

構造式データベースの登録方法

構造式データベース登録方法について説明いたします。

1.「拡張データ解析」画面を開きます。



2. 「拡張データ解析」画面から、「表示」メニュー >「パラメーター検索」をクリックします。



ご不明な点は、カストマコンタクトセンタまで(電話受付 9:00~12:00、13:00~18:00 土、日、祝日は除きます)

電話 0120-477-111 FAX 0120-565-154 E-mail: email_japan@agilent.com http://www.agilent.com/chem/jp



3.「検索パラメータ」ウインドウが表示されましたら、「キャンセル」をクリックします。

検索パラメータ							
ライブラリ(L) 💽¥DATAE	ASE¥DEMO.L						
リトリーバルヒット数(山)	10						
┌─検索パラメータ							
□ 化合物名(№)	Dodecane	□ 融点(M)	0~	20			
□ CAS 番号(<u>C</u>)	112403	□ 沸点(<u>B</u>)	210 ~	220			
□ 分子式(E)	H2O	🔲 Ret. Index(<u>R</u>)	0.0 ~	10.0			
□ 分子量\>>>>□	160.0 ~ 180.0	- イオン検索(型)					
🗖 エントリ #(E)	1 ~ 2	□ マス <u> </u> 57	アバンダンス	90	~	100	%
□ 一般情報①	evaluation	🗖 VA 🛛 🕅	アバンダンス	60	~	70	%
カンパニー I(D)	HP	マス	アバンダンス	40	~	50	%
		\$(S) キャンセル		>			

4. 「パラメータ検索モード」画面にて、「構造式」メニュー >「構造式データベースの選択」をクリックし、使用する 構造式データベースの選択画面を開きます。

パラメータ検索 モード				
(ブラリ(L) リトリーバル(R)	構造式(<u>C</u>)	ツール①	表示♡	オプション
1 🗗 👰 🚛 🌆	- 構造式デ 構造式描	ータベースの) 画パラメータ	選択(<u>S</u>) 設定(P)	<u>a</u> y .
l 🕰 🖾 🕺 🗴	λ √ ⁹¹ 2	ቬ 🏦	£ L	. 🛃
.				

5. 「化学構造式データベース」ウインドウにて、「ファイル追加」ボタンをクリックして新しい構造式データベースを 追加登録します。

化学構造式データベース	
オーダ ファイル名 ディレクトリ	
1 subset.sdb c:¥database¥demo.l	ОК
	キャンセル
	ヘルプ
トップへ移動(M) リストより前時(B) (2774)	い追加(A)

ご不明な点は、カストマコンタクトセンタまで(電話受付 9:00~12:00、13:00~18:00 土、日、祝日は除きます)

電話 0120-477-111 FAX 0120-565-154 E-mail: email_japan@agilent.com http://www.agilent.com/chem/jp



6. 新しい構造式データベースを選択します。

化学構造式データベー	-スの選択				2 🛛
ファイルの場所の:	C TEST.L		•	🗢 🗈 💣 🎟•	
Ò	Struct.sdb				
最近使ったファイル					
デスクトップ					
21 F#15/1					
שיבעיר איד					
Y1 AVED-9	1917				
	ファイル名(11):	struct.sdb		•	開〈②〉
	ファイルの種類(①)	CSデータベース(*.SD	B)	<u> </u>	キャンセル

7. 検索する必要のない構造式データベースがあれば、削除します。

オーダ	ファイル名	ディレクトリ	
1 s 2 s	subset.sdb struct.sdb	c:¥database¥demo.l c:¥database¥test.l	OK キャンセル ヘルプ
トップ	∧移動(<u>M</u>)		ファイル追加(<u>A</u>)
ノくは優先 化学構造	;的に検索す サデータペース	る構造式データベースを検索	えの上位に設定してくださ
オーダ	ファイル名	ディレクトリ	

キャンセル ヘルブ トップへ移動(M) リストより削除(E) ファイル追加(A)…

8. データ解析画面に戻ります。



ご不明な点は、カストマコンタクトセンタまで(電話受付 9:00~12:00、13:00~18:00 土、日、祝日は除きます)

電話 . 0120-477-111 FAX . 0120-565-154

E-mail: email_japan@agilent.com http://www.agilent.com/chem/jp

🔆 🛛 Agilent Technologies

9. 次に、構造式をスペクトル画面に表示する方法を紹介いたします。



10. スペクトルのライブラリ検索後、マススペクトル画面の構造式を表示させたい範囲で右ドラッグします。



ご不明な点は、カストマコンタクトセンタまで(電話受付 9:00~12:00、13:00~18:00 土、日、祝日は除きます) 電話 🛄 0120-477-111 E-mail: email_iapan@agilent.com http://www.agilent.com/chem/jp

FAX 🛄 0120-565-154