


KnowItAll IDエキスパート/デフォミュレーションエキスパート

IDエキスパートはバイオ・ラッドのスペクトルライブラリーを利用して素早く簡単に検索結果を提供します。Deformulation(デフォミュレーション)エキスパートはKnowItAll Spectral Libraryの標準ツールで、有機化合物のみのデータベースで検索をし、解析に役立つ基本的な化学情報を素早く提供します。

起動


1. IDエキスパートを起動するにはPCのデスクトップ上に作成されているショートカットアイコン  をダブルクリックします。

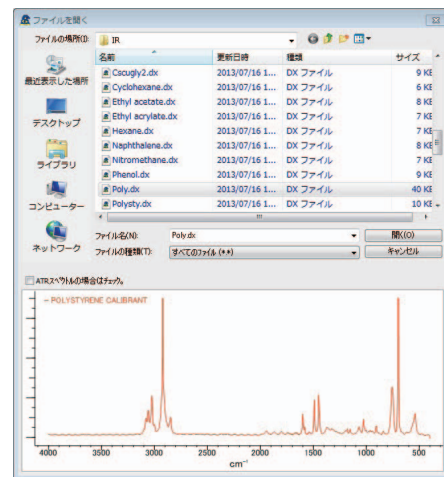
Note IRエディションなどのエディションに組み込まれた場合、Dataグループにアイコンが登録されています。

2. IDエキスパートが起動すると、スプラッシュスクリーンのあとすぐに < スペクトルを開くダイアログボックス > が現れます。
3. 両エキスパートとも最適化がデフォルトで設定されています。最適化を解除するには [ファイル] ⇒ [設定] で表示されるダイアログボックスで最適化のチェックをはずしてください。

サーチの開始

1. < スペクトルを開くダイアログボックス > で目的のスペクトルファイルを選択し、プレビューで確認してから < 開く > をクリックします。
2. スペクトルウィンドウにスペクトルがロードされると、スペクトルの種類に応じて自動的に次のことが実行されます。
 - ① スペクトルサーチ
 - ② ピークサーチ
 - ③ ピーク情報による官能基グループサーチ (IR およびラマンのみ)
 - ④ 複数のコンポーネント (成分) を検索するマルチコンポーネントサーチ (混合物サーチ)

- ☞ デフォミュレーションエキスパートを起動するには  をクリックしてください。



スペクトルサーチは最適なヒット率が得られたところで自動的に終了します。

検索結果 - スペクトルサーチ

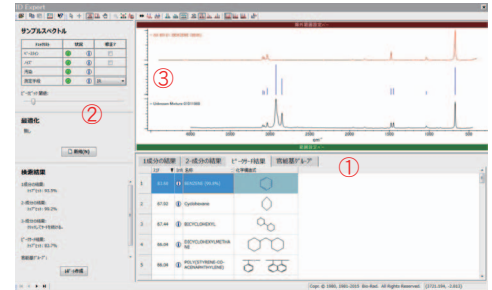
- ① スペクトルの検証
 - a. IRであればベースライン、ノイズ、干渉、測定手段などを判断し、必要な処理の項目が赤く表示されます。
 - b. 訂正のカラムをクリックすると、自動的に処理が行われ、同時に再検索を行います。
- ② 検索結果
 - a. スペクトルサーチの最大ヒット率、マルチコンポーネントサーチの最大ヒット率が成分数ごとに表示されます。
 - b. マルチコンポーネントサーチは KnowItAll が最適と思われるヒット率がでるまで5成分まで繰り返されます。
- ③ スペクトルウィンドウ
 - a. データベーステーブルで選択されたエントリーのスペクトルが表示されます。
- ④ ヒットリスト
 - a. 検索されたデータベースの DB コード、ID 番号、名称、スペクトル、構造式が表示されます。
 - b. マルチコンポーネントサーチでは検索された要素の合成スペクトルと各要素のスペクトル、合成スペクトルとサンプルスペクトルの差のスペクトルが表示されます。
 - c. 各行の①をクリックするとデータベースに登録されている物性情報を表示するウィンドウが開きます。
- ⑤ 最適化情報
 - ①をクリックして最適化を有効にしたとき、表示される最適化の内容を確認することができます。

Note Deformulationエキスパートでは官能基グループサーチは行いません。



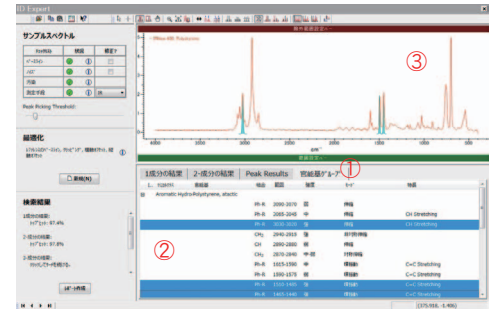
検索結果 - ピークサーチ

- ① ピークサーチの結果はピーク Results に表示されます。
- ② ピークピッキング閾値のスライダーでピーク強度の設定を変更することができます。
- ③ スペクトルウィンドウには測定スペクトルと検索されたピークとデータベーススペクトルが表示されます。



検索結果 - 官能基グループ

- ① 官能基グループタブ
 - 官能基グループタブをクリックして開きます。
 - スペクトルの解析に重要と思われるピークを自動的に選択し、そのピークに赤外吸収を持つ官能基がリストされています。
- ② 官能基テーブル
 - ストされた官能基グループと結合によるピーク位置と強度、振動モードが表示されます。
 - 官能基グループ名先頭の①のカラムをクリックする官能基ハンドブックのウィンドウが開き、官能基による赤外吸収の総括的な説明（英語）が表示されます。
- ③ スペクトルウィンドウ
 - 選択された官能基によるピーク位置と強度で、スペクトルを示唆します。



検索条件の設定

1. 次のサーチ条件を設定することができます。
 - ① スペクトルウィンドウ上の除外範囲設定バー上をドラッグし、サーチ除外領域を設定
 - ② スペクトルウィンドウの範囲設定バー上をドラッグし、サーチ領域を設定
2. <ファイル> => <設定> を選択し、設定ダイアログボックスでサーチアルゴリズムをプルダウンで設定することができます。
3. ID エキスパートが検出したチェック項目（測定手法により異なります。）修正?欄をクリックすると、サーチ条件が変更され新しい条件で新たなサーチが開始されます。

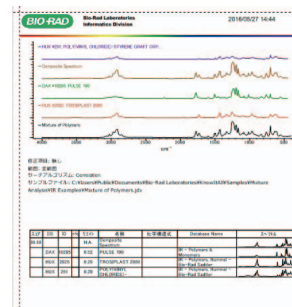
レポートの作成 -PDF

1. レポートしたいタブとエントリーを選択し、表示方法を設定してから <レポート作成> のボタンをクリックします。
2. コメントを入力するダイアログボックスが現れます。テキストボックスに任意のテキストを入力して <OK> をクリックします。
3. あらかじめ登録されたフォーマットで PDF レポートが生成されます。

レポートの作成 -ReportIt

ID エキスパートが KnowItAll のエディションに組み込まれている場合、レポート作成ツール ReportIt プラグインを利用することができます。

1. レポートしたいタブとエントリーを選択し、表示方法を設定してから <送り先バー> の <ReportIt> ボタンをクリックします。
2. 設定されているフォーマットでレポートが表示されます。
3. スペクトルウィンドウやテーブルをダブルクリックして表示方法の設定を編集することができます。



Note レポートに表示されるスペクトルウィンドウはIDエキスパートのスペクトルウィンドウと同じ設定で表示されます。レポートにしたい表示設定(色、重なり、範囲など)をIDエキスパートのスペクトルウィンドウであらかじめ設定しておいてください。