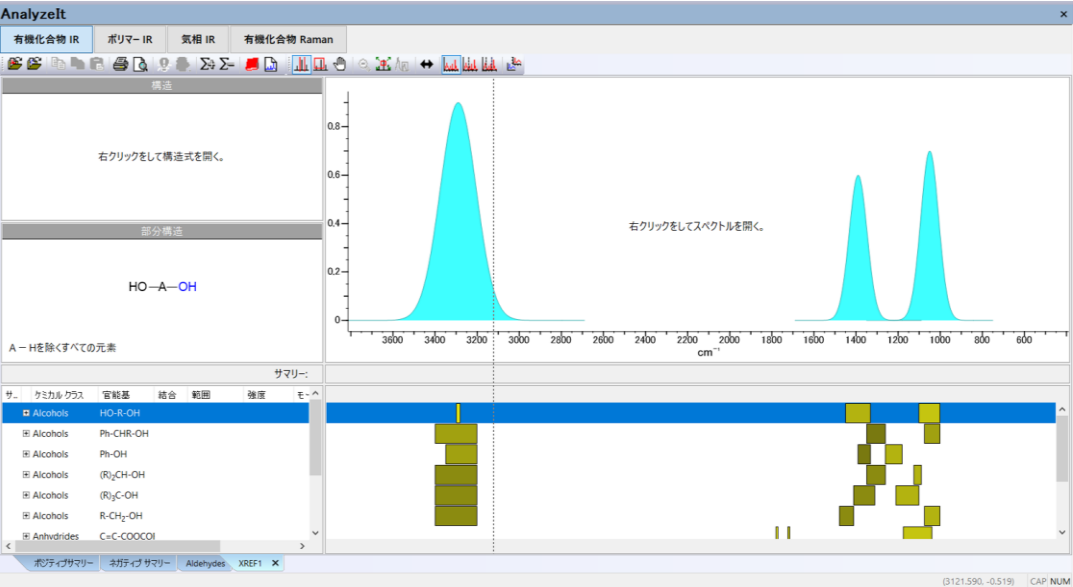
アクション	結果
-------	----

<p>1 <b>Spectral Analysis</b> (スペクトル解析) ツールボックスに移動します。</p> <p><b>Analyzelt</b> をクリックします。</p>	 <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Open Spectrum</b> (スペクトルを開く) - 任意のスペクトルファイルで始まるファイルを選択します。IR スペクトルを選択すると、KnowItAll はそれを <b>Organic IR</b> または <b>Polymer IR</b> アプリケーションに追加するかどうかを尋ねます。</li><li>• <b>Open Structure</b> (構造を開く) - 任意の構造ファイルで始まるファイルを選択します。構造ファイルを選択すると、KnowItAll はそれを <b>Organic IR</b> または <b>Organic Raman</b> アプリケーションに追加するかどうかを尋ねます。</li><li>• 同様に、<ul style="list-style-type: none"><li>○ <b>IR Organic - IR Organic</b> を選択すると、空の <b>Analyzelt IR</b> アプリケーションが開始されます。</li><li>○ <b>Polymer IR - Polymer IR</b> を選択すると、空の <b>Analyzelt Polymer IR</b> アプリケーションが開始されます。</li></ul></li><li>• <b>Raman Organic - Raman Organic</b> を選択すると、空の <b>Analyzelt Raman</b> アプリケーションが開始されます。</li></ul>
--	---

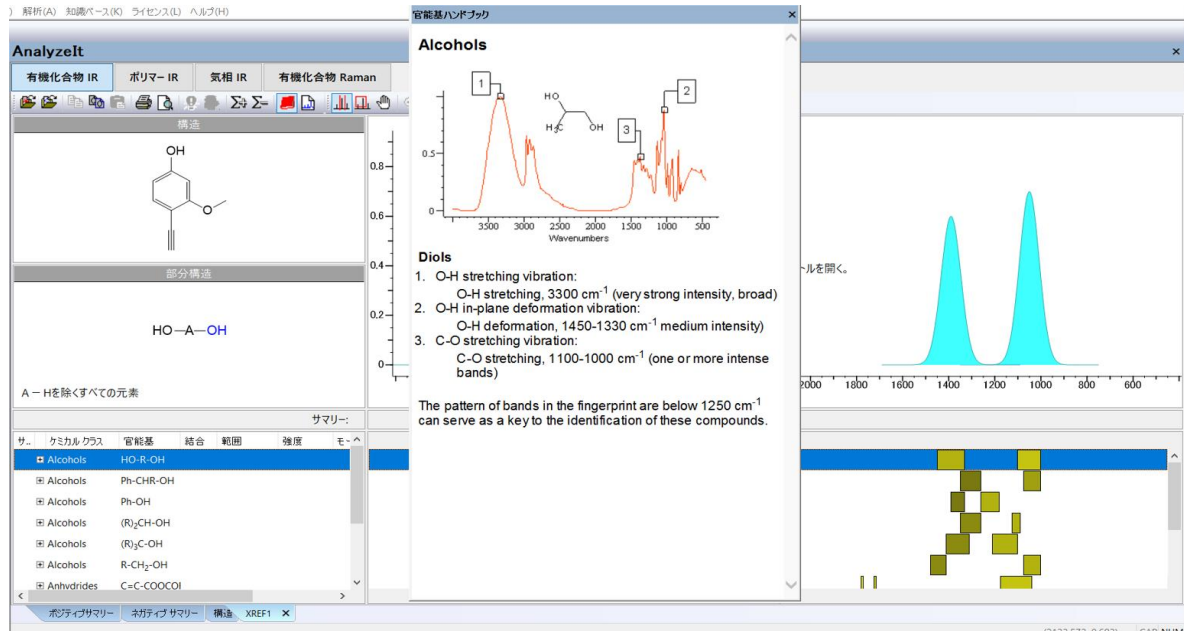
2	<p>それでは、<b>Organic IR</b> の手法から始めましょう。</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Organic IR</b> をクリックします。</li><li>• <b>File (ファイル) &gt; Preferences (プリファレンス)</b> を選択します。</li></ul>	<p><b>Preferences (プリファレンス)</b> のダイアログボックスが開きます。</p>  <p>許容範囲を設定することで、スペクトルのピークとデータベースの一致の精度を調整できます。さらに、スペクトルパネル内でカーソルが移動すると、波数 (x 軸の位置) に対応するマーカを表示することも選択できます。最後に、使用したいナレッジベースを選択するためのチェックボックスを使用してください。</p>
3	<p>「<b>UseAnalyzelt IR Knowledgebase</b>」が選択されていることを確認してください。</p> <p><b>OK</b> をクリックします。</p>	

### 官能基でブラウズ

	アクション	結果
1	<p><b>Analyze (分析) &gt; Browse a Functional Group</b> (官能基をブラウズ) を選択します。</p>	<p>「<b>Browse By Functional Group</b> (官能基でブラウズ)」のダイアログボックスが開きます。</p> 
2	<p>「<b>Aldehydes (酸無水物)</b>」を選択して、<b>OK</b> をクリックします。</p>	<p>「<b>Aldehydes (酸無水物)</b>」タブが <b>Analyze IR</b> の表示に追加されます。</p>  <p>アルデヒドグループ内の各官能基は、左下の<b>官能基データ</b>パネルに個別にリストされています。各エントリーには、分類、グループ、結合、範囲、強度、モード、ノートなどの情報が含まれています。</p> <p>右下の<b>バーチャート</b>パネルに表示される色付きのバーは、<b>官能基データ</b>パネルで選択された官能基クラスに関連するピークを表しています。バーは強度によって色分けされており、明るい色ほど強度が高いことを示しています。<b>スペクトル</b>パネルには対応するピークが表示されます。</p>
	アクション	結果

<p>3 再度、「<b>Analyze &gt; Browse a Functional Group</b>」を選択してください。</p>	<p>「<b>Browse By Functional Group</b> (官能基でブラウズ)」のダイアログボックスが開きます。</p> 
<p>4 「<b>Alcohols</b> (アルコール)」と「<b>Anhydrides</b> (酸無水物)」の両方を選択し、OKをクリックします。</p> <p><b>注記:</b> 最初のクラスを選択したまま、<b>Ctrl</b> キーを押しながら2番目のクラスを選択してください。</p>	<p>「XREF1」タブが <b>Analyzelt IR</b> の表示に追加されます。</p>  <p>このタブは、クラスの組み合わせが含まれる最初のタブであるため、「XREF1」とラベルが付けられています。</p>



アクション	結果
<p>3 「View &gt; Sadtler Handbook」を選択すると、特定の官能基に関連するハンドブック情報が表示されます。</p>	<p>「Sadtler Handbook」パネルでは、<b>Functional Group Data</b> パネルで選択した特定の官能基に関連する Sadtler Handbook of Reference Spectra - IR の情報が表示されます。</p>  <p>「Sadtler Handbook」パネルのタイトルバーをダブルクリックすると、パネルをメインディスプレイにドッキングしたり、ドッキングを解除したりすることができます。</p>



# 官能基解析

## ソフトウェアを利用した官能基解析を使った基本的なスペクトル解析の手順

### 目的

この演習では、**Analyzelt** アプリケーションを使用して基本的なスペクトル解析を行う方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ▶ ピークの相関を選択する方法
- ▶ **Summary+**および **Summary-**タブの使用方法

### 背景

**Analyzelt** アプリケーションは、200 以上の官能基のナレッジベースを活用して、スペクトルの解釈を支援することができます。このナレッジベースを使用することで、スペクトルや構造から官能基情報を取得したり、知識ベースに含まれる化学クラスをブラウズしたりすることができます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Analyzelt IR

- Peak Interpretation Example.dx (IR) (ピーク解釈例.dx (IR))

**KnowItAll** 使用アプリケーション


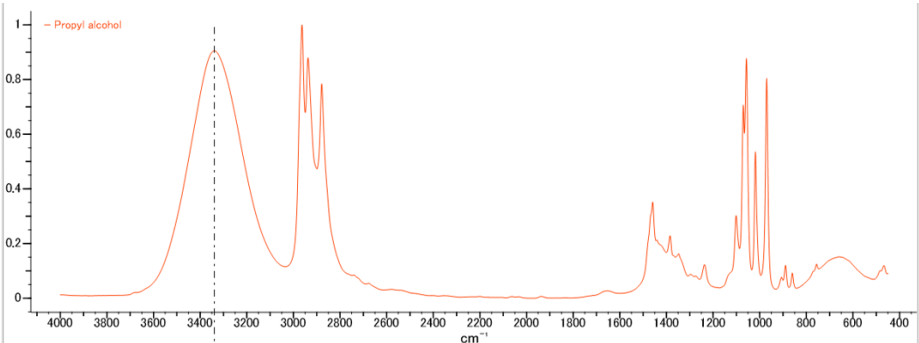
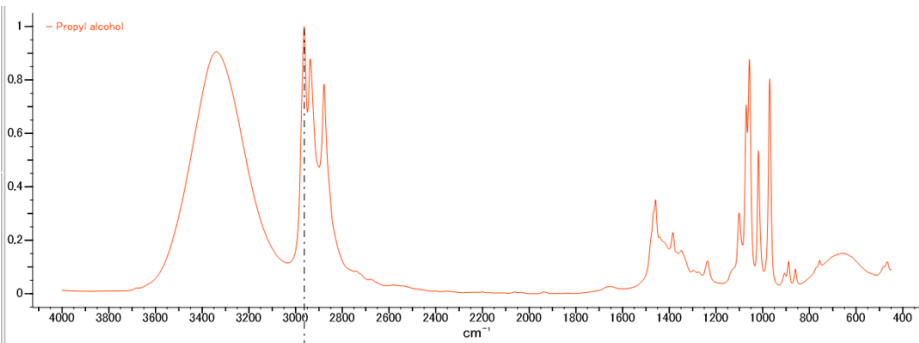
- Analyzelt™


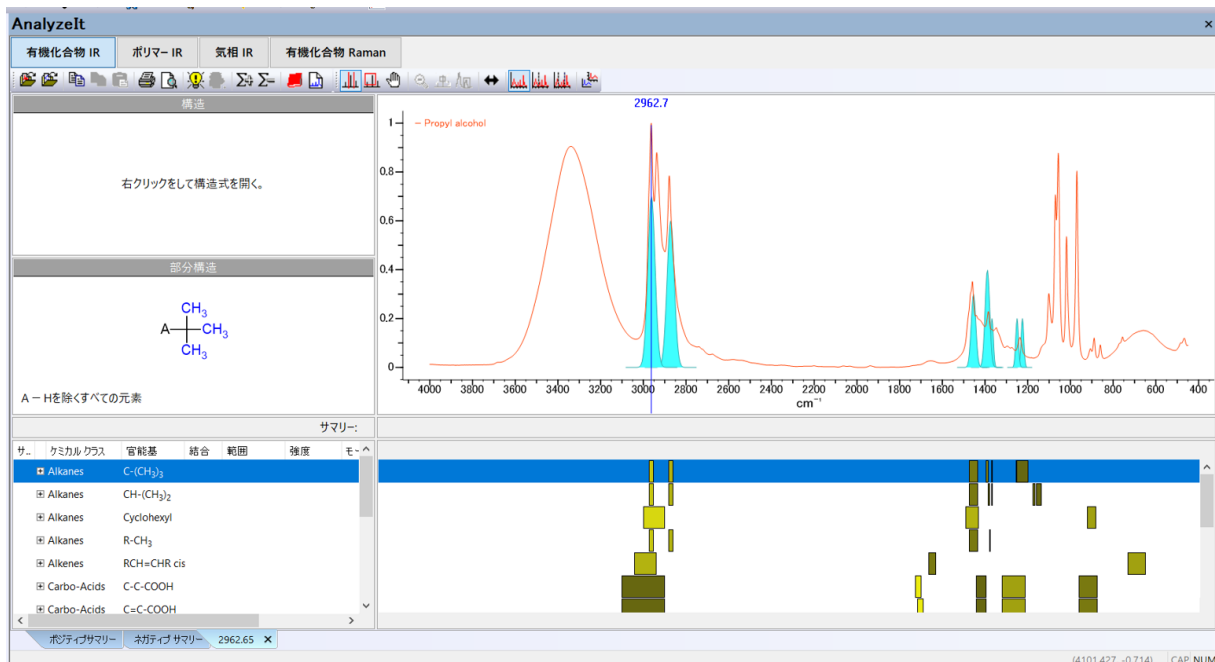
## スペクトルを開きます

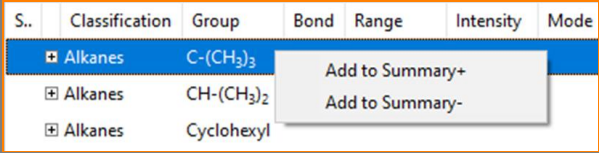
アクション	結果
1 スペクトル解析ツールボックスに移動し、 <b>Analyzelt</b> をクリックします。その後、 <b>Organic IR</b> を選択します。	
2 スペクトルパネルで右クリックします。	ポップアップメニューが表示されます。 <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; margin-top: 10px;">             ズームを戻す(Z)              全範囲を表示する(W)   Ctrl+0              スペクトルを開く(O)...   Ctrl+O           </div>
3 「 <b>Open Spectrum</b> (スペクトルを開く)」をクリックします。  <b>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR</b> フォルダに移動します。 「 <b>Propyl alcohol</b> (プロピル・アルコール)」を開きます。  <b>OK</b> をクリックします。	スペクトルが表示されます。 

## スペクトルを解析

アクション	結果
-------	----

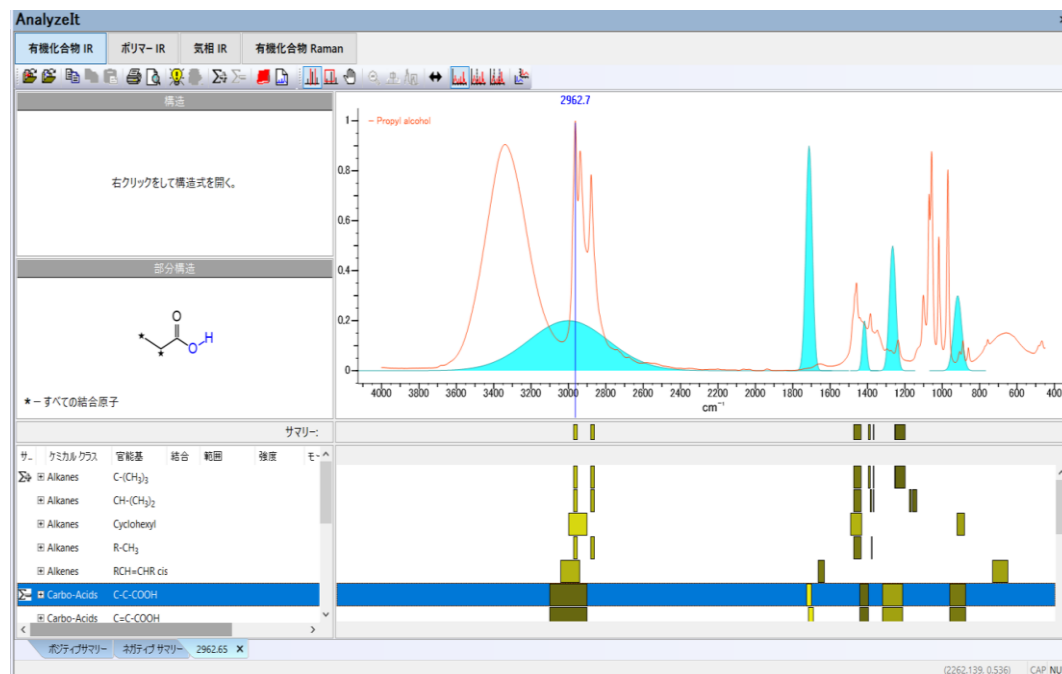
1	<p>ツールバーの「<b>Suggest</b>」ボタンをクリックします。</p>	<p>アプリケーションは解析対象のピークを自動的に選択します。</p>  <p>一般的には、相関解析を行う場合は、<b>1500</b>以上のウェーブナンバーを持ち、ユニークで強いピークから始めることが良いです。<b>Analyzelt</b>アプリケーションでは、適切な出発点を選ぶために一連のルールを使用しています。</p>
2	<p>まず、再度「<b>Suggest</b>」ツールバーのボタンをクリックしてください。</p> <p><b>注記</b>：スペクトルパネルをクリックすることでもピークを選択することができます。</p>	<p>別のピークが提案されます。</p>  <p>「<b>Suggest a Peak</b>」ツールバーのボタンを繰り返しクリックすると、アプリケーションは提案された出発点を順に切り替えます。</p>

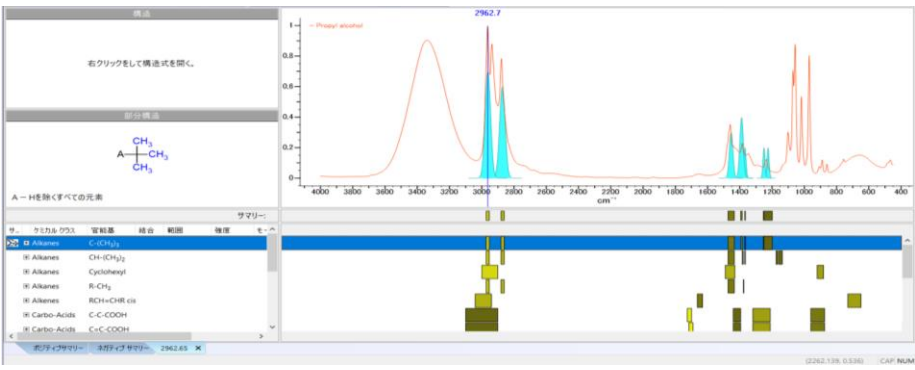
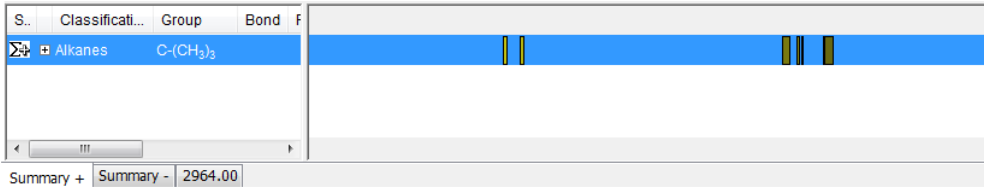
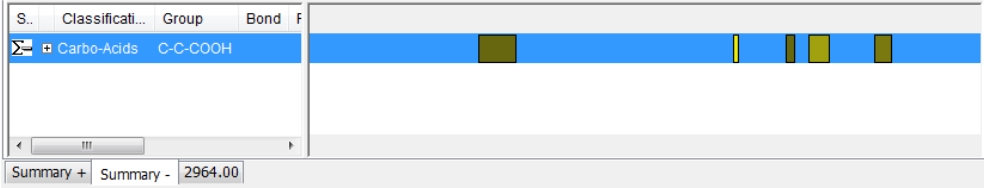
	アクション	結果
3	<p>「Suggest」をクリックし続けて、2番目のピーク（2964 の位置にあるピーク）が選択されるまで繰り返し、その後、「Correlate」ボタン  をクリックします。</p>	<p>ナレッジベースが解析された後、結果はウェーブナンバーでラベルが付けられたタブに表示されます。</p> 

	アクション	結果																												
4	<p><b>Functional Group Data</b> パネルで、アルカンの項目である C-(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> を選択します。</p> <p>右クリックして、<b>Summary</b> ポップアップメニューを開きます。</p> <p><b>注記</b> : <b>Summary+</b> および <b>Summary-</b> タブは自動的に作成され、測定されたスペクトルと一致するかどうかや、一致しないかどうかを追跡するために提供されています。</p>	 <table border="1"><thead><tr><th>S..</th><th>Classification</th><th>Group</th><th>Bond</th><th>Range</th><th>Intensity</th><th>Mode</th></tr></thead><tbody><tr><td>☑</td><td>Alkanes</td><td>C-(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>☒</td><td>Alkanes</td><td>CH-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>☒</td><td>Alkanes</td><td>Cyclohexyl</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></tbody></table> <p>The screenshot shows a table with columns: S., Classification, Group, Bond, Range, Intensity, Mode. The first row is selected and has a context menu open with options 'Add to Summary+' and 'Add to Summary-'. The second row is 'Alkanes CH-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>' and the third is 'Alkanes Cyclohexyl'.</p>	S..	Classification	Group	Bond	Range	Intensity	Mode	☑	Alkanes	C-(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>					☒	Alkanes	CH-(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>					☒	Alkanes	Cyclohexyl				
S..	Classification	Group	Bond	Range	Intensity	Mode																								
☑	Alkanes	C-(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>																												
☒	Alkanes	CH-(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>																												
☒	Alkanes	Cyclohexyl																												

- 5 メチル基はスペクトルとよく相関しているため、「Add to Summary+ (Summary+に追加)」をクリックしてください。

これにより、ピークが **Summary+タブ**と **Summary Bar Chart** (サマリーバーチャートパネル) (スペクトル表示と **Bar Chart** (バーチャート) パネルの間) に追加され、**Functional Group Data** パネルのこのグループの横にサマリープラスの記号が表示されます。



	アクション	結果
6	次に、 <b>Functional Group Data</b> パネルで最初のカルボン酸エントリ (C-C-COOH) を選択し、右クリックして <b>Summary</b> ポップアップメニューを開いてください。	
7	結果によれば、1740 の領域近くにも強いバンドが存在するはずですので、このグループを <b>Summary</b> -タブに移動してください。	
8	<b>Summary+</b> タブをクリックして、このタブに追加されたグループを表示します。	
9	<b>Summary-</b> タブをクリックして、このタブに追加されたグループを表示します。	
10	「File (ファイル)」を選択し、「Close (閉じる)」を選択します。	表示がクリアされます。

# 官能基解析

## Analyzelt™ for Polymer を使用した基本的なスペクトル解析の実行方法

### 目的

この演習では、Analyzelt アプリケーションを使用してポリマーの基本的なスペクトル解析を行う方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ▶ ポリマーサンプルからのスペクトル解析を行う方法

### 背景

Analyzelt Polymer IR Knowledgebase は、中赤外線領域における官能基の明確で迅速な検証と識別を提供することができます。このデータベースには 100 以上の官能基と数百の解釈周波数が収録されています。ポリマーのスペクトルから含まれる官能基を確認し、識別することができます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Analyzelt Polymer IR

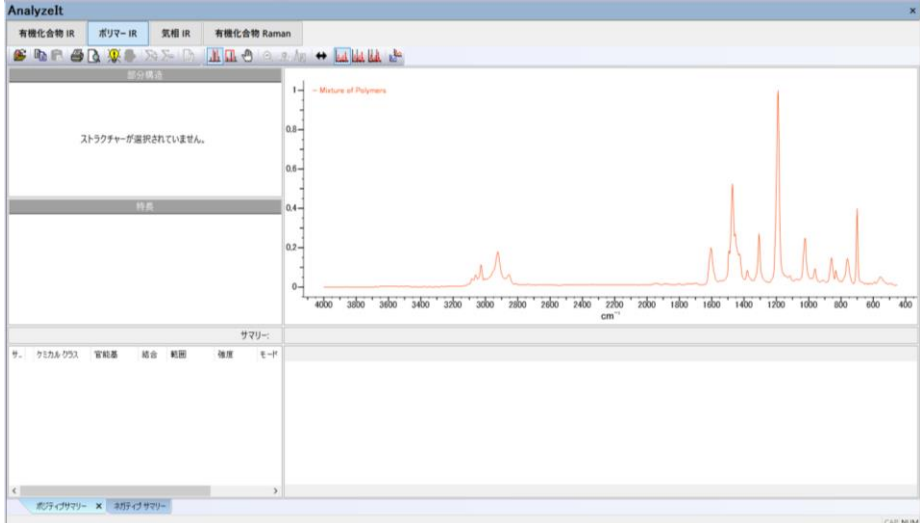
- (ポリマーの混合物)
- Polystyrene.irf


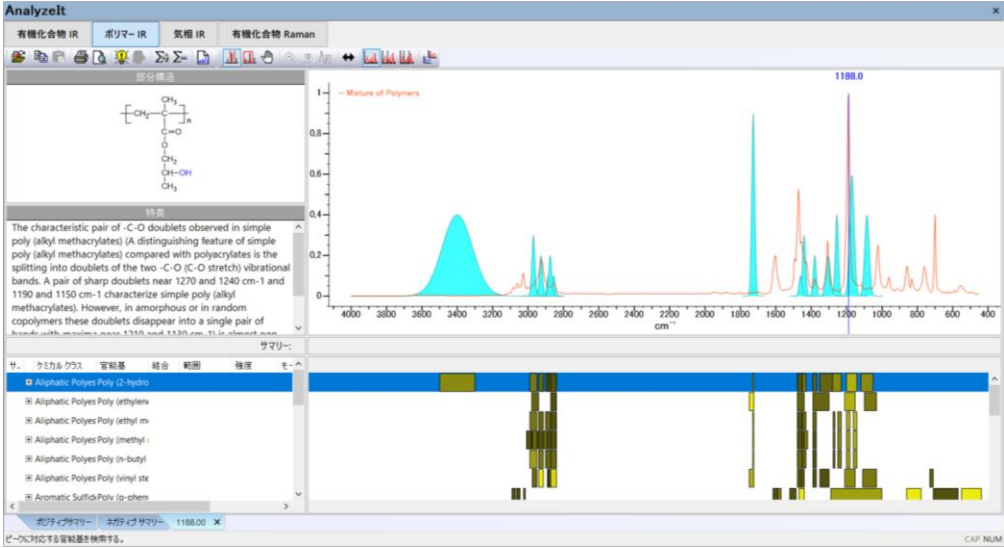
**KnowItAll 使用アプリケーション**

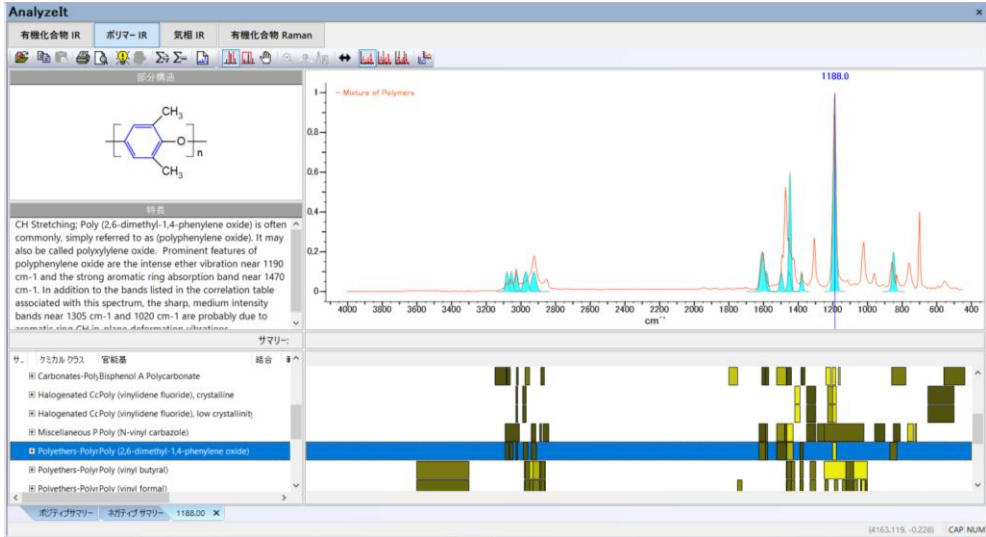
- Analyzelt™


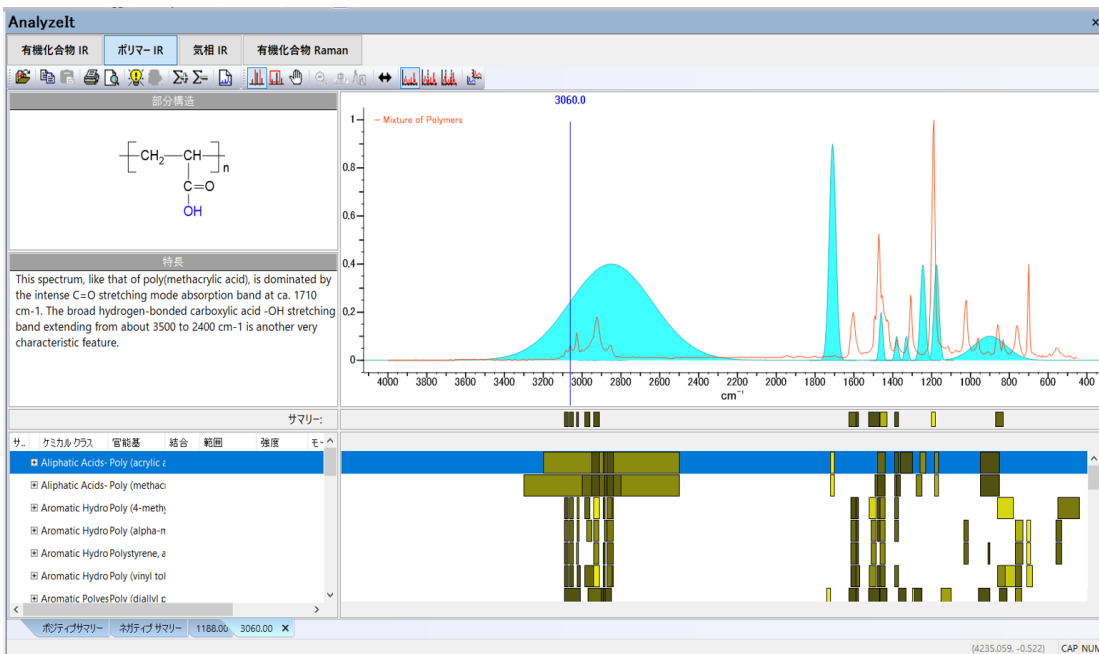


## 混合スペクトルを開いて解析

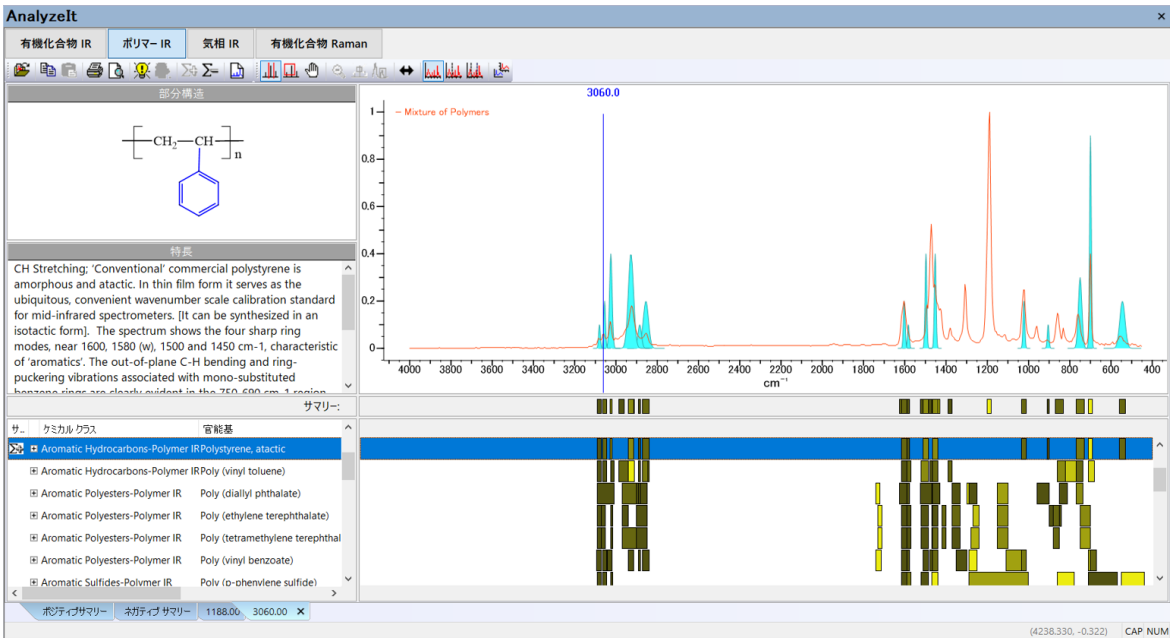
	アクション	結果
1	スペクトル解析ツールボックスに移動し、" <b>Analyzelt</b> "をクリックした後に" <b>Open Spectrum</b> "をクリックします。	
2	<p>"C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Analyzelt\Polymer IR."</p> <p>"Mixture of Polymers.irf"を開きます。</p> <p>ポップアップダイアログで"<b>Polymer IR</b>"ボタンをクリックします。</p> <p>注記：IRF、JCAMP など、特定のスペクトルファイルを探すには「<b>Files of type</b>」フィルタを使用できます。または、「<b>All files (*.*)</b>」を選択することもできます。</p>	<p>スペクトルが表示されます。</p> 

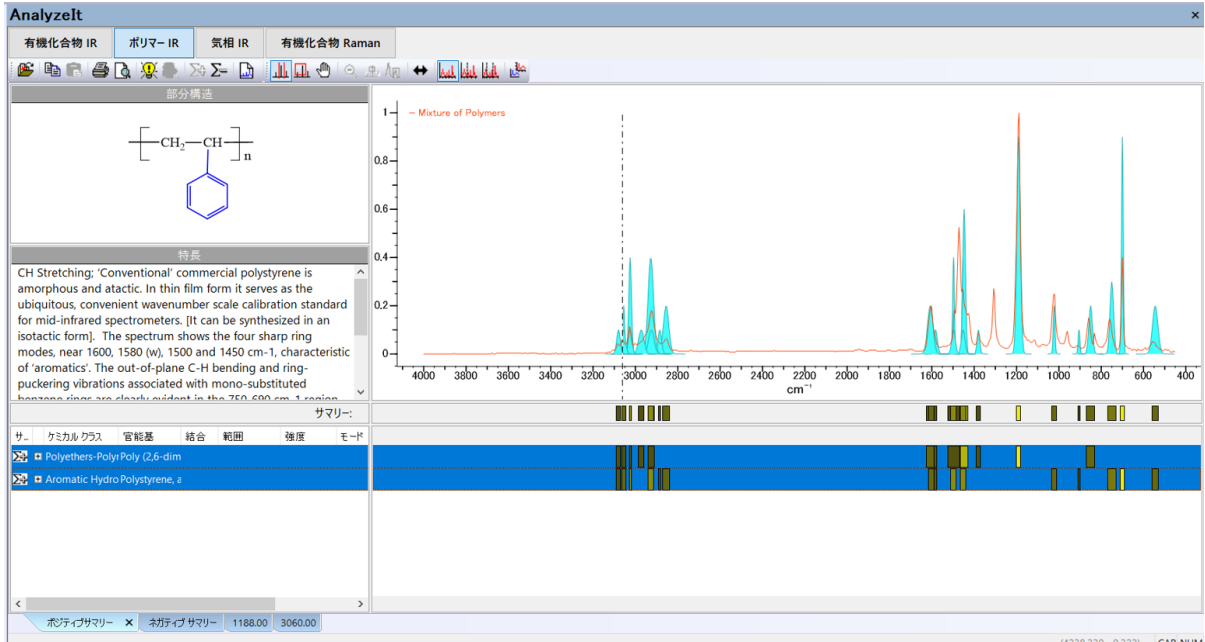
	アクション	結果
3	<p>"Suggest"ボタンを使用して、最も高いピーク（1188 の位置）を選択し、その後"Correlate"ボタン  をクリックします。</p> <p>または、ピークをダブルクリックすると、そのピークが選択され、同時に官能基の一致を検索するためのナレッジベースを開始することもできます。</p>	<p>ナレッジベースの解析が完了すると、結果がウェーブナンバー（1188）でラベルが付けられたタブに表示されます。</p>  <p>The screenshot shows the AnalyzeIt software interface. The main window displays an IR spectrum with a peak at 1188.0 cm⁻¹ highlighted. The interface includes a chemical structure of a polymer, a list of suggested functional groups, and a detailed peak analysis window.</p> <p>The chemical structure shown is a poly(methyl methacrylate) (PMMA) repeat unit: <math>\text{[-CH}_2\text{-C(CH}_3\text{)(COOCH}_3\text{)]}_n</math>.</p> <p>The peak analysis window provides the following information:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Functional Group:</b> Aliphatic Polyes Poly (2-hydro</li> <li><b>Wavenumber:</b> 1188.00</li> <li><b>Assignment:</b> Aliphatic Polyes Poly (2-hydro</li> <li><b>Assignment:</b> Aliphatic Polyes Poly (ethylene</li> <li><b>Assignment:</b> Aliphatic Polyes Poly (ethyl m</li> <li><b>Assignment:</b> Aliphatic Polyes Poly (methyl</li> <li><b>Assignment:</b> Aliphatic Polyes Poly (n-butyl</li> <li><b>Assignment:</b> Aliphatic Polyes Poly (vinyl ste</li> <li><b>Assignment:</b> Aromatic Sulfid Polv (p-phen</li> </ul> <p>The detailed peak analysis window also includes a description of the characteristic pair of -C-O doublets observed in simple poly (alkyl methacrylates) and their splitting into doublets of the two -C-O (C-O stretch) vibrational bands.</p>

	アクション	結果
4	<p><b>Functional Group Data</b> ペインの各エントリを順番に選択します。</p> <p>最初の Poly (2,6-ジメチル-1,4-フェニレンオキシド)がポリエーテルポリマーIRとして適切なマッチとなっていることに注意してください。</p>	 <p>The screenshot shows the Analyzelt software interface. On the left, there is a chemical structure of Poly(2,6-dimethyl-1,4-phenylene oxide) and a list of matches under the 'Summary' tab. The match for 'Polyethers-Poly(Poly (2,6-dimethyl-1,4-phenylene oxide))' is highlighted in blue. The main window displays an IR spectrum with a peak at 1188.0 cm<sup>-1</sup> highlighted. The x-axis is labeled 'cm<sup>-1</sup>' and ranges from 4000 to 400. The y-axis is labeled 'Intensity' and ranges from 0 to 1.0. The spectrum shows several peaks, with the most prominent one at 1188.0 cm<sup>-1</sup>.</p>
5	<p>エントリを右クリックし、「<b>Add to Summary+ (Summary+に追加)</b>」を選択します。</p>	<p>エントリは <b>Summary+</b> タブに追加されます。</p>

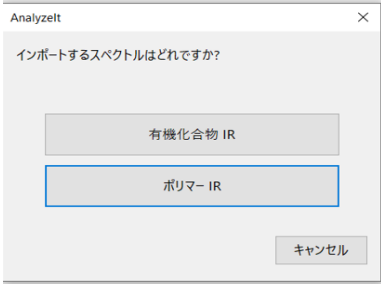
アクション	結果
<p>6 「Suggest」 ボタンをクリックして、3028 のピークを選択し、「Correlate」 ボタンをクリックします </p>	<p>ナレッジベースが解析された後、結果はウェーブナンバーでラベルが付けられたタブに表示されます。</p>  <p>多くの官能基エントリには詳細なメモが記載されていますので、それに注意してください。</p>

アクション	結果
-------	----

<p>7 <b>Functional Group Data</b> ペインの各エントリを順番に選択します。</p> <p>また、アロマチック炭化水素（ポリスチレン）のエントリは適切なマッチとなっていますので、ご注意ください。</p>	 <p>The screenshot shows the Analyzelt software interface. On the left, there is a '部分構造' (Partial Structure) section with a chemical structure of polystyrene: <math>[-CH_2-CH-]_n</math> with a benzene ring attached to the CH group. Below it, the '特性' (Characteristics) section contains text describing CH stretching in commercial polystyrene. The main area displays an IR spectrum with a peak at 3060.0 cm⁻¹. Below the spectrum is a 'サマリー' (Summary) list of polymer entries, with 'Aromatic Hydrocarbons-Polymer IR Polystyrene, atactic' selected and highlighted in blue. Other entries include vinyl toluene, phthalate, terephthalate, and benzoate polymers.</p>
<p>8 アロマチック炭化水素（ポリスチレン）のエントリを選択したら、右クリックして「<b>Add to Summary+</b> (Summary+に追加)」を選んでください。</p>	<p>エントリは <b>Summary+</b> タブに追加されます。</p>

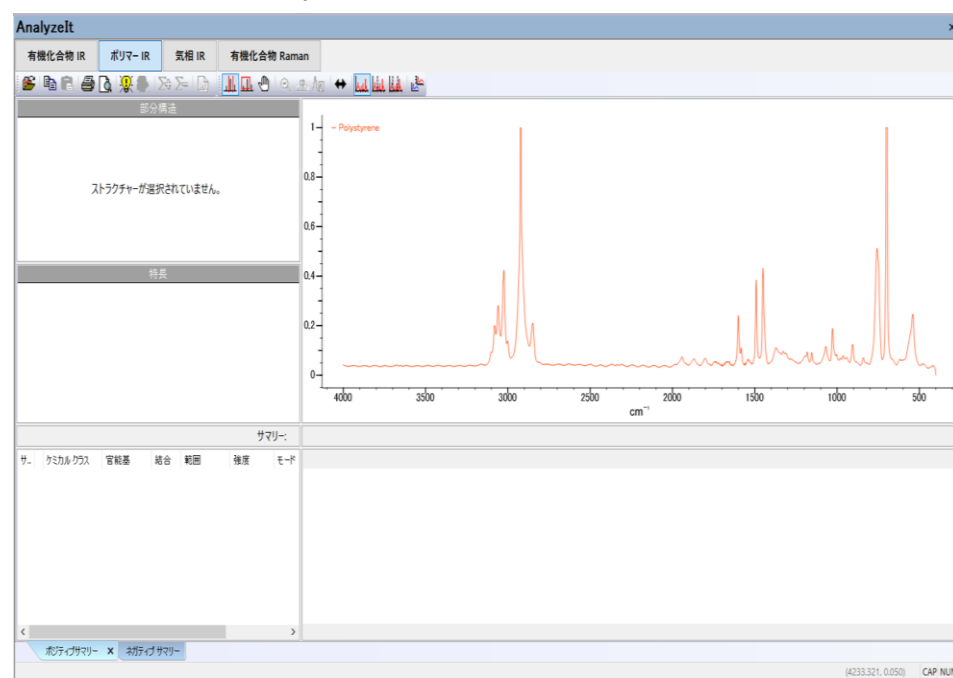
	アクション	結果																					
<p>9</p> <p><b>Summary+</b> タブを開き、両方のエントリを選択してください。</p> <p><b>注記:</b> 最初のエントリを選択した後、<b>Ctrl</b> キーを押しながら 2 番目のエントリをクリックして選択してください。</p>	<p>これらの官能基が混合スペクトルのほとんどのピークを説明していることに注意してください。</p>  <p>The screenshot shows the Analyzelt software interface. On the left, the chemical structure of polystyrene is displayed: <chem>*CC(*)c1ccccc1</chem>. Below the structure, the '特徴' (Features) section describes CH stretching in commercial polystyrene, noting characteristic peaks at 1600, 1580, 1500, and 1450 cm<sup>-1</sup>. The 'サマリ' (Summary) table lists identified functional groups:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>サ.</th> <th>ケミカルクラス</th> <th>官能基</th> <th>結合</th> <th>範囲</th> <th>強度</th> <th>モード</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>☑</td> <td>Polyethers-Poly (2,6-dim</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>☑</td> <td>Aromatic Hydro Polystyrene, a</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p>The main window displays an IR spectrum plot with a red line representing the sample and a cyan line representing the reference. The x-axis is labeled 'cm<sup>-1</sup>' and ranges from 4000 to 400. The y-axis represents transmittance from 0 to 1.0. A vertical dashed line is positioned at approximately 3060 cm<sup>-1</sup>. The spectrum shows several sharp peaks in the fingerprint region (1500-600 cm<sup>-1</sup>) and aromatic C-H stretching peaks around 3000-3100 cm<sup>-1</sup>.</p>	サ.	ケミカルクラス	官能基	結合	範囲	強度	モード	☑	Polyethers-Poly (2,6-dim						☑	Aromatic Hydro Polystyrene, a						
サ.	ケミカルクラス	官能基	結合	範囲	強度	モード																	
☑	Polyethers-Poly (2,6-dim																						
☑	Aromatic Hydro Polystyrene, a																						

## 単一成分のスペクトルを開いて解析

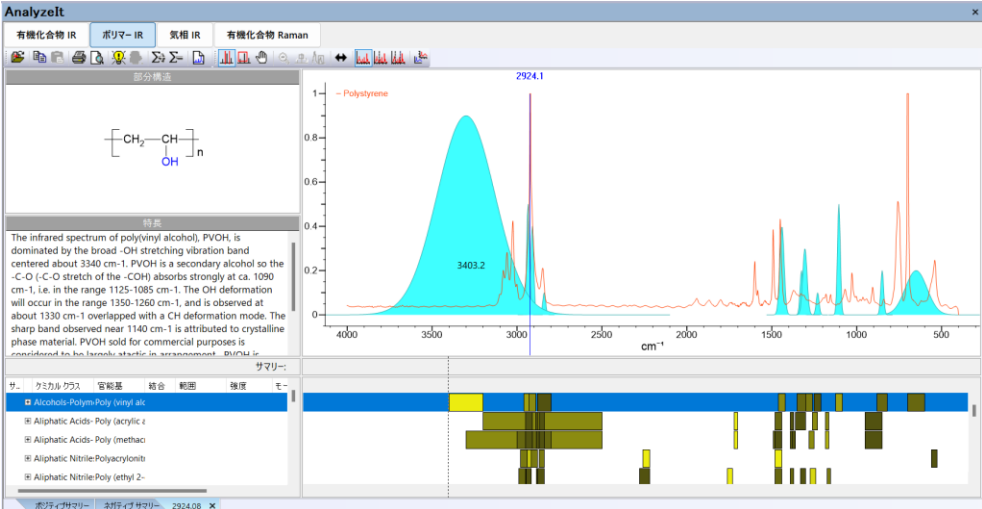
	アクション	結果
1	前の解析を終了するには、右上の閉じるボタンをクリックします。	
2	<p><b>File</b> (ファイル) &gt; <b>Open Spectrum</b> (スペクトルを開く) を選択します。</p> <p>"C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Analyzelt Polymer IR。</p> <p><b>Polystyrene.irf</b> を開きます。</p> <p>注記 : IRF、JCAMP など、特定のスペクトルファイルを探すには「<b>Files of type</b>」フィルタを使用できます。または、「<b>All files (*.*)</b>」を選択することもできます。</p>	<p>ポップアップダイアログが表示されます。</p> 

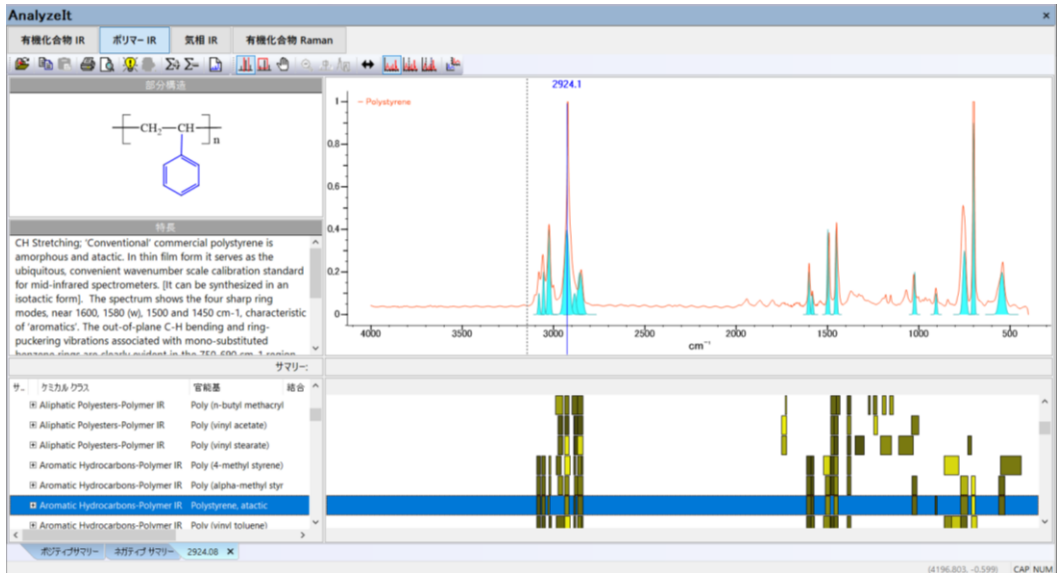
3 「Polymer IR」をクリックします。

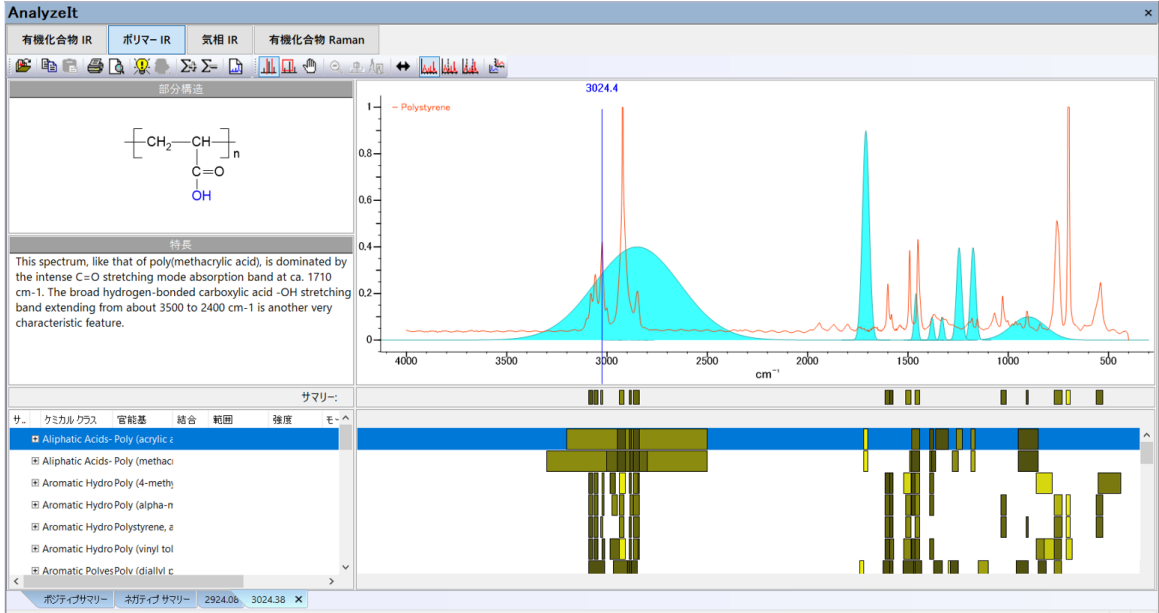
スペクトルが表示されます。

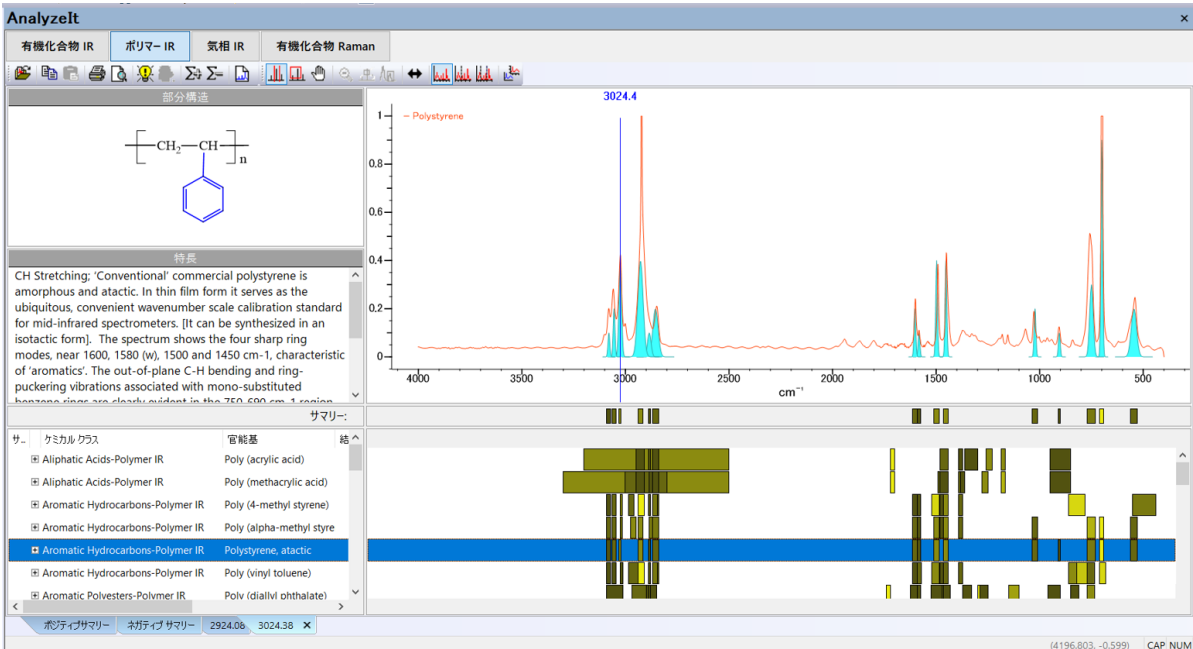


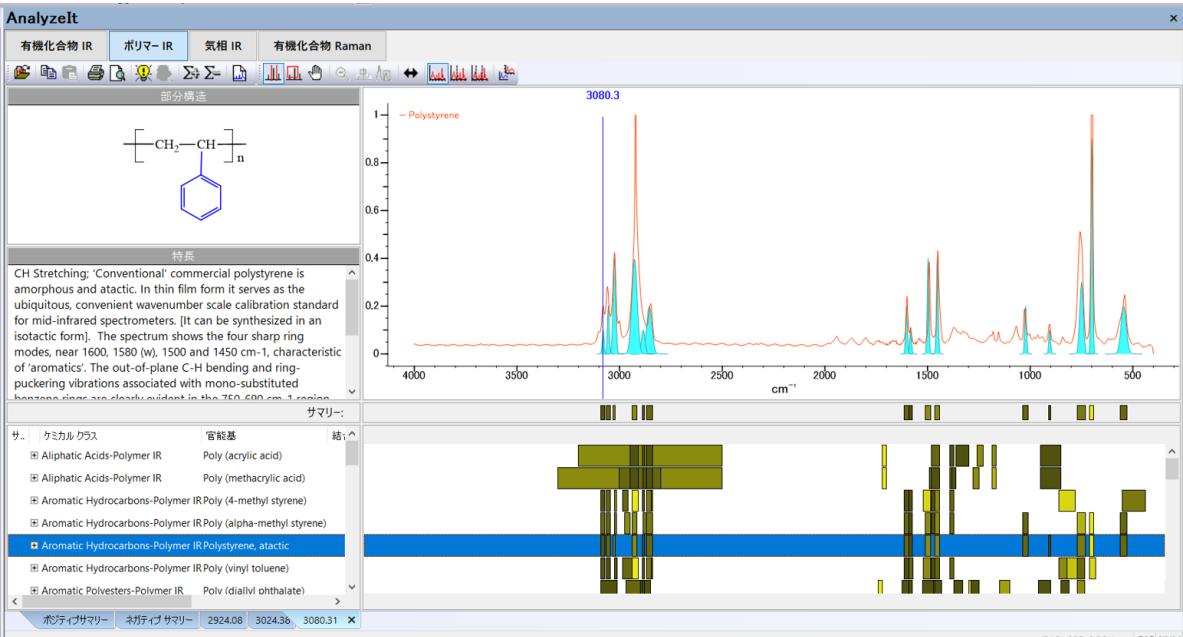


	アクション	結果
4	<p>「Suggest」 ボタンをクリックして、2924.1 のピークを選択し、「Correlate」 ボタンをクリックします。</p>	<p>ナレッジベースの解析が完了すると、結果がウェーブナンバー（2924.08）でラベルが付けられたタブに表示されます。</p>  <p>The screenshot displays the AnalyzeIt software interface. At the top, there are tabs for '有機化合物 IR', 'ポリマー IR', '気相 IR', and '有機化合物 Raman'. The main window shows an IR spectrum with a prominent peak at 2924.1 cm⁻¹ highlighted in cyan. A smaller peak is labeled at 3403.2 cm⁻¹. The x-axis represents wavenumber in cm⁻¹, ranging from 4000 to 500. Below the spectrum, there is a chemical structure of poly(vinyl alcohol) with the formula <math>[-CH_2-CH(OH)-]_n</math>. To the right of the structure, there is a text box describing the infrared spectrum of poly(vinyl alcohol), mentioning the broad -OH stretching vibration band centered around 3340 cm⁻¹ and the C-O stretch of the -COH group at approximately 1090 cm⁻¹. Below the text box, there is a 'サマリー' (Summary) table with columns for 'サ.', 'ケミカルクラス', '官能基', '結合', '範囲', '強度', and 'モ-'. The table lists several suggested compounds, including 'Alcohols-Poly(m vinyl alc', 'Aliphatic Acids- Poly (acrylic e', 'Aliphatic Acids- Poly (methac', 'Aliphatic Nitrile-Polyacrylonit', and 'Aliphatic Nitrile-Poly (ethyl 2-'. The interface also shows a '部分構造' (Substructure) section and a '特徴' (Features) section.</p>

	アクション	結果
5	<p><b>Functional Group Data</b> ペインの各エントリを順番に選択します。</p>	<p>アロマチック炭化水素（ポリスチレン）が適切なマッチとなっていることに注意してください。</p>  <p>The screenshot displays the Analyzelt software interface. At the top, there are tabs for '有機化合物 IR', 'ポリマー IR', '気相 IR', and '有機化合物 Raman'. The main window shows the IR spectrum of Polystyrene. The x-axis represents wavenumber in cm⁻¹, ranging from 4000 to 500. The y-axis represents transmittance. A significant peak is highlighted at 2924.1 cm⁻¹. Below the spectrum, there is a list of functional groups under the heading 'サマリー'. The selected entry is 'Aromatic Hydrocarbons-Polymer IR: Polystyrene, atactic'. The chemical structure of polystyrene is shown in the top left corner of the software window.</p>
6	<p>アロマチック炭化水素（ポリスチレン）のエントリを選択したら、右クリックして「<b>Add to Summary+</b> (Summary+に追加)」を選んでください。</p>	<p>その官能基が <b>Summary+</b> タブに追加されます。</p>

アクション	結果
<p>7 再度「<b>Suggest a Peak</b> (ピークの提案)」ツールバーのボタンをクリックし、その後「<b>Correlate</b> (相関)」ボタンをクリックします。</p>	<p>ナレッジベースの解析が完了すると、結果がウェーブナンバー (3024.38) でラベルが付けられたタブに表示されます。</p>  <p>The screenshot shows the 'AnalyzeIt' software window. The top menu includes '有機化合物 IR', 'ポリマー IR', '気相 IR', and '有機化合物 Raman'. The main display area shows the IR spectrum of Polystyrene with a peak at 3024.4 cm⁻¹ highlighted. The chemical structure of Polystyrene is shown on the left. Below the spectrum is a correlation table with columns for 'サ.', 'ケミカルクラス', '官能基', '結合', '範囲', and '強度'. The table lists various chemical classes and their corresponding functional groups and bond types. The bottom status bar shows the current peak at 3024.38 cm⁻¹.</p>

	アクション	結果
8	<p><b>Functional Group Data</b> ペインの各エントリを順番に選択します。</p>	<p>アロマチック炭化水素（ポリスチレン）が再び適切なマッチであることに注目してください。</p>  <p>The screenshot shows the Analyzelt software interface. On the left, there is a list of functional groups under the heading 'サマリー'. The entry 'Aromatic Hydrocarbons-Polymer IR' for 'Polystyrene, atactic' is selected and highlighted in blue. Above the list, the chemical structure of polystyrene is shown as <math>[-CH_2-CH(C_6H_5)-]_n</math>. To the right, an IR spectrum is displayed with a peak at 3024.4 cm⁻¹. The x-axis represents wavenumber in cm⁻¹, ranging from 4000 to 500. The y-axis represents relative intensity from 0 to 1.0. The spectrum shows characteristic peaks for polystyrene, including aromatic C-H stretching around 3000-3100 cm⁻¹ and aliphatic C-H stretching around 2800-3000 cm⁻¹.</p>

	アクション	結果
9	<p>3番目の提案されたピーク (3080.3) を解析するために、同じ手順を繰り返し、各エントリを順番に<b>官能基データ</b> ペインで選択します。</p>	<p>アロマチック炭化水素 (ポリスチレン) が再び適切なマッチであることとなります。</p>  <p>The screenshot shows the Analyzelt software interface. At the top, there are tabs for '有機化合物 IR', 'ポリマー IR', '気相 IR', and '有機化合物 Raman'. The main window displays an IR spectrum with a peak at 3080.3 cm⁻¹ highlighted. Below the spectrum is a list of matches under the heading 'サマリー:'. The selected match is 'Aromatic Hydrocarbons-Polymer IR Polystyrene, atactic'. The chemical structure of polystyrene is shown as <math>[-CH_2-CH(C_6H_5)-]_n</math>. The text below the structure describes the characteristics of polystyrene, including its amorphous and atactic nature and its use as a calibration standard for mid-infrared spectrometers.</p>

# 官能基解析

## ユーザーナレッジベースの作成方法

### 目的

この演習では、**Analyzelt** アプリケーションでユーザーナレッジベースを作成し、使用方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ユーザーナレッジベースの作成方法
- 官能基のブラウズ方法
- 構造の関連付け方法

### 背景

ユーザーは、自分自身のデータから官能基とバンドを持つ独自のユーザーナレッジベースを作成することができます。このユーザーナレッジベースは、**KnowItAll** のナレッジベースと組み合わせて使用され、スペクトル中の官能基を特定するのに役立ちます。

### ユーザーナレッジベースを作成する手順

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

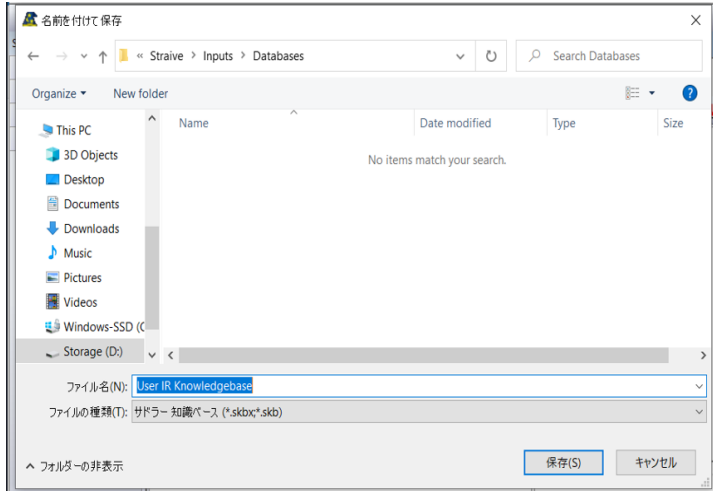
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR  
フォルダに移動します。

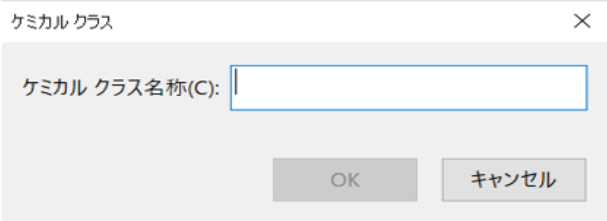
- Butylamine.jdx

**KnowItAll** 使用アプリケーション

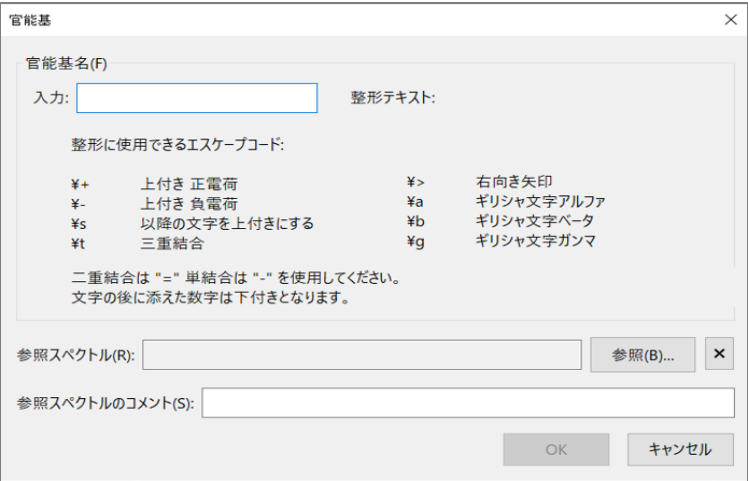
- Analyzelt™


アクション	結果
-------	----

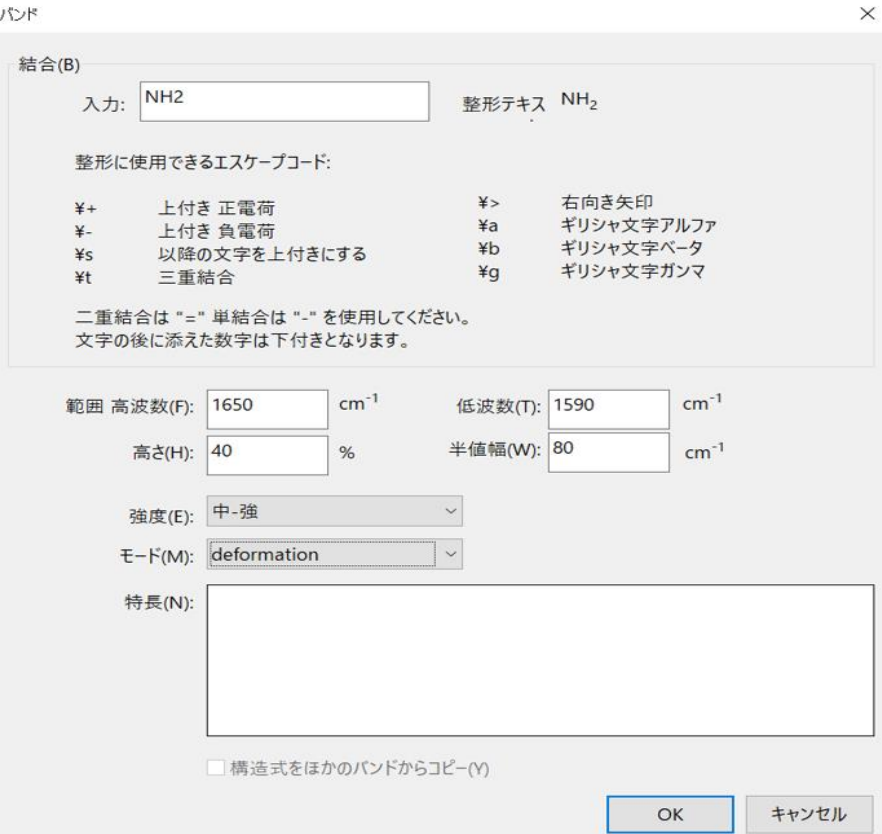
1	<p>スペクトル解析ツールボックスに移動し、<b>Analyzelt</b> アプリケーションを開きます (アイコンをクリック)。</p> <p>「<b>Organic IR</b>」 ボタンをクリックします。</p>	
2	<p><b>Knowledgebase &gt; New</b> (新規作成) を選びます。</p>	<p>「<b>Save As</b> (名前を付けて保存)」 のダイアログボックスが表示されます。</p>
3	<p>ユーザーナレッジベース用の名前 (例: <b>ユーザーIR ナレッジベース</b>) を入力し、ハードドライブ上の適切な場所に保存します。</p>	 <p>ファイルタイプは <b>Sadtler Knowledgebase (*.skbx や *.sbk)</b> と変更できません。</p>


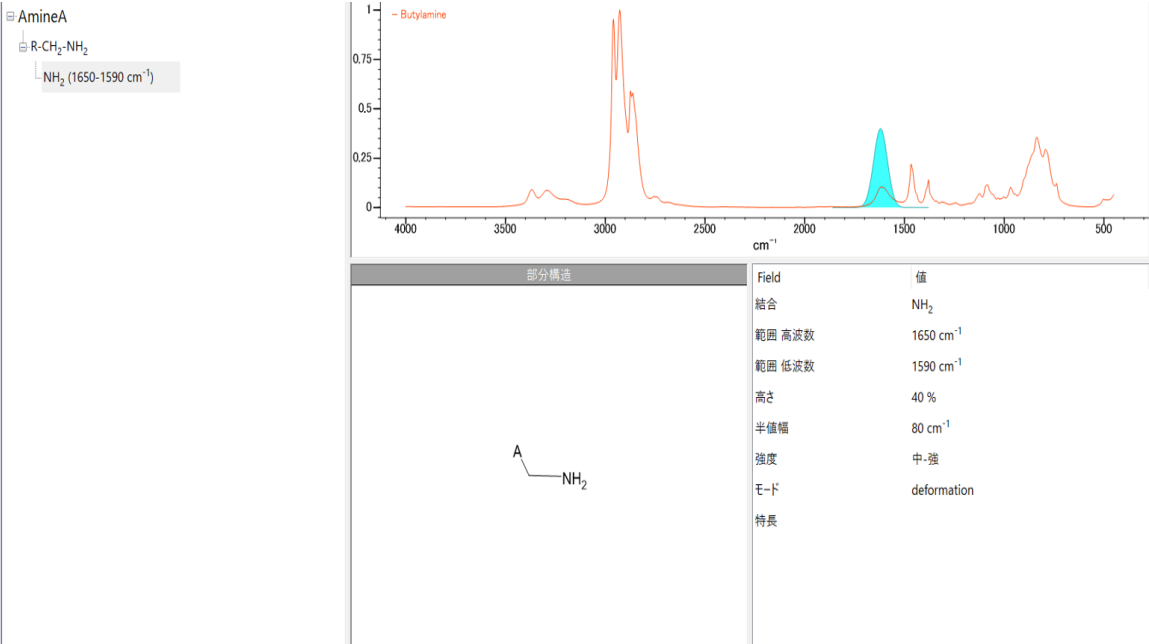
4	<p>「<b>Functional Group Tree</b>」ペイン（左側）で右クリックし、「<b>Add Classification</b>（分類の追加）」を選択します。</p>	<p>「<b>Classification</b>（分類）」のダイアログボックスが表示されます。</p>  <p>「AmineA」と入力し、<b>OK</b>をクリックします。</p> <p><b>注記:</b> 官能基をブラウズする際に、正しい順序で分類が表示されるように、説明的な識別子を使用してください。分類名の末尾にユニークな識別子を追加して、エントリが表示されるナレッジベースを特定できるようにしてください。必要に応じて簡単に変更できます。</p>
---	---	---



	アクション	結果
5	新しい分類名「AmineA」を右クリックし、「 <b>Add Functional Group</b> (官能基の追加)」を選択します。	<p>「<b>Add Functional Group</b> (官能基)」のダイアログボックスが表示されます。</p>  <p>「官能基」ダイアログボックスのスクリーンショット。入力欄は空、整形テキスト欄も空。参照スペクトル欄も空。参照スペクトルのコメント欄も空。OKとキャンセルボタンが下部にある。</p>
6	上部のテキストボックスに「 <b>R-CH2-NH2</b> 」と入力します。	<p>テキストは自動的にフォーマットされます。</p>  <p>「官能基」ダイアログボックスのスクリーンショット。入力欄に「R-CH2-NH2」が入力され、整形テキスト欄にも「R-CH2-NH2」が表示されている。参照スペクトル欄は空。参照スペクトルのコメント欄も空。OKとキャンセルボタンが下部にある。</p>

	アクション	結果																
7	<p>「Browse」をクリックします。</p> <p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IRフォルダに移動します。</p> <p>Butylamine.jdx を選択します。</p> <p>「Reference Spectrum (参照スペクトル)」テキストボックスには、パスとファイル名が表示されます。</p>																	
8	<p>ダイアログボックスを閉じるためには、<b>OK</b> をクリックします。</p> <p>「Functional Group Tree」で「R-CH2-NH2」を右クリックします。</p>	<p>ポップアップメニューが表示されます。</p> <table border="1" data-bbox="905 984 1346 1268"> <tbody> <tr> <td>ケミカル クラスの追加(A)...</td> <td>Ctrl+L</td> </tr> <tr> <td>官能基の追加(F)...</td> <td>Ctrl+F</td> </tr> <tr> <td>バンドの追加(B)...</td> <td>Ctrl+B</td> </tr> <tr> <td>編集(D)...</td> <td>Alt+Enter</td> </tr> <tr> <td>貼り付け(P)</td> <td>Ctrl+V</td> </tr> <tr> <td>削除</td> <td>Del</td> </tr> <tr> <td>参照スペクトルの読み込み(O)...</td> <td>Ctrl+R</td> </tr> <tr> <td>部分構造の読み込み(U)...</td> <td>Ctrl+U</td> </tr> </tbody> </table>	ケミカル クラスの追加(A)...	Ctrl+L	官能基の追加(F)...	Ctrl+F	バンドの追加(B)...	Ctrl+B	編集(D)...	Alt+Enter	貼り付け(P)	Ctrl+V	削除	Del	参照スペクトルの読み込み(O)...	Ctrl+R	部分構造の読み込み(U)...	Ctrl+U
ケミカル クラスの追加(A)...	Ctrl+L																	
官能基の追加(F)...	Ctrl+F																	
バンドの追加(B)...	Ctrl+B																	
編集(D)...	Alt+Enter																	
貼り付け(P)	Ctrl+V																	
削除	Del																	
参照スペクトルの読み込み(O)...	Ctrl+R																	
部分構造の読み込み(U)...	Ctrl+U																	

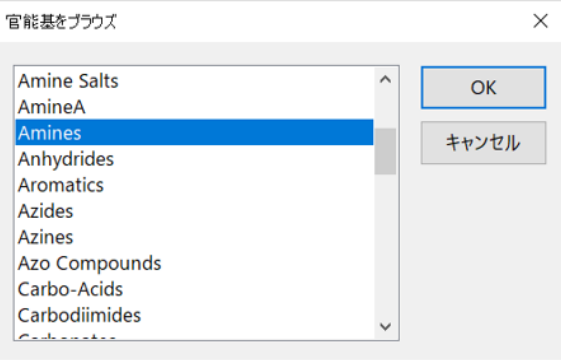
	アクション	結果
9	<p>「Add Band (バンドの追加)」をクリックします。</p> <p>NH2 と入力し、以下の情報を追加してください：</p> <ul style="list-style-type: none"><li>範囲: 1650 から 1590</li><li>高さ: 40</li><li>半分の高さの幅: 80</li><li>強度: 中程度から強い</li><li>モード: 変形</li></ul> <p>OK をクリックします。</p>	<p>「Band (バンド)」ダイアログボックスが表示されます。</p> 

	アクション	結果																		
10	<p>「<b>Fragment Structure</b> (フラグメント構造)」ペインをダブルクリックして<b>ChemWindow</b>を開き、次の構造を描いてください:</p> 																			
11	<p><b>Save</b> (保存) をクリックします。</p>	<p>構造が表示に追加されます。</p>  <table border="1"><thead><tr><th>Field</th><th>値</th></tr></thead><tbody><tr><td>結合</td><td>NH<sub>2</sub></td></tr><tr><td>範囲 高波数</td><td>1650 cm<sup>-1</sup></td></tr><tr><td>範囲 低波数</td><td>1590 cm<sup>-1</sup></td></tr><tr><td>高さ</td><td>40 %</td></tr><tr><td>半値幅</td><td>80 cm<sup>-1</sup></td></tr><tr><td>強度</td><td>中-強</td></tr><tr><td>モード</td><td>deformation</td></tr><tr><td>特長</td><td></td></tr></tbody></table>	Field	値	結合	NH <sub>2</sub>	範囲 高波数	1650 cm <sup>-1</sup>	範囲 低波数	1590 cm <sup>-1</sup>	高さ	40 %	半値幅	80 cm <sup>-1</sup>	強度	中-強	モード	deformation	特長	
Field	値																			
結合	NH <sub>2</sub>																			
範囲 高波数	1650 cm <sup>-1</sup>																			
範囲 低波数	1590 cm <sup>-1</sup>																			
高さ	40 %																			
半値幅	80 cm <sup>-1</sup>																			
強度	中-強																			
モード	deformation																			
特長																				

	アクション						結果
12	追加のバンドを追加するためには、プロセスを続けてください。						ナレッジベースの情報は自動的に保存されます。
	バンド	位置	高さ	半分の高さの幅	強度	モード	<div style="border: 1px solid orange; padding: 5px;">           AmineA  <math>\text{R-CH}_2\text{-NH}_2</math>            CN (1090-1068 <math>\text{cm}^{-1}</math>)            NH<sub>2</sub> (1650-1590 <math>\text{cm}^{-1}</math>)            NH (3400-3320 <math>\text{cm}^{-1}</math>)            NH (3328-3250 <math>\text{cm}^{-1}</math>)            NH (850-750 <math>\text{cm}^{-1}</math>)         </div>
	NH	3400-3320	30	65	中程度	非対称伸縮	
	NH	3328-3250	30	65	中程度	対称伸縮	
	CN	1090-1068	40	40	中程度から弱い	伸縮	
	NH	850-750	50	49	強い	揺れ	
13	ナレッジベースを閉じるためには、右上の角にある×をクリックしてください。						

## ユーザーナレッジベースを指定

	アクション	結果
1	スペクトル解析ツールボックスに移動し、 <b>Analyzelt</b> アプリケーションを開きます (アイコンをクリック)。	
2	「 <b>Organic IR</b> 」、または「 <b>Polymer IR</b> 」、あるいは「 <b>Organic Raman</b> 」アプリケーションをクリックしてください。	
3	<b>File (ファイル) &gt; Preferences (プリファレンス)</b> を選択します。	<b>Preferences (プリファレンス)</b> のダイアログボックスが開きます。
4	「 <b>Add (追加)</b> 」をクリックし、新たに作成したユーザーナレッジベースをブラウズして選択します。	ユーザーナレッジベースは「 <b>Preferences (プリファレンス)</b> 」ダイアログボックスに表示されます。 
5	「 <b>OK</b> 」をクリックして「 <b>Preferences (プリファレンス)</b> 」ダイアログボックスを閉じてください。	

<p>6 <b>Analyze</b> (分析) &gt; <b>Browse a Functional Group</b> (官能基をブラウズ) を選択します。</p>	<p>ユーザーナレッジベースの内容が官能基のリストに追加されました。</p> 
---	---