

# KnowItAll<sup>®</sup> ソフトウェアのトレーニング

---

## NMR 分析ツール

# NMR

## 多重項の解析とデータベースへの保存

### 目的

この演習では、NMR スペクトルの多重項とカップリング定数のラベル付け方法、およびスペクトルに関連する構造が既知の場合に評価された多重項を正しく割り当てる方法を学びます。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- Minelt で処理された NMR スペクトルにおいて、多重項を定義する方法
- Minelt の NMR ツールを利用して、シフトの割り当てを編集する方法
- NMR レポートを自動的に生成する手順

### 背景

処理済みの NMR スペクトルをデータベースに保存することは、研究開発や品質管理、品質保証のために非常に有益です。また、未知の化学物質の検証にも役立ちます。割り当てを追加することで、アーカイブされた参考資料の価値が高まります。

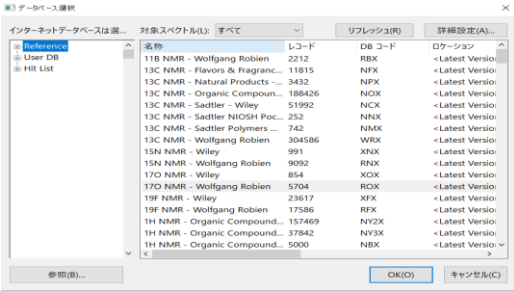
このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

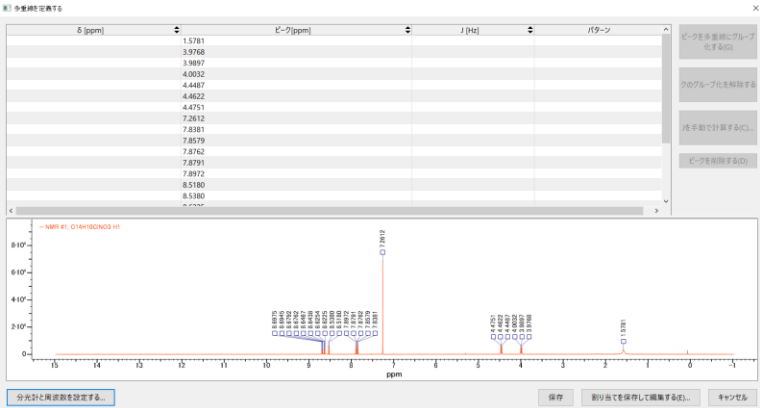
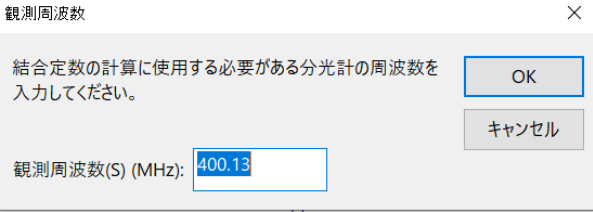
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll  
Samples\NMR\Bruker TopSpin\ C14H10ClNO3\  
• C14H10ClNO3 H1/fid  
• C14H10ClNO3 H1.dsf  
• C14H10ClNO3 H1.sdbx

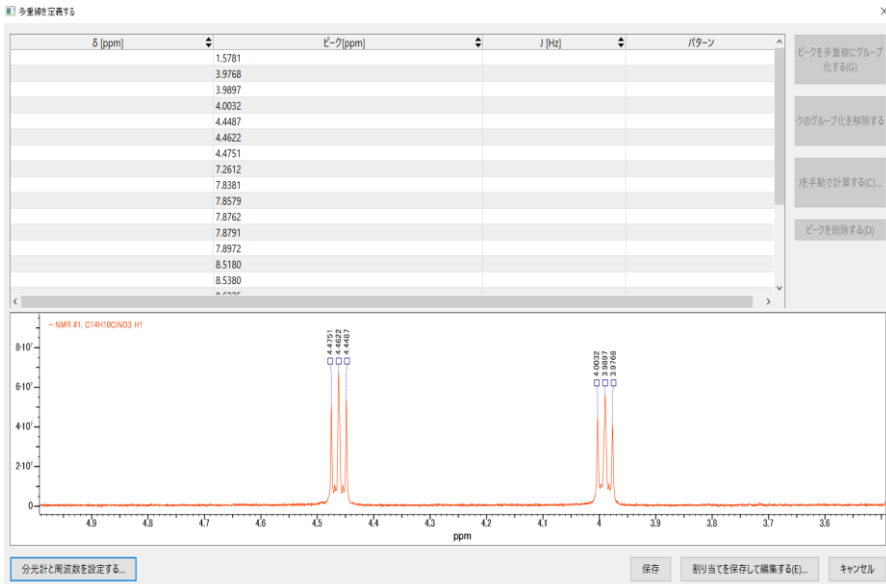
**KnowItAll 使用アプリケーション**

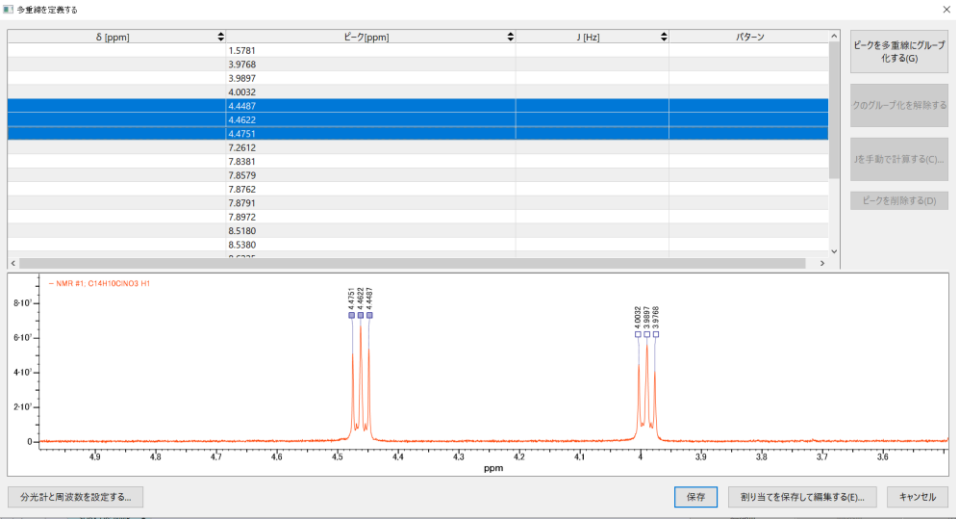
- Minelt™
- ProcessIt™

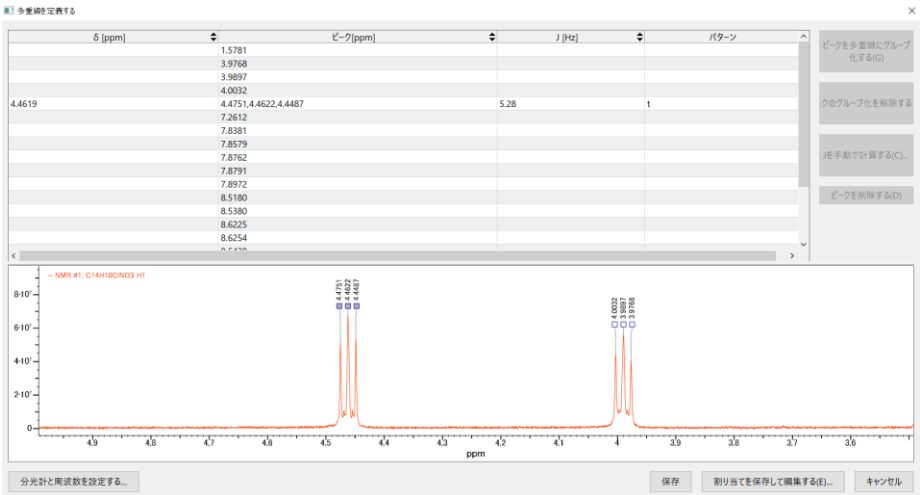
### NMR ツールを使用してスペクトルの多重項を計算

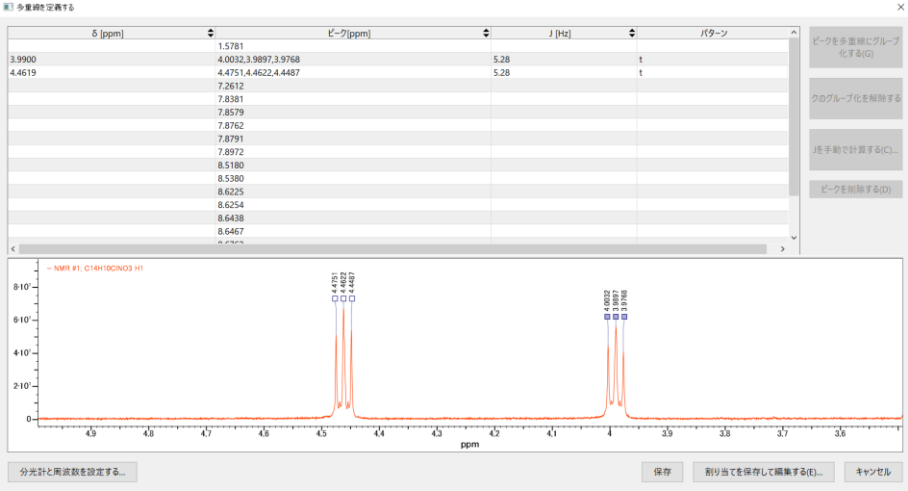
	アクション	結果
1	<p>Minelt アプリケーションを開くには、通常、<b>データツールボックス</b>にあるアイコンをクリックします。</p> 	
2	<p>アイコンをクリックして「<b>Open Database</b> (データベースを開く)」ボタンを選択します。そして、「<b>データベースの選択</b>」ダイアログで「<b>閲覧で開く</b>」をクリックします。</p>	<p>「<b>データベースを開く</b>」をクリックすると、「<b>データベースの選択</b>」ダイアログが表示されます。また、「<b>閲覧で開く</b>」をクリックすると、ファイルエクスプローラが起動し、ファイルを選択することができます。</p> 
3	<p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\NMR\Bruker TopSpin\C14H10ClNO3\C14H10ClNO3 H1.sdbx」.</p>	<p>データベースを開くと、Minelt 内に処理済みの NMR スペクトルが表示されます。</p>  <p>このセクションでは、完全に処理された NMR スペクトルが必要です。このトレーニングでは、第 13 章で Minelt のユーザーデータベースに保存された処理済みファイルを使用します。</p>

	アクション	結果
4	<p><b>NMR Tools (NMR ツール) &gt; Define Multiplets (多重項を定義)</b> を選択します。</p> <p><b>注記： Define Multiplets (多重項を定義) ウィンドウが開かれます。</b> このウィンドウでは、<b>J-値</b>を計算し、遷移ピークリストを定義済みの分割パターンを持つ多重項に変換します。</p>	<p><b>Define Multiplets (多重項を定義) ダイアログ</b>が表示されます：</p> 
5	<p><b>注記：</b>「もしレコードに <b>NMR スペクトロメータの周波数</b>に関するプロパティ値が含まれていない場合、<b>Define Multiplets (多重項を定義) ダイアログ</b>が起動される前に <b>Spectrometer Frequency (スペクトロメータの周波数) ダイアログ</b>が表示されます。</p>	<p>この例では、<b>Spectrometer Frequency (スペクトロメータの周波数) ダイアログ</b>はスキップされます。<b>Define Multiplets (多重項を定義) ダイアログ</b>からは、<b>Set Spectrometer Frequency (スペクトロメータの周波数を設定)</b>をクリックすることで直接再度表示することができます：</p> 

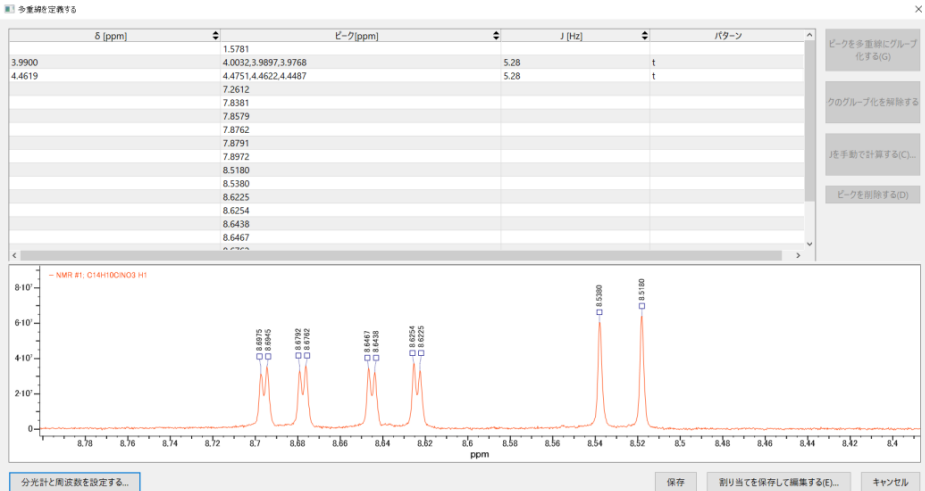
	アクション	結果																																																																
6	<p><b>Define Multiplets</b> (多重項を定義) 内のスペクトルをクリックしてマウスボタンを押し続けます。そして、3.5 ppm から 5 ppm の範囲をドラッグし、その後マウスボタンを離します。</p> <p><b>注記 : Define Multiplets</b> (多重項を定義) が最初に表示されたときには、水平ズームカーソルが予め選択されています。</p>	<p>スペクトル上には 2 つのピークグループが見えます :</p>  <table border="1" data-bbox="655 418 1432 695"> <thead> <tr> <th>δ (ppm)</th> <th>ピーク(ppm)</th> <th>J [Hz]</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td></td><td>1.5781</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>3.9768</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>3.9897</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>4.0032</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>4.4487</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>4.4622</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>4.4751</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.2612</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8381</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8579</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8762</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8791</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8972</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>8.5180</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>8.5380</td><td></td><td></td></tr> </tbody> </table> <p>分光計と周波数を設定する... <span style="float: right;">保存 割り当てを保存して編集する(E)... キャンセル</span></p>	δ (ppm)	ピーク(ppm)	J [Hz]	パターン		1.5781				3.9768				3.9897				4.0032				4.4487				4.4622				4.4751				7.2612				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972				8.5180				8.5380		
δ (ppm)	ピーク(ppm)	J [Hz]	パターン																																																															
	1.5781																																																																	
	3.9768																																																																	
	3.9897																																																																	
	4.0032																																																																	
	4.4487																																																																	
	4.4622																																																																	
	4.4751																																																																	
	7.2612																																																																	
	7.8381																																																																	
	7.8579																																																																	
	7.8762																																																																	
	7.8791																																																																	
	7.8972																																																																	
	8.5180																																																																	
	8.5380																																																																	

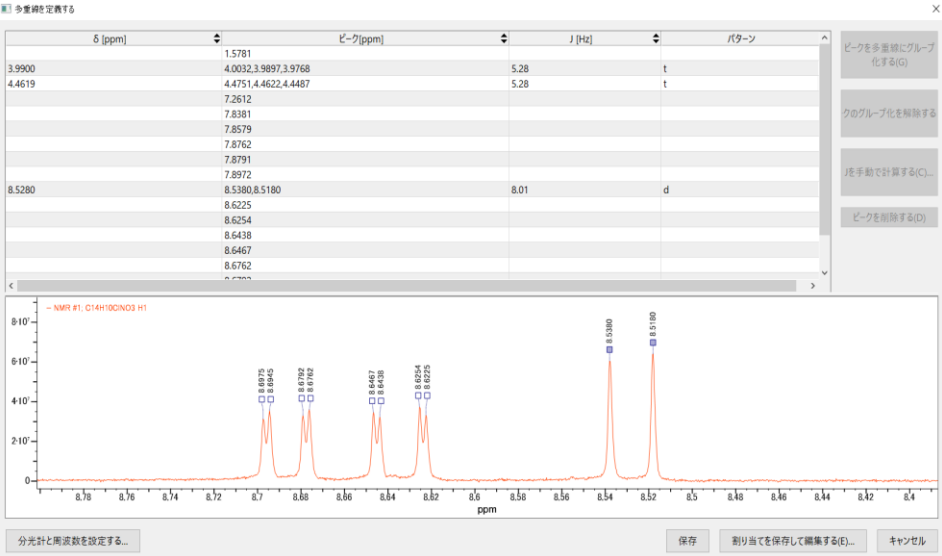
	アクション	結果																																																																				
7	キーボードの <b>CTRL</b> ボタンを押したままにし、 <b>Multiplets</b> (多重項) テーブルで約 4.4 ppm (4.4487、4.4622、4.4751) の 3 つのピークをクリックします。 <b>CTRL</b> ボタンを離します。	<p><b>Multiplets (多重項)</b> テーブルでは 3 つのピークがハイライトされ、選択したピークに対応するスペクトル上の 3 つのボックスもハイライトされます：</p>  <table border="1" data-bbox="659 451 1493 683"><thead><tr><th>δ [ppm]</th><th>ピーク [ppm]</th><th>J [Hz]</th><th>パターン</th></tr></thead><tbody><tr><td>1.5781</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>3.9768</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>3.9897</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>4.0032</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>4.4487</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>4.4622</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>4.4751</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>7.2612</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>7.8381</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>7.8579</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>7.8762</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>7.8791</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>7.8972</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>8.5180</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>8.5380</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>9.7337</td><td></td><td></td><td></td></tr></tbody></table> <p>The spectrum shows peaks at 4.4487, 4.4622, and 4.4751 ppm, and another set of peaks at 3.9768 and 3.9897 ppm. The y-axis represents intensity from 0 to 810, and the x-axis represents chemical shift in ppm from 4.9 to 3.6.</p>	δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン	1.5781				3.9768				3.9897				4.0032				4.4487				4.4622				4.4751				7.2612				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972				8.5180				8.5380				9.7337			
δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン																																																																			
1.5781																																																																						
3.9768																																																																						
3.9897																																																																						
4.0032																																																																						
4.4487																																																																						
4.4622																																																																						
4.4751																																																																						
7.2612																																																																						
7.8381																																																																						
7.8579																																																																						
7.8762																																																																						
7.8791																																																																						
7.8972																																																																						
8.5180																																																																						
8.5380																																																																						
9.7337																																																																						

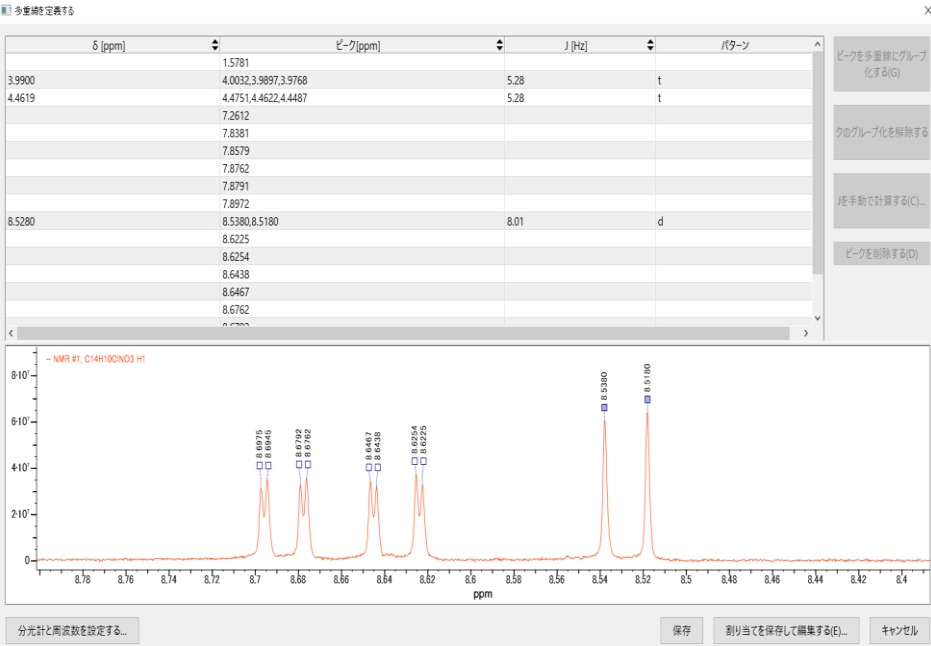
	アクション	結果																																																																
8	<p><b>Group Peaks into Multiplet</b> (複数のピークを一つの多重項にまとめる) ボタンをクリックします。</p> <p><b>注記:</b> 単純な分裂パターン (d, t, q) の場合、カップリング定数 (J 値) が自動的に計算されます。5 つ以上のピークがある場合は、「多重項」として分裂パターンが割り当てられます。必要に応じて再割り当てすることもできます。</p>	<p><b>Multiplets (多重項)</b> テーブルでは、4.4619 ppm にある 3 つのピークがグループ化されました。δ 列にはシフト値が表示されます。これらのピークにはデフォルトの単純な分裂パターン (t) が割り当てられ、単純な分裂パターンの J 値が自動的に計算されました:</p>  <table border="1" data-bbox="657 479 1459 706"> <thead> <tr> <th>δ [ppm]</th> <th>ピーク [ppm]</th> <th>J [Hz]</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1.5781</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>3.9768</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>3.9897</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>4.0032</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>4.4619</td> <td>4.4751, 4.4622, 4.4487</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.2612</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8381</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8579</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8762</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8791</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8972</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.5180</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.5380</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6225</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6254</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン	1.5781				3.9768				3.9897				4.0032				4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t		7.2612				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972				8.5180				8.5380				8.6225				8.6254		
δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン																																																															
1.5781																																																																		
3.9768																																																																		
3.9897																																																																		
4.0032																																																																		
4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t																																																															
	7.2612																																																																	
	7.8381																																																																	
	7.8579																																																																	
	7.8762																																																																	
	7.8791																																																																	
	7.8972																																																																	
	8.5180																																																																	
	8.5380																																																																	
	8.6225																																																																	
	8.6254																																																																	

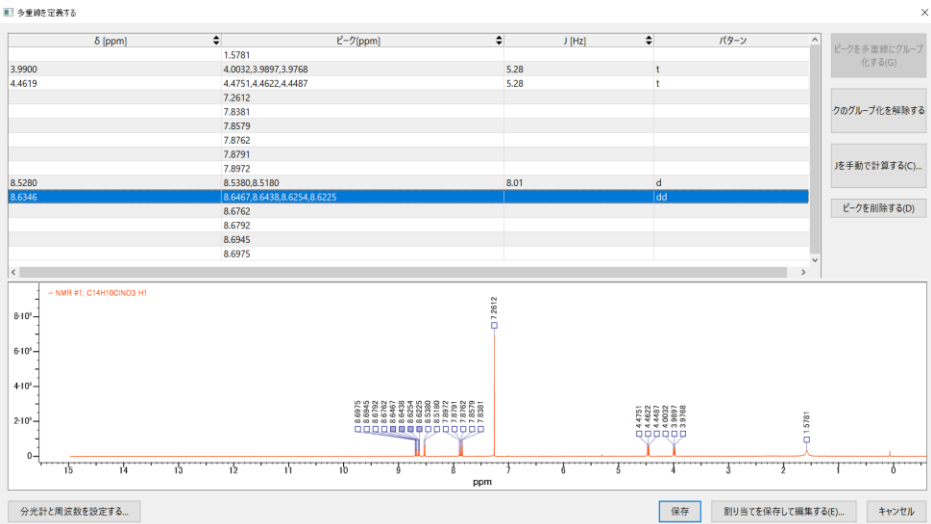
	アクション	結果																																																																
9	<p>~4.0 ppm にあるピーク (3.9768、3.9897、4.0032) についても、手順 7 と 8 を繰り返してください。</p>	<p><b>Multiplets (多重項)</b> テーブルでは、3.9900 ppm にある 3 つのピークがグループ化されました。δ 列にはシフト値が表示されます。これらのピークにはデフォルトの単純な分裂パターン (t) が割り当てられ、単純な分裂パターンの J 値が自動的に計算されました：</p>  <table border="1" data-bbox="659 479 1451 706"> <thead> <tr> <th>δ [ppm]</th> <th>ピーク [ppm]</th> <th>J [Hz]</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1.5781</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>3.9900</td> <td>4.0032, 3.9897, 3.9768</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>4.4619</td> <td>4.4751, 4.4622, 4.4487</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>7.2612</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8381</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8579</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8762</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8791</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8972</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.5180</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.5380</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.6225</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.6254</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.6438</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.6467</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン	1.5781				3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t	4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t	7.2612				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972				8.5180				8.5380				8.6225				8.6254				8.6438				8.6467			
δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン																																																															
1.5781																																																																		
3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t																																																															
4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t																																																															
7.2612																																																																		
7.8381																																																																		
7.8579																																																																		
7.8762																																																																		
7.8791																																																																		
7.8972																																																																		
8.5180																																																																		
8.5380																																																																		
8.6225																																																																		
8.6254																																																																		
8.6438																																																																		
8.6467																																																																		

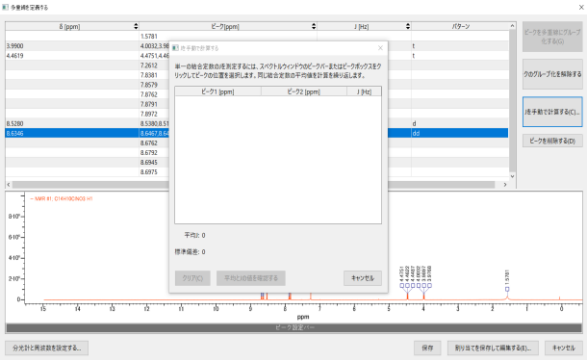
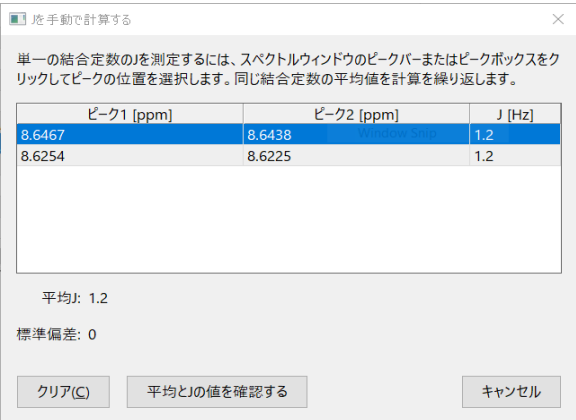


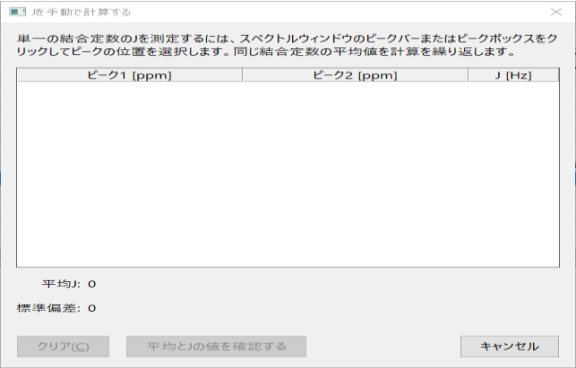
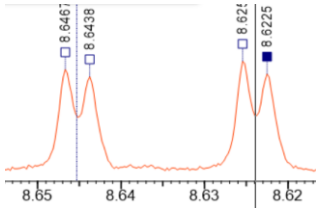
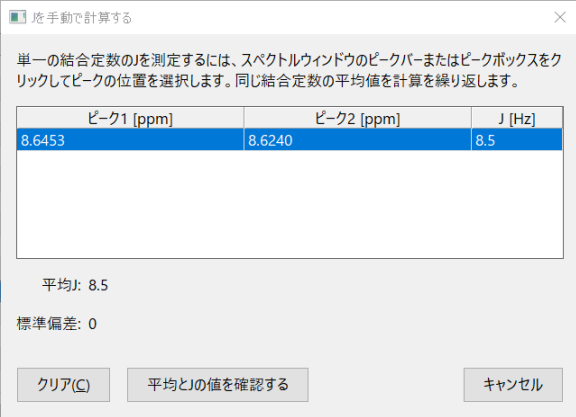
	アクション	結果																																																																
10	<p><b>Define Multiplets</b> (多重項を定義) ダイアログ上のスペクトルを右クリックし、「ズームアウト」を選択します。スペクトルをクリックして、左クリックを押したままにします。マウスを使用して、スペクトル上の領域を約 8.4 ppm から 8.8 ppm までドラッグし、マウスボタンを離します。</p> <p><b>注記:</b> ズームカーソルはまだ有効な状態です。もし有効でない場合は、スペクトルを右クリックし、「水平ズームモード」を選択してアクティブにします。</p>	<p>3つのピークがグループ化されています:</p>  <table border="1" data-bbox="659 415 1465 646"> <thead> <tr> <th>δ (ppm)</th> <th>ピーク(ppm)</th> <th>J (Hz)</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1.5781</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>3.9900</td> <td>4.0032, 3.9897, 3.9768</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>4.4619</td> <td>4.4751, 4.4622, 4.4487</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>7.2512</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8381</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8579</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8762</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8791</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8972</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.5180</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.5300</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.6225</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.6254</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.6438</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.6467</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	δ (ppm)	ピーク(ppm)	J (Hz)	パターン	1.5781				3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t	4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t	7.2512				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972				8.5180				8.5300				8.6225				8.6254				8.6438				8.6467			
δ (ppm)	ピーク(ppm)	J (Hz)	パターン																																																															
1.5781																																																																		
3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t																																																															
4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t																																																															
7.2512																																																																		
7.8381																																																																		
7.8579																																																																		
7.8762																																																																		
7.8791																																																																		
7.8972																																																																		
8.5180																																																																		
8.5300																																																																		
8.6225																																																																		
8.6254																																																																		
8.6438																																																																		
8.6467																																																																		

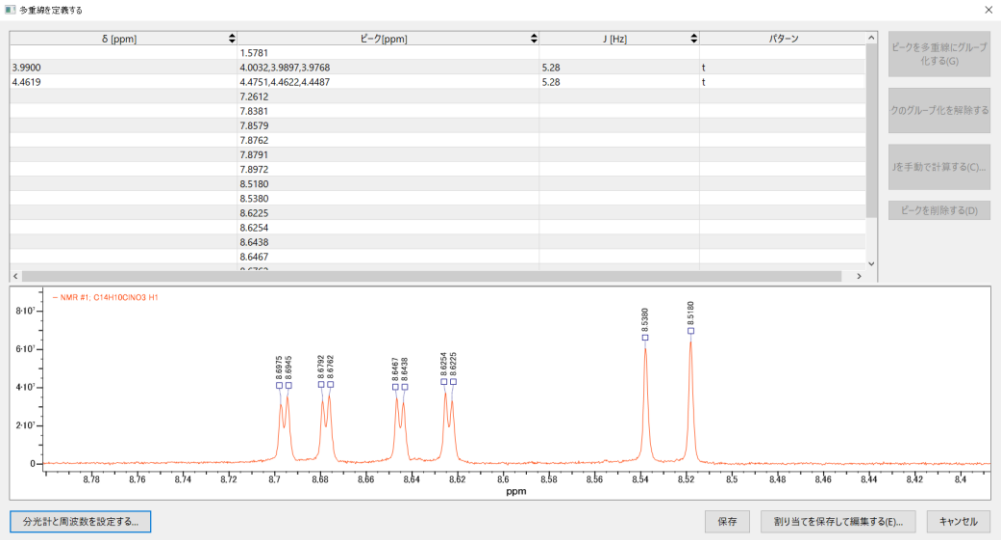
	アクション	結果																																																												
11	<p>~8.5 ppm の 2 つのピーク (8.5180 および 8.5380) についても、手順 7 と 8 を繰り返してください。</p>	<p><b>Multiplets (多重項)</b> テーブルでは、8.5280 ppm の 2 つのピークが一緒にグループ化されました。δ 列にはシフト値が表示されます。これらのピークには、デフォルトの単純な分裂パターン (d) が割り当てられ、単純な分裂パターンの J 値が自動的に計算されました：</p>  <table border="1" data-bbox="661 479 1480 738"> <thead> <tr> <th>δ [ppm]</th> <th>ピーク[ppm]</th> <th>J [Hz]</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>3.9900</td><td>4.0032,3.9897,3.9768</td><td>5.28</td><td>t</td></tr> <tr><td>4.4619</td><td>4.4751,4.4622,4.4487</td><td>5.28</td><td>t</td></tr> <tr><td></td><td>7.2612</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8381</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8579</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8762</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8791</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>7.8972</td><td></td><td></td></tr> <tr><td>8.5280</td><td>8.5380,8.5180</td><td>8.01</td><td>d</td></tr> <tr><td></td><td>8.6225</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>8.6254</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>8.6438</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>8.6467</td><td></td><td></td></tr> <tr><td></td><td>8.6762</td><td></td><td></td></tr> </tbody> </table>	δ [ppm]	ピーク[ppm]	J [Hz]	パターン	3.9900	4.0032,3.9897,3.9768	5.28	t	4.4619	4.4751,4.4622,4.4487	5.28	t		7.2612				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972			8.5280	8.5380,8.5180	8.01	d		8.6225				8.6254				8.6438				8.6467				8.6762		
δ [ppm]	ピーク[ppm]	J [Hz]	パターン																																																											
3.9900	4.0032,3.9897,3.9768	5.28	t																																																											
4.4619	4.4751,4.4622,4.4487	5.28	t																																																											
	7.2612																																																													
	7.8381																																																													
	7.8579																																																													
	7.8762																																																													
	7.8791																																																													
	7.8972																																																													
8.5280	8.5380,8.5180	8.01	d																																																											
	8.6225																																																													
	8.6254																																																													
	8.6438																																																													
	8.6467																																																													
	8.6762																																																													

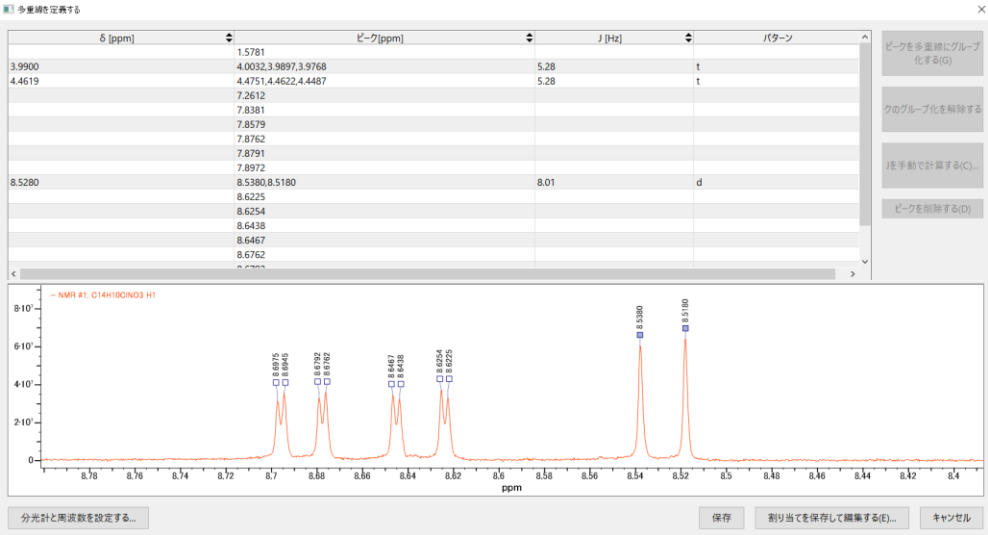
	アクション	結果																																																												
12	<p>さらに、~ 8.6 ppm から 8.71 ppm までズームインしてください。 ~8.62 - 8.64 ppm の 4 つのピーク (8.6225、8.6254、8.6438、8.6467) についても、手順 7 と 8 を繰り返してください。</p> <p><b>注記：</b>これにより、4 つのピークに対して自動的に単純な分裂パターン (q) が割り当てられますが、次の手順で修正されます。</p>	<p><b>Multiplets (多重項)</b> テーブルでは、8.6346 ppm の 2 つのピークがまとめられました。δ 列にはシフト値が表示されます。これらのピークには、デフォルトの単純な分裂パターン (q) が割り当てられ、単純な分裂パターンの J 値が自動的に計算されました：</p>  <table border="1" data-bbox="661 454 1480 787"> <thead> <tr> <th>δ [ppm]</th> <th>ピーク [ppm]</th> <th>J [Hz]</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>3.9900</td> <td>4.0032, 3.9897, 3.9768</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>4.4619</td> <td>4.4751, 4.4622, 4.4487</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.2612</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8381</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8579</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8762</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8791</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8972</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.5280</td> <td>8.5380, 8.5180</td> <td>8.01</td> <td>d</td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6225</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6254</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6438</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6467</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6762</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン	3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t	4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t		7.2612				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972			8.5280	8.5380, 8.5180	8.01	d		8.6225				8.6254				8.6438				8.6467				8.6762		
δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン																																																											
3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t																																																											
4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t																																																											
	7.2612																																																													
	7.8381																																																													
	7.8579																																																													
	7.8762																																																													
	7.8791																																																													
	7.8972																																																													
8.5280	8.5380, 8.5180	8.01	d																																																											
	8.6225																																																													
	8.6254																																																													
	8.6438																																																													
	8.6467																																																													
	8.6762																																																													

	アクション	結果																																																																
13	<p><b>Multiplets (多重項)</b> テーブルで、8.6346 ppm の多重項のパターンを「q」からセルのドロップダウンメニューを使って「dd」に変更してください。</p> <p><b>注記:</b> ドロップダウンメニューでパターンを選択するために、<b>Define Multiplets</b> (多重項を定義) ダイアログのサイズを調整する必要があるかもしれません。</p>	<p><b>Multiplets (多重項)</b> テーブルの 8.6346 ppm の多重項のパターンは現在「dd」と表示されています。J 値のセルは空白になりました。</p>  <table border="1" data-bbox="659 446 1470 690"> <thead> <tr> <th>δ [ppm]</th> <th>ピーク[ppm]</th> <th>J [Hz]</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1.5781</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>3.9900</td> <td>4.0032, 3.9897, 3.9768</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>4.4619</td> <td>4.4751, 4.4622, 4.4487</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.2612</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8381</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8579</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8762</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8791</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8972</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>8.5280</td> <td>8.5380, 8.5180</td> <td>8.01</td> <td>d</td> </tr> <tr style="background-color: #e0f0ff;"> <td>8.6346</td> <td>8.6467, 8.6438, 8.6254, 8.6225</td> <td></td> <td>dd</td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6762</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6792</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6945</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6975</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	δ [ppm]	ピーク[ppm]	J [Hz]	パターン	1.5781				3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t	4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t		7.2612				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972			8.5280	8.5380, 8.5180	8.01	d	8.6346	8.6467, 8.6438, 8.6254, 8.6225		dd		8.6762				8.6792				8.6945				8.6975		
δ [ppm]	ピーク[ppm]	J [Hz]	パターン																																																															
1.5781																																																																		
3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t																																																															
4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t																																																															
	7.2612																																																																	
	7.8381																																																																	
	7.8579																																																																	
	7.8762																																																																	
	7.8791																																																																	
	7.8972																																																																	
8.5280	8.5380, 8.5180	8.01	d																																																															
8.6346	8.6467, 8.6438, 8.6254, 8.6225		dd																																																															
	8.6762																																																																	
	8.6792																																																																	
	8.6945																																																																	
	8.6975																																																																	

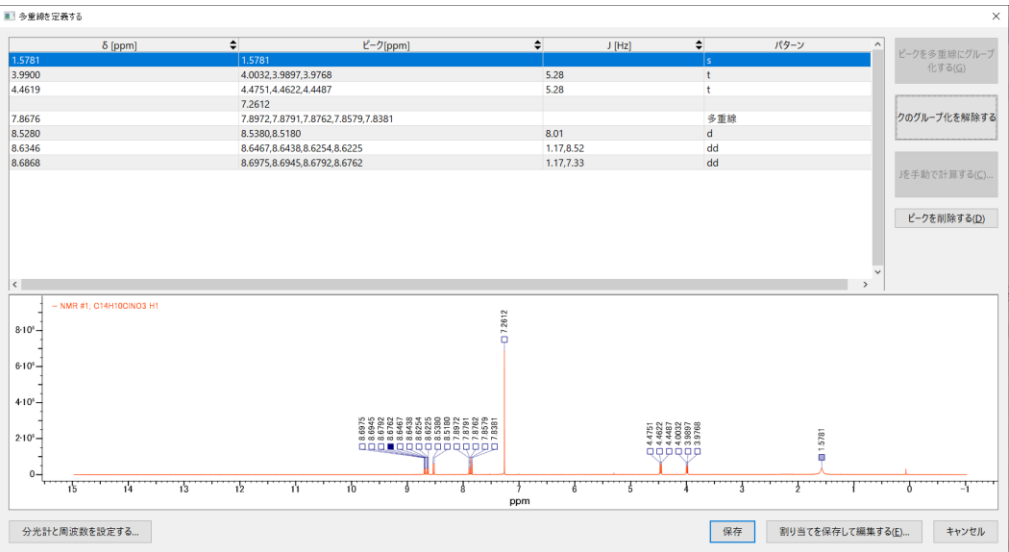
	アクション	結果									
14	<p><b>Define Multiplets (多重項を定義)</b> ダイアログで、「<b>Jを手動で計算する</b>」をクリックしてください。</p> <p><b>注記:</b> 複雑な分裂パターン (例: dd, td, dt, ddd など) の結合定数 (J) は、<b>Jを手動で計算する</b> ツールを使用して手動で計算する必要があります。</p>	<p>「<b>Jを手動で計算する</b>」ダイアログが表示されます。</p>  <p>このダイアログは、この多重項に対して 2 回使用され、dd の 2 つの別々の J 値を計算するために使用されます。</p>									
15	<p>小さい J 値を計算するには、<b>Define Multiplets (多重項を定義)</b> ダイアログのスペクトル上のピークボックスを、左から右の順でクリックしてください。ここでは、8.6467、8.6438、8.6254、8.6225 の 4 つのピークが多重項に含まれています。</p>	<p>ピークボックスが選択されると、そのピークのシフト値が <b>Jを手動で計算する</b> テーブルにクリックされた順に追加されます。最初に選択された 2 つのピーク (8.6467 と 8.6438) の J 値が計算され、次に選択された 2 つのピーク (8.6254 と 8.6225) の J 値が計算されます。テーブルの全ての行の平均 J 値が「<b>Average J:</b>」として表示されます。</p>  <table border="1" data-bbox="674 1036 1215 1203"> <thead> <tr> <th>ピーク1 [ppm]</th> <th>ピーク2 [ppm]</th> <th>J [Hz]</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>8.6467</td> <td>8.6438</td> <td>1.2</td> </tr> <tr> <td>8.6254</td> <td>8.6225</td> <td>1.2</td> </tr> </tbody> </table> <p>平均J: 1.2 標準偏差: 0</p> <p>クリア(C)    平均とJの値を確認する    キャンセル</p>	ピーク1 [ppm]	ピーク2 [ppm]	J [Hz]	8.6467	8.6438	1.2	8.6254	8.6225	1.2
ピーク1 [ppm]	ピーク2 [ppm]	J [Hz]									
8.6467	8.6438	1.2									
8.6254	8.6225	1.2									

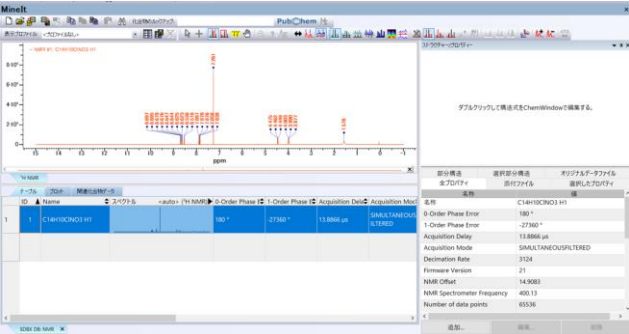
	アクション	結果
16	<p><b>Confirm Average J Value (平均 J 値を確定)</b> をクリックして、小さい J 値を保存してください。ダイアログを閉じないでください。</p>	<p>J 値はレコードに反映され、<b>J を手動で計算する</b> ダイアログはクリアされます：</p> 
17	<p>大きい J 値を計算するために、<b>ピークバー</b>を使用して各グループのピークの重心をクリックしてください。例えば、8.6467 と 8.6438 ppm の間のグループのピークの重心を一度クリックし、次に 8.6254 と 8.6225 ppm の間のグループのピークの重心をもう一度クリックします。以下のように線で示します：</p> 	<p><b>ピークバー</b>がクリックされると、シフト値が <b>J を手動で計算する</b> テーブルに追加されます。J 値は、各グループのピークの中央値として計算されます：</p> 

	アクション	結果																																																																
18	<p>大きい J 値を保存するためには、<b>Confirm Average J Value (平均 J 値を確定)</b> をクリックしてください。その後、<b>Cancel (キャンセル)</b> をクリックして J を手動で計算するダイアログを閉じます。</p>	<p><b>Define Multiplets (多重項を定義)</b> テーブルには、8.6346 ppm の多重項に対して 2 つの J 値が表示されています：</p>  <table border="1" data-bbox="659 391 1528 643"> <thead> <tr> <th>δ [ppm]</th> <th>ピーク [ppm]</th> <th>J [Hz]</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1.5781</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>3.9900</td> <td>4.0032, 3.9897, 3.9768</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>4.4619</td> <td>4.4751, 4.4622, 4.4487</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.2612</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8381</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8579</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8762</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8791</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.8972</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.5180</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.5380</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6225</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6254</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6438</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>8.6467</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン	1.5781				3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t	4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t		7.2612				7.8381				7.8579				7.8762				7.8791				7.8972				8.5180				8.5380				8.6225				8.6254				8.6438				8.6467		
δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン																																																															
1.5781																																																																		
3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t																																																															
4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t																																																															
	7.2612																																																																	
	7.8381																																																																	
	7.8579																																																																	
	7.8762																																																																	
	7.8791																																																																	
	7.8972																																																																	
	8.5180																																																																	
	8.5380																																																																	
	8.6225																																																																	
	8.6254																																																																	
	8.6438																																																																	
	8.6467																																																																	

	アクション	結果
19	<p>次に、8.6762、8.6792、8.6945、8.6975 の 4 つのピークを 8.67 - 8.70 ppm の範囲でグループ化し、2 つのカップリング定数を持つ dd として設定するために、ステップ 12 から 18 までの手順を繰り返してください。</p> <p><b>注記：</b>ドロップダウンメニューでパターンを選択するために、<b>Define Multiplets (多重項を定義)</b> ダイアログのサイズを調整する必要があるかもしれません。</p>	<p>これにより、~8.6868 ppm の位置に dd としてグループ化されたピークが得られます。この多重項に対して 2 つの J 値がテーブルに追加されます：</p> 

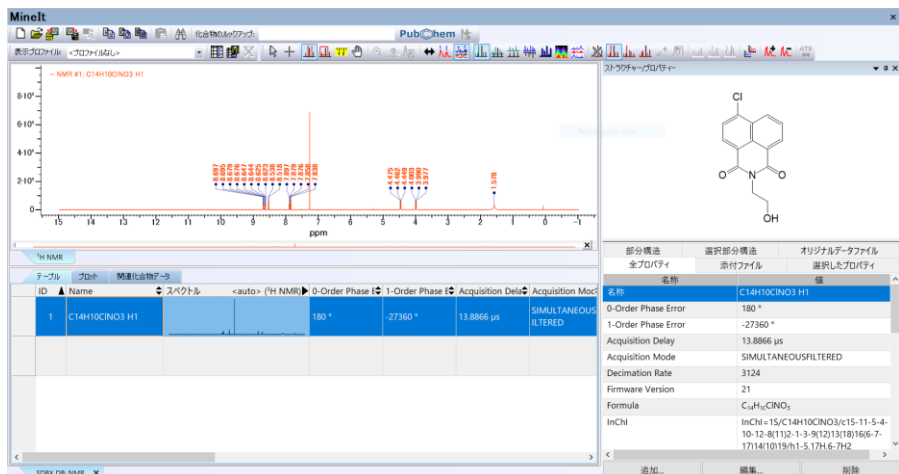
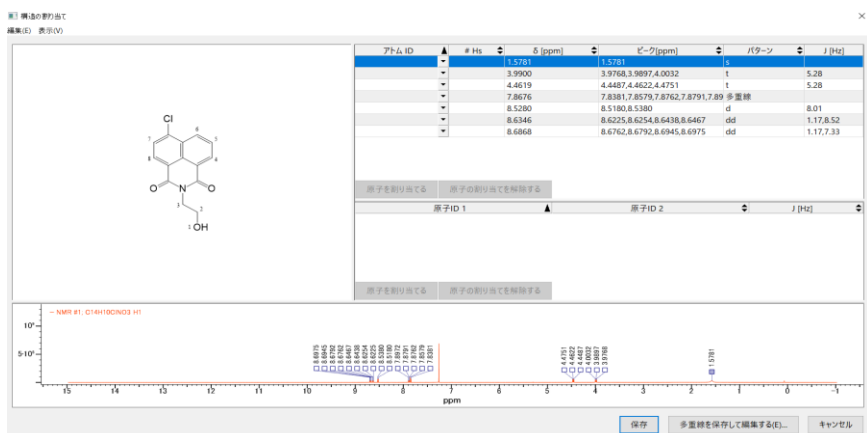


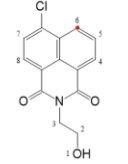
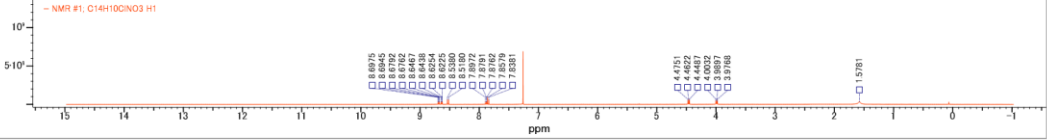
	アクション	結果																																				
20	<p><b>Define Multiplets (多重項を定義)</b> ダイアログ上でスペクトルを右クリックし、"<b>View Entire Spectrum</b>" (スペクトル全体を表示) を選択してください。残りのピークグループについてもステップ 7 と 8 を繰り返してください。具体的には、7.84 から 7.90 ppm の範囲にある 5 つのピーク (7.8381、7.8579、7.8762、7.8791、7.8972) をまとめ、また 1.5781 ppm の単一のピークもまとめます。</p> <p><b>注記 : Multiplets (多重項) テーブル</b>では、シングレットは 1 つのピークとしてまとめられ、正しいパターン (s) で分類される必要があります。</p>	<p>7.8676 ppm のピークは多重項にグループ化されます。また、1.5781 ppm のピークはシングレット (s) としてグループ化されます。どちらの多重項もカップリング定数を持たないため、パターンの性質によります :</p>  <table border="1" data-bbox="661 418 1663 706"> <thead> <tr> <th>δ [ppm]</th> <th>ピーク [ppm]</th> <th>J [Hz]</th> <th>パターン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1.5781</td> <td>1.5781</td> <td></td> <td>s</td> </tr> <tr> <td>3.9900</td> <td>4.0032, 3.9897, 3.9768</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>4.4619</td> <td>4.4751, 4.4622, 4.4487</td> <td>5.28</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td></td> <td>7.2612</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>7.8676</td> <td>7.8972, 7.8791, 7.8762, 7.8579, 7.8381</td> <td></td> <td>多重項</td> </tr> <tr> <td>8.5280</td> <td>8.5380, 8.5180</td> <td>8.01</td> <td>d</td> </tr> <tr> <td>8.6346</td> <td>8.6467, 8.6438, 8.6254, 8.6225</td> <td>1.17, 8.52</td> <td>dd</td> </tr> <tr> <td>8.6868</td> <td>8.6975, 8.6945, 8.6792, 8.6762</td> <td>1.17, 7.33</td> <td>dd</td> </tr> </tbody> </table>	δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン	1.5781	1.5781		s	3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t	4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t		7.2612			7.8676	7.8972, 7.8791, 7.8762, 7.8579, 7.8381		多重項	8.5280	8.5380, 8.5180	8.01	d	8.6346	8.6467, 8.6438, 8.6254, 8.6225	1.17, 8.52	dd	8.6868	8.6975, 8.6945, 8.6792, 8.6762	1.17, 7.33	dd
δ [ppm]	ピーク [ppm]	J [Hz]	パターン																																			
1.5781	1.5781		s																																			
3.9900	4.0032, 3.9897, 3.9768	5.28	t																																			
4.4619	4.4751, 4.4622, 4.4487	5.28	t																																			
	7.2612																																					
7.8676	7.8972, 7.8791, 7.8762, 7.8579, 7.8381		多重項																																			
8.5280	8.5380, 8.5180	8.01	d																																			
8.6346	8.6467, 8.6438, 8.6254, 8.6225	1.17, 8.52	dd																																			
8.6868	8.6975, 8.6945, 8.6792, 8.6762	1.17, 7.33	dd																																			

	アクション	結果
21	<p>7.26 ppm のピークは構造には含まれていないため、<b>Delete Peak(s)</b> (ピークを削除) をクリックして削除します。</p>	<p>その結果、7.2612 ppm のピークは <b>Multiplets (多重項)</b> テーブルから削除されます：</p> 
22	<p><b>Save (保存)</b> をクリックして、多重項をレコードに保存し、<b>Define Multiplets (多重項を定義)</b> ダイアログを終了します。</p>	<p>ダイアログが閉じられ、Mineltrecord が表示されます：</p> 

## NMR ツールを使用して、多重項を構造に割り当てます。

	アクション	結果
1	<p>前のセクションの <b>Minelt</b> レコードを選択してください。 <b>構造/プロパティ</b> ウィンドウで、「ダブルクリックして <b>ChemWindow</b> で構造を編集」というテキストをクリックします。</p> <p><b>注記</b>：構造やプロトン、炭素を構造に割り当てるには、まず構造を <b>Minelt</b> レコードに添付する必要があります。</p>	<p><b>ChemWindow</b> が表示されます；</p> 
2	<p>メニューの「<b>ファイル</b>」&gt;「<b>開く</b>」を選択し、「<b>C14H10ClNO3.dsf</b>」の構造を開きます。</p> <p>『<b>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll</b> ファイルの場所は「<b>サンプル\NMR\Bruker TopSpin\C14H10ClNO3</b>」です。</p>	<p><b>ChemWindow</b> で <b>C14H10ClNO3</b> の構造が表示されます；</p> 
	アクション	結果

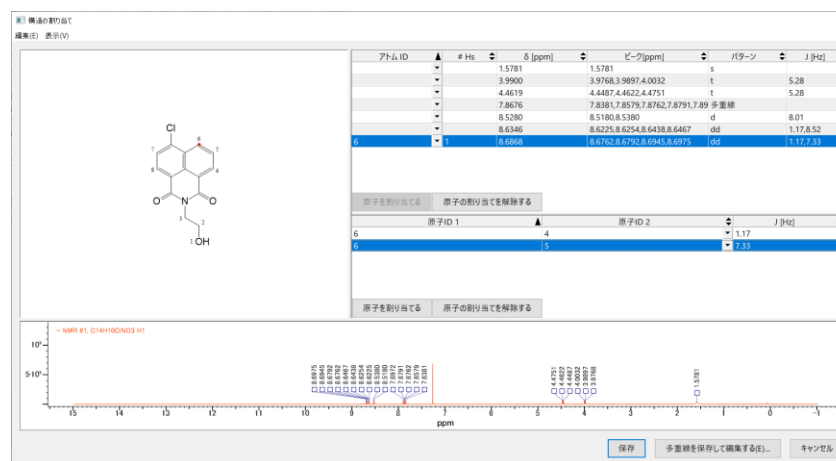
<p>3 「保存」をクリックして、構造を Minelt レコードに追加します。</p>	<p>これにより、構造が Minelt レコードに添付されます：</p> 
<p>4 「NMR ツール」 &gt; 「構造の割り当て」を選択します。</p>	<p>構造の割り当てダイアログが表示されます：</p>  <p><b>Define Multiplets (多重項を定義)</b> ダイアログからの多重項情報は予め入力されています。</p>
<p>アクション</p>	<p>結果</p>

<p>5</p>	<p>構造の割り当てダイアログの表示タブの設定を確認してください。同じ原子に対しての原子 ID をグループ化するにはチェックマークが付いているはずで、すべての原子に対して原子 ID を割り当てるにはチェックが外れているはずで</p>	<div data-bbox="730 272 1075 378" style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p>表示(V)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><input checked="" type="checkbox"/> 同等の原子のグループ原子ID(G) すべての原子に原子IDを割り当てる(A)</li> <li><input checked="" type="checkbox"/> アトム ID 表示(D)</li> <li><input checked="" type="checkbox"/> ストラクチャをウィンドウに合わせる(S)</li> </ul> </div> <p>同じ原子に対しての原子 ID をグループ化するオプションは、対称的な構造に対して同じ番号付けを追加または削除するために使用されます。</p> <p>すべての原子に対して原子 ID を割り当てるオプションは、異種原子に番号付けを追加または削除するために使用されます。これは、スペクトル内のクロスカップリング (例: H-P) をラベル付けするために必要な場合があります。</p>																																																									
<p>6</p>	<p>8.6868 ppm という <math>\delta</math> 値を持つ行をクリックしてください。原子 ID のドロップダウンメニューからプロトン 6 を選択し、その多重項に割り当てます。テーブルの下の空白の部分をクリックして変更を確定させてください。</p> <p><b>注記:</b> このメニューでは、複数のプロトンを選択して割り当てることもできます。</p> <p><b>注記:</b> 原子 ID は、キーボードの数字を使ってセルに直接入力することもできます。または、Assign Atom(s) (原子の割り当て) ボタンをクリックして構造内の原子を選択することもできます。</p> <p><b>注記:</b> プロトンはいつでも「原子の割り当て解除」をクリックすることで未割り当てに戻すことができます。</p>	<p>8.6868 ppm の dd に対応する原子 ID はプロトン 6 です。# Hs の欄には割り当てられたプロトンの数が表示されます:</p> <div data-bbox="730 641 1793 1230" style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p>構造の割り当て</p> <p>構造(E) 表示(V)</p> <div style="display: flex; align-items: center;">  <table border="1" style="font-size: small;"> <thead> <tr> <th>アトム ID</th> <th># Hs</th> <th><math>\delta</math> [ppm]</th> <th>ピーク[ppm]</th> <th>パターン</th> <th>J [Hz]</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>1</td><td>1.5781</td><td>1.5781</td><td>s</td><td></td></tr> <tr><td>2</td><td>3</td><td>3.9900</td><td>3.9768, 3.9897, 4.0032</td><td>t</td><td>5.28</td></tr> <tr><td>3</td><td>4</td><td>4.4619</td><td>4.4487, 4.4622, 4.4751</td><td>t</td><td>5.28</td></tr> <tr><td>4</td><td>7</td><td>7.8676</td><td>7.8381, 7.8579, 7.8762, 7.8791, 7.89</td><td>多重線</td><td></td></tr> <tr><td>5</td><td>8</td><td>8.5280</td><td>8.5180, 8.5380</td><td>d</td><td>8.01</td></tr> <tr><td>6</td><td>1</td><td>8.6346</td><td>8.6225, 8.6254, 8.6438, 8.6467</td><td>dd</td><td>1.17, 8.52</td></tr> <tr style="background-color: #e0e0e0;"><td>6</td><td>1</td><td>8.6868</td><td>8.6762, 8.6792, 8.6945, 8.6975</td><td>dd</td><td>1.17, 7.33</td></tr> </tbody> </table> </div> <div style="margin-top: 10px;"> <table border="1" style="font-size: small; width: 100%;"> <thead> <tr> <th>原子ID 1</th> <th>原子ID 2</th> <th>J [Hz]</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>6</td> <td></td> <td>1.17</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td></td> <td>7.33</td> </tr> </tbody> </table> </div>  </div>	アトム ID	# Hs	$\delta$ [ppm]	ピーク[ppm]	パターン	J [Hz]	1	1	1.5781	1.5781	s		2	3	3.9900	3.9768, 3.9897, 4.0032	t	5.28	3	4	4.4619	4.4487, 4.4622, 4.4751	t	5.28	4	7	7.8676	7.8381, 7.8579, 7.8762, 7.8791, 7.89	多重線		5	8	8.5280	8.5180, 8.5380	d	8.01	6	1	8.6346	8.6225, 8.6254, 8.6438, 8.6467	dd	1.17, 8.52	6	1	8.6868	8.6762, 8.6792, 8.6945, 8.6975	dd	1.17, 7.33	原子ID 1	原子ID 2	J [Hz]	6		1.17	6		7.33
アトム ID	# Hs	$\delta$ [ppm]	ピーク[ppm]	パターン	J [Hz]																																																						
1	1	1.5781	1.5781	s																																																							
2	3	3.9900	3.9768, 3.9897, 4.0032	t	5.28																																																						
3	4	4.4619	4.4487, 4.4622, 4.4751	t	5.28																																																						
4	7	7.8676	7.8381, 7.8579, 7.8762, 7.8791, 7.89	多重線																																																							
5	8	8.5280	8.5180, 8.5380	d	8.01																																																						
6	1	8.6346	8.6225, 8.6254, 8.6438, 8.6467	dd	1.17, 8.52																																																						
6	1	8.6868	8.6762, 8.6792, 8.6945, 8.6975	dd	1.17, 7.33																																																						
原子ID 1	原子ID 2	J [Hz]																																																									
6		1.17																																																									
6		7.33																																																									

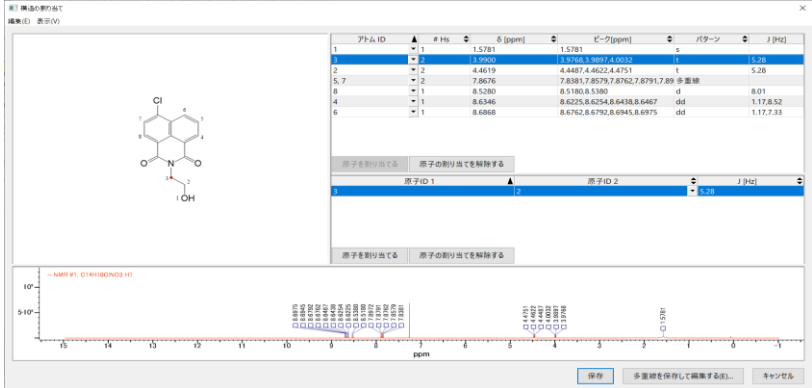
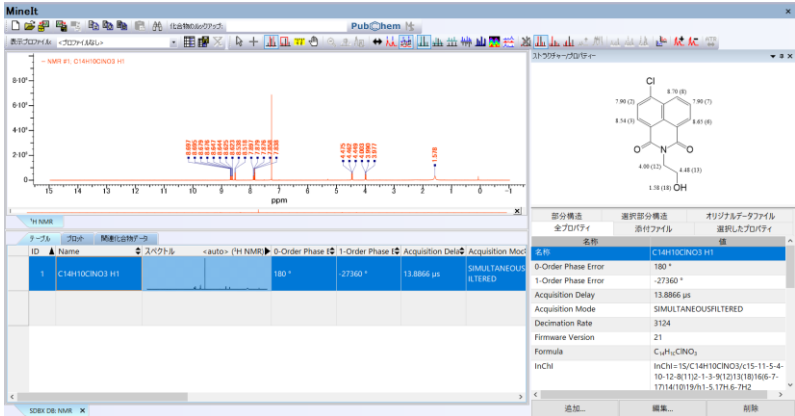
アクション	結果
-------	----

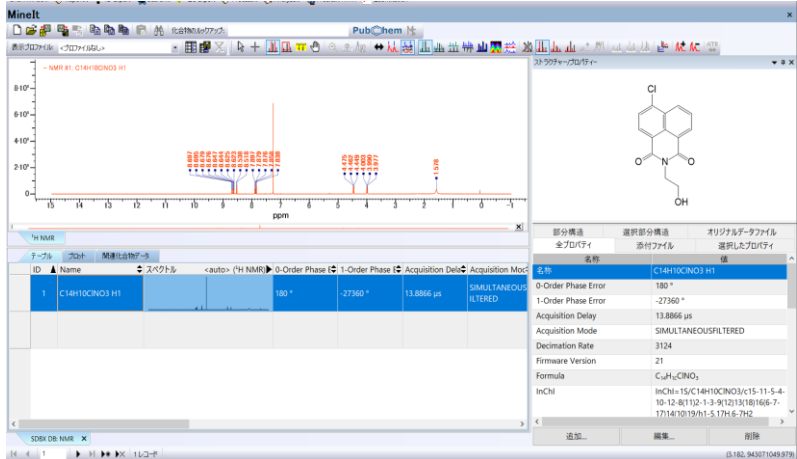
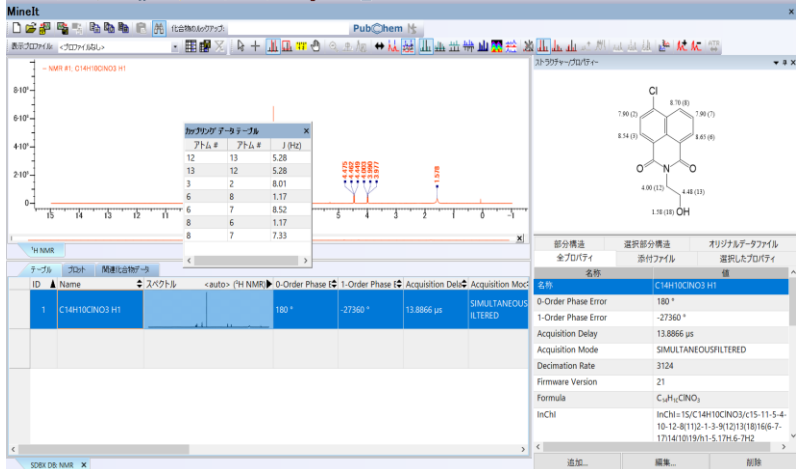
7 構造の割り当てダイアログの下部テーブルでは、**原子 ID 2** の列とセル内のドロップダウンメニューを使用して、小さい J-値 (約 1.17 Hz) をプロトン 4 に、大きい J-値 (約 7.29 Hz) をプロトン 5 に割り当てます。

下部テーブルの原子 ID 2 の列は、原子番号 4 と 5 が割り当てられた状態になります：

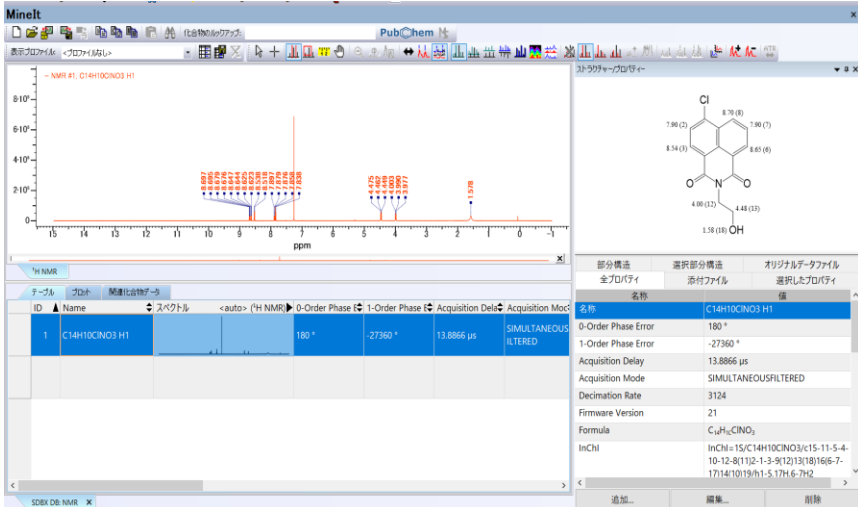


下部テーブルはクロスカップリングの割り当てに使用されます。

	アクション	結果																					
8	<p>構造内の各プロトンについて、ステップ 6 とステップ 7 を繰り返してください。以下のペアを割り当てます：</p> <table border="1" data-bbox="247 483 617 776"> <thead> <tr> <th>原子 ID</th> <th><math>\delta</math></th> <th>原子 ID 2</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>1.5781</td> <td>N/A</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>3.9900</td> <td>2</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>4.4619</td> <td>3</td> </tr> <tr> <td>5, 7</td> <td>7.8676</td> <td>N/A</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>8.5280</td> <td>7</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>8.6346</td> <td>6 (1.17) 5 (8.52)</td> </tr> </tbody> </table>	原子 ID	$\delta$	原子 ID 2	1	1.5781	N/A	3	3.9900	2	2	4.4619	3	5, 7	7.8676	N/A	8	8.5280	7	4	8.6346	6 (1.17) 5 (8.52)	<p>構造の割り当てダイアログの原子 ID 列が埋まります：</p> 
原子 ID	$\delta$	原子 ID 2																					
1	1.5781	N/A																					
3	3.9900	2																					
2	4.4619	3																					
5, 7	7.8676	N/A																					
8	8.5280	7																					
4	8.6346	6 (1.17) 5 (8.52)																					
9	<p>変更をレコードに反映させるために、保存をクリックしてください。</p> <p><b>注記：</b>「SaveAndEdit Multiplets」（多重項の保存・編集）をクリックすると、Define Multiplets（多重項を定義）ダイアログと構造の割り当てダイアログの間をスムーズに切り替えることができます。</p>	<p>保存をクリックすると、ダイアログが閉じられ、Minelt のレコードが表示されます。</p> 																					

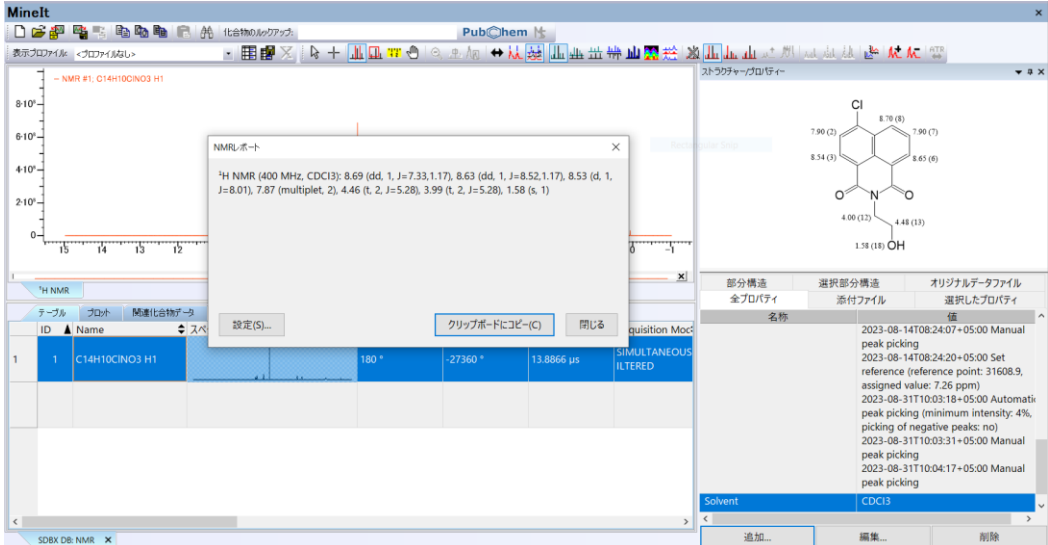
	アクション	結果
10	<p>構造上の割り当てを確認するには、表示 (View) &gt; 割り当て情報 (Assignment Information) &gt; 両方 (Both) を選択してください。</p>	<p>構造/プロパティウィンドウには、原子 ID が表示されます：</p> 
11	<p>クロスカップリング情報を確認するには、表示 (View) &gt; ウィンドウ/テーブル (Windows/Tables) &gt; カップリングデータテーブル (Coupling Data Table) を選択してください。</p>	



	アクション	結果
12	<p>カップリングデータテーブルを閉じるには、<b>X</b>をクリックしてください。</p>	<p>カップリングデータテーブルは非表示になります：</p>  <p>The screenshot displays the Minelt interface with the following details:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Spectrum:</b> A 1H NMR spectrum for C14H10ClNO3 H1. The x-axis is labeled 'ppm' and ranges from 15 to -1. The y-axis represents intensity. Several peaks are visible, with chemical shifts labeled: 8.97, 8.94, 8.91, 8.88, 8.85, 8.82, 8.79, 8.76, 8.73, 8.70, 8.67, 8.64, 8.61, 8.58, 8.55, 8.52, 8.49, 8.46, 8.43, 8.40, 8.37, 8.34, 8.31, 8.28, 8.25, 8.22, 8.19, 8.16, 8.13, 8.10, 8.07, 8.04, 8.01, 7.98, 7.95, 7.92, 7.89, 7.86, 7.83, 7.80, 7.77, 7.74, 7.71, 7.68, 7.65, 7.62, 7.59, 7.56, 7.53, 7.50, 7.47, 7.44, 7.41, 7.38, 7.35, 7.32, 7.29, 7.26, 7.23, 7.20, 7.17, 7.14, 7.11, 7.08, 7.05, 7.02, 6.99, 6.96, 6.93, 6.90, 6.87, 6.84, 6.81, 6.78, 6.75, 6.72, 6.69, 6.66, 6.63, 6.60, 6.57, 6.54, 6.51, 6.48, 6.45, 6.42, 6.39, 6.36, 6.33, 6.30, 6.27, 6.24, 6.21, 6.18, 6.15, 6.12, 6.09, 6.06, 6.03, 6.00, 5.97, 5.94, 5.91, 5.88, 5.85, 5.82, 5.79, 5.76, 5.73, 5.70, 5.67, 5.64, 5.61, 5.58, 5.55, 5.52, 5.49, 5.46, 5.43, 5.40, 5.37, 5.34, 5.31, 5.28, 5.25, 5.22, 5.19, 5.16, 5.13, 5.10, 5.07, 5.04, 5.01, 4.98, 4.95, 4.92, 4.89, 4.86, 4.83, 4.80, 4.77, 4.74, 4.71, 4.68, 4.65, 4.62, 4.59, 4.56, 4.53, 4.50, 4.47, 4.44, 4.41, 4.38, 4.35, 4.32, 4.29, 4.26, 4.23, 4.20, 4.17, 4.14, 4.11, 4.08, 4.05, 4.02, 4.00, 3.97, 3.94, 3.91, 3.88, 3.85, 3.82, 3.79, 3.76, 3.73, 3.70, 3.67, 3.64, 3.61, 3.58, 3.55, 3.52, 3.49, 3.46, 3.43, 3.40, 3.37, 3.34, 3.31, 3.28, 3.25, 3.22, 3.19, 3.16, 3.13, 3.10, 3.07, 3.04, 3.01, 2.98, 2.95, 2.92, 2.89, 2.86, 2.83, 2.80, 2.77, 2.74, 2.71, 2.68, 2.65, 2.62, 2.59, 2.56, 2.53, 2.50, 2.47, 2.44, 2.41, 2.38, 2.35, 2.32, 2.29, 2.26, 2.23, 2.20, 2.17, 2.14, 2.11, 2.08, 2.05, 2.02, 2.00, 1.97, 1.94, 1.91, 1.88, 1.85, 1.82, 1.79, 1.76, 1.73, 1.70, 1.67, 1.64, 1.61, 1.58, 1.55, 1.52, 1.49, 1.46, 1.43, 1.40, 1.37, 1.34, 1.31, 1.28, 1.25, 1.22, 1.19, 1.16, 1.13, 1.10, 1.07, 1.04, 1.01, 1.00, 0.97, 0.94, 0.91, 0.88, 0.85, 0.82, 0.79, 0.76, 0.73, 0.70, 0.67, 0.64, 0.61, 0.58, 0.55, 0.52, 0.49, 0.46, 0.43, 0.40, 0.37, 0.34, 0.31, 0.28, 0.25, 0.22, 0.19, 0.16, 0.13, 0.10, 0.07, 0.04, 0.01, 0.00.</li> <li><b>Chemical Structure:</b> 1-(2-chlorophenyl)pyrrolidine-2-one. The structure is shown with peak assignments: 7.96 (2), 8.78 (8), 7.90 (7), 8.54 (3), 8.67 (4), 4.90 (12), 4.48 (13), 1.18 (18) OH.</li> <li><b>Table:</b> A table with columns: ID, Name, スペクトル, &lt;auto&gt; (1H NMR), 0-Order Phase, 1-Order Phase, Acquisition Del, Acquisition Mod. The first row is highlighted in blue: ID 1, Name C14H10ClNO3 H1, 180°, -27360°, 13.8866 µs, SIMULTANEOUS FILTERED.</li> <li><b>Parameters Panel:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>名称: C14H10ClNO3 H1</li> <li>0-Order Phase Error: 180°</li> <li>1-Order Phase Error: -27360°</li> <li>Acquisition Delay: 13.8866 µs</li> <li>Acquisition Mode: SIMULTANEOUS FILTERED</li> <li>Decimation Rate: 3124</li> <li>Firmware Version: 21</li> <li>Formula: C<sub>14</sub>H<sub>10</sub>ClNO<sub>3</sub></li> <li>InChI: InChI=1S/C14H10ClNO3/c15-11-5-4-10-12-8(11)-1-3-9(12)13/18166-7-1714/1019/h1-5,17H,6-7H2</li> </ul> </li> </ul>

## NMR 多重項レポートの表示

	アクション	結果
1	<p>Minelt で、「NMR ツール」 &gt; 「多重項レポート」を選択します。</p> <p>注記：「クリップボードにコピー」をクリックすると、ダイアログ内のレポート情報がクリップボードにコピーされます。</p>	<p>多重項レポートは、<b>Define Multiplets (多重項を定義)</b> ダイアログで保存した情報が自動的に表示されます。積分情報は<b>構造の割り当て</b>ダイアログから取得されます：</p>  <p>NMR レポートは、<sup>1</sup>H および <sup>13</sup>C NMR スペクトル用に自動的に生成されます。これらの <b>NMR レポート</b> の詳細な設定は、「<b>設定</b>」をクリックすることで調整できます。</p>
2	<p>ダイアログ上の「閉じる」をクリックします。<b>構造/プロパティ</b>ウィンドウで「追加」をクリックし、「ドロップダウンリスト」から「溶媒」を選択します。値として「CDCI3」を入力します。</p>	<p><b>プロパティ</b>ダイアログが表示されます：</p> 

	アクション	結果														
3	<p>プロパティダイアログ上で「OK」をクリックして、溶媒を Minelt のレコードに追加します。その後、「NMR ツール」&gt;「多重項レポート」で NMR レポートダイアログを再起動します。</p>	<p>これにより、NMR レポートには特定のレコードの NMR 溶媒が表示されるようになります。</p>  <p>The screenshot shows the Minelt software interface. On the left, there is an NMR spectrum plot. In the center, a dialog box titled 'NMRレポート' displays the following text: <math>^1\text{H}</math> NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 8.69 (dd, 1, J=7.33, 1.17), 8.63 (dd, 1, J=8.52, 1.17), 8.53 (d, 1, J=8.01), 7.87 (multiplet, 2), 4.46 (t, 2, J=5.28), 3.99 (t, 2, J=5.28), 1.58 (s, 1). On the right, a chemical structure is shown with proton assignments: 7.90 (2), 8.54 (3), 8.70 (8), 7.90 (7), 8.65 (6), 4.00 (12), 4.48 (13), and 1.58 (18) OH. Below the structure is a table of acquisition parameters:</p> <table border="1" data-bbox="1350 662 1696 932"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2023-08-14T08:24:07+05:00 Manual peak picking</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2023-08-14T08:24:20+05:00 Set reference (reference point: 31608.9, assigned value: 7.26 ppm)</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2023-08-31T10:03:18+05:00 Automatic peak picking (minimum intensity: 4%, picking of negative peaks: no)</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2023-08-31T10:03:31+05:00 Manual peak picking</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2023-08-31T10:04:17+05:00 Manual peak picking</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Solvent</td> <td>CDCl<sub>3</sub></td> </tr> </tbody> </table>	名称	値	2023-08-14T08:24:07+05:00 Manual peak picking		2023-08-14T08:24:20+05:00 Set reference (reference point: 31608.9, assigned value: 7.26 ppm)		2023-08-31T10:03:18+05:00 Automatic peak picking (minimum intensity: 4%, picking of negative peaks: no)		2023-08-31T10:03:31+05:00 Manual peak picking		2023-08-31T10:04:17+05:00 Manual peak picking		Solvent	CDCl <sub>3</sub>
名称	値															
2023-08-14T08:24:07+05:00 Manual peak picking																
2023-08-14T08:24:20+05:00 Set reference (reference point: 31608.9, assigned value: 7.26 ppm)																
2023-08-31T10:03:18+05:00 Automatic peak picking (minimum intensity: 4%, picking of negative peaks: no)																
2023-08-31T10:03:31+05:00 Manual peak picking																
2023-08-31T10:04:17+05:00 Manual peak picking																
Solvent	CDCl <sub>3</sub>															

# NMR

## NMR スペクトルの生成

### 目的

この演習では、ピークリストや NMR レポートを使用して、分解されたスペクトルの NMR スペクトルを生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:

- Minelt へのピークリストのインポート方法

### 背景

参照物質を実験スペクトルに重ね合わせることは、化合物の確認や不純物の同定に重要です。そのため、ピークリストを Minelt にインポートできるようになると便利です。Minelt のユーザーデータベースには、NMR レポートなどの参考資料からの表形式のピークリストをインポートすることができます。これにより、これらの化合物のスペクトルを直接重ね合わせたり、差し引いたり、実験データと比較したりすることが可能です。これによって、化合物の確認や不純物の同定に役立つ情報を得ることができます。

#### KnowItAll 使用アプリケーション

- Minelt™

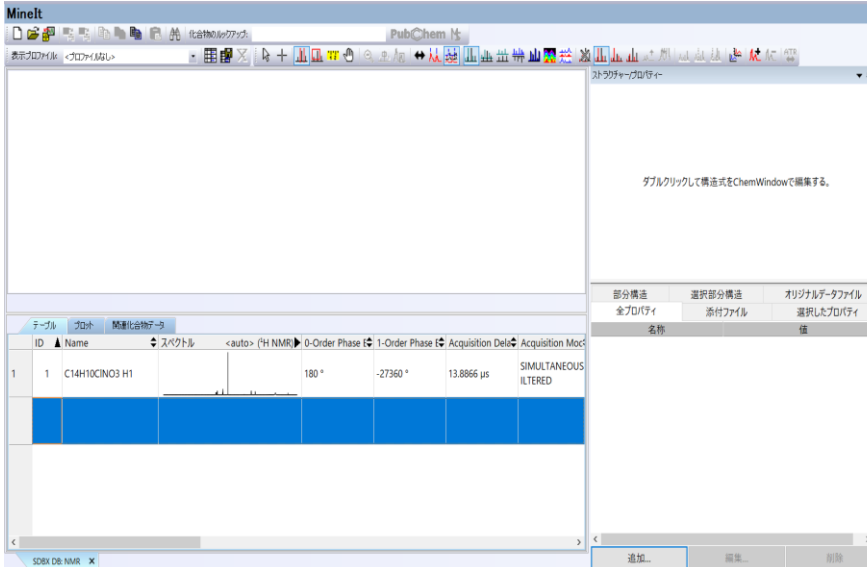
**NMR** レポートまたはピークリストからデータベースレコードを生成

アクション	結果

1 前のセクションで使用したユーザーデータベースから、**テーブル**セクションの空白行をクリックしてください。現在のデータベースでは、これは **2 行目**になります。

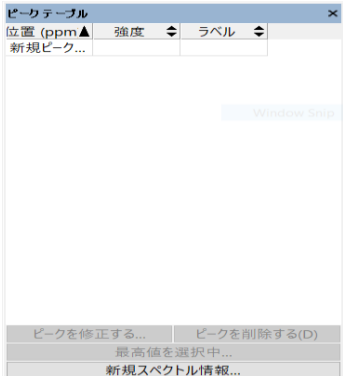
**注記 :** Minelt では、分解データに関するピークリスト情報や NMR レポート内のピーク情報を使用して、データベースレコードを作成することができます。

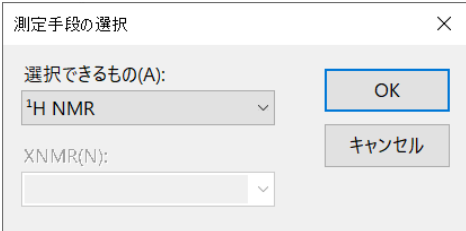
空白のレコードが表示されています :



The screenshot shows the Minelt software interface. At the top, there is a title bar with 'Minelt' and a window icon. Below it is a menu bar with options like '表示プロパティ' and 'プロパティ'. The main area is divided into two panes. The left pane shows a table with one record highlighted in blue. The right pane is empty and contains the text 'ダブルクリックして構造式をChemWindowで編集する。'. Below the panes is a toolbar with buttons for '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', and '選択したプロパティ'. At the bottom, there are buttons for '追加...', '編集...', and '削除'.

ID	Name	スベクトル	<auto> (H NMR)	0-Order Phase	1-Order Phase	Acquisition Delta	Acquisition Mode
1	C14H10ClNO3 H1			180 °	-27360 °	13.8866 µs	SIMULTANEOUS FILTERED

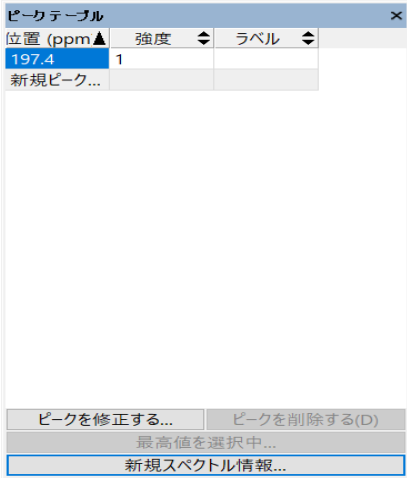
2	<p>「表示」&gt;「ウィンドウ/テーブル」&gt;「ピークテーブル」を選んでください。</p>	<p>空白のピークテーブルダイアログが表示されます：</p> 
---	---	--

	アクション	結果
3	<p>ピークテーブルダイアログで、「新しいテクニック」をクリックして、ピークテーブルで使用するスペクトルの種類を選びます。</p>	<p>「スペクトル技術選択」ダイアログが開きます：</p> 
4	<p>ドロップダウンメニューから、「利用可能なスペクトル技術」を「13C NMR」に変更し、OK をクリックします。</p>	<p>「スペクトル技術選択」ダイアログが閉じられ、空白のピークテーブルが表示されたままになります。</p>



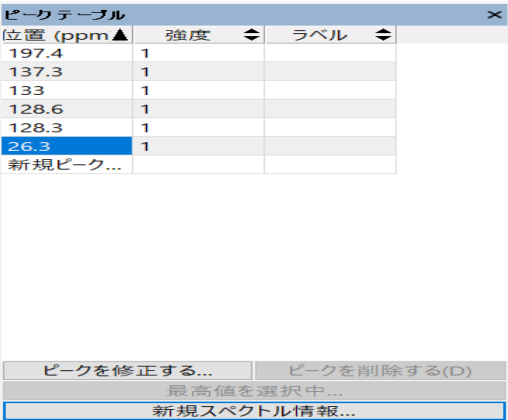
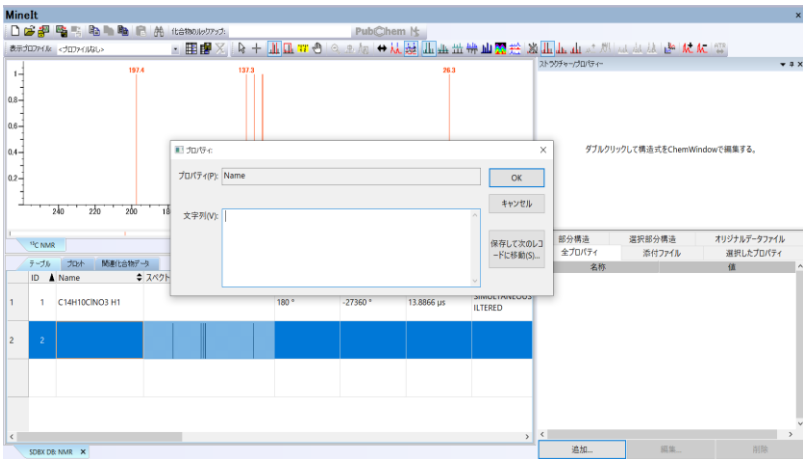
5 ピークテーブル内の「新しいピーク」と書かれたセルをダブルクリックし、「197.4」という値を入力します。入力内容を保存するために、入力した行の下空白スペースをクリックします。

ピークテーブルには、デフォルトでピークの高さが「1」のまま、「197.4」というピークが最初のセルに表示されます：

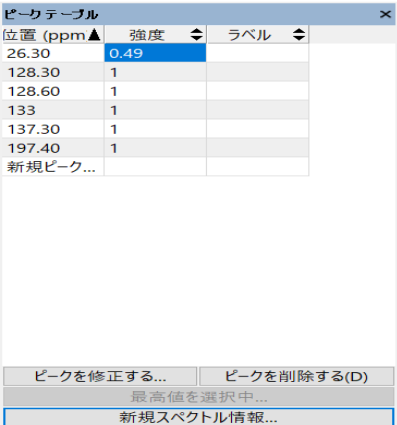
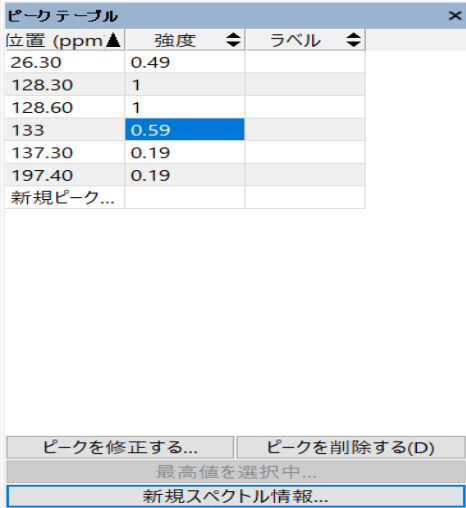


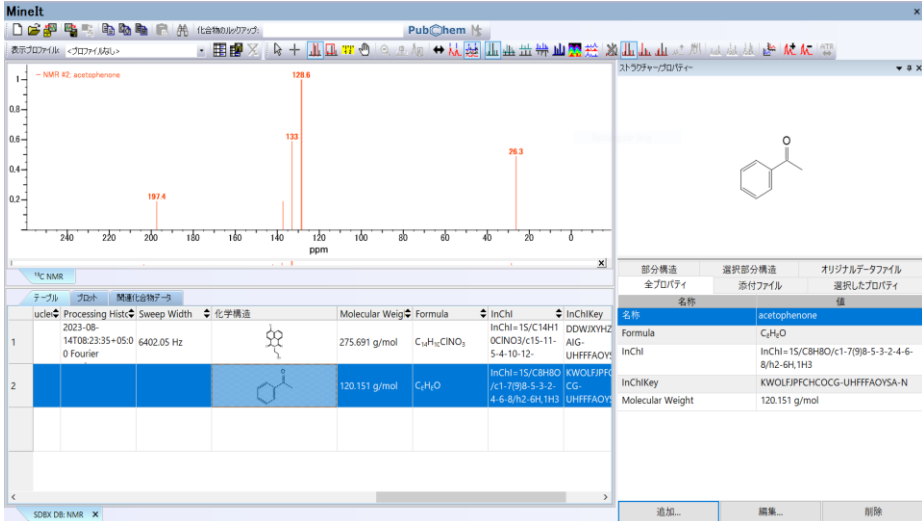
位置 (ppm)	強度	ラベル
197.4	1	
新規ピーク...		

ピークを修正する...    ピークを削除する(D)  
最高値を選択中...  
新規スペクトル情報...

アクション	結果
<p>6 次のピークに対してステップ 5 を繰り返し てください: 137.3、133、128.6、128.3、 26.3。各値を入力後、キーボードの下向きの 矢印をクリックすることで簡単に新しい行 を追加できます。</p> <p><b>注記:</b> これは NMR レポートのスペクトルを シミュレートしています: “<sup>13</sup>C NMR (80 MHz): 197.4, 137.3, 133.0, 128.6, 128.3, 26.3”。</p>	<p>ピークテーブルには以下のピークが表示されます:</p> 
<p>7 ピークテーブルダイアログの <b>X</b> ボタンをク リックして変更を保存し、<b>Name</b> (名前) 列 の 2 行目をダブルクリックします。</p>	<p>ピークテーブルが閉じられます。<b>Name (名前)</b> セルをクリックすると、<b>Minelt</b> が更新され、生成されたスペクトルが表示されます。<b>プロパティ</b> ダイアログが表示されます:</p> 
アクション	結果

<p>8 値ボックスに「acetophenone」と入力し、<b>OK</b> をクリックします。</p>	<p>シミュレートされたスペクトルが表示されます：</p> 
<p>9 <b>注記：</b>このドキュメントで以前に説明した手順を使って、化学構造と <b>NMR スペクトロメーターの周波数</b> をレコードに添付することができます。</p>	<p>化学構造と NMR スペクトロメーターの周波数情報がシミュレートされたスペクトルに添付されました。</p> 

	アクション	結果																								
10	<p>さらに、ピークの高さ情報もシミュレーションに含めることができます。表示&gt;「<b>ウインドウ/テーブル</b>」&gt;「<b>ピークテーブル</b>」を選んでください。ピークテーブルの中で、26.30 ppm のピークの横の行にある「<b>Height (高さ)</b>」のセルをダブルクリックします。0.49 と入力し、キーボードの <b>Enter</b> キーを押してください。</p> <p><b>注記</b> : Enter キーを押すと、セルが下の行に移動します。</p>	<p>ピークの高さの値が<b>ピークテーブル</b>に表示されます：</p>  <table border="1" data-bbox="743 391 1136 813"> <thead> <tr> <th>位置 (ppm)</th> <th>強度</th> <th>ラベル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>26.30</td> <td>0.49</td> <td></td> </tr> <tr> <td>128.30</td> <td>1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>128.60</td> <td>1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>133</td> <td>1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>137.30</td> <td>1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>197.40</td> <td>1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>新規ピーク...</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	位置 (ppm)	強度	ラベル	26.30	0.49		128.30	1		128.60	1		133	1		137.30	1		197.40	1		新規ピーク...		
位置 (ppm)	強度	ラベル																								
26.30	0.49																									
128.30	1																									
128.60	1																									
133	1																									
137.30	1																									
197.40	1																									
新規ピーク...																										
11	<p>ステップ 10 を繰り返して、以下の値を入力してください: 0.59 (133 ppm)、0.19 (137.30 ppm)、0.19 (197.40 ppm)。</p>	<p>ピークの高さの値が<b>ピークテーブル</b>に表示されます：</p>  <table border="1" data-bbox="743 878 1205 1382"> <thead> <tr> <th>位置 (ppm)</th> <th>強度</th> <th>ラベル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>26.30</td> <td>0.49</td> <td></td> </tr> <tr> <td>128.30</td> <td>1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>128.60</td> <td>1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>133</td> <td>0.59</td> <td></td> </tr> <tr> <td>137.30</td> <td>0.19</td> <td></td> </tr> <tr> <td>197.40</td> <td>0.19</td> <td></td> </tr> <tr> <td>新規ピーク...</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	位置 (ppm)	強度	ラベル	26.30	0.49		128.30	1		128.60	1		133	0.59		137.30	0.19		197.40	0.19		新規ピーク...		
位置 (ppm)	強度	ラベル																								
26.30	0.49																									
128.30	1																									
128.60	1																									
133	0.59																									
137.30	0.19																									
197.40	0.19																									
新規ピーク...																										

	アクション	結果
12	<p>ピークテーブルダイアログの <b>X</b> ボタンをクリックして変更を保存してください。</p> <p><b>注記:</b> 他のレコードをクリックしてから再びレコード#2に戻すことで、レコードを更新する必要があるかもしれません。</p>	<p>ピークの高さの値に基づいて、シミュレートされたスペクトルが更新されます:</p>  <p>The screenshot displays the Minelt software interface. At the top, there's a toolbar and a window title 'Minelt'. Below that is a plot of an NMR spectrum with peaks labeled at 197.4, 133, 128.6, and 26.3 ppm. The x-axis is labeled 'ppm' and ranges from 240 to 0. Below the plot is a table with columns for 'ucle', 'Processing Hist', 'Sweep Width', '化学構造', 'Molecular Weig', 'Formula', 'InChI', and 'InChIKey'. Record 2 is highlighted in blue. To the right of the table is a panel with a chemical structure of acetophenone and a table of properties including '名称', 'Formula', 'InChI', 'InChIKey', and 'Molecular Weight'.</p>