

KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

QC Expert による品質管理分析

QC Expert

サンプルスペクトルを参照スペクトルと比較して品質管理の評価を行います。

目的

これらの演習では、KnowItAll QC Expert ソフトウェアを使用して品質管理の比較を行う方法が説明されています。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- アカウントの設定方法
- 標準の選択方法
- 選択した標準との比較方法
- レポートの生成方法

背景

Wiley の KnowItAll QC Expert ソフトウェアは、サンプルの IR、Raman、または GC スペクトルを「ゴールドスタンダード」としてのユーザースペクトルと比較し、材料が制御仕様を満たしているかを迅速に品質チェックします。

管理者アカウントとアドレスの設定

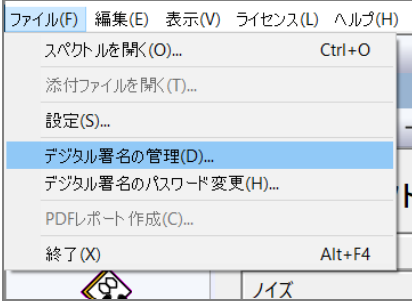
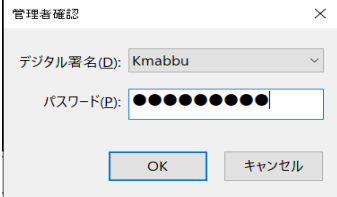
このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています


C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\QC Expert

- DEET.SPA
- Epichlorohydrin Sample Spectrum.irf

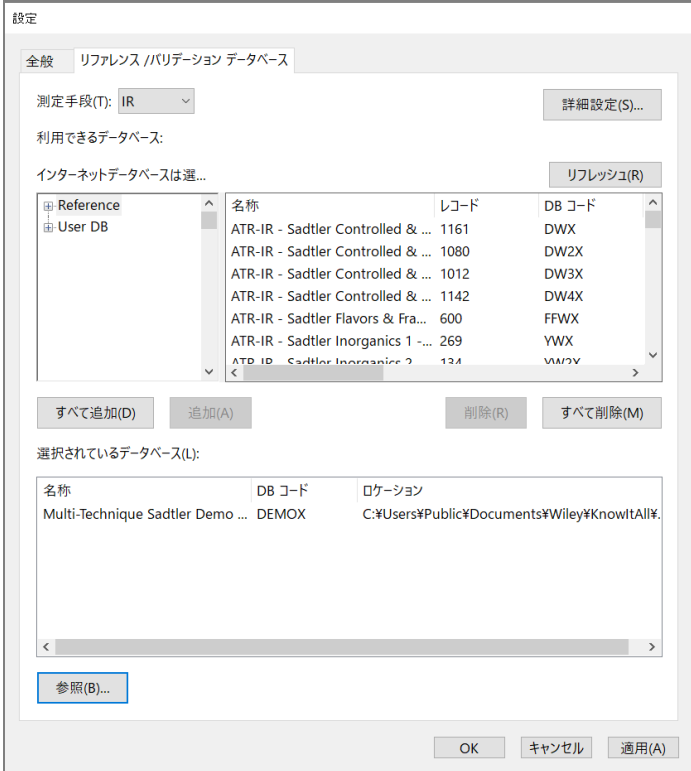
KnowItAll 使用アプリケーション

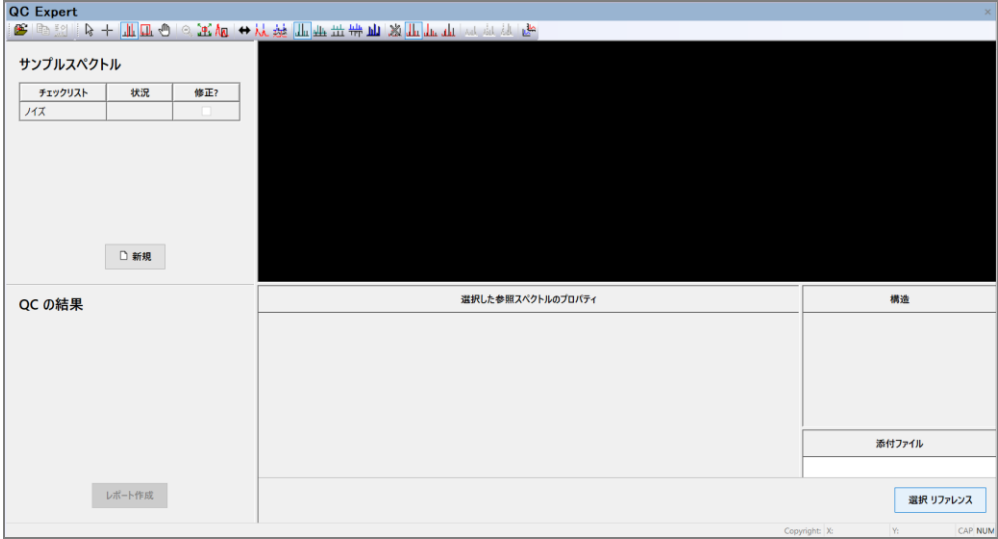
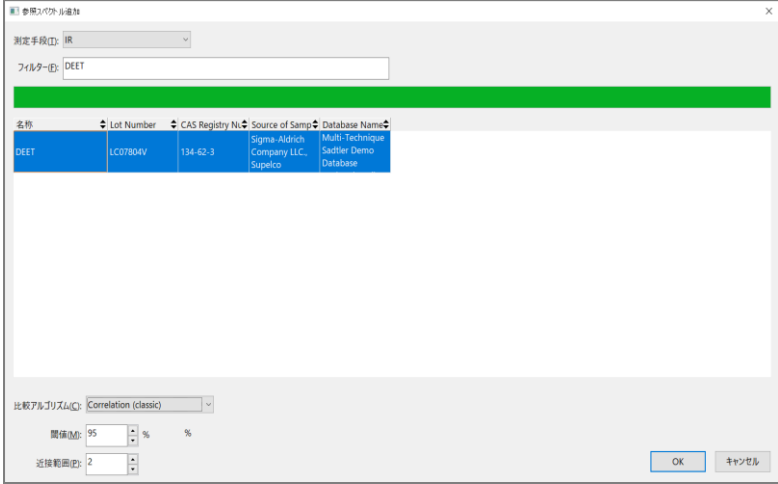
アクション	結果
-------	----

1	データツールボックスに移動し、 QC Expert アプリケーションを開きます。	
2	管理者アカウントを作成するために、 [ファイル]>[デジタル署名管理] を選択します。	
3	[デジタル署名] 欄に好きなユーザーIDを入力します。 [パスワード] と [パスワードの確認] 欄に好きなパスワードを入力します。 OK をクリックします。	
4	表示される [管理者確認] ポップアップで、ユーザー名とパスワードを入力します。	

5	次に、[ファイル]>[設定]に移動し、組織を「 Wiley Laboratories, Inc. 」に設定し、アドレスを追加します。	
---	---	--

参照データベースの選択

アクション	結果																																						
<p>1 「参照/検証データベース」タブで、「参照データベースの参照」ボタンをクリックします。</p> <p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples フォルダに移動します。</p> <p>「Multi-Technique Sadtler Demo Database - Wiley [DEMO]」データベースを選択します。</p>	 <p>設定</p> <p>全般 リファレンス/バリデーションデータベース</p> <p>測定手段(T): IR 詳細設定(S)...</p> <p>利用できるデータベース:</p> <p>インターネットデータベースは選... リフレッシュ(R)</p> <table border="1" data-bbox="898 574 1520 760"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled & ...</td> <td>1161</td> <td>DWX</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled & ...</td> <td>1080</td> <td>DW2X</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled & ...</td> <td>1012</td> <td>DW3X</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled & ...</td> <td>1142</td> <td>DW4X</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Flavors & Fra...</td> <td>600</td> <td>FFWX</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 -...</td> <td>269</td> <td>YWX</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Inorganics 2 -...</td> <td>124</td> <td>YWX</td> </tr> </tbody> </table> <p>すべて追加(D) 追加(A) 削除(R) すべて削除(M)</p> <p>選択されているデータベース(L):</p> <table border="1" data-bbox="898 857 1520 1036"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Multi-Technique Sadtler Demo ...</td> <td>DEMOX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\...</td> </tr> </tbody> </table> <p>参照(B)...</p> <p style="text-align: right;">OK キャンセル 適用(A)</p>	Reference	名称	レコード	DB コード	User DB	ATR-IR - Sadtler Controlled & ...	1161	DWX		ATR-IR - Sadtler Controlled & ...	1080	DW2X		ATR-IR - Sadtler Controlled & ...	1012	DW3X		ATR-IR - Sadtler Controlled & ...	1142	DW4X		ATR-IR - Sadtler Flavors & Fra...	600	FFWX		ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 -...	269	YWX		ATR-IR - Sadtler Inorganics 2 -...	124	YWX	名称	DB コード	ロケーション	Multi-Technique Sadtler Demo ...	DEMOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\...
Reference	名称	レコード	DB コード																																				
User DB	ATR-IR - Sadtler Controlled & ...	1161	DWX																																				
	ATR-IR - Sadtler Controlled & ...	1080	DW2X																																				
	ATR-IR - Sadtler Controlled & ...	1012	DW3X																																				
	ATR-IR - Sadtler Controlled & ...	1142	DW4X																																				
	ATR-IR - Sadtler Flavors & Fra...	600	FFWX																																				
	ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 -...	269	YWX																																				
	ATR-IR - Sadtler Inorganics 2 -...	124	YWX																																				
名称	DB コード	ロケーション																																					
Multi-Technique Sadtler Demo ...	DEMOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\...																																					
<p>2 OK をクリックします。</p>																																							

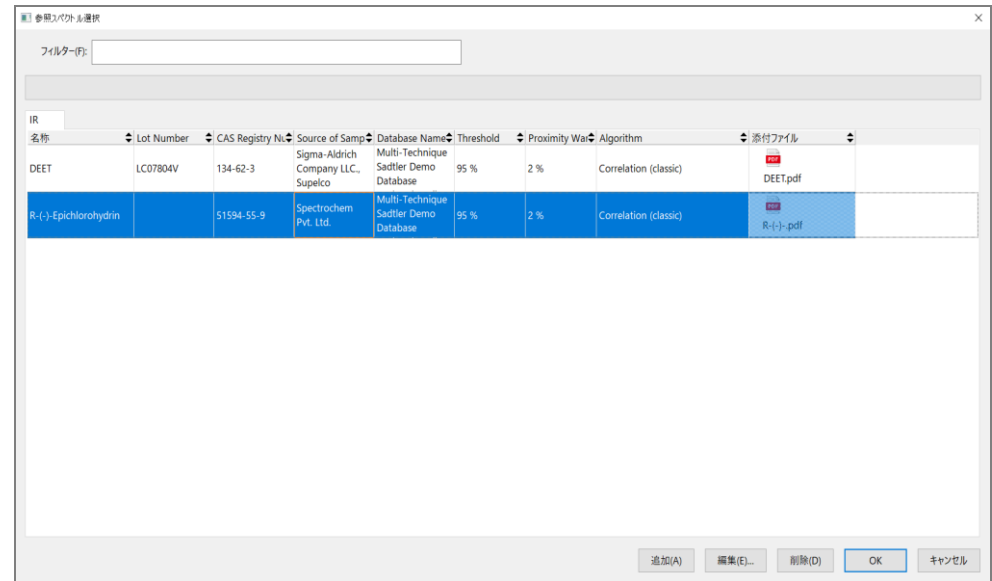
<p>3 QC Expert ウィンドウの右下にある「参照の選択」ボタンをクリックします。</p>	
<p>4 管理者としてログインするように求められるので、管理者としてログインします。すると、「参照スペクトルを追加する」ダイアログボックスが表示されます。</p> <p>フィルタボックスに DEET と入力して DEET を検索します。</p> <p>左下の「比較アルゴリズム」、「一致閾値」、「近接警告」のパラメータを指定します。</p> <p>デモ用に「相関 (クラシック)」アルゴリズムを選択します。</p> <p>スペクトルを追加するために OK ボタンをクリックします。</p>	

5 「参照スペクトルの選択」ダイアログボックスが表示されます。

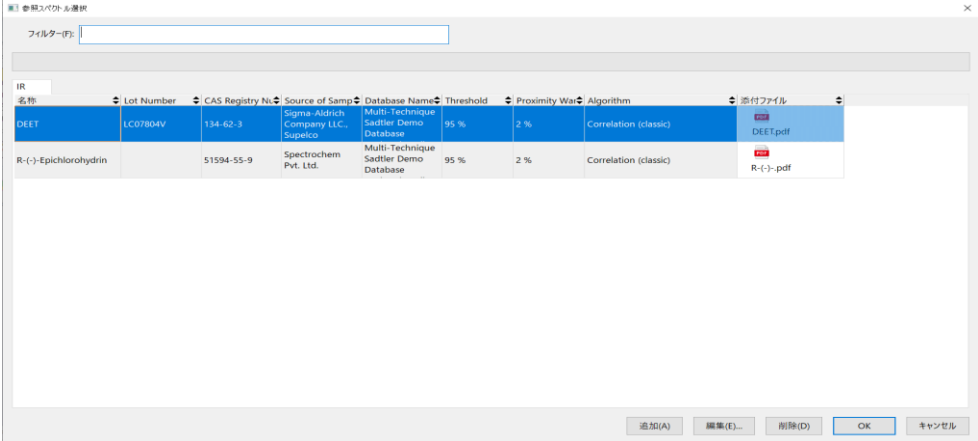
「追加」ボタンをクリックし、フィルタボックスに「epi」と入力します。

「R-(-)-Epichlorohydrin」を選択し、さらに「相関（クラシック）」アルゴリズムを選択します。

OK をクリックします。



非管理者として **QC** アナリストとして **QC Expert** を実行

	アクション	結果																											
1	<p>まず、「参照を選択」ボタンをクリックします。 DEET のスペクトルをハイライトして選択します。</p> <p>OK をクリックします。</p>	 <p>The screenshot shows a window titled "参照を選択" (Select Reference). It contains a search filter field and a table of search results. The table columns are: 名称 (Name), Lot Number, CAS Registry No., Source of Sample, Database Name, Threshold, Proximity War, Algorithm, and 添付ファイル (Attachment File). The first row, "DEET", is highlighted in blue. The second row is "R-(-)-Epichlorohydrin". At the bottom of the window are buttons for "追加(A)" (Add), "編集(E)" (Edit), "削除(D)" (Delete), "OK", and "キャンセル" (Cancel).</p> <table border="1"><thead><tr><th>名称</th><th>Lot Number</th><th>CAS Registry No.</th><th>Source of Sample</th><th>Database Name</th><th>Threshold</th><th>Proximity War</th><th>Algorithm</th><th>添付ファイル</th></tr></thead><tbody><tr><td>DEET</td><td>LC07804Y</td><td>134-62-3</td><td>Sigma-Aldrich Company LLC, Supelco</td><td>Multi-Technique Sadtler Demo Database</td><td>95 %</td><td>2 %</td><td>Correlation (classic)</td><td>DEET.pdf</td></tr><tr><td>R-(-)-Epichlorohydrin</td><td></td><td>51594-55-9</td><td>Spectrochem Pvt. Ltd.</td><td>Multi-Technique Sadtler Demo Database</td><td>95 %</td><td>2 %</td><td>Correlation (classic)</td><td>R-(-).pdf</td></tr></tbody></table>	名称	Lot Number	CAS Registry No.	Source of Sample	Database Name	Threshold	Proximity War	Algorithm	添付ファイル	DEET	LC07804Y	134-62-3	Sigma-Aldrich Company LLC, Supelco	Multi-Technique Sadtler Demo Database	95 %	2 %	Correlation (classic)	DEET.pdf	R-(-)-Epichlorohydrin		51594-55-9	Spectrochem Pvt. Ltd.	Multi-Technique Sadtler Demo Database	95 %	2 %	Correlation (classic)	R-(-).pdf
名称	Lot Number	CAS Registry No.	Source of Sample	Database Name	Threshold	Proximity War	Algorithm	添付ファイル																					
DEET	LC07804Y	134-62-3	Sigma-Aldrich Company LLC, Supelco	Multi-Technique Sadtler Demo Database	95 %	2 %	Correlation (classic)	DEET.pdf																					
R-(-)-Epichlorohydrin		51594-55-9	Spectrochem Pvt. Ltd.	Multi-Technique Sadtler Demo Database	95 %	2 %	Correlation (classic)	R-(-).pdf																					

2 次に、**QC Expert** ウィンドウの中央左部にある「**新しい比較**」をクリックします。

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\QC Expert フォルダに移動し、**DEET.SPA** ファイルを選択します。

インポートされたスペクトルを **ATR-IR** に設定し、このオプションにチェックが入っていることを確認します。

「**Open**」をクリックします。

ファイルを開く

ファイルの場所(I): QC Expert

Name	Date modified	Type
DEET.SPA	17-11-2022 23:41	SPA File
Epichlorohydrin Sample Spectrum	17-11-2022 23:41	IRF File

Quick access

- Desktop
- Libraries
- This PC
- Network

ファイル名(N): DEET

開く(O)

ファイルの種類(T): すべてのファイル (*.*)

キャンセル

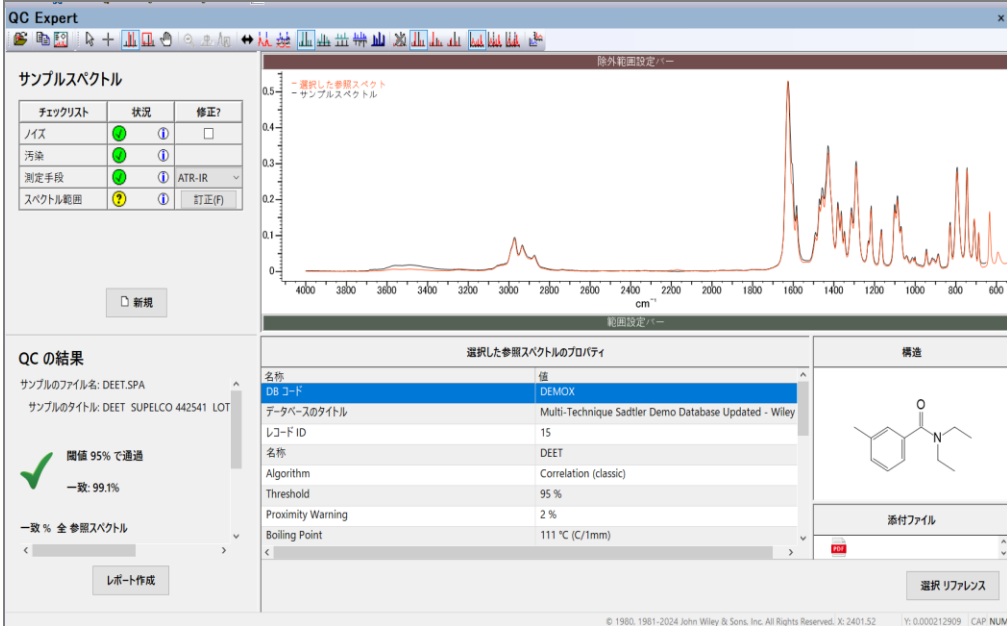
インポートされたスペクトル(I) ATR-IR

- DEET SUPELCO 442541 LOT#LC07804V ...

エンコード(E): <default>

3

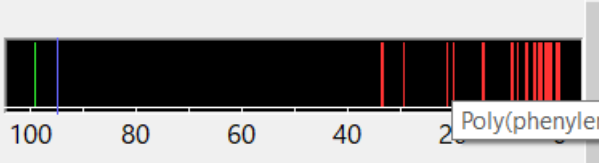
QC Expert ウィンドウには比較のステータスが表示されます。



一致率は 99.1% になると、緑色のチェックマークが表示されています。これは品質管理の比較が合格したことを示しています。

4 「全参照スペクトルの一致率」チャートの緑色と赤色のバーにマウスを重ねます。

注記：一致率チャートの各バーにマウスを重ねると、対応するスペクトルが上部の「スペクトルペイン」に表示されます。



「全参照スペクトルの一致率」チャートでは、サンプルスペクトルと参照データベース内のスペクトルとの比較結果が示されます。緑色のバーは、選択した参照スペクトルと同じ化合物の異なるロットの他のスペクトルとの比較結果を表しています。青いラインは品質管理の基準値であり、赤いラインはサンプルスペクトルとデータベース内の他のスペクトルとの一致率を示しています。

5 添付ファイルペインの右下にある PDF の添付ファイルをダブルクリックします。

すると、DEET の安全データシートや関連情報が表示されます。

sigma-aldrich.com

SIGMA-ALDRICH

SAFETY DATA SHEET

Version 4.4
Revision Date 07/03/2014
Print Date 08/25/2015

1. PRODUCT AND COMPANY IDENTIFICATION

1.1 Product identifiers

Product name : *N,N*-Diethyl-3-methylbenzamide

Product Number : D100951
Brand : Aldrich
Index-No. : 616-018-00-2

CAS-No. : 134-62-3

1.2 Relevant identified uses of the substance or mixture and uses advised against

Identified uses : Laboratory chemicals, Manufacture of substances

1.3 Details of the supplier of the safety data sheet

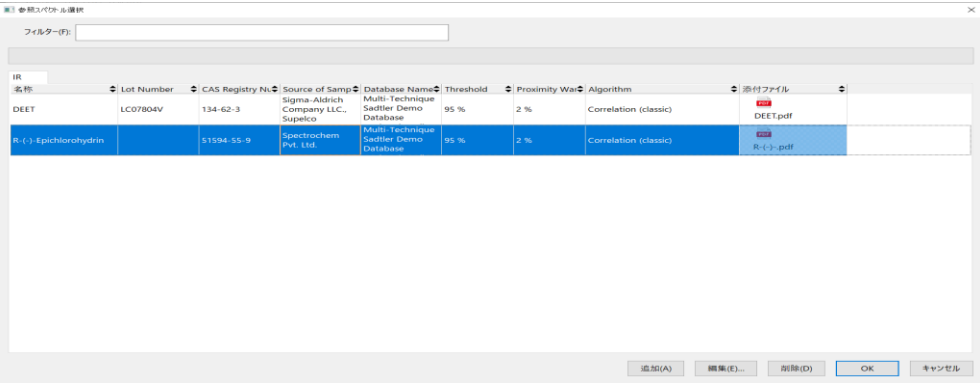
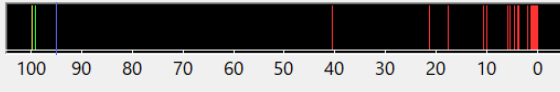
Company : Sigma-Aldrich
3050 Spruce Street
SAINT LOUIS MO 63103
USA

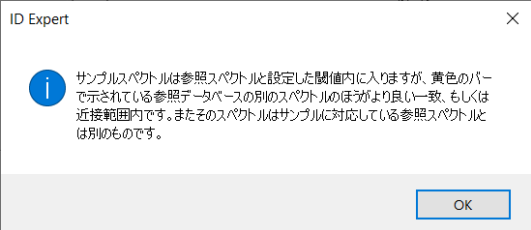
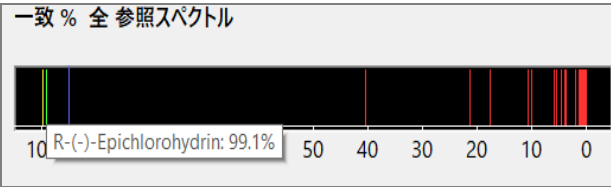
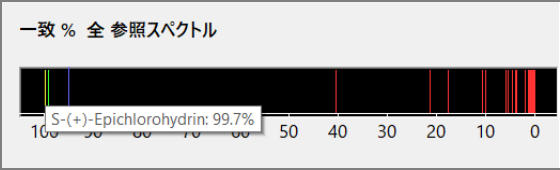
Telephone : +1 800-325-5832
Fax : +1 800-325-5052

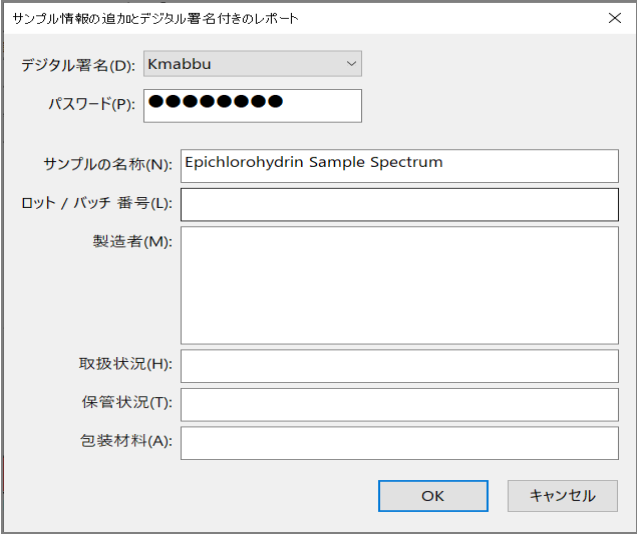
1.4 Emergency telephone number

Emergency Phone # : (314) 776-6555

R-(-)-エピクロロヒドリンのサンプルスペクトルと参照スペクトルの QC アナリストによる比較

	アクション	結果																											
1	<p>「参照を選択」ボタンをクリックしてください。</p> <p>R-(-)-エピクロロヒドリンの参照スペクトルをハイライトして選択します。</p> <p>OK をクリックします。</p>	<p>これにより、R-(-)-エピクロロヒドリンのサンプルスペクトルを開いて、サンプルが期待されるものであるかを確認するための品質管理比較を行います。</p>  <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>Lot Number</th> <th>CAS Registry No.</th> <th>Source of Sample</th> <th>Database Name</th> <th>Threshold</th> <th>Proximity We.</th> <th>Algorithm</th> <th>添付ファイル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>DEET</td> <td>LC07804V</td> <td>134-62-3</td> <td>Sigma-Aldrich Company LLC, Supelco</td> <td>Multi-Technique Sadtler Demo Database</td> <td>95 %</td> <td>2 %</td> <td>Correlation (classic)</td> <td>DEET.pdf</td> </tr> <tr style="background-color: #e6f2ff;"> <td>R-(-)-Epichlorohydrin</td> <td></td> <td>51594-65-9</td> <td>Spectrochem Pvt. Ltd.</td> <td>Multi-Technique Sadtler Demo Database</td> <td>95 %</td> <td>2 %</td> <td>Correlation (classic)</td> <td>R-(-).pdf</td> </tr> </tbody> </table>	名称	Lot Number	CAS Registry No.	Source of Sample	Database Name	Threshold	Proximity We.	Algorithm	添付ファイル	DEET	LC07804V	134-62-3	Sigma-Aldrich Company LLC, Supelco	Multi-Technique Sadtler Demo Database	95 %	2 %	Correlation (classic)	DEET.pdf	R-(-)-Epichlorohydrin		51594-65-9	Spectrochem Pvt. Ltd.	Multi-Technique Sadtler Demo Database	95 %	2 %	Correlation (classic)	R-(-).pdf
名称	Lot Number	CAS Registry No.	Source of Sample	Database Name	Threshold	Proximity We.	Algorithm	添付ファイル																					
DEET	LC07804V	134-62-3	Sigma-Aldrich Company LLC, Supelco	Multi-Technique Sadtler Demo Database	95 %	2 %	Correlation (classic)	DEET.pdf																					
R-(-)-Epichlorohydrin		51594-65-9	Spectrochem Pvt. Ltd.	Multi-Technique Sadtler Demo Database	95 %	2 %	Correlation (classic)	R-(-).pdf																					
2	<p>次に、QC Expert ウィンドウの中央左部にある「新しい比較」をクリックします。</p> <p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\QC Expert フォルダに移動します。</p> <p>Epichlorohydrin Sample Spectrum.irf を選択します。</p> <p>インポートされたスペクトルを ATR-IR に設定し、このオプションにチェックが入っていることを確認します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	<p>QC の結果</p> <p>閾値 95% で不確定 2% 近接範囲 ⓘ</p> <p>一致: 99.1%</p> <p>一致 % 全 参照スペクトル</p>  <p>選択した参照スペクトルとサンプルスペクトルの一致率は 99.1% で非常に優れていますが、品質管理の比較結果は「不確定」です。</p>																											

<p>3</p>	<p>情報ボタン①をクリックしてください。</p>	 <p>ID Expert のポップアップによると、サンプルスペクトルは一致基準を満たしていますが、より一致度の高いスペクトルや近接警告内のスペクトルも存在することが示されています。</p>
<p>4</p>	<p>ダイアログボックスを閉じるためには、OK をクリックします。</p>	
<p>5</p>	<p>一致率チャートの中で、100%に近いバーの上にマウスを重ねると、スペクトルペインに対応するスペクトルが表示されます。</p>	<p>青いしきい値ラインの上には、緑色と黄色の 2 本の線があります。それぞれの線は 2 つのヒットを示しています。</p>
<p>6</p>	<p>一致率チャートの中で緑色のバーをマウスでホバーすると、「R-(-)-エピクロロヒドリン: 99.1%」というテキストが表示されます。</p>	 <p>一致率チャートの緑色のバーは、サンプルスペクトルと参照スペクトルの比較を表しています。一致率は 99.1% です。</p>
<p>7</p>	<p>黄色のバーをマウスでホバーすると、「S-(+)-エピクロロヒドリン: 99.7%」というテキストが表示されます。</p>	 <p>黄色のバーは S-(+)-エピクロロヒドリン のスペクトルを示しており、これは R-(-) 異性体のエナンチオマーです。R と S のエピクロロヒドリンは IR では区別できません。</p>

8	<p>一致率チャートの下にある「レポート作成」ボタンをクリックすると、デジタル署名付きのレポートが作成されます。</p> <p>デジタル署名のドロップダウンメニューからユーザー名を選択します。</p> <p>パスワードを入力します。</p> <p>サンプル情報を入力します。</p>	
9	<p>「OK」をクリックしてレポートを表示します。</p>	<p>デジタル署名が付いた PDF には、以下の情報が含まれています：</p> <ul style="list-style-type: none">ページ 1 - テストに関する情報ページ 2 - スペクトル比較に関する情報ページ 3 - 参照スペクトルに関する情報