

KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

予測された IR

KnowItAll で予測された IR スペクトルを使用

KnowItAllSearchIt と ID Expert で予測された IR スペクトルを使用する方法

目的

これらの演習では、KnowItAll ID Expert および SearchIt で予測された IR スペクトルを使用する方法を示します。

目標

これらのエクササイズを通じて、以下の内容を学ぶことができます：

- KnowItAllSearchIt で予測された IR スペクトルを使用する方法
- KnowItAll ID Expert で予測された IR スペクトルを使用する方法

背景

ワイリーは、かつてのサドラー赤外（IR）スペクトルコレクションを含む、最も多くの実験的な赤外スペクトルを保有しています。しかし、化学産業の進展にもかかわらず、新たに発見される化学物質の領域を網羅するにはまだ不十分な進歩があります。さらに、サンプル収集は困難で時間と費用がかかります。ワイリーの予測赤外スペクトルライブラリは、ワイリーの赤外スペクトル化学領域のカタログ網羅率を向上させる試みです。これは化学空間を拡大するのではなく、現行のライブラリの化学空間内でのカバレッジを増やすことを意図しています。コンピューターモデリング技術の発展により、サンプルの不足を補うために計算された赤外スペクトルの使用可能性が調査されました。これにより、実際のサンプルが不足している場合でも、計算に基づいた赤外スペクトルを利用して情報を補完することが検討されました。

KnowItAllSearchIt は、未知の化合物を検索するためのツールとして利用すると、非常に役立ちます。未知のスペクトルの成分を特定したり、関連する構造や官能基に対して正確な化合物スペクトルを予測したりするのに役立ちます。このデータは予測に基づくものであるため、結果が完璧ではないことを明記しておくべきです。ワイリーは、このライブラリを使用してユーザーがスペクトル内の成分を分類し、未知のスペクトルを特徴づけるためのツールとして活用することを提案しています。ただし、一部の結果は完全に正確ではない場合がありますので、その点を認識してご利用いただくようお願いいたします。

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

- 5MEODIPT.SPC
- 4-(Pyridin-3-yl)-2-2,6,2-terpyridine.irf

トレーニングに使用されるファイルは例示のためのものです。実際にこのトレーニングを行う際には、ユーザー自身の赤外スペクトルデータを使用してください。

KnowItAll 使用アプリケーション

- KnowItAll SearchIt
- KnowItAll ID エキスパート™

KnowItAll の IR および Raman スペクトル検索アルゴリズム

KnowItAll が使用するアルゴリズムについての背景知識は役立つでしょう。IR および Raman スペクトルの比較において、KnowItAll は以下のアルゴリズムを使用しています：

関連

これは KnowItAll の検索でデフォルトのアルゴリズムとして採用されており、業界標準の関連アルゴリズムに準拠しています。関連アルゴリズムは、ユークリッド距離アルゴリズムと似ていますが、比較の前に各スペクトルが平均中心化されます。その後、ドット積の正規化が行われます。この手法は、ノイズのあるスペクトルやベースラインの問題を持つスペクトルに対して、特にベースラインオフセットが負のスパイクや化学的ノイズによる場合に、検索結果を改善することができます。ただし、ユークリッド距離アルゴリズムよりもわずかに時間がかかります。検索速度が遅くなるのは、データベース内の各スペクトルが比較前に平均中心化および正規化されるためです。関連アルゴリズムによって得られる検索結果は、未知の化合物がデータベースに存在しなくても、未知の化合物とスペクトル的に類似しています。関連アルゴリズムは、ピークの面積に大きく影響を受けます。広がった特徴は鋭い特徴よりも強く重み付けされます。このアルゴリズムは、ピークのシフトや相対的なバンドの強度の非線形性に対して最も寛容です。

関連（クラシック）

KnowItAll 2020 以前のすべてのバージョンに存在した関連アルゴリズムは、ユークリッド距離アルゴリズムに類似していましたが、業界標準の関連アルゴリズムには準拠していませんでした。KnowItAll 2020 からは、関連アルゴリズムは業界標準に準拠し、KnowItAll での検索のデフォルトアルゴリズムとなっています。過去の検索結果を再現したいお客様のために、以前の関連アルゴリズムは「クラシックな関連」として提供されています。

ユークリッド距離

ユークリッド距離アルゴリズムは、2つのスペクトル間の点ごとの差を測定します。ユークリッド距離アルゴリズムによって得られる結果は、未知の化合物がデータベースに存在しない場合でも、スペクトル的に類似しています。ただし、このアルゴリズムは、未知のスペクトルが傾斜したベースラインやオフセットを持つ場合には、検索結果が劣化する可能性があります。ユークリッド距離アルゴリズムは、ピーク的面積に大きく影響されます。広がった特徴は鋭い特徴よりも強く重み付けされます。また、このアルゴリズムは、ピークのシフトや相対的なバンドの強度の非線形性に対して最も寛容です。

一次導関数ユークリッド距離

このアルゴリズムは、未知のスペクトルにおけるベースラインの傾斜やオフセットの影響を軽減するために使用されます。ユークリッド距離アルゴリズムと比べて、一次導関数ユークリッド距離はやや検索速度が遅くなりますが、特に未知のスペクトルが 2 つ以上の化合物の混合物である場合、より良い検索結果が得られることがあります。一次導関数ユークリッド距離アルゴリズムは、傾斜の変化によって重要な影響を受けます。鋭い特徴は広がった特徴よりも強く重み付けされます。また、このアルゴリズムはピークのシフトに非常に敏感です。わずかなシフトでも、アルゴリズムが類似した結果を見逃す可能性があります。

二次導関数ユークリッド距離：二次導関数ユークリッド距離アルゴリズムを使用して、参照スペクトルとクエリスペクトルの二次導関数を比較します。

最適化された補正：スペクトル検索のための画期的な技術

スペクトル検索は、研究者が材料を分類または同定するために最も重要なツールの一つですが、依然としてエラーや不完全さに悩まされています。スペクトル検索では、サンプルスペクトルを参照スペクトルのデータベースと比較します。適な一致をデータベース内で見つけるために、スペクトルは最適化された補正が行われます。これにより、計測器やアクセサリ、環境条件などの要因によって生じるスペクトル間の差異を補正することができます。

ASTM のスペクトル検索 ¹ に関するガイドによれば、同じ化合物の比較される 2 つのスペクトルがさまざまな理由で異なる場合、適切な一致スコアを得るためには、さまざまなアルゴリズムや手動での調整方法が存在すると述べられています。これらの方法は特定のケースでは機能するかもしれませんが、X 軸のシフトなど微妙な不一致は手動では非常に難しく、特定のスペクトルの誤りに対して柔軟に対応することはできません。一般的に使用される数学的なアルゴリズムは、欠陥のあるスペクトルにおけるこの種のエラーを補正することができません。

分光学の経験が浅い人々は、専門の分光学者が行うような手動の補正は行いにくいものです。彼らは自分のサンプルスペクトルに必要な補正をどのように行えば最適な検索結果が得られるのかを知ることができません。この懸念に対処するため、Wiley は特許取得済みの画期的な技術である最適化された補正 (**Optimized Corrections**) を導入しました。この技術は、クエリと各個別の参照スペクトルの間で最適な一致を見つけるために、複数の補正を計算上行います。この補正は、クエリと参照スペクトルの両方に対して行われます。このトレーニングガイドでは、最適化された補正技術が、単独の剛性な検索アルゴリズムや手動の方法に比べて、クエリと参照スペクトルの間でより優れた一致を実現することを実証します。また、スペクトルを検索に最適化するために、従来の手法と比べてどのように効果的な結果をもたらすかも示します。

最適化された補正では、選択した範囲内での検索時にフルスペクトルを考慮します。

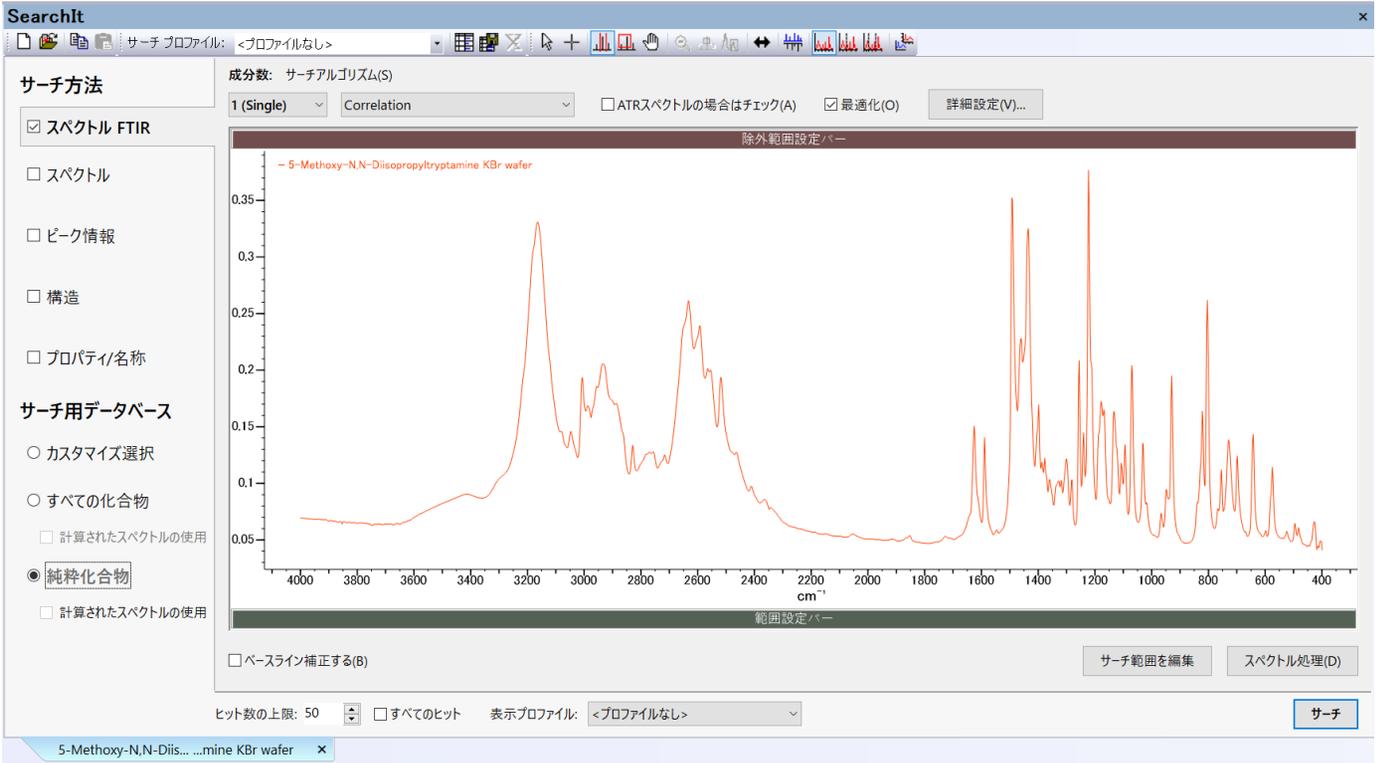
¹ E2310-04 - 中赤外分光法で記録されたデータを用いたスペクトル検索におけるカーブマッチングアルゴリズムの使用ガイド (2009 年版)。ASTM インターナショナルウェブサイト。 <http://www.astm.org/Standards/E2310.htm> (2015 年 3 月 4 日アクセス)。

SearchIt

ライセンスに予測された IR スペクトルのサブスクリプションが含まれている場合、それは **SearchIt** アプリケーションの「データベース」>「全ての化合物」または「**純粋な化合物**」からアクセスすることができます。その際には、「**計算されたスペクトラを使用する**」オプションを選択します。



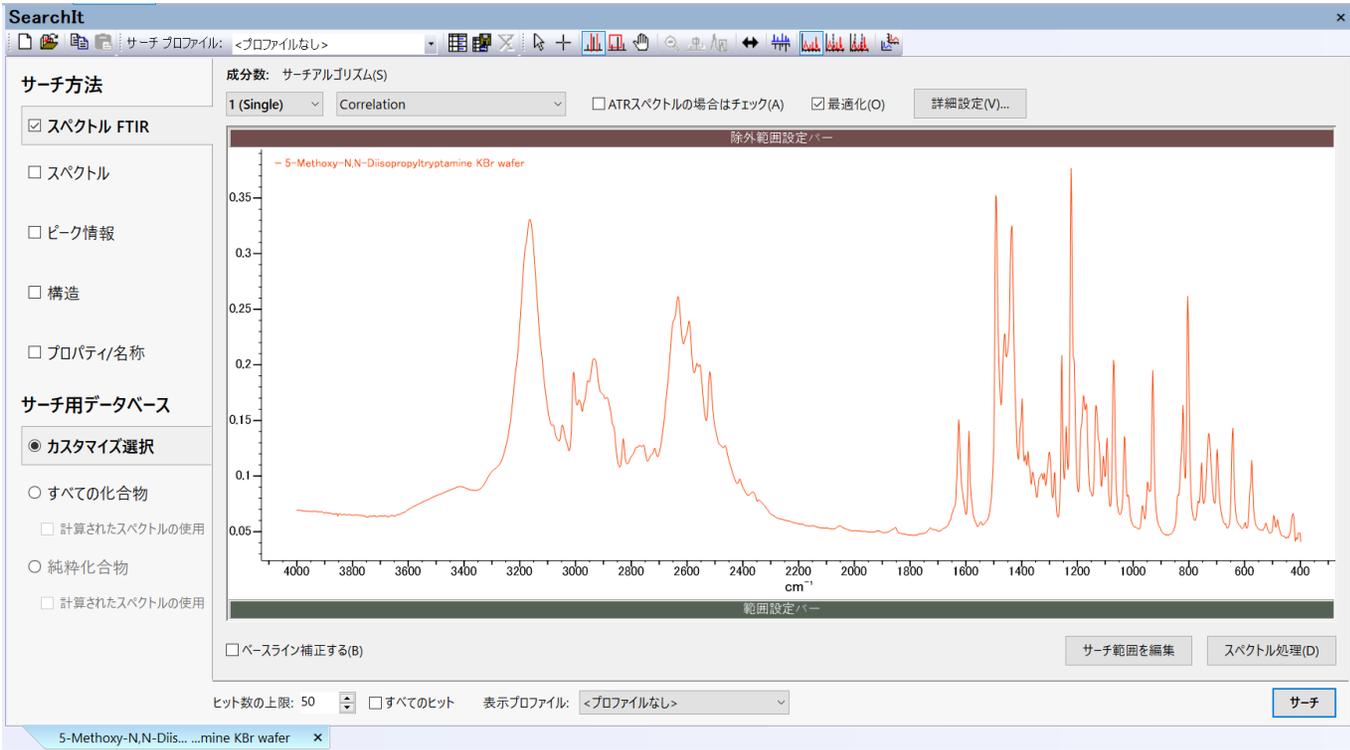
例 1 - 5MEODIPT.SPC、 相関アルゴリズム

アクション	結果
<p>1 SearchIt アプリケーションで、「スペクトルを開く」または「構造を開く」をクリックします。</p>	
<p>2 「予測された IR サンプルスペクトラ」フォルダ内にある 5MEODIPT.SPC を見つけるために、ナビゲーションを行ってください。</p> <p>(なお、このドキュメントで使用されているトレーニングファイルは例示のためのものです。トレーニングを行う際には、ユーザー自身の IR スペクトルを使用するようにしてください。)</p> <p>Open (開きます)</p>	 <p>The screenshot shows the SearchIt application window. The title bar reads 'SearchIt'. Below the title bar, there are search parameters: '成分数: サーチアルゴリズム(S)' and '1 (Single) Correlation'. There are checkboxes for 'ATRスペクトルの場合はチェック(A)' and '最適化(O)'. A '詳細設定(V)...' button is also present. The main area is a plot of an IR spectrum with the title '除外範囲設定バー' and the subtitle '- 5-Methoxy-N,N-Diisopropyltryptamine KBr wafer'. The x-axis is labeled 'cm⁻¹' and ranges from 4000 to 400. The y-axis ranges from 0.05 to 0.35. The plot shows several sharp peaks, particularly in the 1600-1300 cm⁻¹ region. On the left side, there are search method options: 'スペクトル FTIR' (checked), 'スペクトル', 'ピーク情報', '構造', and 'プロパティ/名称'. Below that are search database options: 'カスタマイズ選択', 'すべての化合物', '計算されたスペクトルの使用', and '純粋化合物' (selected). At the bottom, there are buttons for 'サーチ範囲を編集' and 'スペクトル処理(D)', and a 'サーチ' button. The status bar at the bottom shows '5-Methoxy-N,N-Diis... mine KBr wafer x'.</p>

	アクション	結果																																																
3	<p>「User-Select」をクリックしてください</p> <p>「すべて削除」ボタンをクリックしてください。</p> <p>スペクトラの技術を IR に限定します。</p> <p>IR - 予測された IR スペクトラのライブラリ - Wiley を選択し、「追加」をクリックします。</p> <p>検索</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... 対象スペクトル(L): IR リフレッシュ(R) 詳細設定(A)...</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>IR - Polymers, Hummel Defined Basic - Wiley</td> <td>1041</td> <td>HDX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>Hit List</td> <td>IR - Polymers, Hummel Industrial - Wiley</td> <td>5000</td> <td>HPX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>IR - Polymers, Hummel Industrial Monomers - Wiley</td> <td>1567</td> <td>HEX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>IR - Polymers, Hummel Industrial Polymers - Wiley</td> <td>1910</td> <td>HCX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr style="background-color: #0070C0; color: white;"> <td></td> <td>IR - Predicted Library of IR Spectra - Wiley</td> <td>250000</td> <td>PREDIRX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>IR - Sadtler Acrylates & Methacrylates - Wiley</td> <td>478</td> <td>PPX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>IR - Sadtler Adhesives & Sealants (Subset) - Wiley</td> <td>520</td> <td>ALX</td> <td><Latest Version></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"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>IR - Predicted Library of IR Spectra - Wiley</td> <td>250000</td> <td>PREDIRX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Predicted Library of IR ...</td> </tr> </tbody> </table>	Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション	User DB	IR - Polymers, Hummel Defined Basic - Wiley	1041	HDX	<Latest Version>	Hit List	IR - Polymers, Hummel Industrial - Wiley	5000	HPX	<Latest Version>		IR - Polymers, Hummel Industrial Monomers - Wiley	1567	HEX	<Latest Version>		IR - Polymers, Hummel Industrial Polymers - Wiley	1910	HCX	<Latest Version>		IR - Predicted Library of IR Spectra - Wiley	250000	PREDIRX	<Latest Version>		IR - Sadtler Acrylates & Methacrylates - Wiley	478	PPX	<Latest Version>		IR - Sadtler Adhesives & Sealants (Subset) - Wiley	520	ALX	<Latest Version>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	IR - Predicted Library of IR Spectra - Wiley	250000	PREDIRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Predicted Library of IR ...
Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション																																														
User DB	IR - Polymers, Hummel Defined Basic - Wiley	1041	HDX	<Latest Version>																																														
Hit List	IR - Polymers, Hummel Industrial - Wiley	5000	HPX	<Latest Version>																																														
	IR - Polymers, Hummel Industrial Monomers - Wiley	1567	HEX	<Latest Version>																																														
	IR - Polymers, Hummel Industrial Polymers - Wiley	1910	HCX	<Latest Version>																																														
	IR - Predicted Library of IR Spectra - Wiley	250000	PREDIRX	<Latest Version>																																														
	IR - Sadtler Acrylates & Methacrylates - Wiley	478	PPX	<Latest Version>																																														
	IR - Sadtler Adhesives & Sealants (Subset) - Wiley	520	ALX	<Latest Version>																																														
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																															
IR - Predicted Library of IR Spectra - Wiley	250000	PREDIRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Predicted Library of IR ...																																															

アクション	結果																																										
<p>4 ヒットリストを見つけて予測結果を表示します。</p>	<div data-bbox="514 324 1890 1071"> <table border="1"> <thead> <tr> <th>HQI</th> <th>Tag</th> <th>Corrections</th> <th>DB</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>70.97</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>36387</td> <td>SMT-NB3I TMS P1631</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>69.96</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>67580</td> <td>5-Methoxy-3-(2-morpholinylethyl)indole</td> <td></td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>68.87</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>4072</td> <td>5-Methoxy-N,N-dipropyltryptamine</td> <td></td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>68.22</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>42758</td> <td>5-METHOXINDOLE-N,N-DIETHYL-TRYPTAMINE</td> <td></td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>67.52</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>134398</td> <td>1H-Indole-3-ethanamine, 5-</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> </div> <p>上位 10 件のヒットにおいて、バックボーン類似性が見られることから、KnowItAll は特定の化合物クラスに一致したことが示されています。</p>	HQI	Tag	Corrections	DB	ID	Name	スペクトル	1	70.97		PREDIRX	36387	SMT-NB3I TMS P1631		2	69.96		PREDIRX	67580	5-Methoxy-3-(2-morpholinylethyl)indole		3	68.87		PREDIRX	4072	5-Methoxy-N,N-dipropyltryptamine		4	68.22		PREDIRX	42758	5-METHOXINDOLE-N,N-DIETHYL-TRYPTAMINE		5	67.52		PREDIRX	134398	1H-Indole-3-ethanamine, 5-	
HQI	Tag	Corrections	DB	ID	Name	スペクトル																																					
1	70.97		PREDIRX	36387	SMT-NB3I TMS P1631																																						
2	69.96		PREDIRX	67580	5-Methoxy-3-(2-morpholinylethyl)indole																																						
3	68.87		PREDIRX	4072	5-Methoxy-N,N-dipropyltryptamine																																						
4	68.22		PREDIRX	42758	5-METHOXINDOLE-N,N-DIETHYL-TRYPTAMINE																																						
5	67.52		PREDIRX	134398	1H-Indole-3-ethanamine, 5-																																						

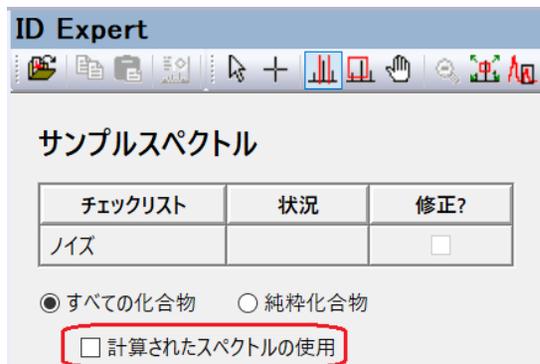
例 2 - 5MEODIPT.SPC、一次微分アルゴリズム

アクション	結果
<p>1 (これは例 1 の続きです。)</p> <p>SearchIt アプリケーションに戻ります。</p> <p>「スペクトルを開く」または「構造を開く」をクリックして、ファイルを再度開きます > 5MEODIPT.SPA > 開く > 新しい検索を開始します。</p> <p>検索方法を一次微分のユークリッド距離に切り替えてください。</p> <p>「Search」をクリックします。</p>	 <p>The screenshot shows the SearchIt application window. The main panel displays an FTIR spectrum plot with the title "5-Methoxy-N,N-Diisopropyltryptamine KBr wafer". The x-axis is labeled "cm⁻¹" and ranges from 4000 to 400. The y-axis represents transmittance, ranging from 0.05 to 0.35. The plot shows several characteristic absorption bands, including a broad peak around 3400 cm⁻¹ and sharp peaks in the fingerprint region between 1500 and 600 cm⁻¹.</p> <p>On the left side of the interface, there are search method options: <ul style="list-style-type: none"> <input checked="" type="checkbox"/> スペクトル FTIR <input type="checkbox"/> スペクトル <input type="checkbox"/> ピーク情報 <input type="checkbox"/> 構造 <input type="checkbox"/> プロパティ/名称 Below these are search database options: <ul style="list-style-type: none"> <input checked="" type="radio"/> カスタマイズ選択 <input type="radio"/> すべての化合物 <ul style="list-style-type: none"> <input type="checkbox"/> 計算されたスペクトルの使用 <input type="radio"/> 純粋化合物 <ul style="list-style-type: none"> <input type="checkbox"/> 計算されたスペクトルの使用 At the bottom, there are search parameters: "ヒット数の上限: 50", "すべてのヒット" (checked), and "表示プロファイル: <プロフィールなし>". A "検索" (Search) button is visible in the bottom right corner. </p>

	アクション	結果																																										
2	ヒットリストを見つけて予測結果を表示します。	<div data-bbox="514 321 1858 1063"> <table border="1" data-bbox="514 738 1333 1039"> <thead> <tr> <th>HQI</th> <th>Tag</th> <th>Corrections</th> <th>DB</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>56.29</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>59113</td> <td>5-MeO-NBpBrT</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>54.59</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>40590</td> <td>5-Methoxy-alpha,N-dimethyltryptamine</td> <td></td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>53.95</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>39786</td> <td>Indole, 5-methoxy-3-(2-(1-pyrrolidinyl)ethyl)-</td> <td></td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>53.62</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>33759</td> <td>Indole, 5-methoxy-3-(2-methylamino)ethyl-</td> <td></td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>53.32</td> <td></td> <td>PREDIRX</td> <td>88895</td> <td>Ethanone, 1-(5-methoxy-2-methyl-3-</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> </div> <div data-bbox="514 1071 1900 1128"> <p>上位 10 件のヒットにおいて、バックボーンの類似性が見られることから、KnowItAll は特定の化合物クラスに一致したことが示されています。</p> </div>	HQI	Tag	Corrections	DB	ID	Name	スペクトル	1	56.29		PREDIRX	59113	5-MeO-NBpBrT		2	54.59		PREDIRX	40590	5-Methoxy-alpha,N-dimethyltryptamine		3	53.95		PREDIRX	39786	Indole, 5-methoxy-3-(2-(1-pyrrolidinyl)ethyl)-		4	53.62		PREDIRX	33759	Indole, 5-methoxy-3-(2-methylamino)ethyl-		5	53.32		PREDIRX	88895	Ethanone, 1-(5-methoxy-2-methyl-3-	
HQI	Tag	Corrections	DB	ID	Name	スペクトル																																						
1	56.29		PREDIRX	59113	5-MeO-NBpBrT																																							
2	54.59		PREDIRX	40590	5-Methoxy-alpha,N-dimethyltryptamine																																							
3	53.95		PREDIRX	39786	Indole, 5-methoxy-3-(2-(1-pyrrolidinyl)ethyl)-																																							
4	53.62		PREDIRX	33759	Indole, 5-methoxy-3-(2-methylamino)ethyl-																																							
5	53.32		PREDIRX	88895	Ethanone, 1-(5-methoxy-2-methyl-3-																																							

ID Expert

ライセンスに予測された IR スペクトラのサブスクリプションが含まれている場合、**ID Expert** のインターフェースの「クエリステータス」には「計算されたスペクトラを使用する」オプションが表示されます。



例 3 4-(Pyridin-3-yl)-2,2,6,2-terpyridine.irf

	アクション	結果
1	データツールボックスに移動し、 ID Expert アプリケーションを開くために ID Expert アイコンをクリックします。または、デスクトップ（スタンドアロン）アプリケーションがインストールされている場合は、デスクトップのアイコンをダブルクリックして直接 ID Expert を開くこともできます。	アプリケーションが開き、ウィンドウの「Open」ダイアログボックスが表示されます。

	アクション	結果
2	<p>「Open (開く)」ダイアログボックスを閉じて、次に「File」>「Settings」を選択してください。</p> <p>アルゴリズムを設定します： MS 以外のすべての技術に対して、一次微分のユークリッド距離を使用します。</p> <p>OK をクリックします</p>	<p>すると、設定画面が表示されます。</p> 

	アクション	結果
3	<p>新しい検索</p> <p>「予測された IR サンプルスペクトラ」フォルダー内の「4-(Pyridin-3-yl)-2-2,6,2-terpyridine.irf」を開きます。</p> <p>(なお、このドキュメントで使用されているトレーニングファイルは例示のためのものです。トレーニングを行う際には、ユーザー自身の IR スペクトルを使用するようにしてください。)</p> <p>Open (開きます)</p>	
4	<p>クエリステータスの技術を ATR-IR に設定します。</p> <p>「計算されたスペクトラを使用する」にチェックを入れます。</p>	

アクション	結果																											
<p>5 検索結果はコンポーネントテーブルで表示します。</p>	<div data-bbox="583 321 1875 1036"> <p>ID Expert</p> <p>除外範囲設定バー</p> <p>サンプルスペクトル</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>チェックリスト</th> <th>状況</th> <th>修正?</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>ノイズ</td> <td>●</td> <td>① □</td> </tr> <tr> <td>汚染</td> <td>●</td> <td>① □</td> </tr> <tr> <td>測定手段</td> <td>●</td> <td>① ATR-IR ▾</td> </tr> </tbody> </table> <p> <input checked="" type="radio"/> すべての化合物 <input type="radio"/> 純粋化合物 <input checked="" type="checkbox"/> 計算されたスペクトルの使用 </p> <p>最適化</p> <p>クエリーのベースライン、レファレンスのベースライン、強度の歪み、縦軸クリッピング、横軸オフセット</p> <p>①</p> <p>□ 新規</p> <p>検索結果</p> <p>1-成分の結果: トップヒット: 61.7%</p> <p>2-成分の結果: [Progress bar]</p> <p>ピークサーチ結果:</p> <p>レポート作成</p> <p>ピークサーチ結果</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>1-成分の結果</th> <th>ピークサーチ結果</th> <th>官能基</th> </tr> <tr> <th>スコア ▼ Info</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>61.66 ①</td> <td>4'-(p-BROMOPHENYL)-2,2':6',2''-TERPYRIDINE</td> <td>[Spectrum]</td> </tr> <tr> <td>60.93 ①</td> <td>4',4''-Dibromo-[2,2':6',2''-terypyridine (修正案)</td> <td>[Spectrum]</td> </tr> <tr> <td></td> <td>4'-(p-</td> <td>[Spectrum]</td> </tr> </tbody> </table> <p>この検索では実験スペクトラと予測スペクトラの両方が含まれています。両者は似た化学クラスに属していることが分かります。</p> </div>	チェックリスト	状況	修正?	ノイズ	●	① □	汚染	●	① □	測定手段	●	① ATR-IR ▾	1-成分の結果	ピークサーチ結果	官能基	スコア ▼ Info	Name	スペクトル	61.66 ①	4'-(p-BROMOPHENYL)-2,2':6',2''-TERPYRIDINE	[Spectrum]	60.93 ①	4',4''-Dibromo-[2,2':6',2''-terypyridine (修正案)	[Spectrum]		4'-(p-	[Spectrum]
チェックリスト	状況	修正?																										
ノイズ	●	① □																										
汚染	●	① □																										
測定手段	●	① ATR-IR ▾																										
1-成分の結果	ピークサーチ結果	官能基																										
スコア ▼ Info	Name	スペクトル																										
61.66 ①	4'-(p-BROMOPHENYL)-2,2':6',2''-TERPYRIDINE	[Spectrum]																										
60.93 ①	4',4''-Dibromo-[2,2':6',2''-terypyridine (修正案)	[Spectrum]																										
	4'-(p-	[Spectrum]																										