



IR,Ramanによるスペクトル解析に KnowItAll IDエキスパート

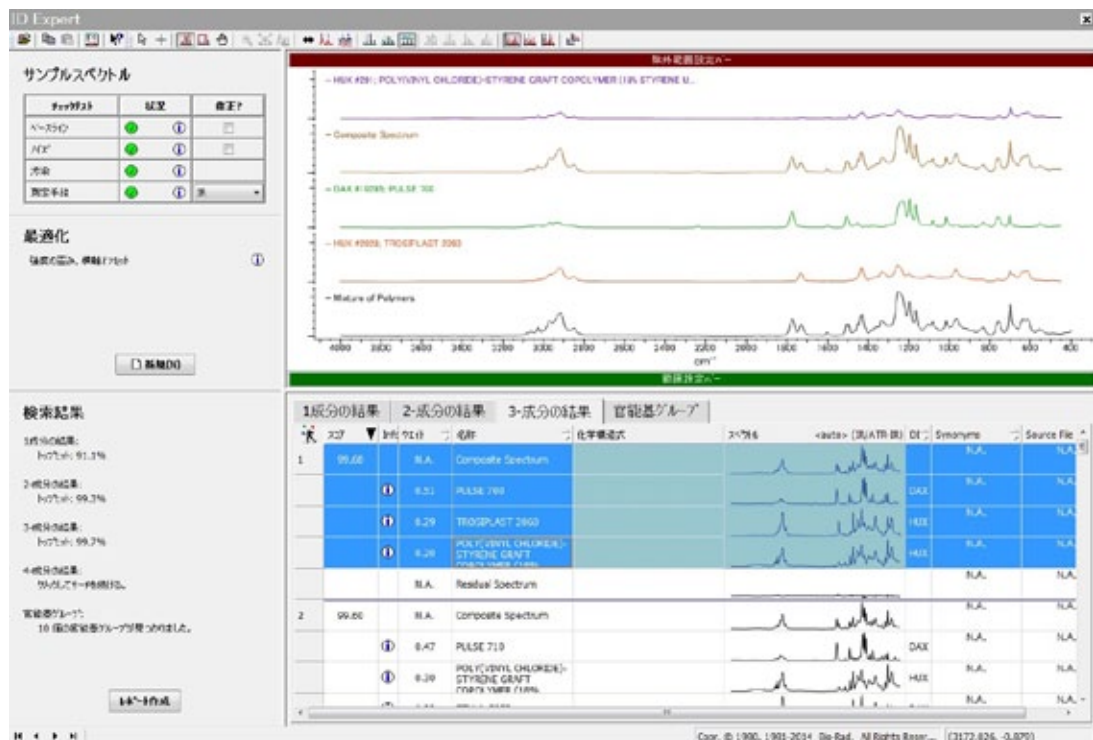
IDエキスパートは、バイオ・ラッド インフォマティクス事業部が長年培ってきた経験と分光学に基づき、IRスペクトル、ラマンスペクトルから最適な解析結果を素早く引きだします。easy to useをコンセプトに設計され、シンプルな操作方法で最大限の解析情報を提供する最先端サーチツールです。

■シンプルな操作で生産性の向上に貢献

IDエキスパートはスペクトルがロードされると同時にスペクトル検索を開始します。大幅に向上したサーチスピードで、より確度の高い検索結果を提供します。ロードされたスペクトルを検証し、ノイズの除去やベースライン補正、不純物領域の設定、ATR補正などの必要性を示唆し、初心者でも安心して操作することができます。

検索結果はスペクトルサーチ、マルチコンポーネントサーチ、官能基グループ検索のそれぞれでタブに表示されます。

満足する検索結果が得られたらワンクリックでPDF形式のレポートを作成することができます。



シングルサーチ、マルチコンポーネントサーチ、さらに官能基グループ検索の結果が一つの画面に表示されます。

■ スペクトルサーチの実行

IDエキスパートは通常のスペクトルサーチと5コンポーネントまでの混合物検索を自動的にを行います。膨大なデータベースに複雑な計算を行う混合物サーチは本来時間のかかるツールですが、新しく開発されたアルゴリズムにより、快適なサーチ環境を実現しました。測定スペクトルの要素となりえる化合物をあらゆる角度から模索します。

■ マルチコンポーネント検索

複数の要素を組み合わせた検索の結果は、検出された要素を合成したコンポジットスペクトル、コンポジットスペクトルの要素となった個々のスペクトル、測定スペクトルとコンポジットスペクトルの差を表した残渣スペクトルの3要素で構成されます。

■ 物性情報と構造式

データベースにはスペクトルだけでなく、構造式やさまざまな物性情報が登録されており、解析の手がかりとすることができます。構造式を含め、すべての物性情報を確認することができます。

■ 最適化

ロードされたスペクトルとデータベーススペクトルの問題を評価し、自動的にデータ処理がされます。どのようなデータ処理されたかは各エントリーごとに確認することができます。

■ 官能基検索

IDエキスパートはスペクトルサーチと同時に、ピークに由来する官能基グループのリストを作成し、スペクトルの解釈や解析をサポートする情報も提供します。スペクトル解釈のトレーニングツールとしてもご利用いただけます。

■ ピークを自動選択

ロードされたスペクトルから自動的に着目すべきピークを選択し、そのピークに赤外吸収をもつ官能基グループがリストされます。

■ 高分子スペクトルの官能基情報

IRスペクトルでは官能基知識ベースには有機化合物のほかに高分子スペクトルの官能基情報も含まれています。高分子スペクトルの解析にも威力を発揮します。

■ スペクトルの示唆と官能基情報

官能基によるピーク領域と強度で予測されるスペクトルを示唆します。結合とピーク強度、振動モードが表示されます。

■ IDエキスパートについて

KnowItAll IDエキスパートは次の製品に標準仕様となります。混合物サンプルのIRスペクトルを有機化合物のスペクトルに分解することを目的としたKnowItAll Deformulationエディションが追加されます。

■ KnowItAll IRスペクトルライブラリー

■ KnowItAll Ramanスペクトルライブラリー

■ IRパッケージデータベース

■ Ramanパッケージデータベース

KnowItAll2015ではKnowItAllとIR/Ramanデータベースすべてがインストールされます。一緒に納品されるライセンスドングルで利用できる機能とデータベースの種類をコントロールします。

未購入(ライセンスのない)のデータベースを検索対象とすると、ロックされたヒットリストが生成されます。

BIO RAD

バイオ・ラッド ラボラトリーズ株式会社
インフォマティクス事業部

〒140-0002
東京都品川区東品川 2-2-24 天王洲セントラルタワー 20F
電話 03-6361-7080 FAX 03-5463-8483
E-mail : informatics_jp@bio-rad.com