

KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

ユーザーデータベースの作成方法

データベースを作成

複数の分析技術を含む独自のユーザーデータベースを作成する方法

目的

この演習では、KnowItAll' sMinelt データベース構築機能を使って、複数の分析技術を含む検索可能なユーザーデータベースを作成する方法を説明します。また、表示されるプロパティをカスタマイズしたり、ユーザープロパティや表示プロファイルを作成したりすることもできます。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ユーザーデータベースの作成方法
- ユーザーデータベースにスペクトラを追加する方法
- ユーザーデータベースに構造を追加する方法
- ユーザープロパティの追加方法
- 上記のタスクを一括で実行する方法
- Minelt 表示プロファイルの作成と使用方法

背景

ユーザーデータベースの作成により、知的財産を保護し、組織内で情報の共有を促進する。結果として、研究者は自分の分析を改善することができます。

ユーザーデータベースを作成

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\Ethyl acetate.dx
- \Raman\Ethyl acetate.irf
- \Minelt\Import.csv
- MSDS Web Link.txt
- Ethyl acetate MSDS.pdf

KnowItAll 使用アプリケーション

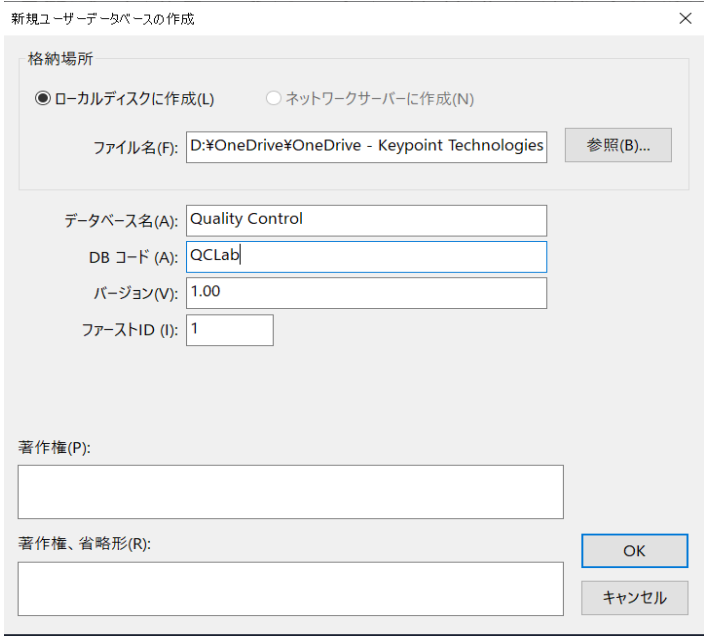
- Minelt™
- ChemWindow®
- Browselt™

アクション

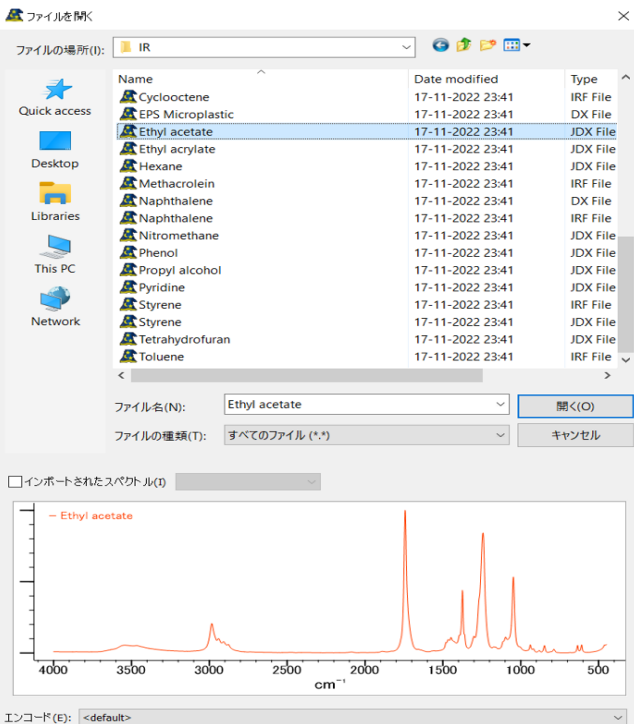
結果

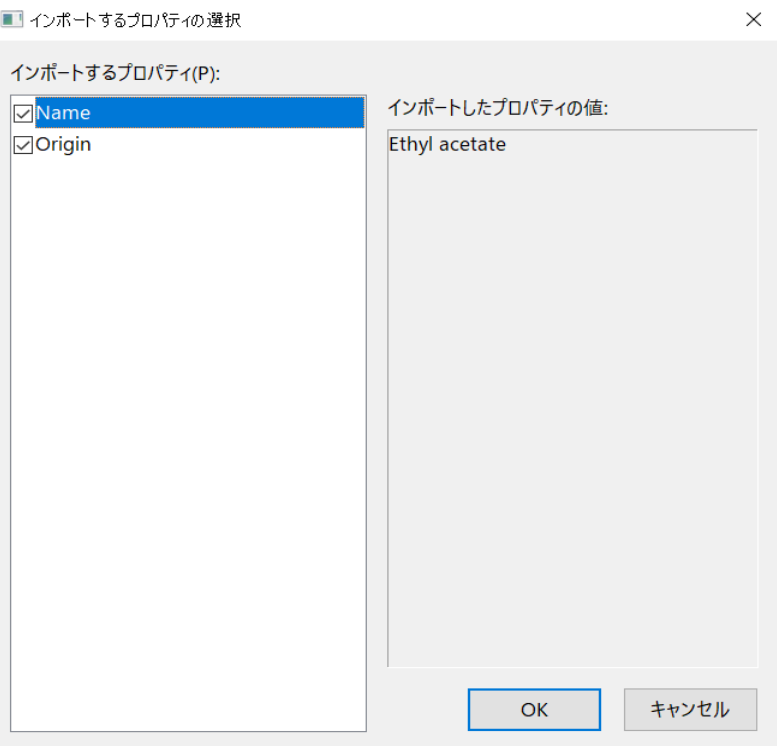
1	データツールボックスに移動し、 Minelt アプリケーションを開くために Minelt/Create Database (Minelt/データベースの作成) アイコンをクリックします。	Minelt アプリケーションが起動します。
2	メニューから「データベース」 > 「新規作成」を選択します。	新しいデータベース作成ダイアログボックスが表示されます。 
3	「ローカルシステムに作成」を選択します。	これにより、新しいデータベースがローカルに保存されます。
4	「Browse」をクリックします。 ローカルドライブ上に「Databases」という名前のフォルダを作成します。 フォルダを開き、ファイル名として「quality_control」と入力します。 Save (保存) をクリックします。	自動的に「*.sdbx」という拡張子が追加されます。 注記 : SDBX データベース形式では、スペクトルを特定の範囲や解像度に合わせる必要はありません。これにより、参照スペクトルをより高い解像度で提供することができ、ユーザーは生成されたオリジナルのスペクトルをそのまま保存することができます。
5	データベース名のテキストボックスには「Quality Control」と入力してください。 注記 : 他に指定する名前がない場合は、ファイル名が使用されます。	

アクション	結果
-------	----

6	<p>データベース略称のテキストボックスには「QCLab」と入力してください。</p> <p>注記：略称は 3 文字から 7 文字の範囲で入力する必要があります。</p>	
7	<p>バージョン番号と初めの ID (開始 ID) を入力し、著作権メッセージを入力してください。</p>	
8	<p>OK をクリックします。</p>	<p>新しいデータベースが作成され、データの受け入れ準備が整いました。データベースペインの下部 (左下) にあるデータベースタブには、「QCLab」というデータベース略称が表示されます。さらに、メインウィンドウの下端には著作権情報が表示されます。</p>

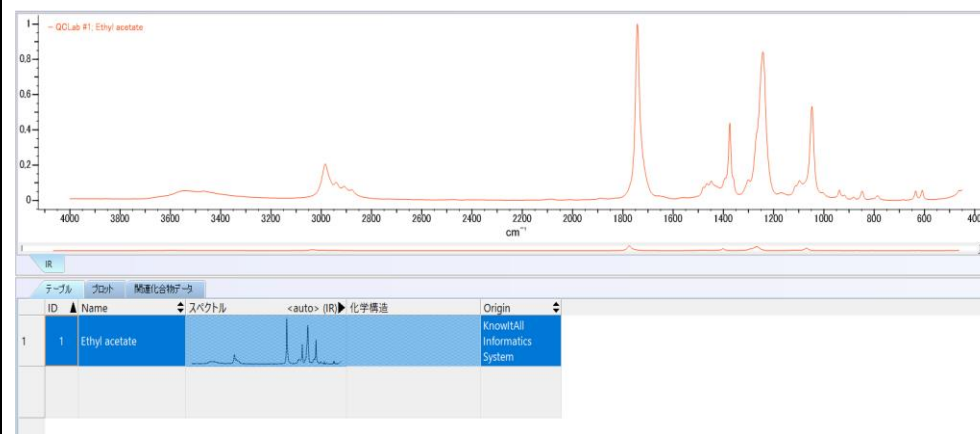
ユーザーデータベースに最初のスペクトルレコードを追加

	アクション	結果																																																			
1	<p>スペクトルをインポートし、最初のデータベースレコードを作成します：</p> <ul style="list-style-type: none"> 「ファイル」>「インポート」を選択するか、Ctrl+I キーを押してください。 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR フォルダに移動します。 「Ethyl acetate.dx」を開きます。 <p>注記：IRF、JCAMP など、特定のスペクトルファイルを探すには「Files of type」フィルタを使用できます。</p>	<p>ウィンドウの「開く」ダイアログボックスが表示されます。</p>  <p>ファイルを開く</p> <p>ファイルの場所(O): IR</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>Date modified</th> <th>Type</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>Cyclooctene</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr> <tr><td>EPS Microplastic</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DX File</td></tr> <tr><td>Ethyl acetate</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Ethyl acrylate</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Hexane</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Methacrolein</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr> <tr><td>Naphthalene</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DX File</td></tr> <tr><td>Naphthalene</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr> <tr><td>Nitromethane</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Phenol</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Propyl alcohol</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Pyridine</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Styrene</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr> <tr><td>Styrene</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Tetrahydrofuran</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>JDX File</td></tr> <tr><td>Toluene</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr> </tbody> </table> <p>ファイル名(N): Ethyl acetate 開く(O)</p> <p>ファイルの種類(T): すべてのファイル (*.*) キャンセル</p> <p><input type="checkbox"/> インポートされたスペクトル(S)</p> <p>IR Spectrum: Ethyl acetate</p> <p>Wavenumber (cm⁻¹): 4000 to 500</p> <p>エンコード(E): <default></p>	Name	Date modified	Type	Cyclooctene	17-11-2022 23:41	IRF File	EPS Microplastic	17-11-2022 23:41	DX File	Ethyl acetate	17-11-2022 23:41	JDX File	Ethyl acrylate	17-11-2022 23:41	JDX File	Hexane	17-11-2022 23:41	JDX File	Methacrolein	17-11-2022 23:41	IRF File	Naphthalene	17-11-2022 23:41	DX File	Naphthalene	17-11-2022 23:41	IRF File	Nitromethane	17-11-2022 23:41	JDX File	Phenol	17-11-2022 23:41	JDX File	Propyl alcohol	17-11-2022 23:41	JDX File	Pyridine	17-11-2022 23:41	JDX File	Styrene	17-11-2022 23:41	IRF File	Styrene	17-11-2022 23:41	JDX File	Tetrahydrofuran	17-11-2022 23:41	JDX File	Toluene	17-11-2022 23:41	IRF File
Name	Date modified	Type																																																			
Cyclooctene	17-11-2022 23:41	IRF File																																																			
EPS Microplastic	17-11-2022 23:41	DX File																																																			
Ethyl acetate	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Ethyl acrylate	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Hexane	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Methacrolein	17-11-2022 23:41	IRF File																																																			
Naphthalene	17-11-2022 23:41	DX File																																																			
Naphthalene	17-11-2022 23:41	IRF File																																																			
Nitromethane	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Phenol	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Propyl alcohol	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Pyridine	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Styrene	17-11-2022 23:41	IRF File																																																			
Styrene	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Tetrahydrofuran	17-11-2022 23:41	JDX File																																																			
Toluene	17-11-2022 23:41	IRF File																																																			

	アクション	結果
2	「Open」をクリックします。	<p data-bbox="709 375 1402 402">「プロパティのインポート選択」ダイアログボックスが開きます。</p>  <p data-bbox="695 1240 1892 1328">このダイアログボックスは、情報をユーザーデータベースに転送する際に表示されます。利用可能なプロパティがすべて表示されます。各プロパティを順番に選択し、それぞれのプロパティに対してアクションを定義するためのチェックボックスを使用します。</p>


3 **OK** をクリックします。

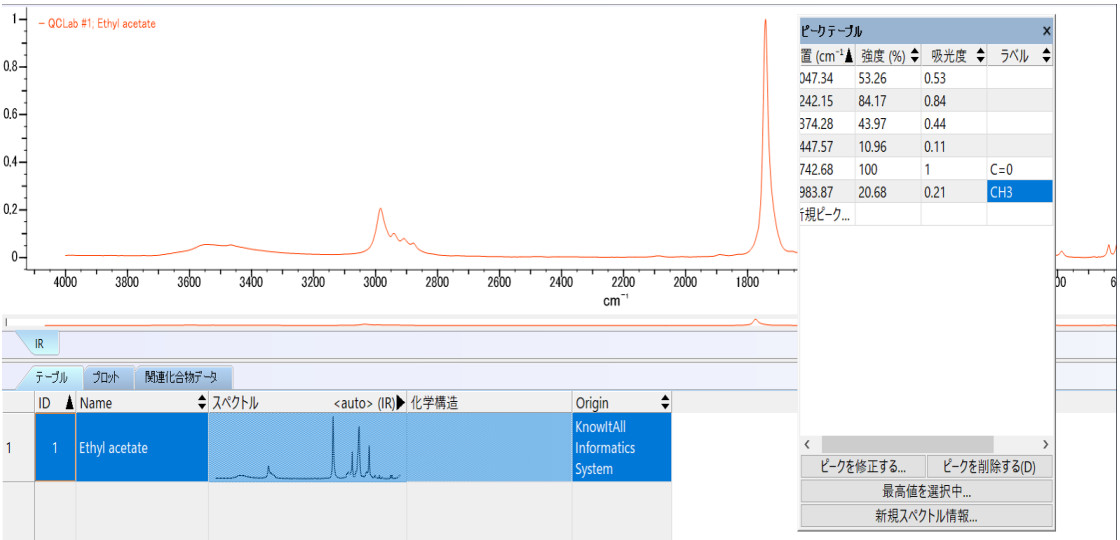



ダイアログボックスが閉じられます。スペクトルは最初のレコードとしてユーザーデータベースに追加されました。



スペクトルにラベルを追加

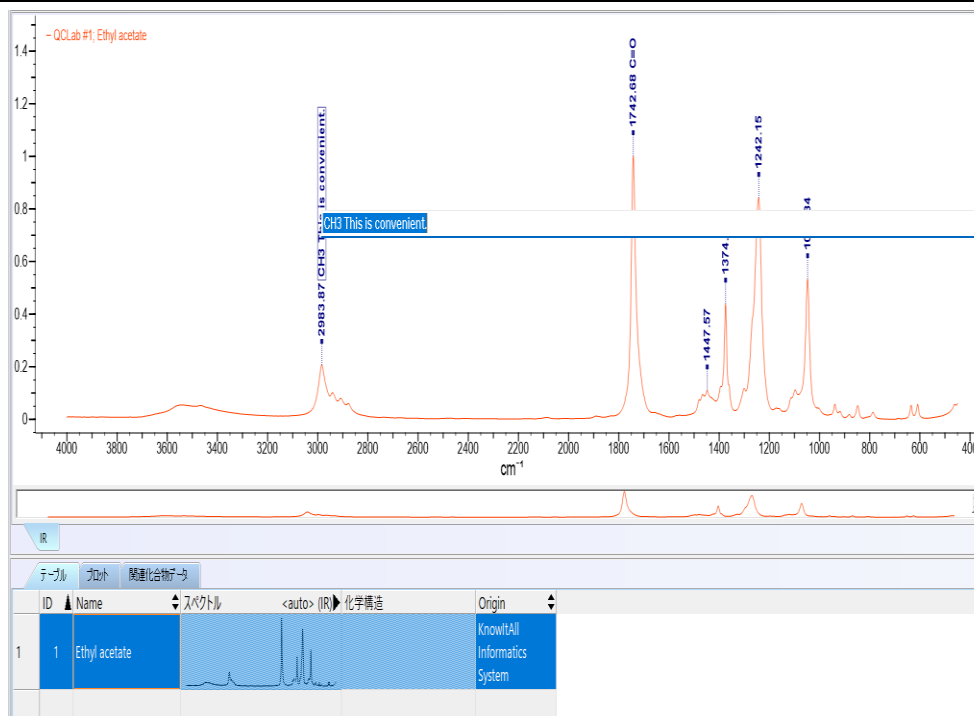
KnowItAll 2024 の新機能として、ユーザーはカスタムなピークラベルを追加することができます。

	アクション	結果																																
1	<p>前の例を引き続き進めましょう</p> <p>「表示」 > 「ウィンドウ/テーブル」 > 「ピークテーブル」を選択して、スペクトルのピークテーブルを開きます。</p>	<p>ピークテーブルが別のウィンドウで表示されます。</p>  <table border="1" data-bbox="701 483 1276 760"> <thead> <tr> <th>位置 (cm⁻¹)</th> <th>強度 (%)</th> <th>吸光度</th> <th>ラベル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1047.34</td> <td>53.26</td> <td>0.53</td> <td></td> </tr> <tr> <td>1242.15</td> <td>84.17</td> <td>0.84</td> <td></td> </tr> <tr> <td>1374.28</td> <td>43.97</td> <td>0.44</td> <td></td> </tr> <tr> <td>1447.57</td> <td>10.96</td> <td>0.11</td> <td></td> </tr> <tr> <td>1742.68</td> <td>100</td> <td>1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2983.87</td> <td>20.68</td> <td>0.21</td> <td></td> </tr> <tr> <td>新規ピーク...</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	位置 (cm ⁻¹)	強度 (%)	吸光度	ラベル	1047.34	53.26	0.53		1242.15	84.17	0.84		1374.28	43.97	0.44		1447.57	10.96	0.11		1742.68	100	1		2983.87	20.68	0.21		新規ピーク...			
位置 (cm ⁻¹)	強度 (%)	吸光度	ラベル																															
1047.34	53.26	0.53																																
1242.15	84.17	0.84																																
1374.28	43.97	0.44																																
1447.57	10.96	0.11																																
1742.68	100	1																																
2983.87	20.68	0.21																																
新規ピーク...																																		

	アクション	結果																																						
2	ラベルの列に直接テキストを入力することができます。	<p>入力したラベルはスペクトルペインに表示されます。</p>  <table border="1" data-bbox="1512 462 1774 665"><caption>ピークテーブル</caption><thead><tr><th>位置 (cm⁻¹)</th><th>強度 (%)</th><th>吸光度</th><th>ラベル</th></tr></thead><tbody><tr><td>047.34</td><td>53.26</td><td>0.53</td><td></td></tr><tr><td>242.15</td><td>84.17</td><td>0.84</td><td></td></tr><tr><td>374.28</td><td>43.97</td><td>0.44</td><td></td></tr><tr><td>447.57</td><td>10.96</td><td>0.11</td><td></td></tr><tr><td>742.68</td><td>100</td><td>1</td><td>C=O</td></tr><tr><td>983.87</td><td>20.68</td><td>0.21</td><td>CH3</td></tr></tbody></table> <table border="1" data-bbox="724 828 1386 982"><thead><tr><th>ID</th><th>Name</th><th>スペクトル</th><th><auto> (IR) 化学構造</th><th>Origin</th></tr></thead><tbody><tr><td>1</td><td>Ethyl acetate</td><td></td><td></td><td>KnowItAll Informatics System</td></tr></tbody></table>	位置 (cm ⁻¹)	強度 (%)	吸光度	ラベル	047.34	53.26	0.53		242.15	84.17	0.84		374.28	43.97	0.44		447.57	10.96	0.11		742.68	100	1	C=O	983.87	20.68	0.21	CH3	ID	Name	スペクトル	<auto> (IR) 化学構造	Origin	1	Ethyl acetate			KnowItAll Informatics System
位置 (cm ⁻¹)	強度 (%)	吸光度	ラベル																																					
047.34	53.26	0.53																																						
242.15	84.17	0.84																																						
374.28	43.97	0.44																																						
447.57	10.96	0.11																																						
742.68	100	1	C=O																																					
983.87	20.68	0.21	CH3																																					
ID	Name	スペクトル	<auto> (IR) 化学構造	Origin																																				
1	Ethyl acetate			KnowItAll Informatics System																																				



3 ピークテーブルのウィンドウを閉じます。

マウスでピークラベル上にカーソルを合わせ、ダブルクリックすると、さらなる編集のためのテキストボックスが開きます。そこで編集を行うことができます。



ピークラベルはスペクトルの一部であり、KnowItAll ではスペクトルとともに移動します。例えば、ReportIt や ProcessIt といったアプリケーションプラグインにも反映されます。

4 「ReportIt に転送する」を選択します

送り先:  ChemWindow  ReportIt

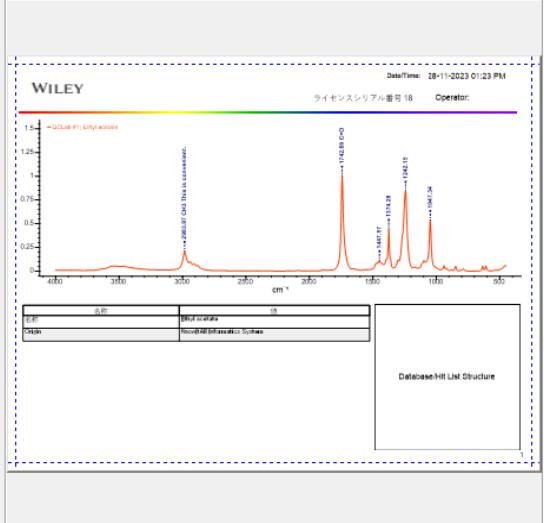
「Landscape (ランドスケープ)」のレポートテンプレートを選択します

OK をクリックします。

レポートテンプレート 選択

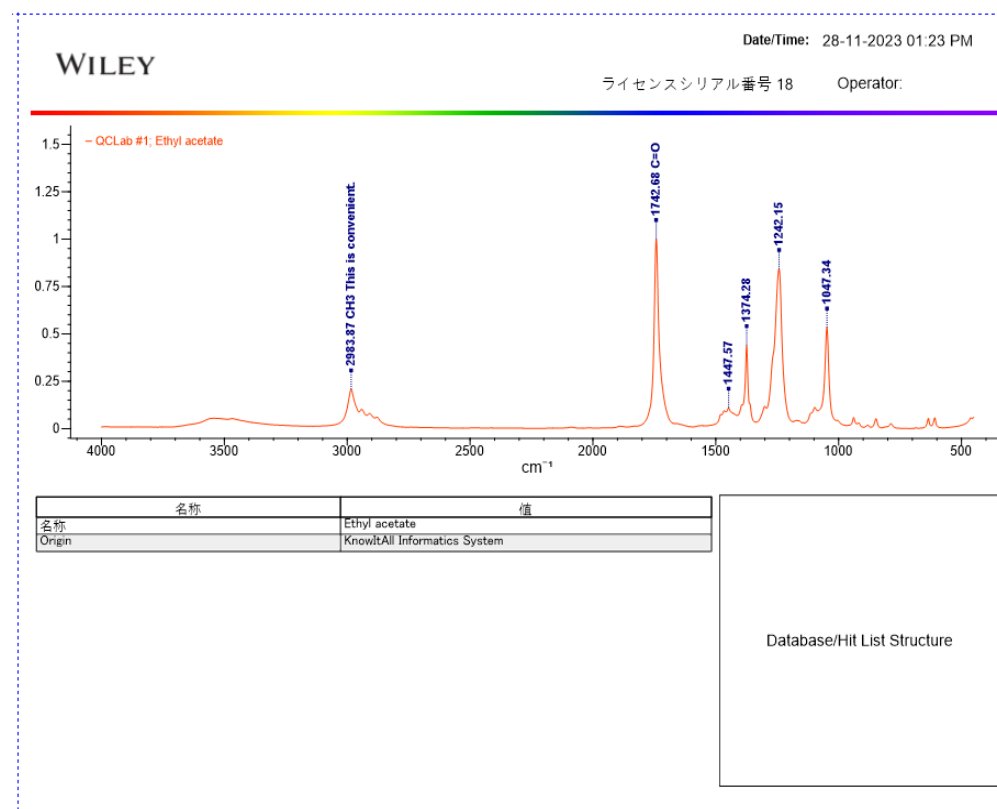
テンプレートを選択してください(T):

タイトル	ファイルのパス
Landscape	C:\Users\Public\Documents...
Landscape_NMR_Assignment	C:\Users\Public\Documents...
Mixture Analysis Landscape	C:\Users\Public\Documents...
Mixture Analysis Portrait	C:\Users\Public\Documents...
Portrait	C:\Users\Public\Documents...
Portrait_NMR_Assignment	C:\Users\Public\Documents...


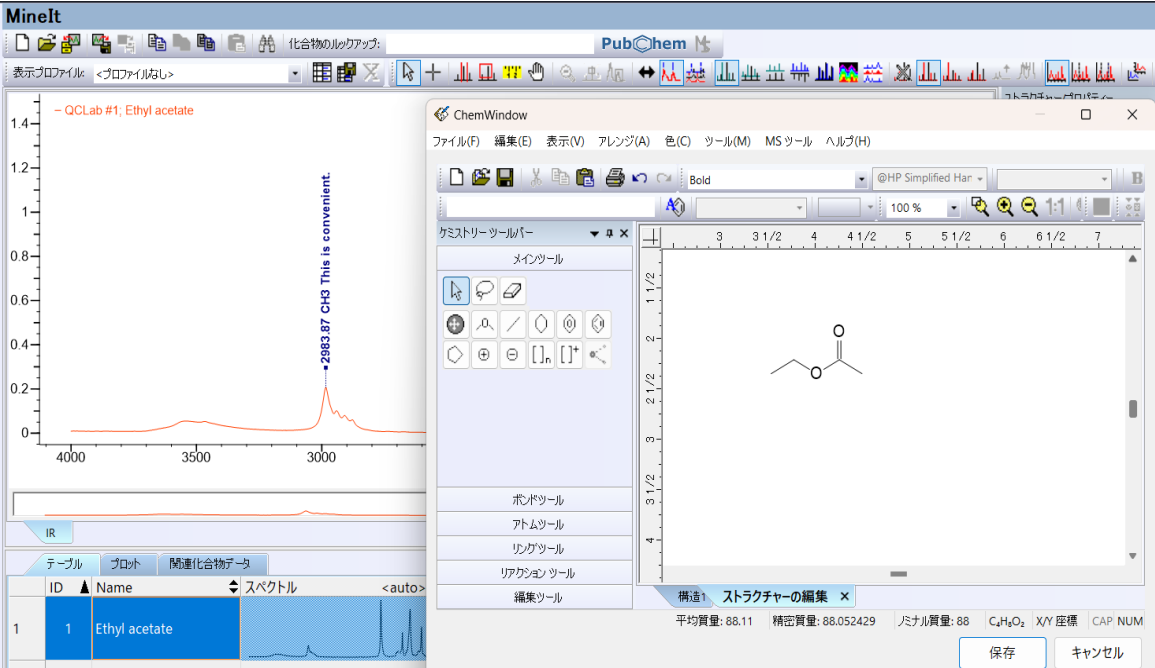


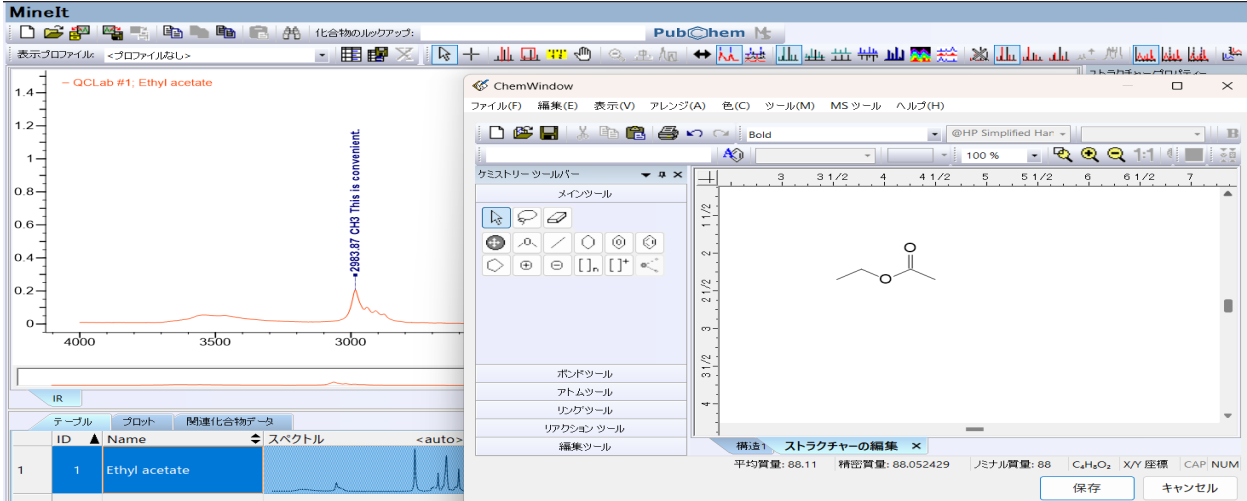
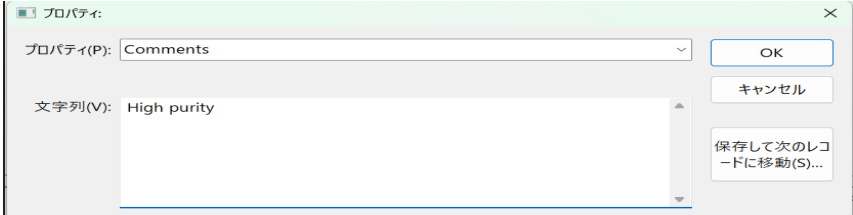
OK キャンセル

すると、ピークラベルはスペクトルと一緒に移動し、表示されます：



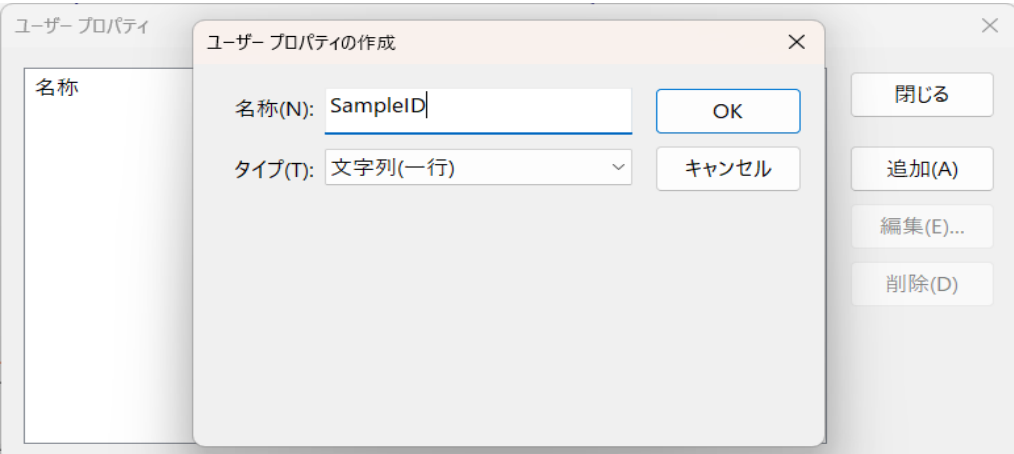
データベースレコードに化学構造とプロパティを追加します

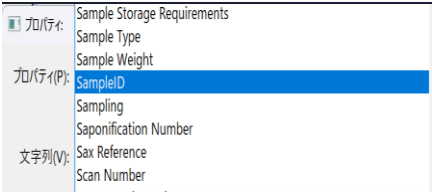
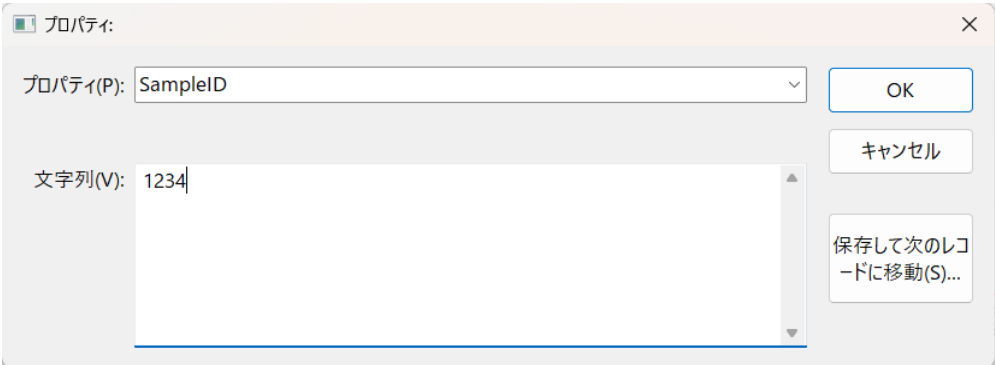
	アクション	結果
1	<p>Minelt に戻ります</p> <p>まず、最初のレコードを選択した状態で、ウィンドウの右上にある「構造/プロパティ」ペインをダブルクリックします（「ChemWindow で構造を編集するにはダブルクリック」）。</p>	<p>すると、「ChemWindow への転送」アプリケーションが表示されます。または、「転送先」を使用して ChemWindow アプリケーションに移動することもできます。</p> 
2	<p>描画ツールを使用して、指定された化学構造を作成します。</p>	 <p>ChemWindow</p> <p>ファイル(F) 編集(E) 表示(V) アレンジ(A) 色(C) ツール(M) MS ツール ヘルプ(H)</p> <p>構造1: ストラクチャーの編集 ×</p> <p>平均質量: 88.11 精密質量: 88.052429 分子質量: 88 C₄H₈O₂ XY 座標 CAP NUM</p> <p>保存 キャンセル</p>

	アクション	結果
3	<p>Save (保存) をクリックします。</p>	<p>作成した構造は、最初のレコードに追加され、データベースペインの「化学構造」列と「構造/プロパティ」ペインの両方に表示されます。</p>  <p>注記： 化学的な性質の中には、InChI、InChIKey、分子量など、構造をレコードに保存する際に自動的に計算されるものもあります。</p>
4	<p>まず、「構造/プロパティ」ペインの下部にある「追加」をクリックします。</p>	<p>すると、プロパティのダイアログボックスが表示されます。</p>
5	<p>ドロップダウンリストから追加したいプロパティを選択します。ここでは「コメント」を選びます。</p> <p>「値」ボックスに「高純度」と入力します。</p>	

	アクション	結果																														
6	OK をクリックします。	<p>プロパティダイアログボックスが閉じられ、追加したプロパティの名前と値が「構造/プロパティ」ペインに表示されます。</p> <table border="1" data-bbox="701 448 1444 1003"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> <tr> <th>全プロパティ</th> <th>添付ファイル</th> <th>選択したプロパティ</th> </tr> <tr> <th colspan="2">名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td colspan="2">名称</td> <td>Ethyl acetate</td> </tr> <tr> <td colspan="2">Comments</td> <td>High purity</td> </tr> <tr> <td colspan="2">Formula</td> <td>C₄H₈O₂</td> </tr> <tr> <td colspan="2">InChI</td> <td>InChI=1S/C4H8O2/c1-3-6-4(2)5/h3H2,1-2H3</td> </tr> <tr> <td colspan="2">InChIKey</td> <td>XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYSA-N</td> </tr> <tr> <td colspan="2">Molecular Weight</td> <td>88.106 g/mol</td> </tr> <tr> <td colspan="2">Origin</td> <td>KnowItAll Informatics System</td> </tr> </tbody> </table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称		値	名称		Ethyl acetate	Comments		High purity	Formula		C ₄ H ₈ O ₂	InChI		InChI=1S/C4H8O2/c1-3-6-4(2)5/h3H2,1-2H3	InChIKey		XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYSA-N	Molecular Weight		88.106 g/mol	Origin		KnowItAll Informatics System
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																														
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																														
名称		値																														
名称		Ethyl acetate																														
Comments		High purity																														
Formula		C ₄ H ₈ O ₂																														
InChI		InChI=1S/C4H8O2/c1-3-6-4(2)5/h3H2,1-2H3																														
InChIKey		XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYSA-N																														
Molecular Weight		88.106 g/mol																														
Origin		KnowItAll Informatics System																														
	ヒント	<p>同じ値を複数のフィールドに入力する場合は、複数のデータベースレコードを選択し、「構造/プロパティ」ペインの下部にある「追加」または「編集」ボタンを使用します。</p>																														

ユーザープロパティを追加

	アクション	結果
1	「データベース」 > 「ユーザープロパティフィールドの定義」を選択してください。	すると、「ユーザープロパティフィールド」ダイアログボックスが表示されます。
2	<p>「Add」をクリックします。</p> <p>ドロップダウンリストからタイプをテキストに設定します。</p> <p>名前を入力してください。</p>	<p>「プロパティフィールドの定義」ダイアログボックスが表示されます。</p>  <p>注記：フィールドのタイプによって利用可能なコントロールが異なります：数値、テキスト、列挙型など。</p>
3	OK をクリックします。その後、閉じるをクリックします。	
4	「構造/プロパティ」ペインで「追加」をクリックしてください。	<p>「プロパティ」ダイアログボックスが表示されます。</p> <p>注記：「表示」 > 「ウィンドウ/テーブル」 > 「構造/プロパティテーブル」をクリックするか、もし表示されていない場合は Alt キーを押しながら 3 キーを押してください。</p>
5	全ての利用可能なプロパティを表示するために、下向きの矢印をクリックします。	事前に定義されたプロパティとユーザー定義のプロパティが表示されます。ユーザー定義のプロパティはリストの先頭にあります。

6	<p>「SampleID」を選択します。</p> 	<p>ダイアログに「値」のテキストボックスが追加されます。</p> <p>注記： プロパティの種類によって追加されるテキストボックスは異なります。数値、テキスト、列挙型などに応じて表示されます。</p>
7	<p>「値」のテキストボックスに「1234」と入力してください。</p>	

8 **OK** をクリックします。

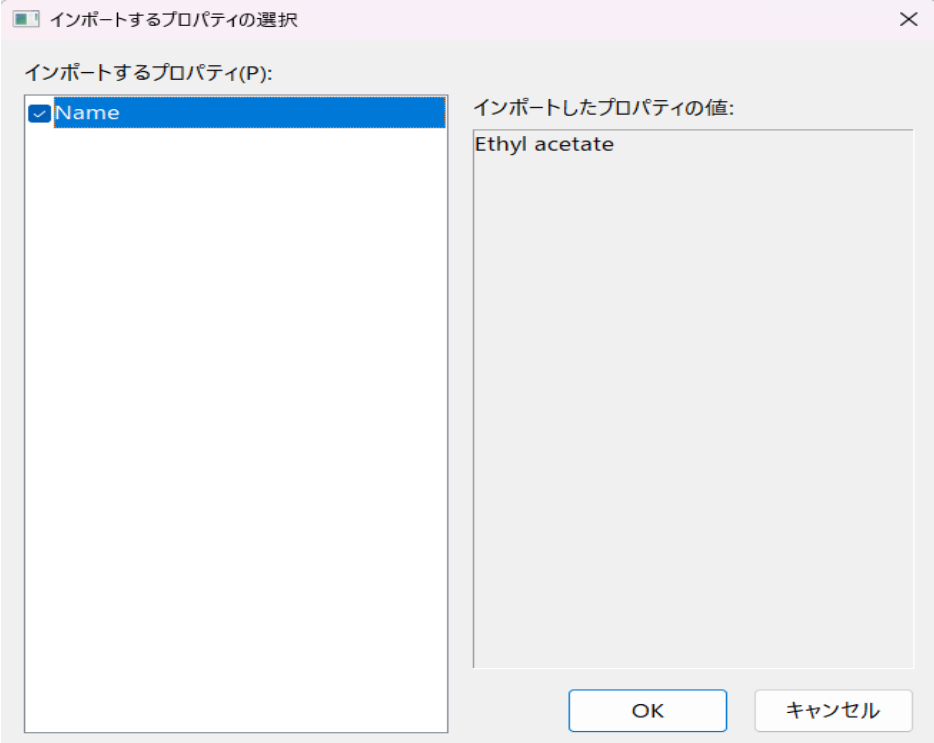
ダイアログボックスが閉じます。プロパティ「**SampleID**」の値が「1234」として、最初のレコードの「**構造/プロパティ**」ペインに追加されます。

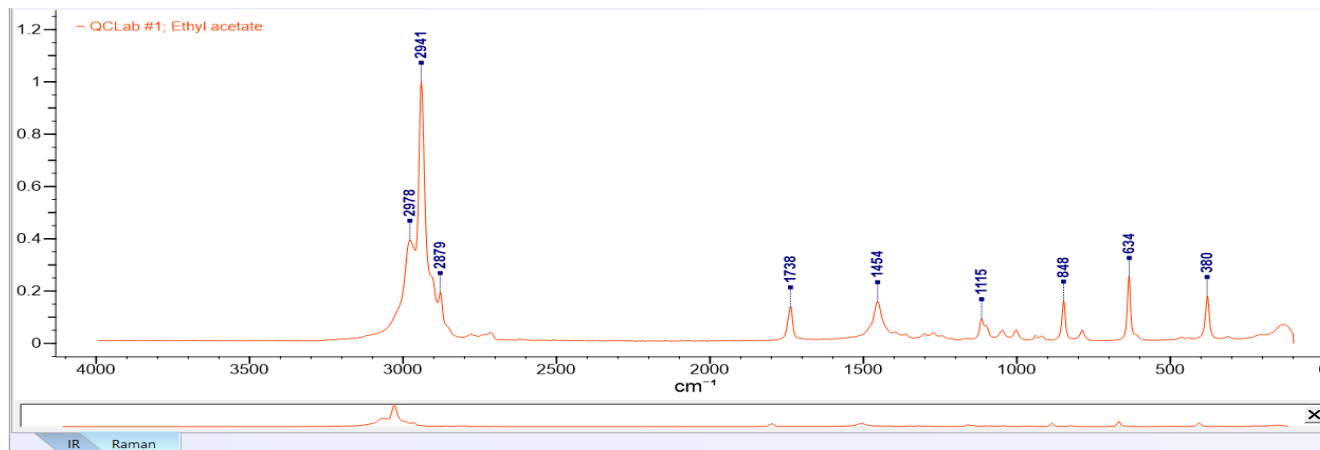

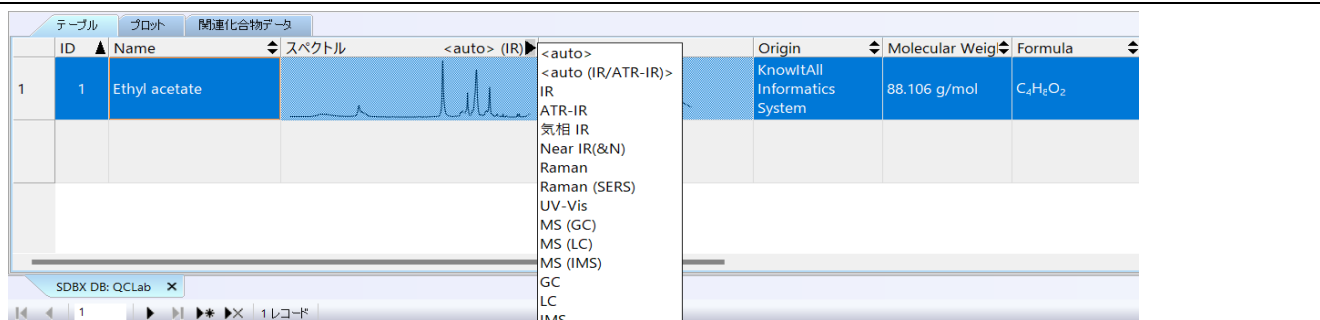
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ
名称		値
名称	Ethyl acetate	
Comments	High purity	
Formula	C ₄ H ₈ O ₂	
InChI	InChI=1S/C4H8O2/c1-3-6-4(2)5/h3H2,1-2H3	
InChIKey	XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYSA-N	
Molecular Weight	88.106 g/mol	
Origin	KnowItAll Informatics System	
SampleID	1234	

追加... 編集... 削除



	アクション	結果																																				
9	<p>手順 1 から 8 までを繰り返し、ユーザープロパティ「WebLink」を作成し、「構造/プロパティ」ペインに表示してください。</p> <p>「プロパティ」ダイアログボックスの値フィールドに「https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/ethyl-acetate」と入力してください。</p>	<p>ウェブアドレスを持つ「WebLink」というプロパティが、最初のレコードの「構造/プロパティ」ペインに追加されます。</p> <table border="1" data-bbox="877 440 1318 878"> <thead> <tr> <th>部分構造 全プロパティ</th> <th>選択部分構造 添付ファイル</th> <th>オリジナルデータファイル 選択したプロパティ</th> </tr> <tr> <th>名称</th> <th colspan="2">値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td colspan="2">Ethyl acetate</td> </tr> <tr> <td>Comments</td> <td colspan="2">High purity</td> </tr> <tr> <td>Formula</td> <td colspan="2">C₄H₈O₂</td> </tr> <tr> <td>InChI</td> <td colspan="2">InChI=1S/C4H8O2/c1-3-6-4(2)5/h3H2,1-2H3</td> </tr> <tr> <td>InChIKey</td> <td colspan="2">XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYSA-N</td> </tr> <tr> <td>Molecular Weight</td> <td colspan="2">88.106 g/mol</td> </tr> <tr> <td>Origin</td> <td colspan="2">KnowItAll Informatics System</td> </tr> <tr> <td>SampleID</td> <td colspan="2">1234</td> </tr> <tr> <td>Web Link</td> <td colspan="2">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/ethyl-acetate</td> </tr> <tr> <td colspan="3"> <div style="display: flex; justify-content: space-around;"> 追加... 編集... 削除 </div> </td> </tr> </tbody> </table>	部分構造 全プロパティ	選択部分構造 添付ファイル	オリジナルデータファイル 選択したプロパティ	名称	値		名称	Ethyl acetate		Comments	High purity		Formula	C ₄ H ₈ O ₂		InChI	InChI=1S/C4H8O2/c1-3-6-4(2)5/h3H2,1-2H3		InChIKey	XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYSA-N		Molecular Weight	88.106 g/mol		Origin	KnowItAll Informatics System		SampleID	1234		Web Link	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/ethyl-acetate		<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> 追加... 編集... 削除 </div>		
部分構造 全プロパティ	選択部分構造 添付ファイル	オリジナルデータファイル 選択したプロパティ																																				
名称	値																																					
名称	Ethyl acetate																																					
Comments	High purity																																					
Formula	C ₄ H ₈ O ₂																																					
InChI	InChI=1S/C4H8O2/c1-3-6-4(2)5/h3H2,1-2H3																																					
InChIKey	XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYSA-N																																					
Molecular Weight	88.106 g/mol																																					
Origin	KnowItAll Informatics System																																					
SampleID	1234																																					
Web Link	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/ethyl-acetate																																					
<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> 追加... 編集... 削除 </div>																																						
10	<p>「構造/プロパティ」ペインのウェブアドレスをクリックしてください。</p>	<p>ウェブページが開きます。</p> 																																				
11	<p>「KnowItAllBack」ボタンをクリックして、Minelt アプリケーションに戻ってください。</p>																																					

最初のデータベースレコードに別のスペクトル（ラマンスペクトル）を追加

	アクション	結果
1	最初のデータベースレコードが選択されていることを確認した後、[ファイル]>[インポート]を選択します。	プレビューペインが表示される「開く」ダイアログボックスが表示されます。
2	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Raman フォルダに移動してください。 Ethyl acetate.irf を開いてください。	<p>「プロパティのインポート選択」ダイアログボックスが開きます。</p>  <p>このダイアログボックスは、情報をユーザーデータベースに転送する際に表示されます。利用可能なプロパティがすべて表示されます。</p>
	アクション	結果

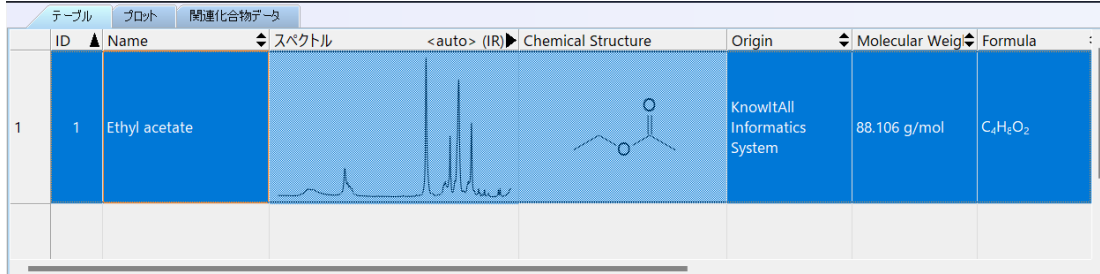

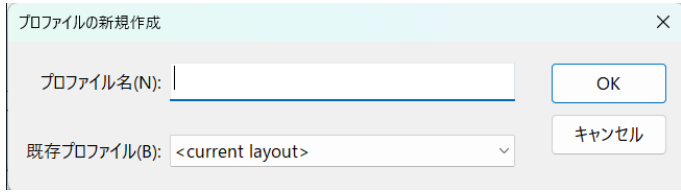
<p>3 OK をクリックします。</p>	<p>新しい「ラマン」タブがスペクトルペインに追加され、ラマンスペクトルの表示が行われます。</p>  <p>The figure shows a Raman spectrum plot for Ethyl acetate. The x-axis represents wavenumber in cm⁻¹, ranging from 4000 to 0. The y-axis represents intensity, ranging from 0 to 1.2. Several peaks are labeled with their wavenumbers: 2941, 2978, 2879, 1738, 1454, 1115, 848, 634, and 380. The plot is titled '- QCLab #1; Ethyl acetate'.</p>
<p>4 スペクトル間を切り替えるには、スペクトルペイン左下のタブを使用します。</p>	 <p>The figure shows a close-up of the bottom left corner of the spectrum plot area. There are two tabs: 'IR' and 'Raman'. The 'Raman' tab is currently selected and highlighted in blue.</p>
<p>5 また、データベースペインの「スペクトル」列の矢印をクリックすることもスペクトル間を切り替えることができます。</p>	 <p>The figure shows a screenshot of a database table with columns: ID, Name, スペクトル (Spectrum), Origin, Molecular Weight, and Formula. The 'Ethyl acetate' entry is selected. A dropdown menu is open for the 'Spectrum' column, listing various spectral techniques: <auto> (IR), <auto> (IR/ATR-IR), IR, ATR-IR, 気相 IR (Gas phase IR), Near IR(&N), Raman, Raman (SERS), UV-Vis, MS (GC), MS (LC), MS (IMS), GC, LC, and IMS. The 'IR' option is currently selected.</p>

最初のデータベースレコードに添付ファイルを追加

	アクション	結果
1	<p>最初のデータベースレコードが選択されていることを確認した後、[構造/プロパティ]ペインの[添付ファイル]タブをクリックします。</p>	<p>[添付ファイル]タブが空の状態が表示されます。</p> 
2	<p>[ファイル] > [添付ファイルのインポート]を選択します。</p>	<p>Windows の[開く]ダイアログボックスが表示されます。</p>
3	<p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Mineltフォルダに移動してください。</p> <p>Ethyl acetate MSDS.pdf を選択します。 [開く]をクリックします。</p>	<p>アイコンが[添付ファイル]タブに追加されます。</p> 

	アクション	結果
4	[添付ファイル]タブのアイコンをダブルクリックします。	<p>すると、ドキュメントはその元のアプリケーションである Adobe Acrobat で開かれます。</p> <p>SIGMA-ALDRICH <small>sigma-aldrich.com</small></p> <p style="text-align: right;">SAFETY DATA SHEET Version 4.11 Revision Date 02/26/2015 Print Date 06/09/2015</p> <hr/> <p>1. PRODUCT AND COMPANY IDENTIFICATION</p> <p>1.1 Product identifiers</p> <p>Product name : Ethyl acetate</p> <p>Product Number : 270989 Brand : Sigma-Aldrich Index-No. : 607-022-00-5</p> <p>CAS-No. : 141-78-6</p> <p>1.2 Relevant identified uses of the substance or mixture and uses advised against</p> <p>Identified uses : Laboratory chemicals, Manufacture of substances</p> <p>1.3 Details of the supplier of the safety data sheet</p> <p>Company : Sigma-Aldrich 3050 Spruce Street SAINT LOUIS MO 63103 USA</p> <p>Telephone : +1 800-325-5832 Fax : +1 800-325-5052</p> <p>1.4 Emergency telephone number</p> <p>Emergency Phone # : (314) 776-6555</p> <hr/> <p>2. HAZARDS IDENTIFICATION</p> <p>2.1 Classification of the substance or mixture</p> <p>GHS Classification in accordance with 29 CFR 1910 (OSHA HCS) Flammable liquids (Category 2), H225 <small>Combustible liquid</small></p> <p>注記：[添付ファイル]タブを使用すると、ユーザーデータベースのレコードにさまざまな種類のファイルを添付することができます。また、[ファイル]>[エクスポート]>[添付ファイル]を選択することで、添付されたファイルをエクスポートすることもできます。</p>

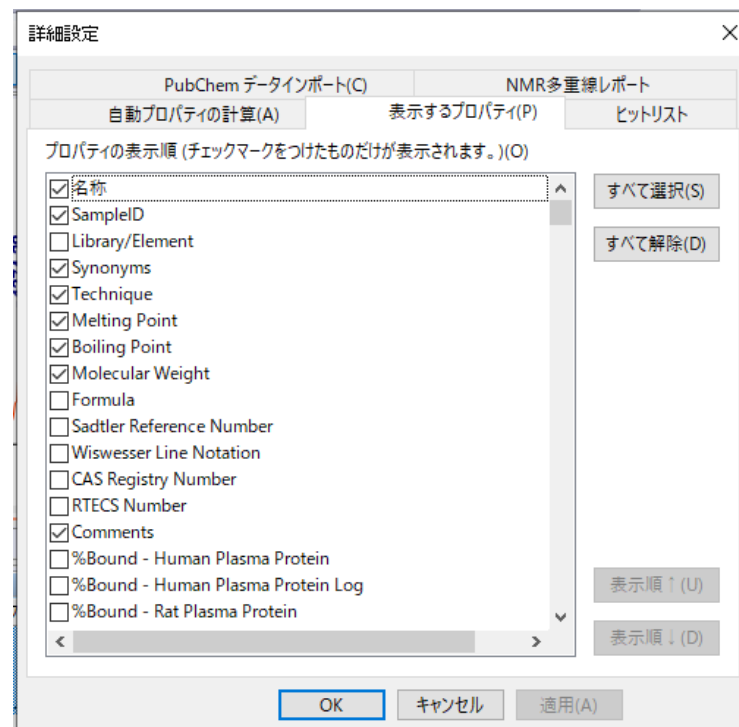
新しい **Minelt** の表示プロファイルを作成

	アクション	結果
1	まず、テーブルの行の高さを適切な値に調整します。	<p>例えば、行の高さを十分な値に設定します：</p> 
1	<p>プロファイルツールバーの「新しいプロファイルを追加」ボタン  をクリックします。</p>	<p>「新しいプロファイル」ダイアログボックスが表示されます。</p> 
2	「プロフィール名」に「 QC Lab 」と入力し、 OK をクリックします。	これにより、このレイアウトは Minelt アプリケーションの任意のデータベースやヒットリストの表示に適用できるようになります。

ヒント

研究室内の各ユーザーがデータベースに関連する重要な情報を一貫して入力するためには、好みのプロパティを設定する必要があります。

そのためには、[ファイル]>[環境設定]を選択します。環境設定ダイアログボックスが開いたら、[プロパティ表示]タブを選択します。[すべて解除]をクリックしてすべてのプロパティをクリアし、入力したいプロパティとその順序を選択します。



その後、ユーザーはそのプロファイルに必要な情報を入力します。特定のプロパティに情報がない場合は、[すべてのプロパティ]には表示されません。

一括インポート：多数のスペクトルデータとレコードを、スプレッドシートからのプロパティを一括で取り込む

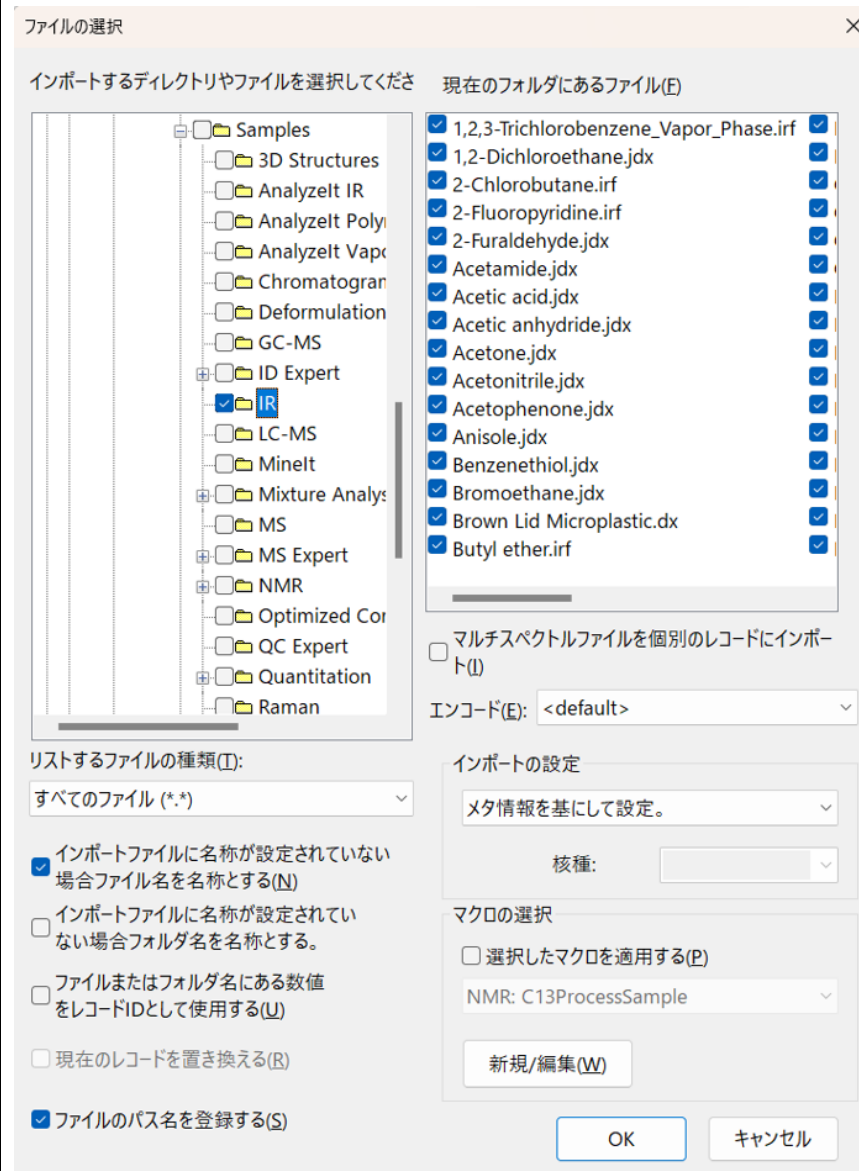
	アクション	結果
1	前述の例と同様に、新しい空のデータベースを作成します。	

2 [ファイル]>[一括インポート]を選択すると、[ファイルの選択]ダイアログボックスが表示されます。

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR に移動し、フォルダ内のすべてのスペクトルファイルを選択します。

フォルダ名の横にあるチェックボックスを選択すると、そのフォルダ内のすべてのファイルが選択されます。

OK をクリックします。



新しいデータベース内には、各スペクトルファイルに対してレコードが作成されます。

3 [ファイル]>[インポート]を選択します。

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Minelt
に移動します


スプレッドシートを使用してスペクトルファイルとプロパティ
のマッピングを行うための **BatchImportProperties.csv** を選択
します。

「Open」をクリックします。

ファイルにヘッダーラインが含まれていることを確認してくだ
さい。

次へをクリックします。

スプレッドシートファイルのインポートウィザードが開きます。



ステップ 1: ファイルの解析

スペクトルとして読み込む(S)

インポートする行

すべて(A) 行指定(R):

配置

ファイルにヘッダー情報がある(H) id,Name,CAS Registry Number,Synonyms

区切り文字(D): , エンコード(E): <default>

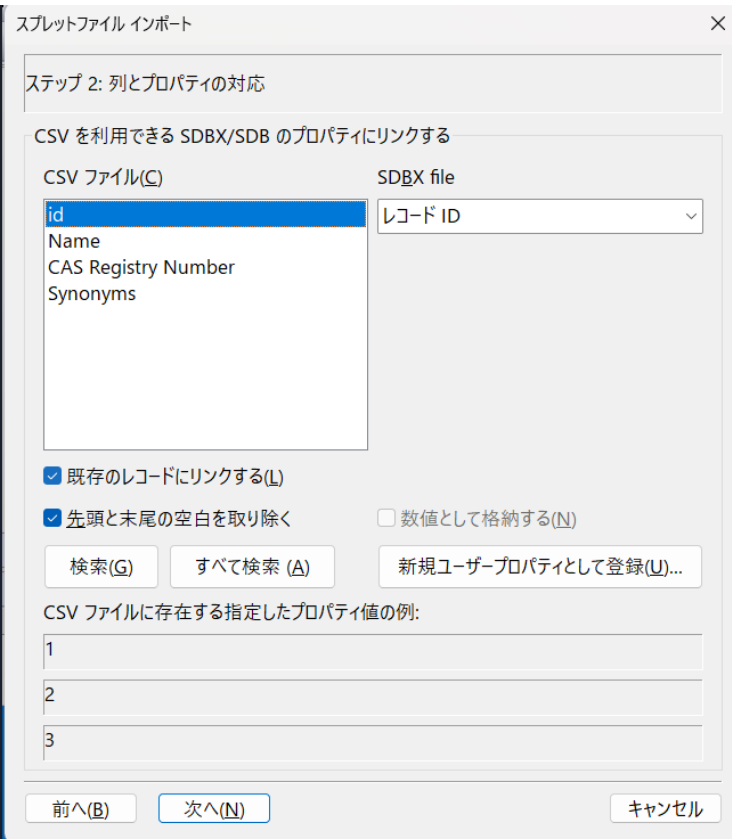
id	Name	CAS Registr...	Synonyms
1	1, 2-Dichlor...	107-06-2	Ethylene chl...
2	2-Chlorobut...	78-86-4	sec-Butyl ch...
3	2-Fluoropyri...	372-48-5	o-Fluoropyri...
4	2-Furaldehy...	98-01-1	Furfural
5	Acetamide	60-35-5	Ethanamide
6	Acetic acid	64-19-7	Ethanoic acid
7	Acetic anhy...	108-24-7	Ethanoic an...
8	Acetone	67-64-1	2-Propanone

ファイル解析完了 (34 行読込)

前へ(B) 次へ(N) キャンセル

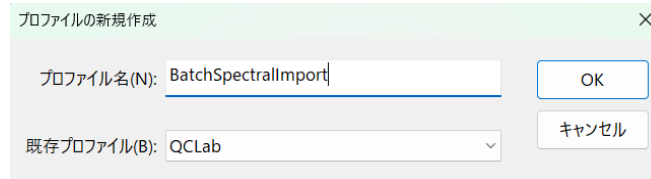
アクション

結果

<p>4 「すべて提案」をクリックし、自動的なフィールドのマッチングを行います。</p> <p>CSV ファイルの「id」に対応する SDBX ファイルの「レコード ID」を確認してください。他も同様にしてください：</p> <p>CSV の「id」フィールドが SDBX/SDB ファイルの「レコード ID」フィールドと一致していることを確認してください。具体的には：</p> <p>Name = Name (名前 = 名前)</p> <p>CAS 登録番号 = CAS 登録番号</p> <p>Synonyms = Synonyms (シノニムス = シノニムス)</p> <p>既存のレコードとのリンク付けに使用するオプションがまだチェックされていない場合は、それをチェックしてください。</p> <p>次へをクリックします。</p>	 <p>スプレッドファイル インポート</p> <p>ステップ 2: 列とプロパティの対応</p> <p>CSV を利用できる SDBX/SDB のプロパティにリンクする</p> <table border="1"><thead><tr><th>CSV ファイル(C)</th><th>SDBX file</th></tr></thead><tbody><tr><td>id</td><td>レコード ID</td></tr><tr><td>Name</td><td></td></tr><tr><td>CAS Registry Number</td><td></td></tr><tr><td>Synonyms</td><td></td></tr></tbody></table> <p><input checked="" type="checkbox"/> 既存のレコードにリンクする(L)</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 先頭と末尾の空白を取り除く <input type="checkbox"/> 数値として格納する(N)</p> <p>検索(G) すべて検索 (A) 新規ユーザープロパティとして登録(U)...</p> <p>CSV ファイルに存在する指定したプロパティ値の例:</p> <p>1</p> <p>2</p> <p>3</p> <p>前へ(B) 次へ(N) キャンセル</p>	CSV ファイル(C)	SDBX file	id	レコード ID	Name		CAS Registry Number		Synonyms	
CSV ファイル(C)	SDBX file										
id	レコード ID										
Name											
CAS Registry Number											
Synonyms											
<p>5 「完了」をクリックします。</p> <p>プロンプトでデータベースを今すぐ最適化する必要はありません。</p>	<p>データベースには、CSV ファイルによって Synonyms フィールドと CAS 登録番号 フィールドが入力されます。</p>										

ヒント

このデータベースのスプレッドシート部分を編集することができます。たとえば、空の構造列を削除する場合は、列を右クリックして「列の削除」を選択します。編集が完了したら、この列の配置を **Minelt** プロファイルとして保存することができます。**プロファイル** ツールバーで「**現在のプロファイルを保存**」をクリックし、新しいプロファイルの名前を入力します。



プロファイルの新規作成

プロファイル名(N): BatchSpectralImport


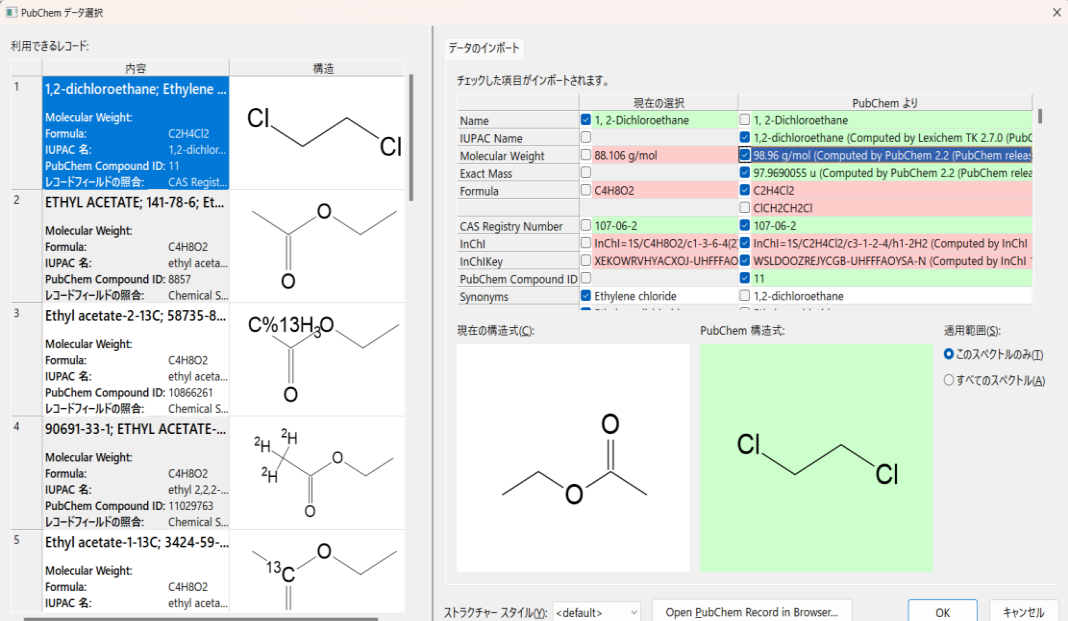
既存プロファイル(B): QCLab

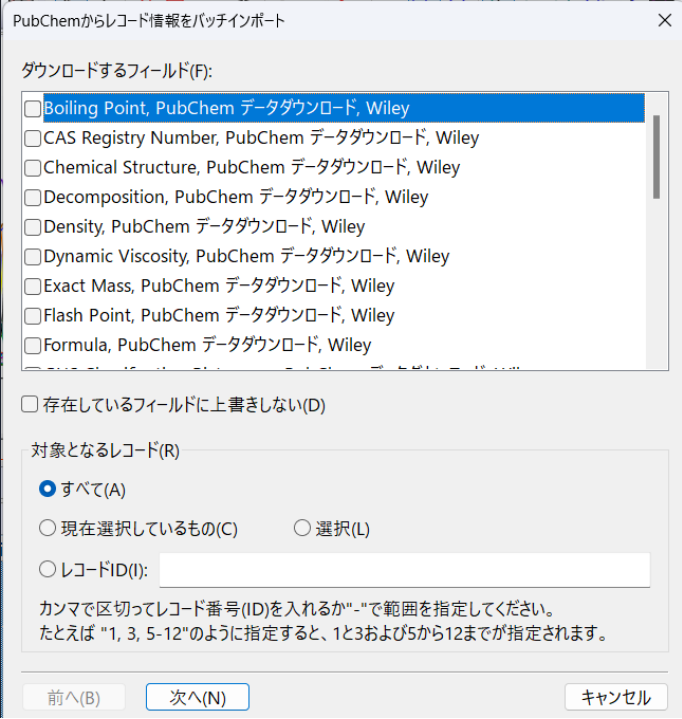
OK

キャンセル

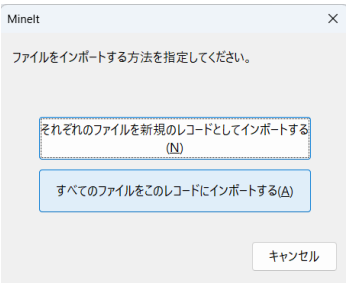
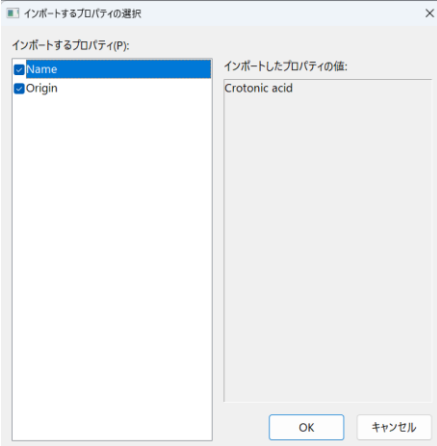
このプロファイルは、このデータベースと関連付けられます。他のデータベースでも使用するために選択することができます。

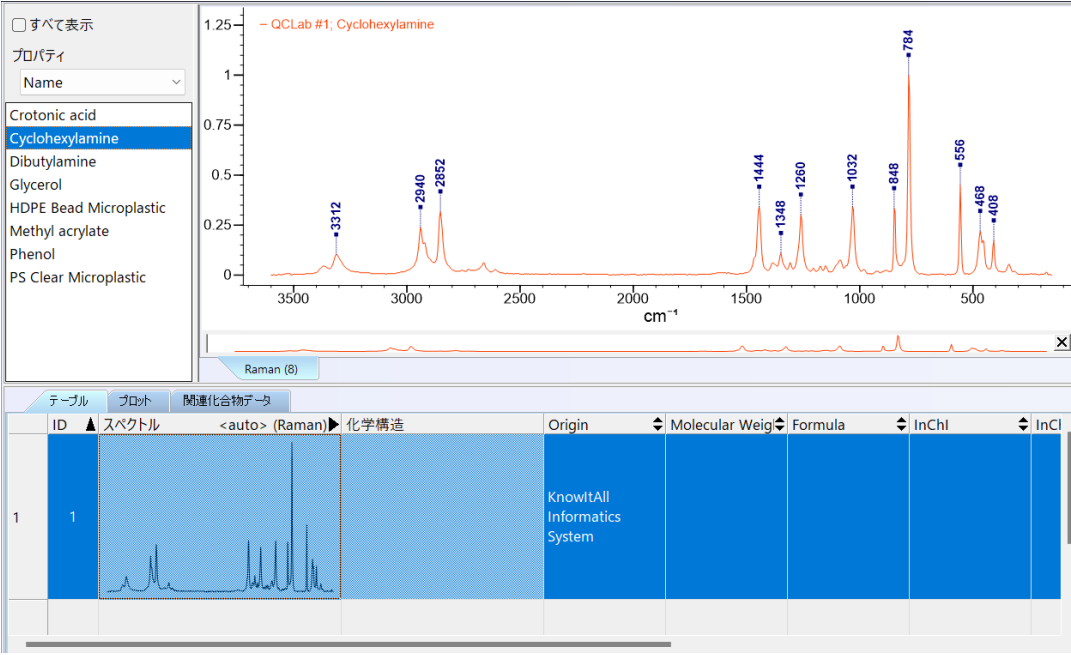
一括インポート：多数のスペクトルデータとレコードを、**PubChem** からのプロパティを一括で取り込む

アクション	結果
<p>1 まず、上記のデータベースから最初のレコードを選択し、PubChem のツールバーボタンをクリックします。</p> 	<p>PubChem によるレコードの検索が行われます。情報が見つかった場合、PubChem データ選択ダイアログボックスが表示されます。</p> 

	アクション	結果
2	OK をクリックします。	PubChem から新しいプロパティが最初のデータベースレコードに追加されます。
3	次に、Shift キーを押しながら残りのデータベースレコードを選択し、[データベース]>[バッチ PubChem 情報のダウンロード]を選択します。	<p>すると、バッチ PubChem 情報のダウンロードダイアログボックスが表示されます。</p> 
4	データベースレコードに追加したいプロパティフィールドをチェックし、[次へ]をクリックします。	これにより、PubChem から新しいプロパティが残りのデータベースレコードに追加されます。

一括インポート：複数のスペクトル、1つのレコード

	アクション	結果
1	前述の例と同様に、新しい空のデータベースを作成します。	
2	<p>[ファイル]>[インポート]を選択します。</p> <p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Raman フォルダに移動します。</p> <p>フォルダ内の全ての.DXファイルを選択します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	<p>ダイアログボックスが表示され、ファイルのインポート方法を選択するように求められます。</p> 
3	「このレコードに全てのファイルをインポート」をクリックします。	<p>プロパティのインポート選択ダイアログが開きます。</p>  <p>インポートしたいプロパティにチェックを入れます。</p>

	アクション	結果
4	ダイアログが表示されるたびに OK をクリックします。	ダイアログボックスは、レコード内の各スペクトルに対して 1 回ずつ表示されます。
5	最初のレコードが選択された状態で、スペクトルペインを確認します。	<p>タブには、最初のレコードに関連付けられた 6 つのラマンスペクトルが表示されています。</p> 
6	左側のペインでスペクトルの名前をクリックして表示します。	

	アクション	結果
7	[ウィンドウ] > [3分割]を選択します。	<p>スペクトルペインは3つに分割され、6つのスペクトルのうち3つが表示されます。</p> <p>The figure displays three vertically stacked Raman spectra plots. Each plot has a y-axis for intensity and an x-axis for wavenumber in cm⁻¹, ranging from 3600 to 200. The top plot is for Cyclohexylamine, the middle for Dibutylamine, and the bottom for Glycerol. Each plot shows several sharp peaks with their corresponding wavenumbers labeled. The plots are separated by horizontal lines, and each has a 'Raman (8)' label at the bottom left.</p>

ユーザーデータベースの作成方法

構造を含むデータベースを作成

目的

この演習では、KnowItAll の Minelt データベース構築機能を使って、検索可能なユーザーデータベースを作成す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:

- ユーザーデータベースの作成方法
- ユーザーデータベースに構造を追加する方法
- ステレオ化学の特性を表示する方法
- ユーザープロパティの追加方法

背景

ユーザーデータベースの作成により、知的財産を保護し、組織内で情報の共有を促進する。

結果として、研究者は自分の分析を改善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\Structures フォルダに移動します。

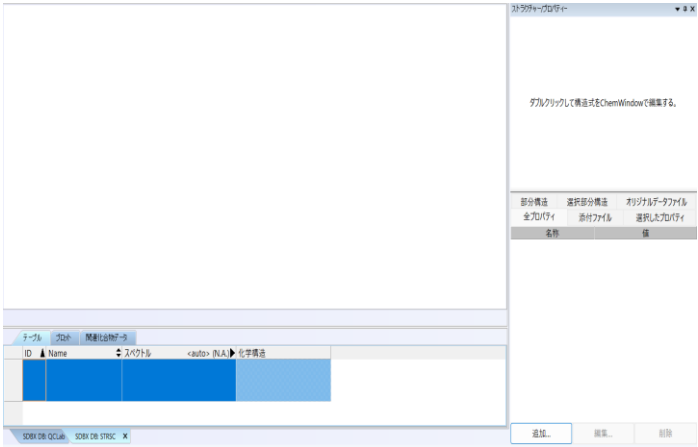
- benzylpenicillin.dsf


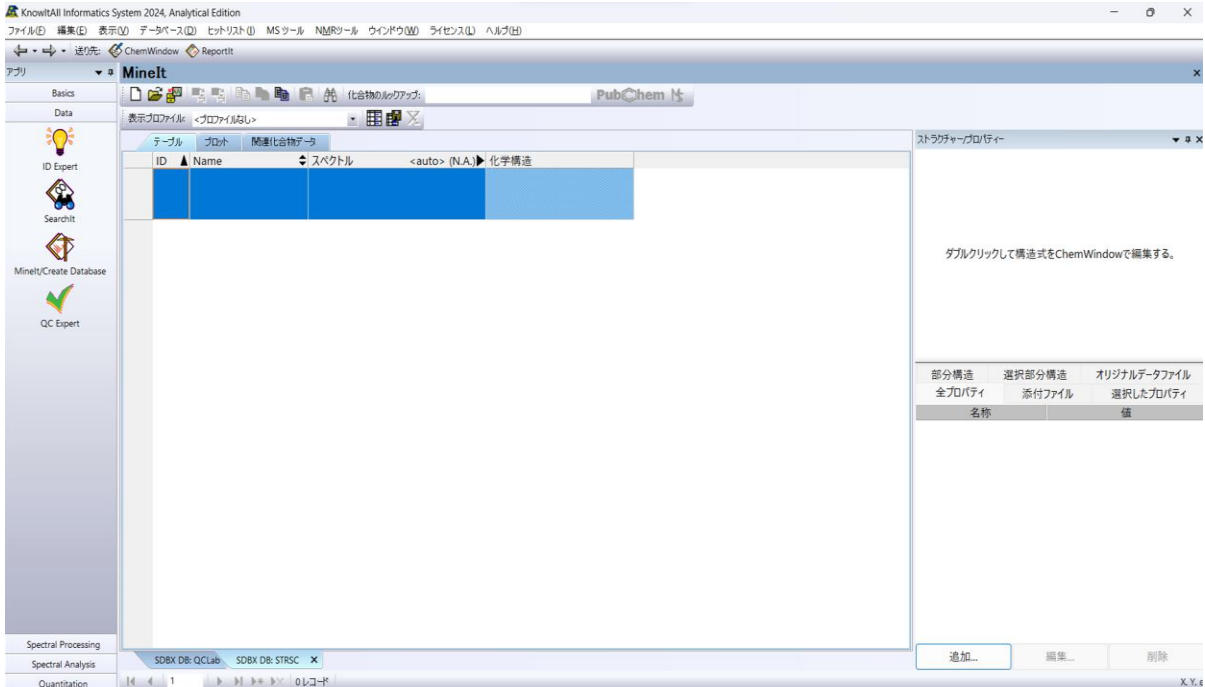
KnowItAll 使用アプリケーション

- Minelt™
- ChemWindow®

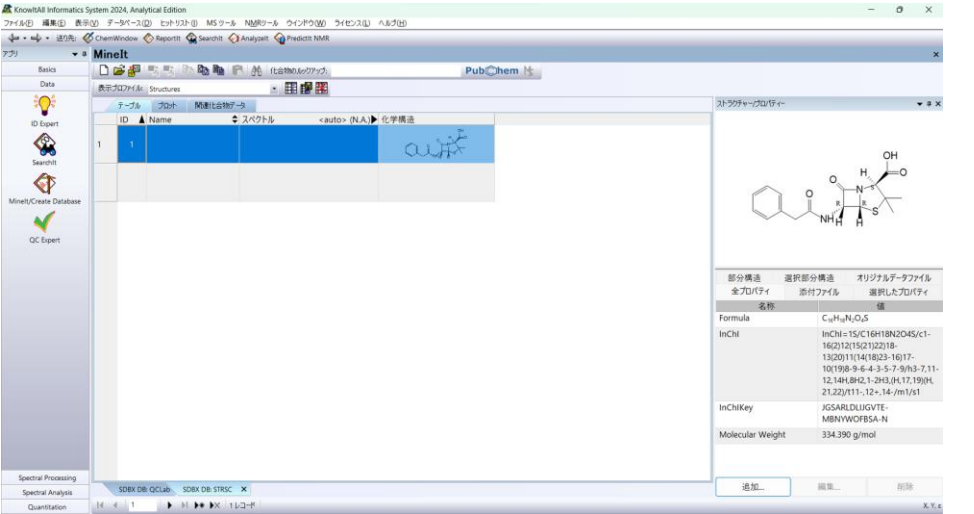
ユーザーデータベースを作成

	アクション	結果
1	Minelt アプリケーションを開き、 Database > New (データベース > 新規) を選択します。	新しいデータベース作成ダイアログボックスが表示されます。 
2	「ローカルシステムに作成」を選択します。	これにより、新しいデータベースがローカルに保存されます。
3	「 Browse 」をクリックします。 以前に作成したデータベースフォルダに移動します。 データベースファイル名に「 structures-sc 」と入力します。 Save (保存) をクリックします。	自動的に「*.sdbx」という拡張子が追加されます。 注記 : SDBX データベース形式では、スペクトルを特定の範囲や解像度に合わせる必要はありません。これにより、参照スペクトルをより高い解像度で提供することができ、ユーザーは生成されたオリジナルのスペクトルをそのまま保存することができます。
4	データベース名のテキストボックスには「 Structures 」と入力してください。 注記 : 他に指定する名前がない場合は、ファイル名が使用されます。	
	アクション	結果

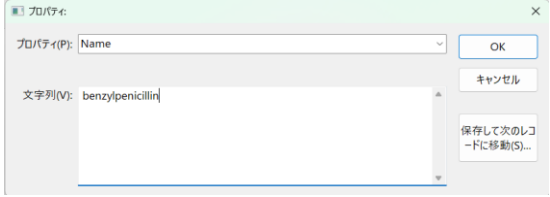
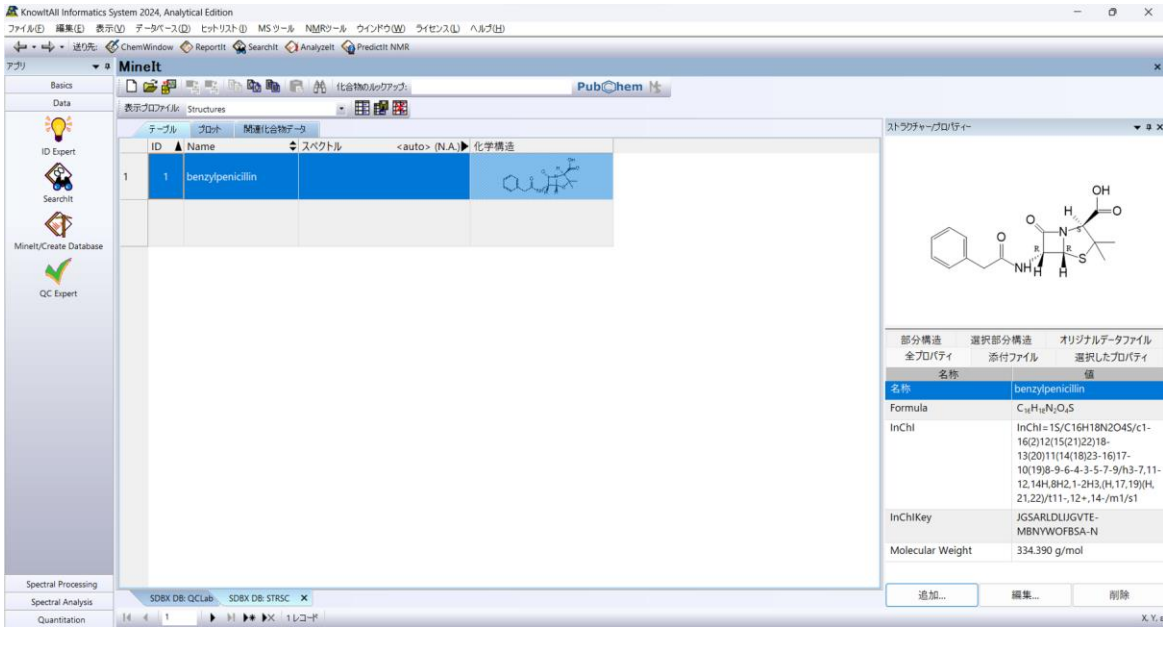
5	<p>データベース略称のテキストボックスには「STRSC」と入力してください。</p> <p>注記：略称は 3 文字から 7 文字の範囲で入力する必要があります。</p>					
6	<p>OK をクリックします。</p>	<p>新しいデータベースが作成され、データの受け入れ準備が整いました。データベース略称は、データベースのタブに表示されます。</p>  <p>The screenshot shows a software window with a tab labeled 'STRSC'. Below the tab is a table with the following structure:</p> <table border="1"><thead><tr><th>ID</th><th>Name</th></tr></thead><tbody><tr><td></td><td></td></tr></tbody></table> <p>Buttons for '追加' (Add), '編集' (Edit), and '削除' (Delete) are visible at the bottom right of the table area.</p>	ID	Name		
ID	Name					
7	<p>表示メニューから「ウィンドウ/テーブル」>「スペクトルペイン」を選択すると、レイアウトからスペクトルの表示が削除されます。</p> <p>注記：このコマンド（およびその他の類似コマンド）は、メインウィンドウの異なるペインの表示を切り替えます。</p>					

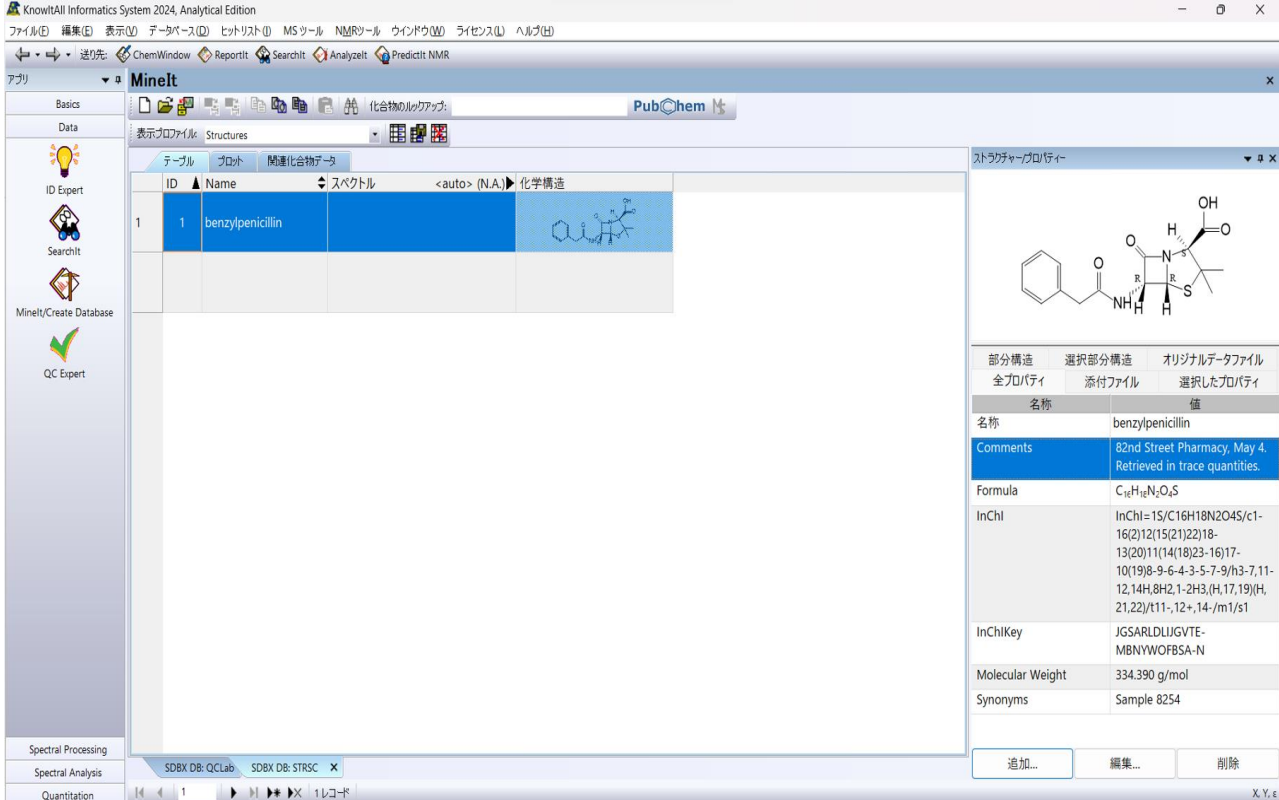
	アクション	結果																			
8	<p>「新しいプロファイルを追加」 ツール バーボタン  をクリックし、新しいプロ ファイルダイアログボックスに 「Structures」という名前を入力し、 OK をクリックしてください。</p>	 <p>KnowItAll Informatics System 2024 Analytical Edition</p> <p>ファイル(F) 編集(E) 表示(V) データベース(D) ヒットリスト(H) MSツール(N) NMRツール(U) ウィンドウ(W) ライセンス(L) ヘルプ(H)</p> <p>ChemWindow ReportIt</p> <p>アプリ</p> <p>Basics</p> <p>Data</p> <p>表示プロファイル <プロファイルなし></p> <p>テーブル プロット 関連化合物検索</p> <table border="1"><thead><tr><th>ID</th><th>Name</th><th>スペクトル</th><th><auto> (N.A.)</th><th>化学構造</th></tr></thead><tbody><tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></tbody></table> <p>ストラクチャープロパティ</p> <p>ダブルクリックして構造式をChemWindowで編集する。</p> <table border="1"><thead><tr><th>部分構造</th><th>選択部分構造</th><th>オリジナルデータファイル</th></tr></thead><tbody><tr><td>全プロパティ</td><td>添付ファイル</td><td>選択したプロパティ</td></tr><tr><td>名称</td><td></td><td>値</td></tr></tbody></table> <p>追加... 編集... 削除</p> <p>Spectral Processing</p> <p>Spectral Analysis SDBX DB: QCLab SDBX DB: STRSC</p> <p>Quantitation</p>	ID	Name	スペクトル	<auto> (N.A.)	化学構造						部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称		値
ID	Name	スペクトル	<auto> (N.A.)	化学構造																	
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																			
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																			
名称		値																			

最初のデータベースのレコードに構造を追加

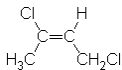
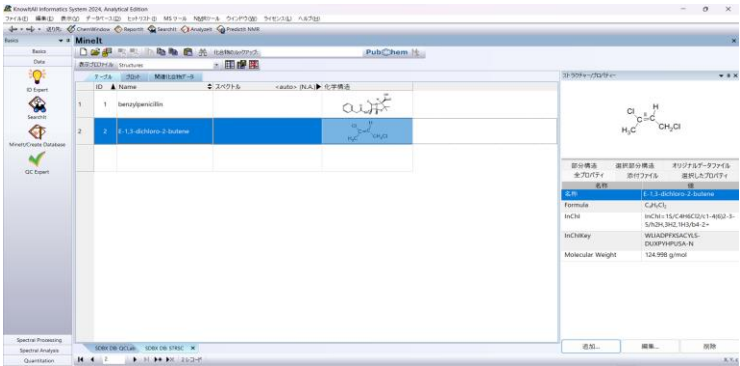
	アクション	結果
1	<p>ファイル > 「インポート」を選択します。</p> <p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Structures フォルダに移動します。</p> <p>Benzylpenicillin.dsf という構造ファイルを開きます。</p>	<p>構造は「構造/プロパティ」ペインに表示されます。</p> 
2	<p>View (表示) メニューを開き、Stereochemistry (立体化学) がまだチェックされていない場合は、チェックを入れてください。</p>	<p>表示メニューで立体化学が有効になると、構造に立体化学の記述子が表示されます。</p>

データベースレコードにプロパティを追加

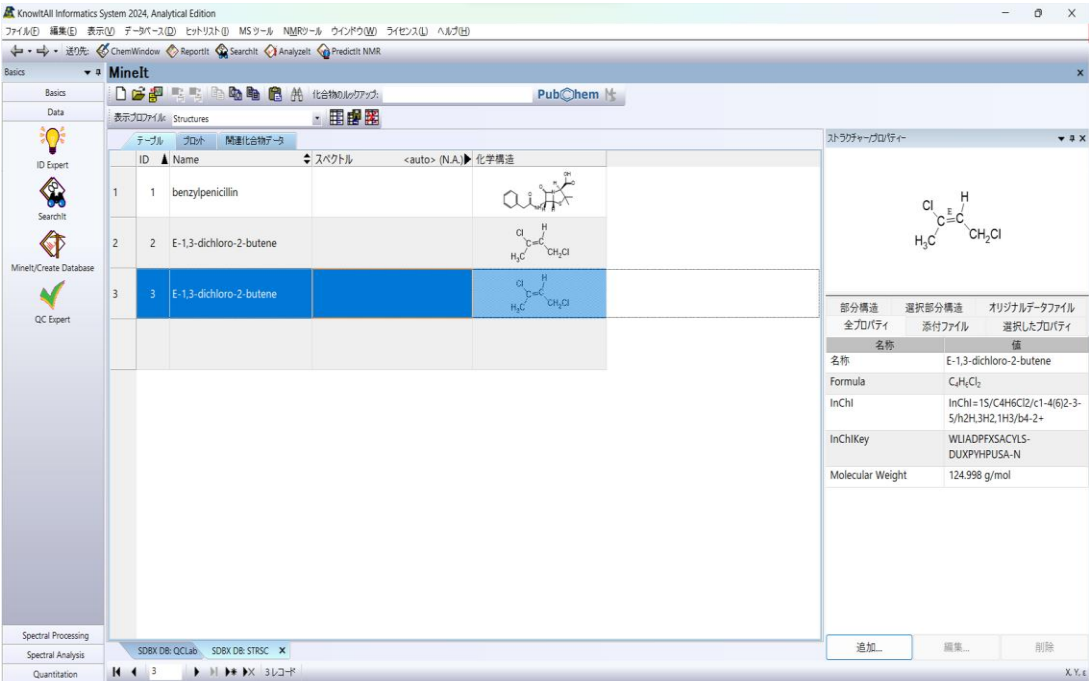









	アクション	結果																								
1	「構造/プロパティ」ペインで「追加」をクリックしてください。	「プロパティ」ダイアログボックスが表示されます。																								
2	プロパティの名前を選択し、値のテキストボックスに「benzylpenicillin」と入力します。																									
3	OK をクリックします。	<p>プロパティのダイアログボックスが閉じられ、追加されたプロパティの名前が「構造/プロパティ」ペインに表示されます。</p>  <table border="1" data-bbox="1522 1063 1795 1307"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> <tr> <th>全プロパティ</th> <th>添付ファイル</th> <th>選択したプロパティ</th> </tr> <tr> <th>名称</th> <th>値</th> <th></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td>benzylpenicillin</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Formula</td> <td>C₁₆H₁₈N₂O₅S</td> <td></td> </tr> <tr> <td>InChI</td> <td>InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(2)12)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-12-,14-/m1/s1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>InChIKey</td> <td>JGSARLDLJGVTE-MBNWVWFBSA-N</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Molecular Weight</td> <td>334.390 g/mol</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称	値		名称	benzylpenicillin		Formula	C ₁₆ H ₁₈ N ₂ O ₅ S		InChI	InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(2)12)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-12-,14-/m1/s1		InChIKey	JGSARLDLJGVTE-MBNWVWFBSA-N		Molecular Weight	334.390 g/mol	
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																								
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																								
名称	値																									
名称	benzylpenicillin																									
Formula	C ₁₆ H ₁₈ N ₂ O ₅ S																									
InChI	InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(2)12)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-12-,14-/m1/s1																									
InChIKey	JGSARLDLJGVTE-MBNWVWFBSA-N																									
Molecular Weight	334.390 g/mol																									

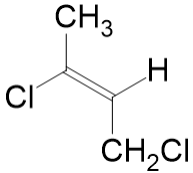
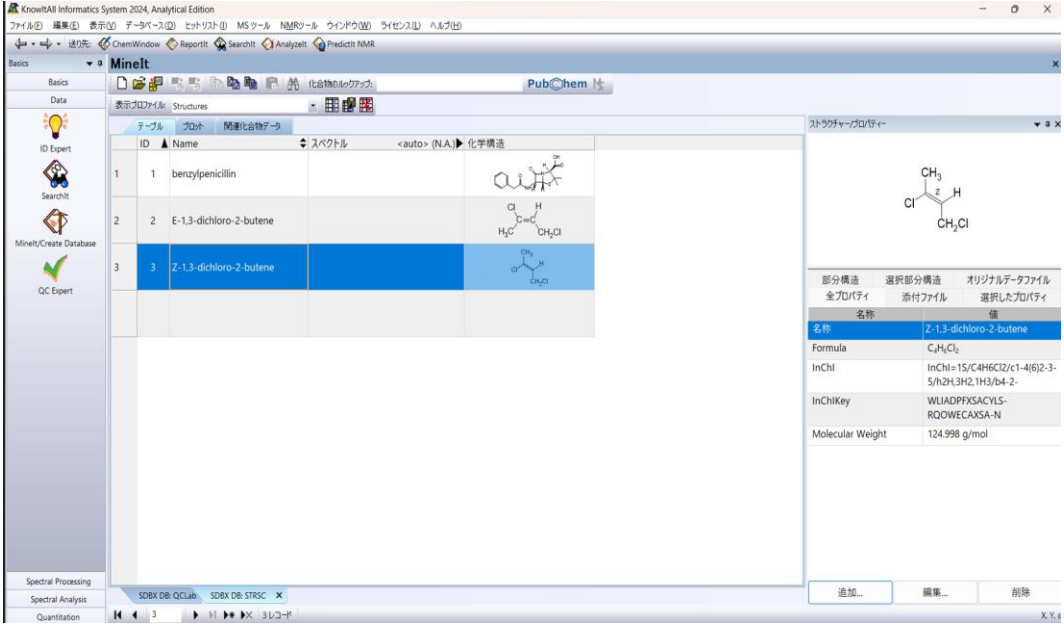
	アクション	結果																														
4	同様に、「 Synonyms 」というプロパティを追加し、値に「 Sample 8254 」と入力します。																															
5	「 Comments 」というプロパティを追加し、値に「 82nd Street Pharmacy, May 4. Retrieved in trace quantities. 」と入力します。	 <p>The screenshot shows the KnowItAll Informatics System 2024, Analytical Edition interface. The main window displays a table with one entry: 'benzylpenicillin'. The right sidebar shows the chemical structure and a table of properties including Name, Comments, Formula, InChI, InChIKey, Molecular Weight, and Synonyms.</p> <table border="1" data-bbox="1606 776 1911 1144"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> <tr> <th>全プロパティ</th> <th>添付ファイル</th> <th>選択したプロパティ</th> </tr> <tr> <th>名称</th> <th>名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td>benzylpenicillin</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Comments</td> <td></td> <td>82nd Street Pharmacy, May 4. Retrieved in trace quantities.</td> </tr> <tr> <td>Formula</td> <td></td> <td>C₁₆H₁₈N₂O₄S</td> </tr> <tr> <td>InChI</td> <td></td> <td>InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-12+/m1/s1</td> </tr> <tr> <td>InChIKey</td> <td></td> <td>JGSARLDLJGVTE-MBNYWOFBSA-N</td> </tr> <tr> <td>Molecular Weight</td> <td></td> <td>334.390 g/mol</td> </tr> <tr> <td>Synonyms</td> <td></td> <td>Sample 8254</td> </tr> </tbody> </table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称	名称	値	名称	benzylpenicillin		Comments		82nd Street Pharmacy, May 4. Retrieved in trace quantities.	Formula		C ₁₆ H ₁₈ N ₂ O ₄ S	InChI		InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-12+/m1/s1	InChIKey		JGSARLDLJGVTE-MBNYWOFBSA-N	Molecular Weight		334.390 g/mol	Synonyms		Sample 8254
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																														
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																														
名称	名称	値																														
名称	benzylpenicillin																															
Comments		82nd Street Pharmacy, May 4. Retrieved in trace quantities.																														
Formula		C ₁₆ H ₁₈ N ₂ O ₄ S																														
InChI		InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-12+/m1/s1																														
InChIKey		JGSARLDLJGVTE-MBNYWOFBSA-N																														
Molecular Weight		334.390 g/mol																														
Synonyms		Sample 8254																														

2 番目のデータベースレコードを追加

	アクション	結果
1	Basics (基本) ツールボックスに移動し、ChemWindow アプリケーションのアイコンをクリックして ChemWindow アプリケーションを開いてください。 注記: この場合、 Transfer to (転送先) バーは使用しないでください。	
2	以下の構造を描画してください： 	
3	選択 ツールを使って構造を選択し、「 編集メ 」>「 コピー 」を選択します。	
4	KnowItAllBack ボタンを使って Minelt アプリケーションに戻ります。	
5	2 番目のデータベースエントリが選択された状態で、「 編集メ 」>「 貼り付け 」を選択します。 メッセージボックスが表示され、「新しいデータを新しいレコードとして追加しますか?」と尋ねられます。 OK をクリックします。	「はい」と答えると、構造が 2 番目のレコードに追加されます。 
6	「名前」というプロパティを追加し、値に「E-1,3-dichloro-2-butene」と入力します。	

3 番目のデータベースレコードを追加

	アクション	結果																								
1	2 番目のデータベースレコードがまだ選択された状態で、「編集メ」>「構造のコピー」を選択します。																									
2	<p>3 番目のデータベースレコードを選択し、「編集メ」>「貼り付け」を選択します。</p> <p>メッセージボックスが表示され、「新しいデータを新しいレコードとして追加しますか？」と尋ねられます。</p> <p>OK をクリックします。</p>	<p>構造とプロパティが 3 番目のデータベースレコードに追加されます。</p>  <p>The screenshot shows the Minelt software interface. The main window displays a table with 3 records. The third record, 'E-1,3-dichloro-2-butene', is selected. The chemical structure of E-1,3-dichloro-2-butene is shown in the structure window on the right. The table has columns for ID, Name, and Structure. The structure window shows the chemical structure of E-1,3-dichloro-2-butene with the formula $C_4H_6Cl_2$.</p> <table border="1" data-bbox="934 673 1428 901"><thead><tr><th>ID</th><th>Name</th><th>Structure</th></tr></thead><tbody><tr><td>1</td><td>benzylpenicillin</td><td></td></tr><tr><td>2</td><td>E-1,3-dichloro-2-butene</td><td></td></tr><tr><td>3</td><td>E-1,3-dichloro-2-butene</td><td></td></tr></tbody></table> <p>Properties window for E-1,3-dichloro-2-butene:</p> <table border="1" data-bbox="1648 828 1911 1023"><thead><tr><th>名称</th><th>値</th></tr></thead><tbody><tr><td>名称</td><td>E-1,3-dichloro-2-butene</td></tr><tr><td>Formula</td><td>C₄H₆Cl₂</td></tr><tr><td>InChI</td><td>InChI=1S/C4H6Cl2/C1-4(6)2-3-5/h2H,3H2,1H3/b4-2+</td></tr><tr><td>InChIKey</td><td>WUADPFXSACYLSDUXPHHUSA-N</td></tr><tr><td>Molecular Weight</td><td>124.998 g/mol</td></tr></tbody></table>	ID	Name	Structure	1	benzylpenicillin		2	E-1,3-dichloro-2-butene		3	E-1,3-dichloro-2-butene		名称	値	名称	E-1,3-dichloro-2-butene	Formula	C ₄ H ₆ Cl ₂	InChI	InChI=1S/C4H6Cl2/C1-4(6)2-3-5/h2H,3H2,1H3/b4-2+	InChIKey	WUADPFXSACYLSDUXPHHUSA-N	Molecular Weight	124.998 g/mol
ID	Name	Structure																								
1	benzylpenicillin																									
2	E-1,3-dichloro-2-butene																									
3	E-1,3-dichloro-2-butene																									
名称	値																									
名称	E-1,3-dichloro-2-butene																									
Formula	C ₄ H ₆ Cl ₂																									
InChI	InChI=1S/C4H6Cl2/C1-4(6)2-3-5/h2H,3H2,1H3/b4-2+																									
InChIKey	WUADPFXSACYLSDUXPHHUSA-N																									
Molecular Weight	124.998 g/mol																									
3	3 番目のデータベースレコードが選択された状態で、構造/プロパティペインをダブルクリックして ChemWindow で構造を開きます。																									

	アクション	結果
4	表示された構造を示された通りに編集し、 [Minelt Database に戻って保存する] をクリックします。 	これにより、構造が 3 番目のデータベースレコードに追加されます。 ChemWindow が閉じられ、 Minelt ウィンドウに戻ります。
5	「名前」というプロパティを「Z-1,3-dichloro-2-butene」と編集します。	

データベースを作成

GC-MS データを使用してユーザーデータベースを構築する方法

目的

この演習では、KnowItAll[®] sMinelt データベース構築機能を使って、複数の分析技術を含む検索可能なユーザーデータベースを作成する方法を説明します。また、表示されるプロパティをカスタマイズしたり、ユーザープロパティや表示プロファイルを作成したりすることもできます。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ユーザーデータベースの作成方法
- GC-MS スキャンをフィルタリングする方法
- ユーザーデータベースにスペクトラを追加する方法
- ユーザーデータベースに構造を追加する方法

背景

ユーザーデータベースの作成により、知的財産を保護し、組織内で情報の共有を促進する。

結果として、研究者は自分の分析を改善することができます。

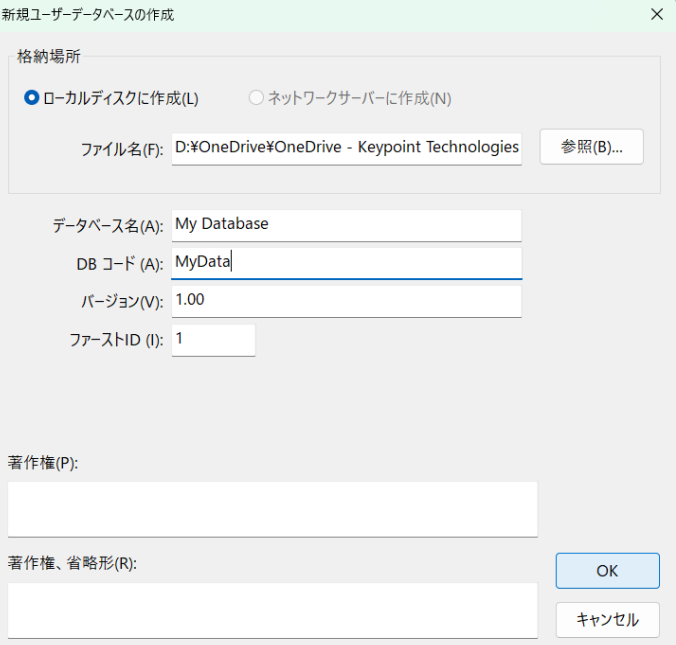
このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

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

KnowItAll 使用アプリケーション

- Minelt™
- ChemWindow®
- Browselt™

GC-MS レコードを作成

	アクション	結果
1	<p>KnowItAll を起動します。</p> <p>Minelt アイコンをクリックします。</p> <p>「データベースメ」 > 「新規」を選択します。</p> <p>データベースの場所を設定するために、「参照」を使用します。</p> <p>タグ（例："MyData"など）を入力します。</p> <p>OK をクリックします。</p>	

2 ファイルメニューから「インポート」を選択します。

ダイアログボックスで、サンプル > GC-MS に移動します。

「Barbiturate GC-MS.d」というファイルを選択します。

「Open」をクリックします。

The screenshot displays the KnowItAll Informatics System 2024, Analytical Edition interface. The main window shows the 'Minelt' project with a table of chemical structures. A file selection dialog is open, showing the file 'Barbiturate GC-MS.d' selected. A chromatogram plot is visible in the bottom right corner, showing peaks at approximately 2.5, 4.5, and 5.5 minutes. The plot is titled 'BARBITURATE MIX' and the x-axis is labeled 'min'.

Name	Date modified	Type
Barbiturate GC-MS.d	17-11-2022 11:41 PM	D File
Structure 1 - Barbitital	17-11-2022 11:41 PM	DSF File
Structure 2 - Butethal	17-11-2022 11:41 PM	DSF File
Structure 3 - Amobarbital	17-11-2022 11:41 PM	DSF File
Structure 4 - Pentobarbital	17-11-2022 11:41 PM	DSF File
Structure 5 - Secobarbital	17-11-2022 11:41 PM	DSF File

Chromatogram plot: BARBITURATE MIX. Data is 2D, TIC only displayed. X-axis: min (1 to 6). Peaks at approximately 2.5, 4.5, and 5.5 minutes.

3 閾値を 10%以上に設定し、[Pick (ピック)]をクリックします。

「Add all spectra to the current record (現在のレコードにすべてのスペクトルを追加)」を選択します。

OK をクリックします。

MSスペクトル選択

インポートするMSスペクトルを指定してください: グローバルレッシュホールド(M): 15.3 % Pick(P)

スペクト...	ロケーション [min]
<input type="checkbox"/> 117	2.20467
<input type="checkbox"/> 118	2.21417
<input type="checkbox"/> 119	2.22383
<input type="checkbox"/> 120	2.23317
<input type="checkbox"/> 121	2.24283
<input type="checkbox"/> 122	2.25233
<input type="checkbox"/> 123	2.262
<input type="checkbox"/> 124	2.2715
<input type="checkbox"/> 125	2.28117
<input type="checkbox"/> 126	2.29067
<input type="checkbox"/> 127	2.30033
<input type="checkbox"/> 128	2.30983
<input type="checkbox"/> 129	2.3195
<input type="checkbox"/> 130	2.32883
<input type="checkbox"/> 131	2.3385
<input type="checkbox"/> 132	2.348
<input type="checkbox"/> 133	2.35767
<input type="checkbox"/> 134	2.368
<input checked="" type="checkbox"/> 135	2.37783
<input type="checkbox"/> 136	2.38733

最小強度

min

m/z

すべて選択(S) すべて解除(D) 選択したスキャン: 2.37783 min

スペクトルインポートモード

MSスペクトル(T)をインポートする このレコードにすべてのスペクトルを追加(A)

クロマトグラム(H) すべてのスペクトルをそれぞれ新規レコードとして追加する(E)

1個の新規レコードにすべてのスペクトルを追加する(L)

OK キャンセル

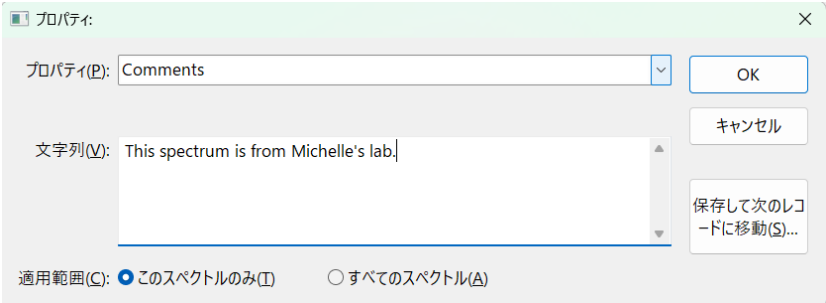

4

The screenshot displays the KnowItAll Informatics System 2024, Analytical Edition interface. The main window shows a chromatogram titled "MyData #1: BARBITURATE MIX" with peaks labeled at retention times 2.38, 3.89, 4.41, 4.81, and 5.11 minutes. The x-axis is labeled "min" and ranges from 1 to 6. Below the chromatogram, a table lists the results for the "BARBITURATE MIX" sample.

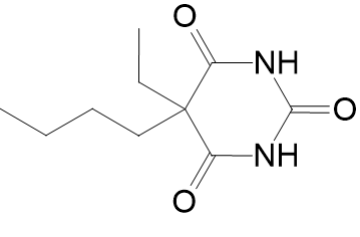
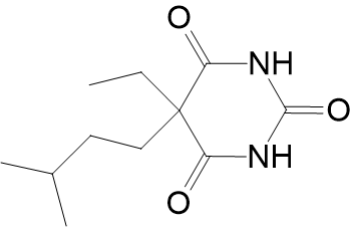
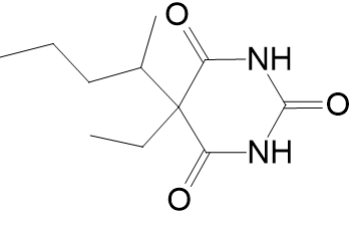
部分構造 全プロパティ	選択部分構造 添付ファイル	オリジナルデータファイル 選択したプロパティ
名称	値	
名称	BARBITURATE MIX	
Instrument Name	MS_5970	
Sample Acquisition Date	9 Jan 86 8:47 am	
Sample Name	BARBITURATE MIX	

Buttons for "追加..." (Add), "編集..." (Edit), and "削除" (Delete) are visible at the bottom right of the table. The status bar at the bottom right shows "(6.102.0.474)".

<p>5 [ウィンドウ]>[2 分割]を選びます。</p> <p>上側のペインには MS が表示されるようにし、下側のペインには GC が表示されるようにします。</p> <p>GC スキャンのペイン上でマウスを動かします。</p> <p>右クリックし、マウスが「選択モード」になっていることを確認します。</p> <p>GC ピークをクリックして、MS のペインが変化するのを確認します。</p>																												
<p>6 MS スペクトルのペインをクリックして選択状態にします（黒い枠で囲まれます）。</p> <p>最初のスキャンをハイライトします（黒い枠があることを確認します）。</p> <p>[追加] ボタンをクリックします。</p>	 <table border="1" data-bbox="1486 1133 1734 1295"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>全プロパティ</td> <td>添付ファイル</td> <td>選択したプロパティ</td> </tr> <tr> <td>名称</td> <td>名称</td> <td>値</td> </tr> <tr> <td>名称</td> <td>BARBITURATE MIX, Raw</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Instrument Name</td> <td>MS_5970</td> <td></td> </tr> <tr> <td>MS Technique</td> <td>GC</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Retention Time</td> <td>2.37783 min</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Sample Acquisition Date</td> <td>9 Jan 86 8:47 am</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Sample Name</td> <td>BARBITURATE MIX</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称	名称	値	名称	BARBITURATE MIX, Raw		Instrument Name	MS_5970		MS Technique	GC		Retention Time	2.37783 min		Sample Acquisition Date	9 Jan 86 8:47 am		Sample Name	BARBITURATE MIX	
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																										
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																										
名称	名称	値																										
名称	BARBITURATE MIX, Raw																											
Instrument Name	MS_5970																											
MS Technique	GC																											
Retention Time	2.37783 min																											
Sample Acquisition Date	9 Jan 86 8:47 am																											
Sample Name	BARBITURATE MIX																											

<p>7</p>	<p>ポップアップウィンドウで、プロパティのドロップダウンリストからフィールドを選択します。例えば、Comments (コメント) を選びます。</p> <p>値を入力します。</p> <p>「このスペクトルのみ」を選択します。</p>																															
<p>8</p>		 <table border="1" data-bbox="1612 919 1902 1138"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>全プロパティ</td> <td>添付ファイル</td> <td>選択したプロパティ</td> </tr> <tr> <td>名称</td> <td>名称</td> <td>値</td> </tr> <tr> <td>名称</td> <td>BARBITURATE MIX, Raw Spectrum 135 at 2.3778 min</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Comments</td> <td>This spectrum is from Michelle's lab.</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Instrument Name</td> <td>MS_5970</td> <td></td> </tr> <tr> <td>MS Technique</td> <td>GC</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Retention Time</td> <td>2.37783 min</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Sample Acquisition Date</td> <td>9 Jan 86 8:47 am</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Sample Name</td> <td>BARBITURATE MIX</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称	名称	値	名称	BARBITURATE MIX, Raw Spectrum 135 at 2.3778 min		Comments	This spectrum is from Michelle's lab.		Instrument Name	MS_5970		MS Technique	GC		Retention Time	2.37783 min		Sample Acquisition Date	9 Jan 86 8:47 am		Sample Name	BARBITURATE MIX	
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																														
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																														
名称	名称	値																														
名称	BARBITURATE MIX, Raw Spectrum 135 at 2.3778 min																															
Comments	This spectrum is from Michelle's lab.																															
Instrument Name	MS_5970																															
MS Technique	GC																															
Retention Time	2.37783 min																															
Sample Acquisition Date	9 Jan 86 8:47 am																															
Sample Name	BARBITURATE MIX																															

<p>9 他の MS スペクトルを選択します。</p>															
<p>10 MS 135 をハイライトします。 [ファイル]>[インポート]を選択します。 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\GC-MS フォルダに移動します。 構造 1 を選択します -バルビタール 「Open」をクリックします。</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> <th>化学構造</th> <th>Comments</th> <th>Molecular Weight</th> <th>Formula</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>BARBITURATE MIX</td> <td></td> <td></td> <td>This spectrum is from Michelle's lab.</td> <td>184.195 g/mol</td> <td>C₄H₄N₂O₃</td> </tr> </tbody> </table>	ID	Name	スペクトル	化学構造	Comments	Molecular Weight	Formula	1	BARBITURATE MIX			This spectrum is from Michelle's lab.	184.195 g/mol	C ₄ H ₄ N ₂ O ₃
ID	Name	スペクトル	化学構造	Comments	Molecular Weight	Formula									
1	BARBITURATE MIX			This spectrum is from Michelle's lab.	184.195 g/mol	C ₄ H ₄ N ₂ O ₃									

11	<p>MS 292 をハイライトします。</p> <p>[ファイル]>[インポート]を選択します。</p> <p>構造 2 を選択します - プチタール</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	
12	<p>MS 346 をハイライトします。</p> <p>[ファイル]>[インポート]を選択します。</p> <p>構造 3 を選択します - アモバルピタール</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	
13	<p>MS 366 をハイライトします。</p> <p>[ファイル]>[インポート]を選択します。</p> <p>構造 4 を選択します - ペンタバルピタール</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	

<p>14 MS 418 をハイライトします。</p> <p>[ファイル]>[インポート]を選択します。</p> <p>構造 5 を選択します -セコバルピタール</p> <p>「Open」をクリックします。</p> <p>MS のレコードを切り替えて、その違いを確認します。</p>	 <p>The screenshot displays the Mineit software interface. The top panel shows a mass spectrum for 'MyData #1, BARBITURATE MIX, Raw Spectrum 418 at 5.1087 min'. The x-axis is m/z (40-240) and the y-axis is relative intensity (0-1). The base peak is at m/z 168.05. Other significant peaks are labeled at m/z 26.95, 41, 53, 69.10, 79, 97.10, 107.95, 124.05, 141.05, 153.05, 181, and 195.10. The bottom panel shows a gas chromatogram for 'MyData #1, BARBITURATE MIX' with peaks at retention times 2.38, 3.89, 4.41, 4.61, and 5.14 minutes. A table at the bottom lists the sample as BARBITURATE MIX with a molecular weight of 184.195 g/mol and formula C₁₂H₁₄N₂O₃. The chemical structure of barbiturate is shown on the right.</p>
<p>15 もし MS インタープリターがインストールされている場合： ユーザーデータベースのレコードに MS スペクトルと構造の両方が存在する場合は、「MS インタープリターへの転送」ボタンが有効になります。</p>	 <p>The screenshot shows a button with the text 'MS インタープリターに転送' (Transfer to MS Interpreter). The button is highlighted, indicating it is active.</p>