

# KnowItAll ソフトウェア トレーニング

---

## SmartSpectra データベースと分類モデル

## KnowItAll での SmartSpectra の使用方法

### 目的

これらの演習は、KnowItAll ID Expert および SearchIt で SmartSpectra を使用方法を示します。

### 目標

これらの演習では以下を学びます：

- KnowItAll SearchIt で SmartSpectra の IR スペクトルを使用する方法
- KnowItAll SearchIt で SmartSpectra のラマンスペクトルを使用する方法
- KnowItAll ID Expert で SmartSpectra の IR スペクトルを使用する方法
- KnowItAll ID Expert で SmartSpectra のラマンスペクトルを使用する方法

#### このレッスンで使用されるトレーニングファイル:

- 4-(Pyridin-3-yl)-2-2,6,2-terpyridine.irf
- 4,13-DIDECYL-1,7,10,16-TETRAOXA-4,13-DIAZACYCLOOCTADECANE.irf
- X-Phos.irf
- 1-acetyl-1234-tetrahydroquinoline.irf
- 17-Hydroxy-17-alpha-pregn-4-en-20-yn-3-one.irf

#### 注意:

トレーニングで使用されるファイルは、あくまで例として提供されています。このトレーニングに従う際には、ユーザー自身のIRスペクトルを使用する必要があります。

使用する KnowItAll アプリケーション:

- KnowItAll SearchIt
- KnowItAll ID Expert

## 背景

Wiley は、Sadtlar IR コレクションを含む実験的 IR

スペクトルの最大量を保有しています。ただし、化学産業の継続的な発展的な一方で、新たに発見された化学空間を十分にカバーする準備はまだ準備です。サンプルの収集は、挑戦的で時間がかかり、コストも高い作業です。Wiley の IR SmartSpectra コレクションは、Wiley の IR 化学空間のカatalogカバレッジを増やす試みです。このデータベースが化学空間自体を拡大するわけではありませんが、既存のライブラリ内でのカバレッジを向上させます。

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IRスペクトルを使用する可能性が検討され、不明な化合物の分類を向上させることが判明しました。

これらのライブラリは、不明な化合物の検索、不明なスペクトルの構成要素の洞察、または関連構造や機能基のスペクトルを正確に予測するためのツールとして役立ちます。結果には誤差が含まれる可能性があることを考慮する必要があります。Wiley は一部の結果が完全に正確ではない場合があることを認識しており、ユーザーがこれらのライブラリを補助的なものツールとして使用し、スペクトル内の成分を分類して未知のスペクトルを特定することを推奨しています。

## KnowItAll IR と Raman Search Algorithms

KnowItAll で使用されるアルゴリズムの背景知識が役立ちます。IR と Raman spectral comparison比較には、以下のアルゴリズムが使用されます。

### Correlation

これは KnowItAll での勝手の検索アルゴリズムであり、業界の相関アルゴリズムに準拠しています。このアルゴリズムは、Euclidean Distanceアルゴリズムに似ていますが、比較前にスペクトルが平均中心化される点が異なりますこの方法は、特にベースラインオフセットがある場合やノイズの多いスペクトルで検索結果を改善します。計算には時間がかかりますが、未知の化合物がデータベースに含まれていてもスペクトル的に比較した結果を提供します。

### Correlation (Classic)

KnowItAll 2020 以前のすべてのバージョンに存在した相関アルゴリズムです。このアルゴリズムは業界には準拠していませんが、KnowItAll 2020 以降、アルゴリズムが標準準拠となり、古い結果を再現したいユーザー向けCorrelation (**Classic**)が提供されています。

### Euclidean Distance

Euclidean Distance アルゴリズムは、2つのスペクトル間のポイントごとの検討を測定します。このアルゴリズムも未知の化合物がデータベースに含まれていても類似した結果を提供しますが、見通しやオフセットがあるベースラインでは検索結果が劣化する可能性があります。このアルゴリズムも広い特徴を強く重み付けし、ピークのシフトや相対バンド強度の非線形強度最も耐久性があります。

### First Derivative Euclidean Distance

アルゴリズムは、未知スペクトルのベースライン上限やオフセットの影響を軽減するために使用します。検索速度は通常のEuclidean Distanceアルゴリズムよりやや遅いですが、特に未知スペクトルが複数の化合物の混合物であるこのアルゴリズムは傾きの変化に強く重み付けされ、鋭い特徴が広いより特徴もはるかに強調されます。シフトでも似た結果を逃す可能性があります。

### Second Derivative Euclidean Distance

アルゴリズムは、参照スペクトルと境界スペクトルの二次導関数を比較するために使用します。

---

## 最適化補正: Spectral Searching の検討技術

Spectral Searchingは、材料の分類や同定において最もツールの一つですが、考えエラーや不完全に悩まされています。Spectral Searchingの中には、サンプルスペクトルが参照されスペクトルのデータベースと比較されます。最適な一致がデータベース内で見つかるように、装置、付属品、環境条件、その他の課題によるスペクトルの考慮を行うための調整が行われる場合があります。

### ASTMのSpectral

Searchingに関するガイド<sup>1</sup>によると、同じ化合物の2つの比較スペクトルが異なる理由を調整するために、個別のアルゴリズムや手動の方法が存在します。ただし、これらの方法は特定のケースでのみ効果がありますであり、X軸のシフトのような微妙なずれを手動で識別して補正するのは非常に困難です。通常使用されるハード直的な数学的アルゴリズムは、欠陥のあるスペクトルでこのようなエラーを補正することができません。

手動の補正は経験豊富なスペクトロスコピーの専門家によって実行される場合がありますが、スペクトロスコピーの経験が少ない人は、最適な検索結果を得るために必要な補正をサンプルスペクトルに行う方法を知りませんこの課題に対処するため、ワイリーは修正を最適化しますこの技術は、限りスペクトルと参照スペクトル間の最適な一致を見つけるために、結局と各参照スペクトルに対して複雑な計算補正を複数実行します。

このトレーニングガイドでは、最適化補正技術が、難しい直進的な検索アルゴリズム単独や手動による補正を用いた場合よりも優れた一致を認めるスペクトルと参照スペクトルの間で達成する方法を示します。

<sup>1</sup> ASTM E2310-04: 中赤外分光法を使用して記録されたデータを使用した曲線マッチング アルゴリズムによるSpectral Searchingの使用に関する標準ガイド、2009年。ASTM 国際 Web サイト。ASTM.org (2015年3月4日アクセス)。

# SearchIt

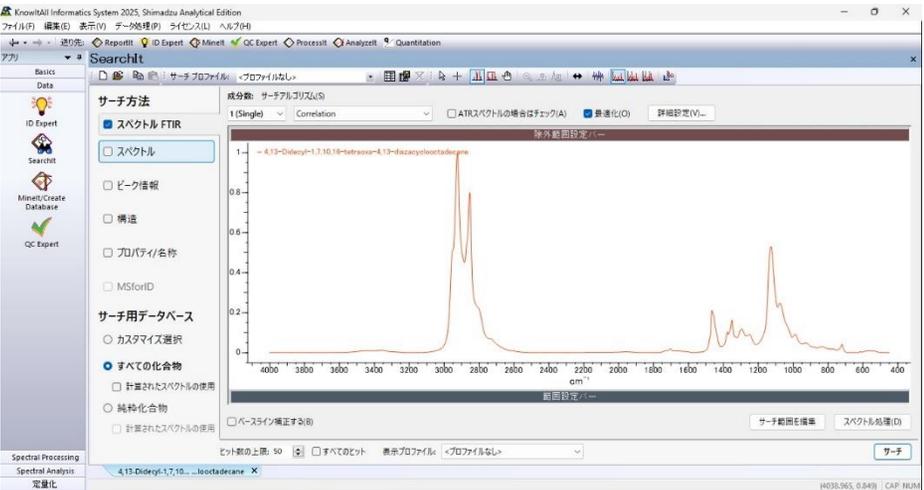
## 概要

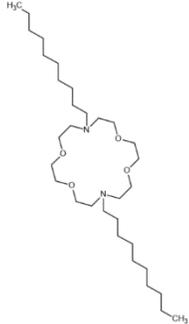
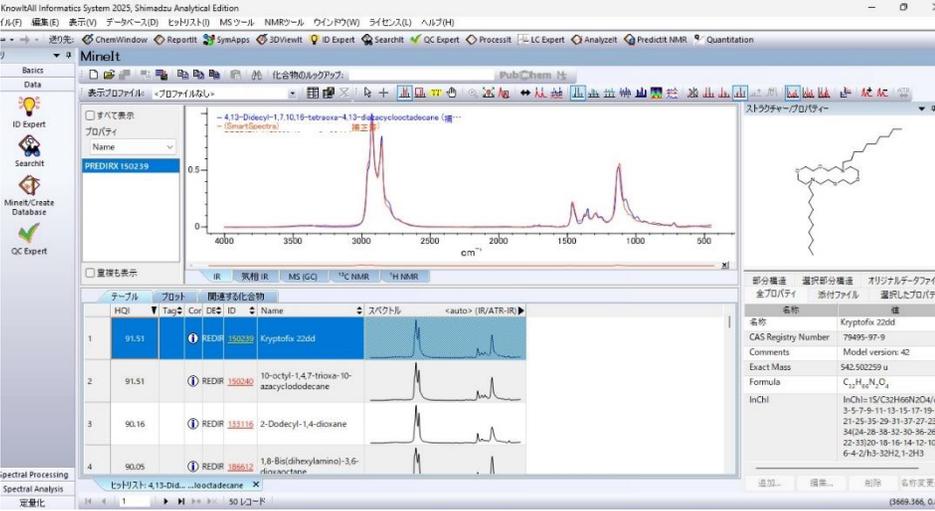
ユーザーライセンスに SmartSpectra IR スペクトルのサブスクリプションが含まれている場合、SearchIt アプリケーション内で以下の方法でアクセスできます  
データベースを検索 > すべての化合物 データベース > 純粋化合物 の際、 **Computed Spectra** を使用するオプションのチェックボックスを選択してください:



## 例 1

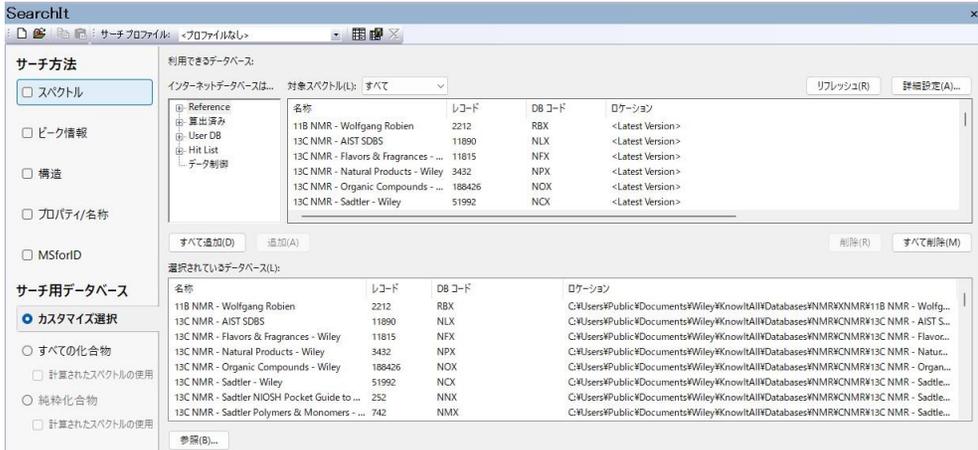
例のファイル: 4,13-DIDECYL-1,7,10,16-TETRAOXA-4,13-DIAZACYCLOOCTADECANE.irf

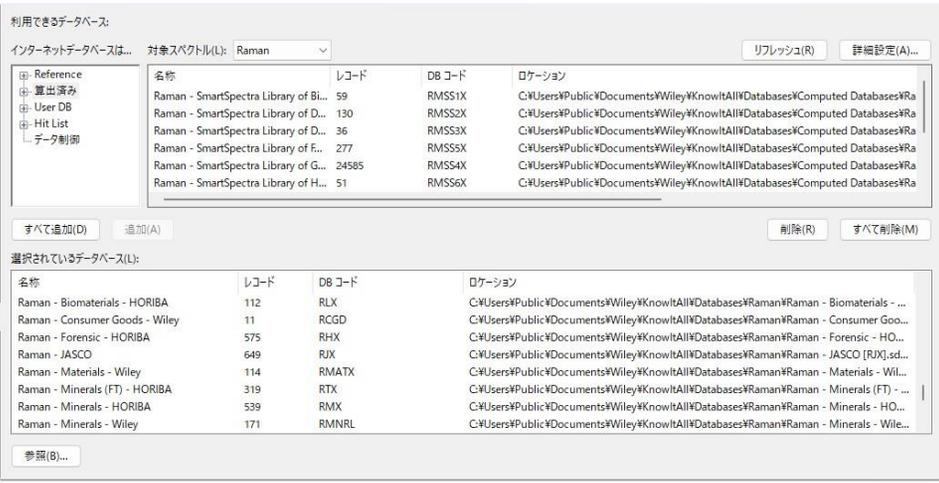
	終了	結果
1	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションで、標準ツールバーにある「Open Spectrum」または「Structure」アイコン (  ) をクリックします。</p>	<p>注: この文書で使用されているトレーニング ファイルは例示の目的のみです。ユーザーは、このトレーニングに反対する際に自分の IR スペクトルを使用する必要があります。</p>
2	<p>次に、「C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Computed Spectra\IR」フォルダ内で「4,13-DIDECYL-1,7,10,16-TETRAOXA-4,13-DIAZACYCLOOCTADECANE.「irf」を探してクリックし、「開く」を選択します。</p> <p>検索方法が「<b>相関アルゴリズム</b>」に設定されている場合を確認します。方法を変更するには、ドロップダウンメニューから「<b>相関アルゴリズム</b>」を選択します。</p> <p>サーチアルゴリズム(S) e) <input type="text" value="Correlation"/></p> <p>「データベースの検索」セクションで、「<b>計算されたスペクトルを使用する</b>」ボックスにチェックが入っていることを確認し、「<b>すべての化合物</b>」を選択します。</p> <p><input checked="" type="radio"/> <b>すべての化合物</b></p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 計算されたスペクトルの使用</p> <p>「<b>検索</b>」をクリックします。</p>	<p>このページの画像は、このスペクトルに関連する正しい化合物構造です。検索を実行すると、<b>Minelt</b> アプリケーションが作成された結果を表示します。</p> 

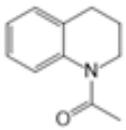
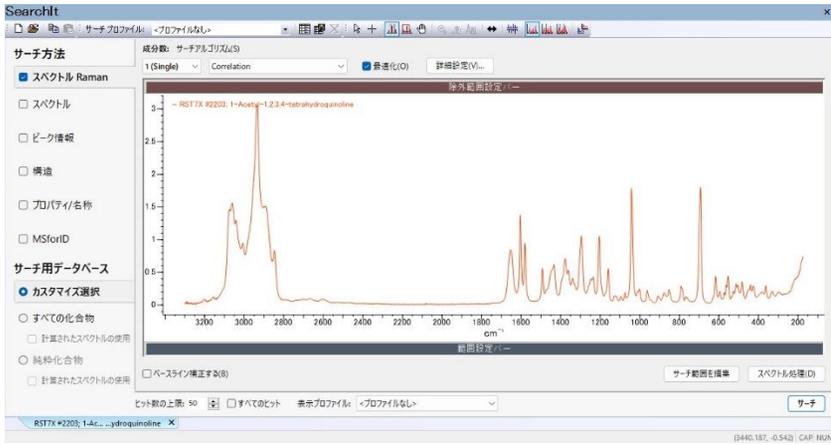
	終了	結果
3	<p><b>Minelt</b> では、ヒットリストテーブルに予測と実測の一致があった結果が表示されます。</p> <p>下記の構造が 予測データと完全に一致しており、テーブルの最上位に表示されるトップヒットです。</p> 	<p><b>Minelt</b> でヒットリスト結果が表示されます。書き込みに対するベストの一致がヒットリストの最上部に表示され、このトップマッチは自動的に選択され、表示されます。</p>  <p>注: 特定の結果は、ユーザーライセンスに含まれるデータベースによって異なります。</p>

## 例 2

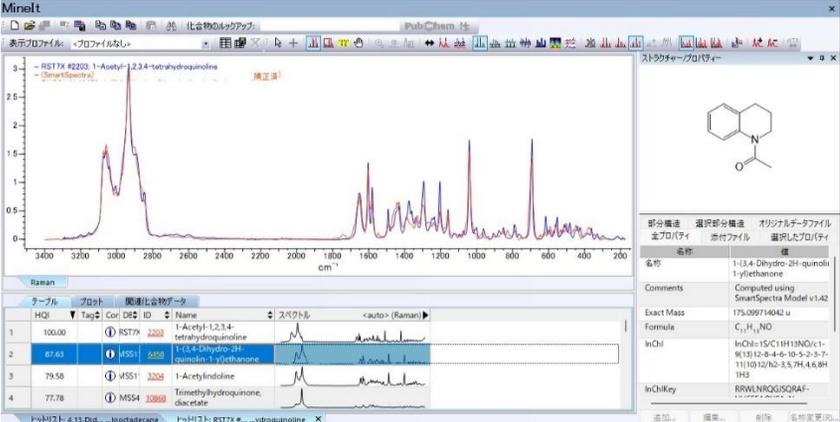
のファイル: 1-アセチル-1234-テトラヒドロキノリン. irf

	終了	結果																																																																												
1	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションに戻ります。画面の右上にある小さな X クリックして前の検索をクリアします ( X )。</p> <p><b>SearchIt</b> アプリケーションでは、「データベースの検索」セクションの下にある「ユーザー選択」をクリックします。</p>	<p>「ユーザー選択データベース」ウィンドウが表示されます:</p>  <p>利用可能なデータベース:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>インターネットデータベースは...</th> <th>対象スペクトル(L):</th> <th>すべて</th> <th>リフレッシュ(R)</th> <th>詳細設定(A)...</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Reference</td> <td>名称</td> <td>レコード</td> <td>DB コード</td> <td>ロケーション</td> </tr> <tr> <td>① 算出済み</td> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>② User DB</td> <td>13C NMR - AIST SDBS</td> <td>11890</td> <td>NLX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>③ Hit List</td> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - ...</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>④ データ制御</td> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Organic Compounds - ...</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table> <p>すべて追加(O) 追加(A) 削除(R) すべて削除(O)</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>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wollg...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - AIST SDBS</td> <td>11890</td> <td>NLX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - AIST S...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Flavoc...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Natur...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Organ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NOX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to ...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler Polymers &amp; Monomers - ...</td> <td>742</td> <td>NMX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...</td> </tr> </tbody> </table> <p>参照(B)...</p>	インターネットデータベースは...	対象スペクトル(L):	すべて	リフレッシュ(R)	詳細設定(A)...	Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション	① 算出済み	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	② User DB	13C NMR - AIST SDBS	11890	NLX	<Latest Version>	③ Hit List	13C NMR - Flavors & Fragrances - ...	11815	NFX	<Latest Version>	④ データ制御	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>		13C NMR - Organic Compounds - ...	188426	NOX	<Latest Version>		13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wollg...	13C NMR - AIST SDBS	11890	NLX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - AIST S...	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Flavoc...	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Natur...	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Organ...	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...	13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to ...	252	NNX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...	13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...	742	NMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...
インターネットデータベースは...	対象スペクトル(L):	すべて	リフレッシュ(R)	詳細設定(A)...																																																																										
Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																																										
① 算出済み	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																																																																										
② User DB	13C NMR - AIST SDBS	11890	NLX	<Latest Version>																																																																										
③ Hit List	13C NMR - Flavors & Fragrances - ...	11815	NFX	<Latest Version>																																																																										
④ データ制御	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>																																																																										
	13C NMR - Organic Compounds - ...	188426	NOX	<Latest Version>																																																																										
	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																																																																										
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																																											
11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wollg...																																																																											
13C NMR - AIST SDBS	11890	NLX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - AIST S...																																																																											
13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Flavoc...																																																																											
13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Natur...																																																																											
13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Organ...																																																																											
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...																																																																											
13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to ...	252	NNX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...																																																																											
13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...	742	NMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtle...																																																																											

	終了	結果																																																																
2	<p>「スペクトル技術に限定」のドロップダウンメニューを使用して、「ラマン」を選択します。</p> <p>対象スペクトル(L): Raman</p> <p>「参照 (Reference)」をクリックし、その後「すべて追加」をクリックしてすべてのライセンスされたデータベースを追加します。</p> <p>その後、「Computed」タブ (Computed) を選択し、「Add All」をクリックしてすべての SmartSpectra データベースを追加します。</p>	<p>参照および計算データベースを選択して追加すると、すべてのライセンスされたラマンライブラリが「検索用に選択されました」ウィンドウに表示されます:</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... 対象スペクトル(L): Raman</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>Raman - SmartSpectra Library of Bi...</td> <td>59</td> <td>RMSS1X</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra</td> </tr> <tr> <td>Raman - SmartSpectra Library of D...</td> <td>130</td> <td>RMSS2X</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra</td> </tr> <tr> <td>Raman - SmartSpectra Library of D...</td> <td>36</td> <td>RMSS3X</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra</td> </tr> <tr> <td>Raman - SmartSpectra Library of F...</td> <td>277</td> <td>RMSS5X</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra</td> </tr> <tr> <td>Raman - SmartSpectra Library of G...</td> <td>24585</td> <td>RMSS4X</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra</td> </tr> <tr> <td>Raman - SmartSpectra Library of H...</td> <td>51</td> <td>RMSS6X</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra</td> </tr> </tbody> </table> <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>Raman - Biomaterials - HORIBA</td> <td>112</td> <td>RLX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Biomaterials - ...</td> </tr> <tr> <td>Raman - Consumer Goods - Wiley</td> <td>11</td> <td>RCGD</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Consumer Goo...</td> </tr> <tr> <td>Raman - Forensic - HORIBA</td> <td>575</td> <td>RHX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Forensic - HO...</td> </tr> <tr> <td>Raman - JASCO</td> <td>649</td> <td>RJX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - JASCO [RJX].sd...</td> </tr> <tr> <td>Raman - Materials - Wiley</td> <td>114</td> <td>RMATX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Materials - Wil...</td> </tr> <tr> <td>Raman - Minerals (FT) - HORIBA</td> <td>319</td> <td>RTX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals (FT) - ...</td> </tr> <tr> <td>Raman - Minerals - HORIBA</td> <td>539</td> <td>RMX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals - HO...</td> </tr> <tr> <td>Raman - Minerals - Wiley</td> <td>171</td> <td>RMNRL</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals - Wile...</td> </tr> </tbody> </table>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	Raman - SmartSpectra Library of Bi...	59	RMSS1X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra	Raman - SmartSpectra Library of D...	130	RMSS2X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra	Raman - SmartSpectra Library of D...	36	RMSS3X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra	Raman - SmartSpectra Library of F...	277	RMSS5X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra	Raman - SmartSpectra Library of G...	24585	RMSS4X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra	Raman - SmartSpectra Library of H...	51	RMSS6X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra	名称	レコード	DB コード	ロケーション	Raman - Biomaterials - HORIBA	112	RLX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Biomaterials - ...	Raman - Consumer Goods - Wiley	11	RCGD	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Consumer Goo...	Raman - Forensic - HORIBA	575	RHX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Forensic - HO...	Raman - JASCO	649	RJX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - JASCO [RJX].sd...	Raman - Materials - Wiley	114	RMATX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Materials - Wil...	Raman - Minerals (FT) - HORIBA	319	RTX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals (FT) - ...	Raman - Minerals - HORIBA	539	RMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals - HO...	Raman - Minerals - Wiley	171	RMNRL	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals - Wile...
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																															
Raman - SmartSpectra Library of Bi...	59	RMSS1X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra																																																															
Raman - SmartSpectra Library of D...	130	RMSS2X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra																																																															
Raman - SmartSpectra Library of D...	36	RMSS3X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra																																																															
Raman - SmartSpectra Library of F...	277	RMSS5X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra																																																															
Raman - SmartSpectra Library of G...	24585	RMSS4X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra																																																															
Raman - SmartSpectra Library of H...	51	RMSS6X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Computed Databases\Ra																																																															
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																															
Raman - Biomaterials - HORIBA	112	RLX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Biomaterials - ...																																																															
Raman - Consumer Goods - Wiley	11	RCGD	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Consumer Goo...																																																															
Raman - Forensic - HORIBA	575	RHX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Forensic - HO...																																																															
Raman - JASCO	649	RJX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - JASCO [RJX].sd...																																																															
Raman - Materials - Wiley	114	RMATX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Materials - Wil...																																																															
Raman - Minerals (FT) - HORIBA	319	RTX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals (FT) - ...																																																															
Raman - Minerals - HORIBA	539	RMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals - HO...																																																															
Raman - Minerals - Wiley	171	RMNRL	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\Raman\Raman - Minerals - Wile...																																																															

	終了	結果
3	<p>標準ツールバーにある「Open Spectrum」または「Structure」アイコン (  ) をクリックします。</p> <p>次に、「C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Computed Spectra\Raman」フォルダ内で「1-acetyl-1234-tetrahydroquinoline.irf」を探してクリックし、「開く」を選択します。</p> <p>注：このページの画像は、このスペクトルに関連する正しい化合物構造です。</p> 	<p>選択されたファイルが「Spectral Searching」ウィンドウで開きます：</p>  <p>The screenshot shows the 'Spectral Searching' window with the following details:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>Search Method: <input checked="" type="checkbox"/> スペクトル Raman</li><li>Search Database: <input checked="" type="radio"/> カスタマイズ選択</li><li>Search Results: 1 (Single)</li><li>Search Criteria: Correlation</li><li>Search Button: 検索</li></ul> <p>The plot displays a Raman spectrum with a prominent peak at approximately 2950 cm<sup>-1</sup>. The x-axis is labeled 'cm<sup>-1</sup>' and ranges from 3200 to 200. The y-axis represents intensity, ranging from 0.0 to 3.0.</p>

	終了	結果
4	<p>「Spectral Searching」ウィンドウで、「詳細設定」をクリックし、「重複の削除」と「重複の削除」のチェックを外します。「OK」をクリックします。</p> <p>「検索」をクリックします。</p>	<p>「詳細設定」のポップアップウィンドウが表示されます。「OK」をクリックすると、ウィンドウが閉じます。検索を実行すると、MineIt が書き込み結果を読み込みます。</p> 

	終了	結果
5	<p>ヒットリストを探して、予測および実測の一致を含む結果を表示します。</p>	<p>ヒットリストの最上位にあるのは、範囲スペクトルに最も一致する実測スペクトルです。2番目に良いヒットは SmartSpectra データベースからの結果です。</p> <p>注：このシミュレートされたテストでは、最上位のヒットは放棄スペクトルとして使用されたため無視する必要があります。そのため、SmartSpectra の結果が真の一致です。</p> 

# ID Expert

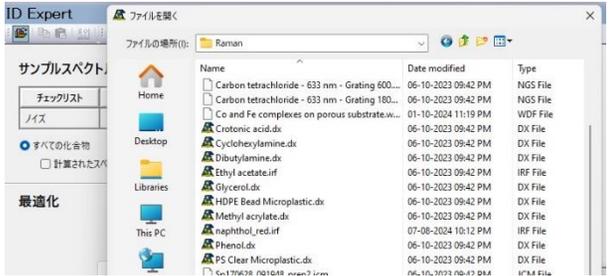
## はじめに

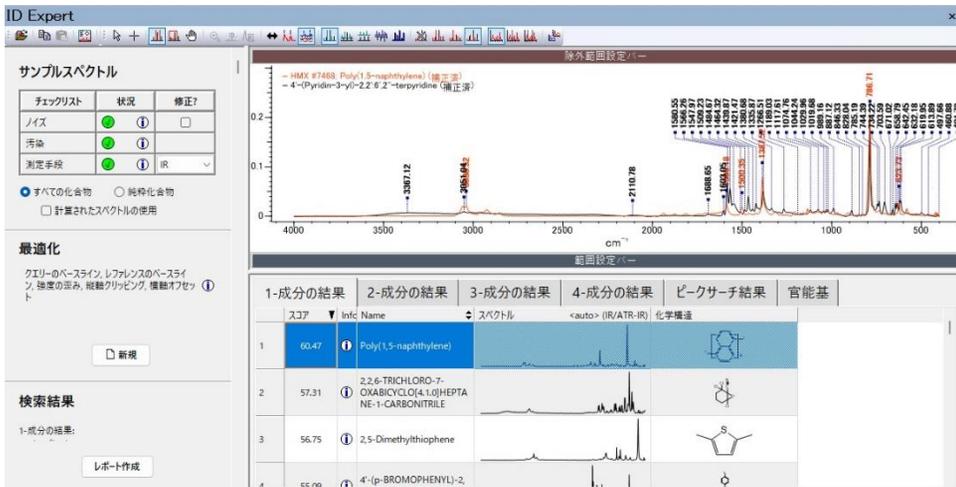
ユーザーのライセンスに予測 IR スペクトルのサブスクリプションが含まれている場合、ID Expert インターフェースの価格には「計算されたスペクトルを使用する」オプションが表示されます：

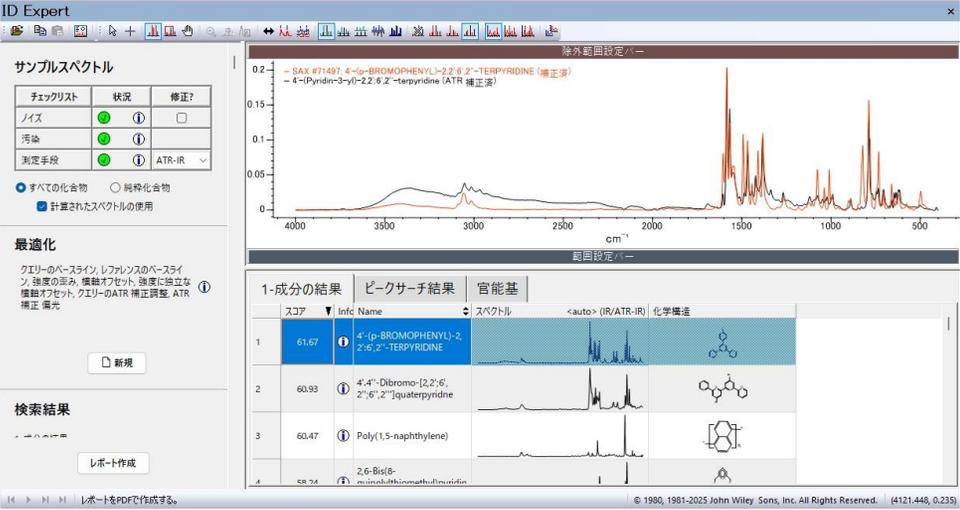


## 例 3

のファイル: 4-(ピリジン-3-イル)-2-2,6,2-terpyridine.irf

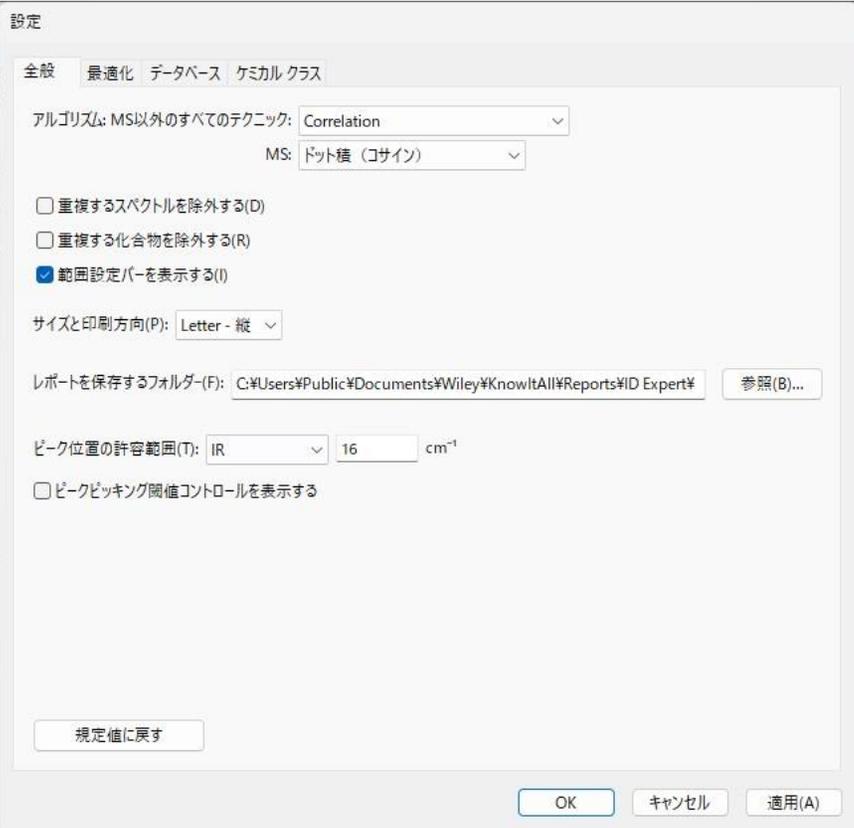
アクション	結果
<p>1</p> <p>データツールボックスに移動し、ID Expertアイコン (  )をクリックしてID Expertアプリケーションを開きます。または、デスクトップ(スタンドアロン)アプリケーションがインストールされている場合は、デスクトップアイコンをダブルクリックしてID Expertを直接開くこともできます。</p>	<p>アプリケーションが開き、「開く」ウィンドウが表示されます。</p> 
<p>2</p> <p>[開く]ダイアログウィンドウで[キャンセル]をクリックし、[ファイル]&gt;[設定]を選択します。</p> <p>[全般] タブで、ドロップダウンメニューを使用して、[アルゴリズム: MS 以外のすべての手法]をメニューオプション [1<sup>次導関数Euclidean Distance</sup>] に設定します。[適用] を選択し、[OK]を選択して変更を適用します。</p>	<p>[設定] をクリックすると、設定ウィンドウが開きます。</p> 

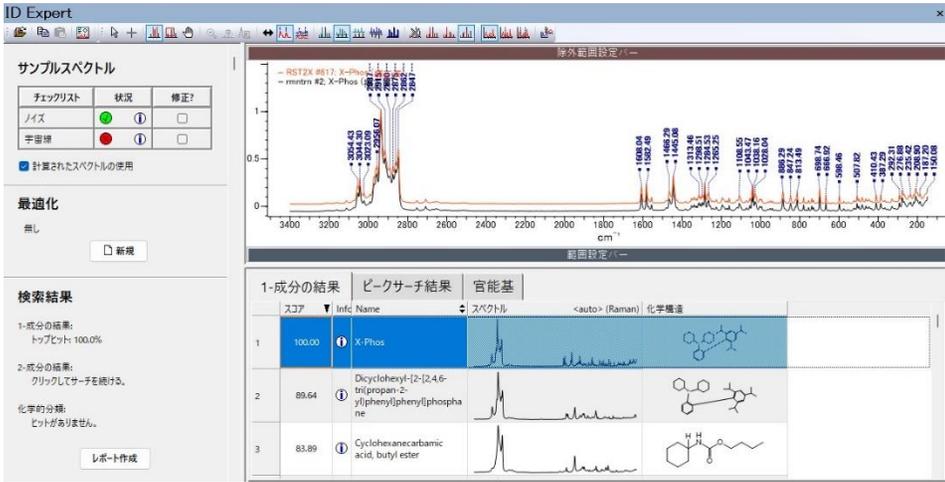
アクション	結果
<p>3 「新規検索」ボタンをクリックします ( <input type="button" value="新規"/> )。</p> <p>「C:\Users\Public\Documents\Wiley\」にある4-(Pyridin-3-yl)-2-2,6,2-terpyridine.irfを開きます。 KnowItAll\Samples\Computed Spectra\IRフォルダに移動します。開くをクリックします。</p> <p>(注: このドキュメントで使用されているトレーニングファイルは、例としてのみ使用されます。ユーザーは、このトレーニングに従う際に独自のIRスペクトルを使用する必要があります。)</p>	<p>ファイルを開くとすぐに、ユーザーが利用できるライセンスされたデータベースを使用して一致するものの検索が開始されます。</p>  <p>変更されたクエリステータス設定が表示されます。ID Expertは変更された設定で検索を更新します。</p> 
<p>4 クエリステータスで、テクニックをATR-IRに変更します。</p> <p>「計算されたスペクトルを使用する」チェックボックスをオンにします。</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 計算されたスペクトルの使用</p>	<p>変更されたクエリステータス設定が表示されます。ID Expertは変更された設定で検索を更新します。</p> 

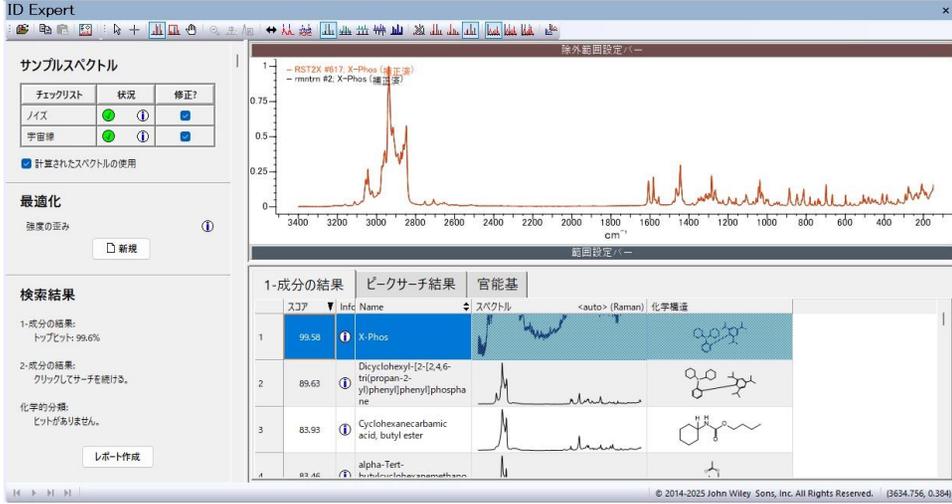
アクション	結果																				
<p>5 コンポーネント テーブルで検索結果を表示します。</p>	<p>この検索結果には、実験スペクトルと予測スペクトルが含まれます。</p>  <p>The screenshot displays the 'ID Expert' software window. On the left, the 'Samples Spectra' section contains a checklist with 'Noise' and 'Contamination' both marked as checked (green circles). Below this, there are radio buttons for 'All compounds' (selected) and 'Pure compounds', and a checked box for 'Use calculated spectra'. The 'Optimization' section includes a 'New' button. The 'Search Results' section has a 'Report' button. The main area shows a spectral plot with the sample spectrum in red and the library reference spectrum in black. Below the plot is a table of search results:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>スコア</th> <th>Info Name</th> <th>スペクトル</th> <th>官能基</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>61.67</td> <td>4-(p-BROMOPHENYL)-2,2',6,2'-TERPYRIDINE</td> <td>[Spectrum]</td> <td>[Chemical Structure]</td> </tr> <tr> <td>60.93</td> <td>4,4'-Dibromo-[2,2',6,2'-quaterpyridine]</td> <td>[Spectrum]</td> <td>[Chemical Structure]</td> </tr> <tr> <td>60.47</td> <td>Poly(1,5-naphthylene)</td> <td>[Spectrum]</td> <td>[Chemical Structure]</td> </tr> <tr> <td>58.54</td> <td>2,6-Bis[2,6-dichloroquinoline]</td> <td>[Spectrum]</td> <td>[Chemical Structure]</td> </tr> </tbody> </table>	スコア	Info Name	スペクトル	官能基	61.67	4-(p-BROMOPHENYL)-2,2',6,2'-TERPYRIDINE	[Spectrum]	[Chemical Structure]	60.93	4,4'-Dibromo-[2,2',6,2'-quaterpyridine]	[Spectrum]	[Chemical Structure]	60.47	Poly(1,5-naphthylene)	[Spectrum]	[Chemical Structure]	58.54	2,6-Bis[2,6-dichloroquinoline]	[Spectrum]	[Chemical Structure]
スコア	Info Name	スペクトル	官能基																		
61.67	4-(p-BROMOPHENYL)-2,2',6,2'-TERPYRIDINE	[Spectrum]	[Chemical Structure]																		
60.93	4,4'-Dibromo-[2,2',6,2'-quaterpyridine]	[Spectrum]	[Chemical Structure]																		
60.47	Poly(1,5-naphthylene)	[Spectrum]	[Chemical Structure]																		
58.54	2,6-Bis[2,6-dichloroquinoline]	[Spectrum]	[Chemical Structure]																		
<p>6 右上隅の X アイコン (  ) を選択して、アクティブな検索を閉じます。</p>																					

## 例 4

サンプルファイル: X-Phos.irf

アクション	結果
<p>1 開いている場合は閉じ、[ファイル] &gt; [設定]を選択します。</p> <p><b>[設定]</b>ポップアップ ウィンドウの<b>[全般]</b>タブで、ドロップダウンメニューを使用して、<b>[アルゴリズム: MS 以外のすべての手法]</b>をメニューオプション<b>[相関]</b>に設定します。</p> <p>「重複を削除」および「複製を削除」のチェックを外します。</p> <p>変更を適用するには、<b>[適用] [OK]</b>をクリックします。</p>	 <p>設定</p> <p>全般 最適化 データベース ケミカルクラス</p> <p>アルゴリズム: MS以外のすべてのテクニク: Correlation</p> <p>MS: ドット積 (コサイン)</p> <p><input type="checkbox"/> 重複するスペクトルを除外する(D)</p> <p><input type="checkbox"/> 重複する化合物を除外する(R)</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 範囲設定バーを表示する(I)</p> <p>サイズと印刷方向(P): Letter - 縦</p> <p>レポートを保存するフォルダ(F): C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Reports\ID Expert 参照(B)...</p> <p>ピーク位置の許容範囲(T): IR 16 cm<sup>-1</sup></p> <p><input type="checkbox"/> ピークピッキング閾値コントロールを表示する</p> <p>規定値に戻す</p> <p>OK キャンセル 適用(A)</p>

アクション	結果																								
<p>2 新しい検索ボタン ( <input type="button" value="新規"/> ) をクリックします。  「C:\Users\Public\Documents\Wiley\」にあるX-Phos.irfを開きます。  KnowItAll\Samples\Computed Spectra\Raman”を開きます。[開く]をクリックします。</p> <p>クエリステータスパネルで、[コンピュータスペクトルを使用する]ボックスをオンにします。</p> <p>「コンピュータスペクトルを使用する」チェックボックスをオンにすると、SmartSpectra データがID Expert のライブラリ検索に追加されます。チェックされていない場合は、SmartSpectra は検索されません。</p> <p>(注: 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、例としてのみ使用されます。ユーザーは、このトレーニングに従う際に独自のラマンスペクトルを使用する必要があります。)</p>	<p>ファイルを開くとすぐに、ユーザーが利用できるライセンスされたデータベースを使用して一致するものの検索が開始されます。</p>  <p>The screenshot shows the ID Expert interface. On the left, the 'サンプルスペクトル' (Sample Spectrum) panel is active, with the '計算されたスペクトルの使用' (Use calculated spectrum) checkbox checked. The main window displays a Raman spectrum with several peaks labeled with their wavenumbers (e.g., 3064.09, 2924.07, 1605.28, 1465.08, 1313.46, 1261.53, 1209.25, 1106.05, 1028.16, 897.79, 813.46, 688.74, 598.66, 412.03, 317.29, 276.88, 208.90, 147.09). Below the spectrum, the '1-成分の結果' (1-Component Results) table is visible, showing the top three search results:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>順位</th> <th>スコア</th> <th>Info</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> <th>官能基</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>100.00</td> <td>①</td> <td>X-Phos</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>89.64</td> <td>①</td> <td>Dicyclohexyl-12-(2,4,6-tripropylphenyl)phenylphosphane</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>83.89</td> <td>①</td> <td>Cyclohexanecarbanilic acid, butyl ester</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	順位	スコア	Info	Name	スペクトル	官能基	1	100.00	①	X-Phos			2	89.64	①	Dicyclohexyl-12-(2,4,6-tripropylphenyl)phenylphosphane			3	83.89	①	Cyclohexanecarbanilic acid, butyl ester		
順位	スコア	Info	Name	スペクトル	官能基																				
1	100.00	①	X-Phos																						
2	89.64	①	Dicyclohexyl-12-(2,4,6-tripropylphenyl)phenylphosphane																						
3	83.89	①	Cyclohexanecarbanilic acid, butyl ester																						

アクション	結果
<p>3 コンポーネント結果テーブルで検索結果を表示します。</p>	<p>ヒットリストの一番上のヒットは、クエリスペクトルに最も一致する経験的スペクトルです。2番目に良いヒットは SmartSpectra データベースからのものです。</p> <p>注:このシミュレートされたテストでは、トップヒットはクエリスペクトルとして使用されたため無視されます。したがって、SmartSpectra の結果が真のベストマッチとなります。</p> 
<p>4 右上隅の X アイコン (  ) を選択して、アクティブな検索を閉じます。</p>	

# 分類モデル

## 目的

これらの演習では、KnowItAll ID Expert および Minelt で分類モデルを使用する方法を説明します。

## 目的

これらの演習では次のことが学べます:

- ID Expert で KnowItAll 分類モデルを使用する方法
- Minelt で KnowItAll 分類モデルを使用する方法

### Training Files Used in This Lesson:

- 17-Hydroxy-17-alpha-pregn-4-en-20-yn-3-one.irf
- SmartSpectraFTIROxycodone.irf
- SmartSpectraRamanAndrosteroneacetate.irf

*Note:* The training files used are for example purposes only. The user should utilize their own IR spectra when following this training.

### KnowItAll Applications Used:

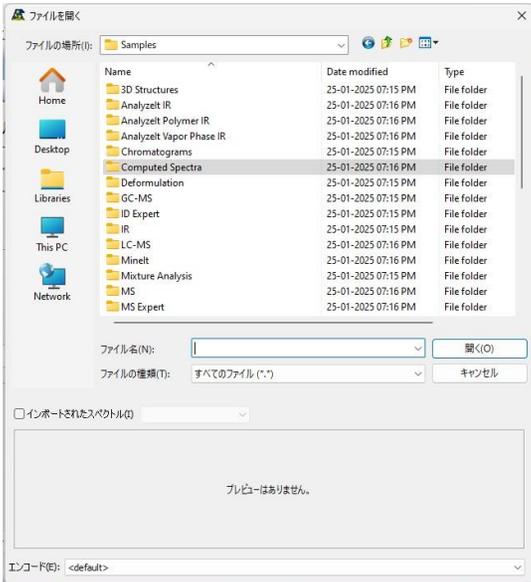
- KnowItAll ID Expert
- KnowItAll Minelt

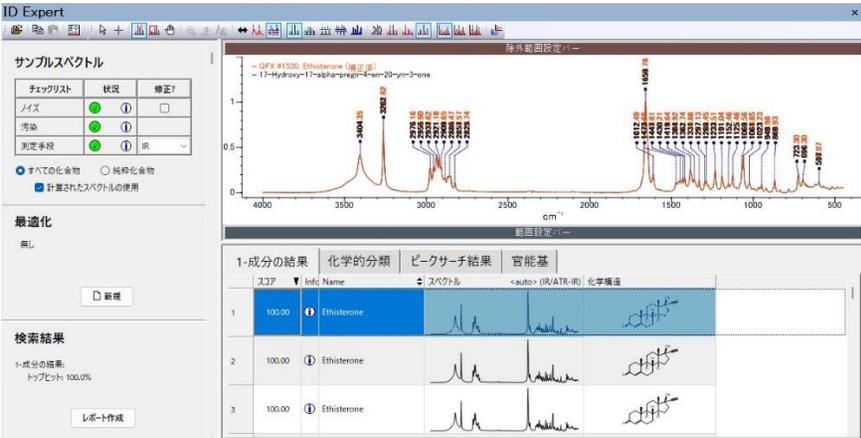
## 背景

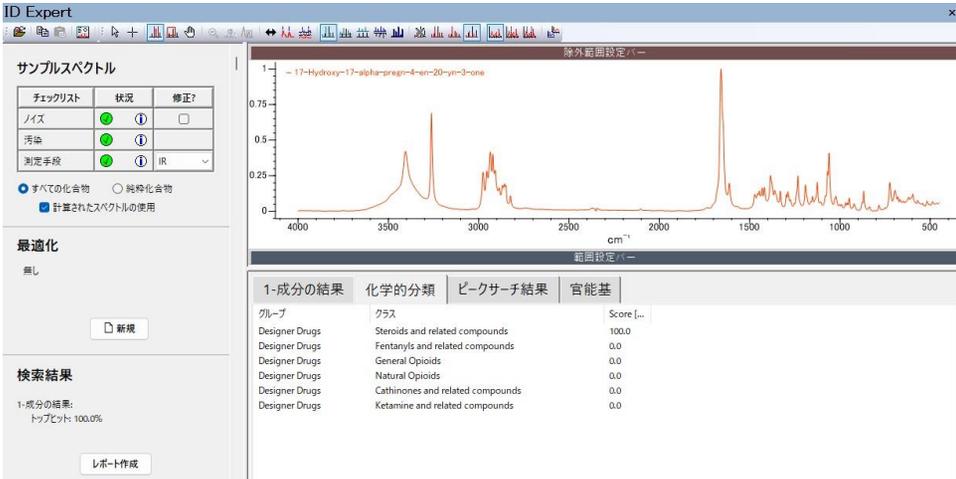
分類モデルは、データを定義済みのクラスまたはグループにラベル付けまたは分類するために使用される教師あり学習の一種です。これらのモデルは、特徴データに基づいて上記のラベルを予測します。モデルはラベル付けされたデータでトレーニングするか、トレーニング対象のデータがモデルによって自己ラベル付けされるようにするアーキテクチャを備えている必要があります。当社のモデルは、真または偽の結果を伴うバイナリ分類器です。このモデルは、近年非常に人気が高まっているニューラルネットワークアルゴリズムアーキテクチャも使用します。モデルは、KnowItAllのID ExpertおよびMineltアプリケーション内のFT-IR、ラマン、およびGC-MS技術用に最適化されています。

## ID エキスパート

サンプルファイル: 17-Hydroxy-17-alpha-pregn-4-en-20-yn-3-one.irf

	アクション	結果
1	<p>IDエキスパート (  ) を開きます。</p> <p><b>[開く]</b> ウィンドウが表示されない場合は、<b>[新しい検索]</b> ボタン (  ) をクリックして、ダイアログウィンドウを手動で起動します。</p>	<p>ファイル選択のための「開く」ウィンドウが表示されます。</p>  <p>The screenshot shows a Windows-style 'Open' dialog box titled 'ファイルを開く'. The current location is 'Samples'. A list of folders is displayed with columns for Name, Date modified, and Type. The 'Computed Spectra' folder is selected. Below the list are fields for 'ファイル名(N):', 'ファイルの種類(T):', and buttons for '開く(O)' and 'キャンセル'. At the bottom, there is a checkbox for 'インポートされたスペクトル(I)' and an 'エンコード(E):' dropdown menu.</p>

アクション	結果
<p>2 「C:\Users\Public\Documents\Wiley\」にある17-Hydroxy-17-alpha-pregn-4-en-20-yn-3-one.irfを開きます。</p> <p>KnowItAll\Samples\Mixture Analysis\IR Examples\Components”フォルダ。</p> <p>「開く」をクリックします。</p>	<p>ファイルを開くとすぐに、ユーザーが利用できるライセンスデータベースを使用して一致するものの検索が開始されます。</p>  <p>The screenshot shows the ID Expert software window. On the left, there are controls for 'サンプルスペクトル' (Sample Spectrum) with a checklist for 'チェックリスト' (Checklist) including 'ノイズ' (Noise), '汚染' (Contamination), and '測定手段' (Measurement Method). Below this is the '最適化' (Optimization) section with a '新規' (New) button. The '検索結果' (Search Results) section shows '1-成分の結果' (1-component results) with a 'トップヒット: 100.0%' (Top hit: 100.0%) and a 'レポート作成' (Create Report) button. The main area displays an IR spectrum plot with peaks labeled with wavenumbers. Below the plot, there are tabs for '1-成分の結果' (1-component results), '化学的分類' (Chemical classification), 'ピークサーチ結果' (Peak search results), and '官能基' (Functional groups). The '1-成分の結果' tab is active, showing a table with 3 rows of results for 'Ethisterone' at 100.00% confidence, each with a small spectrum and a chemical structure.</p>
<p>3 クリック&gt; 設定。</p> <p>設定ウィンドウの分類タブで、すべての分類を表示チェックボックスをオンにします。変更を保存するには、[OK]をクリックします。</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> すべての化学的分類を表示(A)</p>	<p>[OK]をクリックすると、設定ウィンドウが閉じます。</p>

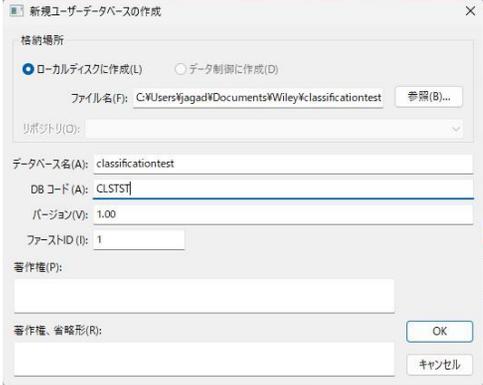
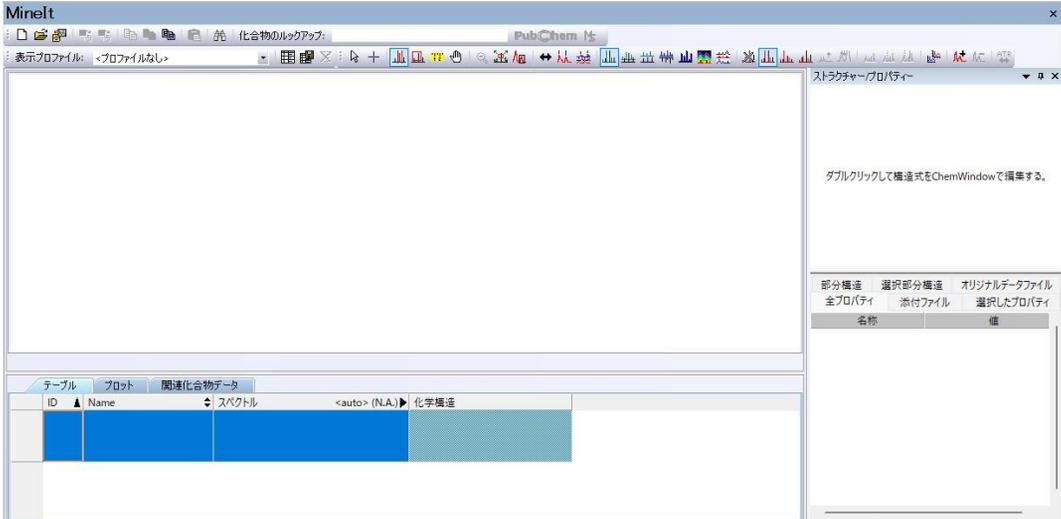
アクション	結果																																
<p>4 コンポーネント結果のすぐ右にある分類タブをクリックします。タブ。</p> <p>注: サンプルで複数のコンポーネントが検出される状況 (つまり、&gt; 1) では、下の画像に示すように、タブは最後のコンポーネント結果の右側にあります。</p> 	<p>ID Expert は、ユーザーライセンスで利用可能な分類モデルの分類結果を表示します。この場合、サンプルはステロイドであると識別されます。</p>  <table border="1"> <thead> <tr> <th>1-成分の結果</th> <th>化学的分类</th> <th>ピークサーチ結果</th> <th>官能基</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>グループ</td> <td>クラス</td> <td></td> <td>Score [...]</td> </tr> <tr> <td>Designer Drugs</td> <td>Steroids and related compounds</td> <td></td> <td>100.0</td> </tr> <tr> <td>Designer Drugs</td> <td>Fentanyl and related compounds</td> <td></td> <td>0.0</td> </tr> <tr> <td>Designer Drugs</td> <td>General Opioids</td> <td></td> <td>0.0</td> </tr> <tr> <td>Designer Drugs</td> <td>Natural Opioids</td> <td></td> <td>0.0</td> </tr> <tr> <td>Designer Drugs</td> <td>Cathinones and related compounds</td> <td></td> <td>0.0</td> </tr> <tr> <td>Designer Drugs</td> <td>Ketamine and related compounds</td> <td></td> <td>0.0</td> </tr> </tbody> </table>	1-成分の結果	化学的分类	ピークサーチ結果	官能基	グループ	クラス		Score [...]	Designer Drugs	Steroids and related compounds		100.0	Designer Drugs	Fentanyl and related compounds		0.0	Designer Drugs	General Opioids		0.0	Designer Drugs	Natural Opioids		0.0	Designer Drugs	Cathinones and related compounds		0.0	Designer Drugs	Ketamine and related compounds		0.0
1-成分の結果	化学的分类	ピークサーチ結果	官能基																														
グループ	クラス		Score [...]																														
Designer Drugs	Steroids and related compounds		100.0																														
Designer Drugs	Fentanyl and related compounds		0.0																														
Designer Drugs	General Opioids		0.0																														
Designer Drugs	Natural Opioids		0.0																														
Designer Drugs	Cathinones and related compounds		0.0																														
Designer Drugs	Ketamine and related compounds		0.0																														

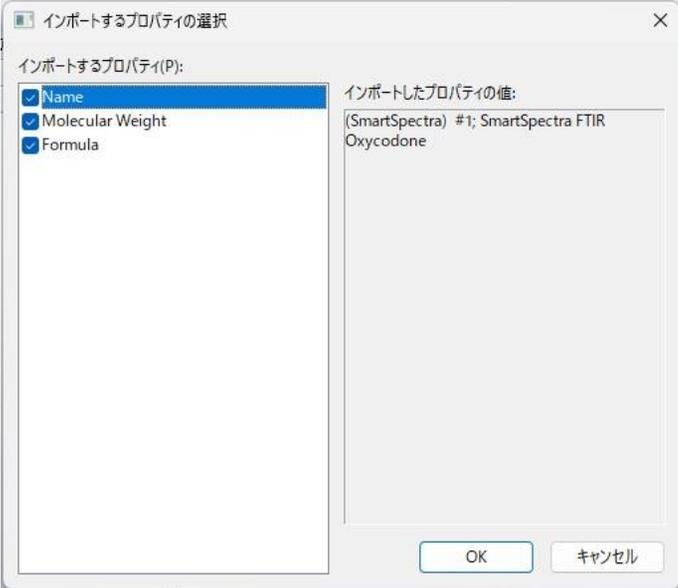
## Minelt での分類バッチプロパティ計算

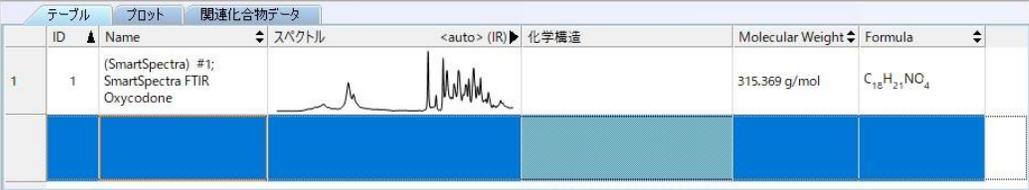
サンプルファイル: SmartSpectraFTIROxycodone.irf、SmartSpectraRamanAndrosteroneacetate.irf

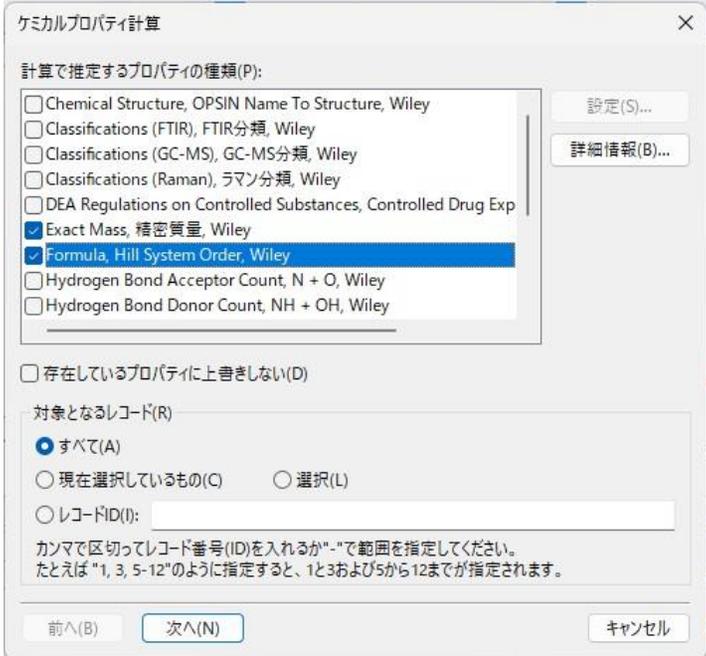
バッチ プロパティ計算は、一連の化合物に一度に適用される計算です。この演習では、バッチプロパティ計算の実行をシミュレートするために、ロック解除されたユーザー データベースを作成します。このワークフローは、ロック解除された (ユーザー) データベースを使用してのみ実行できます。

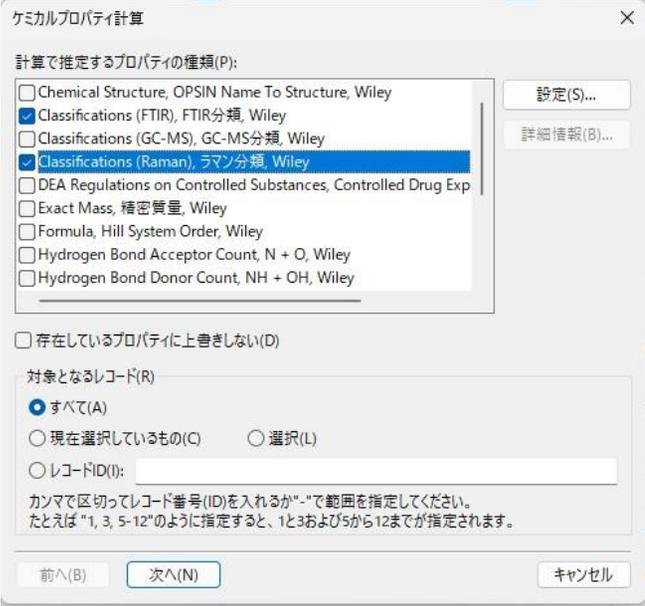
	アクション	結果
1	<p>Mineltアプリケーション (  )に移動します。</p> <p>Mineltのバッチプロパティ計算ツールを使用するには、ユーザーデータベースを作成する必要があります。</p> <p>注意:ユーザーデータベースを作成すると、ロック解除されたデータベースが作成されます。ライセンスされた KnowItAll データベースはロックされたデータベースです。</p> <p>の「新しいユーザーデータベースの作成」アイコンを選択します。</p>	
2	<p>「新しいデータベースの作成」ウィンドウで、「参照」ボタンを使用してファイルを保存する場所を選択します。</p>	<p>新しいデータベース作成ウィンドウが起動します。</p>

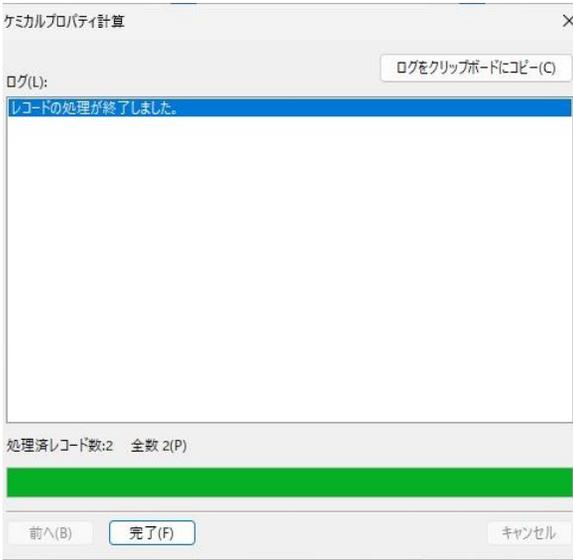
	アクション	結果
	<p>ボタンをクリックしてください。 [OK]をクリックして保存します。</p> <p>新しいデータベースの作成ウィンドウで、データベース名とデータベースの略語を入力します。</p>	
3	<p>[OK]をクリックしてデータベースを作成します。</p>	<p>Mineltで空のユーザー データベースが開かれます。</p> 
4	<p>ファイル] &gt; [インポート]に移動します。</p>	<p>[開く]ウィンドウが起動します。</p>

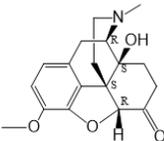
	アクション	結果																		
5	<p>SmartSpectraFTIROxycodone.irfを開く 「C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Computed Spectra\IR”フォルダ。  「開く」をクリックします。</p>	<p>プロパティのインポート選択ウィンドウが起動します。</p> 																		
6	<p>プロパティのインポート選択ウィンドウで [OK]をクリックします。</p>	<p>プロパティのインポート選択ウィンドウが閉じられ、プロパティが構造/プロパティパネルにインポートされます。</p> <table border="1" data-bbox="768 1040 1289 1338"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>全プロパティ</td> <td>添付ファイル</td> <td>選択したプロパティ</td> </tr> <tr> <th>名称</th> <th colspan="2">値</th> </tr> <tr> <td>名称</td> <td colspan="2">(SmartSpectra) #1; SmartSpectra FTIR Oxycodone</td> </tr> <tr> <td>Formula</td> <td colspan="2">C<sub>18</sub>H<sub>21</sub>NO<sub>4</sub></td> </tr> <tr> <td>Molecular Weight</td> <td colspan="2">315.369 g/mol</td> </tr> </tbody> </table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称	値		名称	(SmartSpectra) #1; SmartSpectra FTIR Oxycodone		Formula	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>		Molecular Weight	315.369 g/mol	
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																		
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																		
名称	値																			
名称	(SmartSpectra) #1; SmartSpectra FTIR Oxycodone																			
Formula	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>																			
Molecular Weight	315.369 g/mol																			

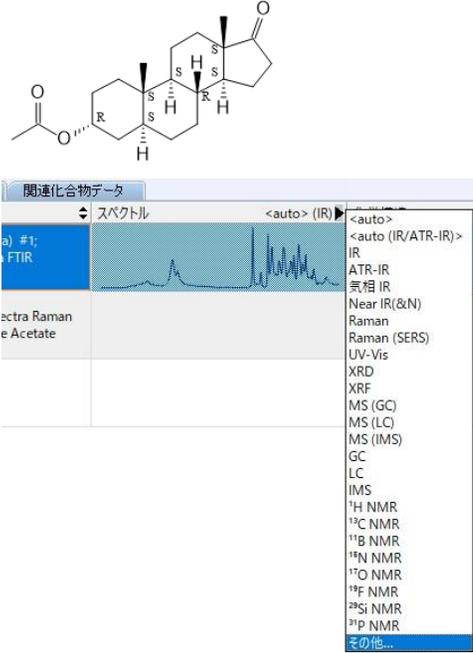
	アクション	結果
7	テーブルの最初のレコードの下の行をクリックします。	<p>表の2行目は網掛けされています。</p> 
8	[ファイル]タブに移動し、[インポート]を選択して、2番目のファイルをユーザーデータベースにインポートします。	[開く] ダイアログウィンドウが起動します。
9	手順4~8を繰り返す SmartSpectraRamanAndrosteroneacetate.irfの 「C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Computed Spectra\Raman」フォルダ。	プロパティ インポート選択ウィンドウが起動します。Raman サンプル ファイルがユーザーデータベースにインポートされます。

	アクション	結果
10	[データベース]>[バッチプロパティ計算]に移動します。	<p>バッチプロパティ計算ウィンドウが起動します。</p>  <p>ケミカルプロパティ計算</p> <p>計算で推定するプロパティの種類(P):</p> <ul style="list-style-type: none"><li><input type="checkbox"/> Chemical Structure, OPSIN Name To Structure, Wiley</li><li><input type="checkbox"/> Classifications (FTIR), FTIR分類, Wiley</li><li><input type="checkbox"/> Classifications (GC-MS), GC-MS分類, Wiley</li><li><input type="checkbox"/> Classifications (Raman), ラマン分類, Wiley</li><li><input type="checkbox"/> DEA Regulations on Controlled Substances, Controlled Drug Exp</li><li><input checked="" type="checkbox"/> Exact Mass, 精密質量, Wiley</li><li><input checked="" type="checkbox"/> Formula, Hill System Order, Wiley</li><li><input type="checkbox"/> Hydrogen Bond Acceptor Count, N + O, Wiley</li><li><input type="checkbox"/> Hydrogen Bond Donor Count, NH + OH, Wiley</li></ul> <p><input type="checkbox"/> 存在しているプロパティに上書きしない(D)</p> <p>対象となるレコード(R)</p> <p><input checked="" type="radio"/> すべて(A)</p> <p><input type="radio"/> 現在選択しているもの(C)    <input type="radio"/> 選択(L)</p> <p><input type="radio"/> レコードID(I):</p> <p>カンマで区切ってレコード番号(ID)を入れるか "-" で範囲を指定してください。 たとえば "1, 3, 5-12" のように指定すると、1と3および5から12までが指定されます。</p> <p>前へ(B)    次へ(N)    キャンセル</p>

	アクション	結果
11	<p>クリックして、IR および Raman の分類モデルを選択します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>分類 (FTIR)、FTIR 分類、Wiley</li> <li>分類 (ラマン)、ラマン分類、Wiley”。</li> </ul> <p>注:特定の手法ごとにモデルを1つずつ実行することをお勧めしますが、異なるスペクトルレコードに対してすべての分類エンジンを一度に実行することも可能です。</p>	<p>分類モデルが選択された化学特性計算ウィンドウを以下に示します。</p>  <p>ケミカルプロパティ計算</p> <p>計算で推定するプロパティの種類(P):</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><input type="checkbox"/> Chemical Structure, OPSIN Name To Structure, Wiley</li> <li><input checked="" type="checkbox"/> Classifications (FTIR), FTIR分類, Wiley</li> <li><input type="checkbox"/> Classifications (GC-MS), GC-MS分類, Wiley</li> <li><input checked="" type="checkbox"/> Classifications (Raman), ラマン分類, Wiley</li> <li><input type="checkbox"/> DEA Regulations on Controlled Substances, Controlled Drug Exp</li> <li><input type="checkbox"/> Exact Mass, 精密質量, Wiley</li> <li><input type="checkbox"/> Formula, Hill System Order, Wiley</li> <li><input type="checkbox"/> Hydrogen Bond Acceptor Count, N + O, Wiley</li> <li><input type="checkbox"/> Hydrogen Bond Donor Count, NH + OH, Wiley</li> </ul> <p><input type="checkbox"/> 存在しているプロパティに上書きしない(D)</p> <p>対象となるレコード(R)</p> <p><input checked="" type="radio"/> すべて(A)</p> <p><input type="radio"/> 現在選択しているもの(C)    <input type="radio"/> 選択(L)</p> <p><input type="radio"/> レコードID(I): <input type="text"/></p> <p>カンマで区切ってレコード番号(ID)を入れるか"- "で範囲を指定してください。 たとえば "1, 3, 5-12"のように指定すると、1と3および5から12までが指定されます。</p> <p>前へ(B)    次へ(N)    キャンセル</p>
12	<p>「含めるレコード」の下で、「すべて」が選択されていることを確認します。次に、「次へ&gt;」をクリックして、バッチプロパティ計算を実行します。</p>	

	アクション	結果
13	<b>バッチ</b> プロパティ計算を完全に実行できるようにします。緑色のステータスバーを使用して進行状況を追跡できます。	<b>バッチ</b> プロパティ計算が完了すると、ログボックスに「レコード処理が完了しました」と表示されます。ステータスバー全体が緑色になります。 
14	「化学特性計算」ウィンドウで「完了」をクリックして、Mineltに戻ります。	化学特性計算ウィンドウは閉じられています。

	アクション	結果																																										
15	結果の分類は、選択したレコードの「構造/プロパティ」パネルに表示されます。	<p>レコード ID 1 には、結果分類 (FTIR) 「一般オピオイド (100.0%)」と「天然オピオイド (100.0%)」があります。</p> <table border="1" data-bbox="772 407 1125 651"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> <tr> <th>全プロパティ</th> <th>添付ファイル</th> <th>選択したプロパティ</th> </tr> <tr> <th colspan="2">名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td></td> <td>(SmartSpectra) #1; SmartSpectra FTIR Oxycodone</td> </tr> <tr> <td>Classifications (FTIR)</td> <td></td> <td>General Opioids (100.0%) Natural Opioids (100.0%)</td> </tr> <tr> <td>Formula</td> <td></td> <td>C<sub>18</sub>H<sub>23</sub>NO<sub>4</sub></td> </tr> <tr> <td>Molecular Weight</td> <td></td> <td>315.369 g/mol</td> </tr> </tbody> </table> <p>レコード ID 2 には、分類 (ラマン) 「ステオロイドおよび関連化合物 (100.0%)」の結果があります。</p> <table border="1" data-bbox="772 753 1125 980"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> <tr> <th>全プロパティ</th> <th>添付ファイル</th> <th>選択したプロパティ</th> </tr> <tr> <th colspan="2">名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td></td> <td>#2; SmartSpectra Raman Androsterone Acetate</td> </tr> <tr> <td>Classifications (Raman)</td> <td></td> <td>Steroids and related compounds (100.0%)</td> </tr> <tr> <td>Formula</td> <td></td> <td>C<sub>21</sub>H<sub>32</sub>O<sub>3</sub></td> </tr> <tr> <td>Molecular Weight</td> <td></td> <td>332.484 g/mol</td> </tr> </tbody> </table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称		値	名称		(SmartSpectra) #1; SmartSpectra FTIR Oxycodone	Classifications (FTIR)		General Opioids (100.0%) Natural Opioids (100.0%)	Formula		C <sub>18</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>4</sub>	Molecular Weight		315.369 g/mol	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称		値	名称		#2; SmartSpectra Raman Androsterone Acetate	Classifications (Raman)		Steroids and related compounds (100.0%)	Formula		C <sub>21</sub> H <sub>32</sub> O <sub>3</sub>	Molecular Weight		332.484 g/mol
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																																										
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																																										
名称		値																																										
名称		(SmartSpectra) #1; SmartSpectra FTIR Oxycodone																																										
Classifications (FTIR)		General Opioids (100.0%) Natural Opioids (100.0%)																																										
Formula		C <sub>18</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>4</sub>																																										
Molecular Weight		315.369 g/mol																																										
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																																										
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																																										
名称		値																																										
名称		#2; SmartSpectra Raman Androsterone Acetate																																										
Classifications (Raman)		Steroids and related compounds (100.0%)																																										
Formula		C <sub>21</sub> H <sub>32</sub> O <sub>3</sub>																																										
Molecular Weight		332.484 g/mol																																										
16	最終的な化合物構造は、参考のために結果セルに示されています。これらは、バッチプロパティの計算で使用された2つのスペクトルの構造表現であり、正しく分類されていることを示すために比較のために追加されています。	<p>レコード ID 1: (SmartSpectra) #1; SmartSpectra FTIR オキシコドン。</p>  <p>レコード ID 2: #2; SmartSpectra ラマン アンドロステロン アセテート。</p>																																										

アクション	結果
<p>データベース スペクトル ペインでさまざまなスペクトル手法をすべて表示するには、ペインの「&lt;auto&gt; (IR)」または「&lt;auto&gt; (Raman)」部分の右側にある黒い三角形を選択します。</p> <p>ドロップダウンが表示されたら、表示するテクニックを選択します。</p>	 <p>The screenshot displays a chemical structure of a complex steroid-like molecule with a fused ring system and a side chain. Below the structure is a software interface window titled '関連化合物データ' (Related Compound Data). The window has a 'スペクトル' (Spectrum) section with a dropdown menu currently set to '&lt;auto&gt; (IR)'. A list of spectral techniques is shown, including FTIR, ATR-IR, Near IR (&amp;N), Raman, Raman (SERS), UV-Vis, XRD, XRF, MS (GC), MS (LC), MS (IMS), GC, LC, IMS, <sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR, <sup>11</sup>B NMR, <sup>15</sup>N NMR, <sup>17</sup>O NMR, <sup>19</sup>F NMR, <sup>29</sup>Si NMR, <sup>31</sup>P NMR, and 'その他...' (Others...). The 'その他...' option is highlighted at the bottom of the list.</p>