

Delta Tips

NMDT_0057

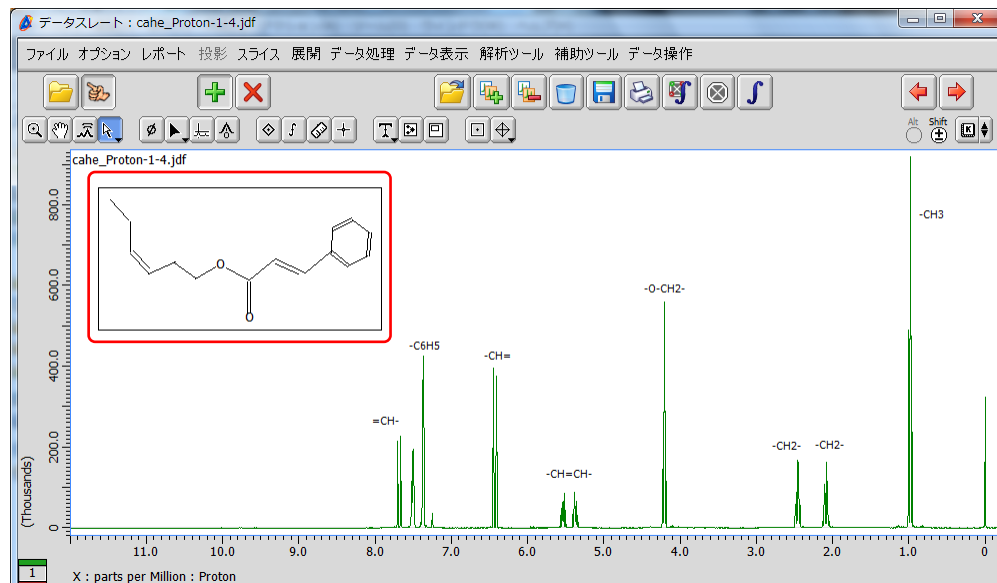
分子構造式エディタの使い方

NMR data processing software

Delta
NMR Software
v5.0



Deltaは、NMR解析補助機能の一つとして、分子構造式ファイルを作成する機能を持っています。ここでは、分子構造式エディタの使用方法を説明します。

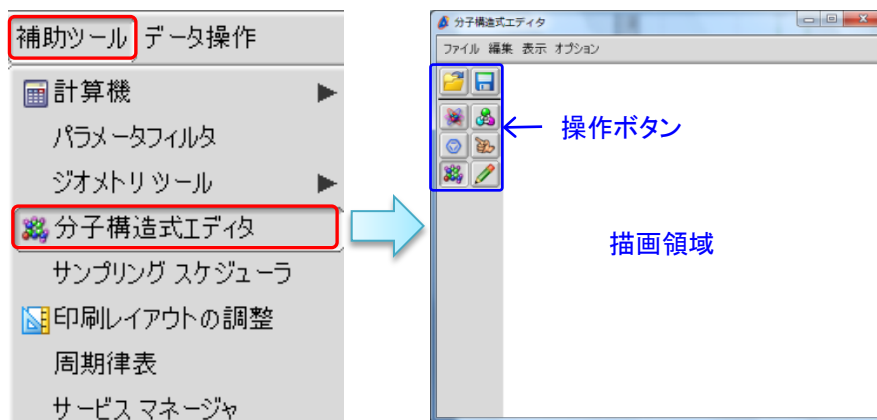


1H NMRスペクトル上に分子構造式を表示した例

以下、分子構造式エディタを用いた1-プロパノール分子構造式の作成方法を紹介します。


① [補助ツール]-[分子構造式エディタ]を選択する。

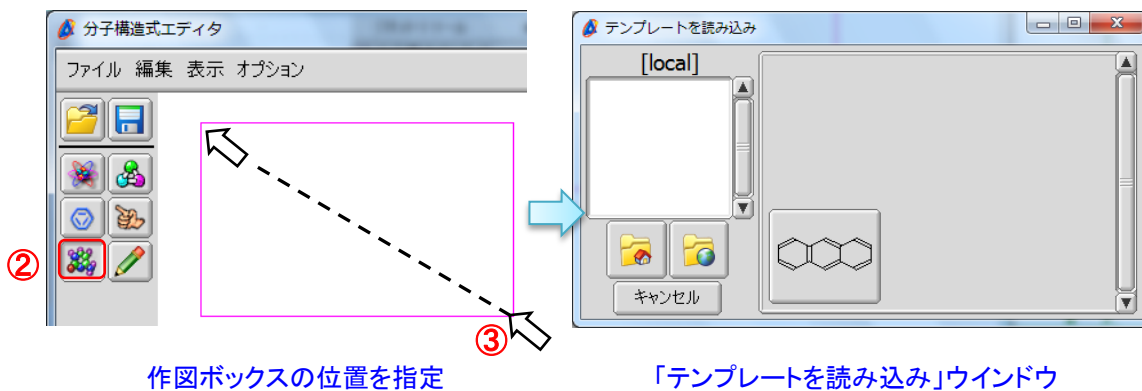
⇒「分子構造式エディタ」ウィンドウが開きます。




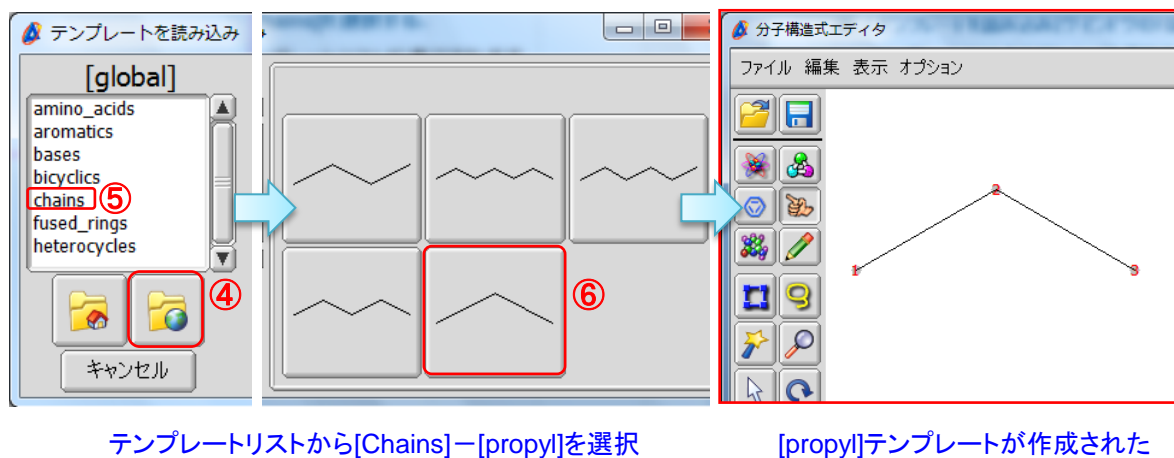
「分子構造式エディタ」ウィンドウ

★ [分子構造式エディタ]は、「データスレート」および「プロセッサ」ウィンドウでも使用できます。

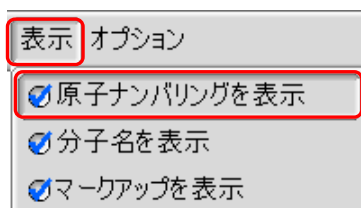
- ②  [テンプレート]ボタンを押す。
- ③ マウスをドラッグし、描画領域に作図ボックスの位置を指定する。
 ⇒ 作図ボックスが作成され、「テンプレートを読み込み」ウインドウが開きます。



- ④ 「テンプレートを読み込み」ウインドウの  [Globalディレクトリ]ボタンを押す。
- ⑤ 「global」リスト-[Chains]を選択し、⑥ 「Chains」リストから[propyl]を選択する。
 ⇒ [propyl]テンプレートが作成されます。

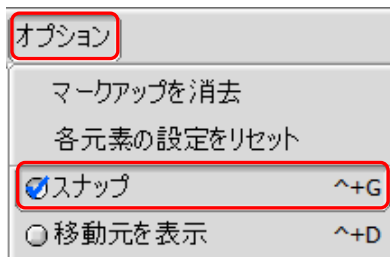


★ 「分子構造式エディタ」ウインドウの[表示]-[原子ナンバリングを表示]の選択で、原子ナンバリングを表示させることができます。



[表示]-[原子ナンバリングを表示]

⑦ 「分子構造式エディタ」ウインドウの[オプション]ー[スナップ]を選択する。

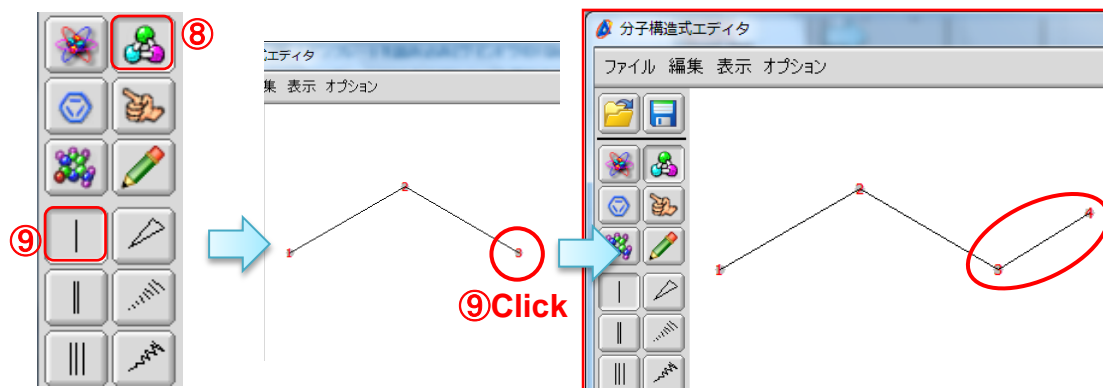


[オプション]ー[スナップ]

⑧  [ボンドを描く]ボタンを押す。

⑨  [単結合]ボタンを押し, [propyl]テンプレートの原子ナンバー3をクリックする。

⇒[propyl]テンプレートに単結合が追加されます。

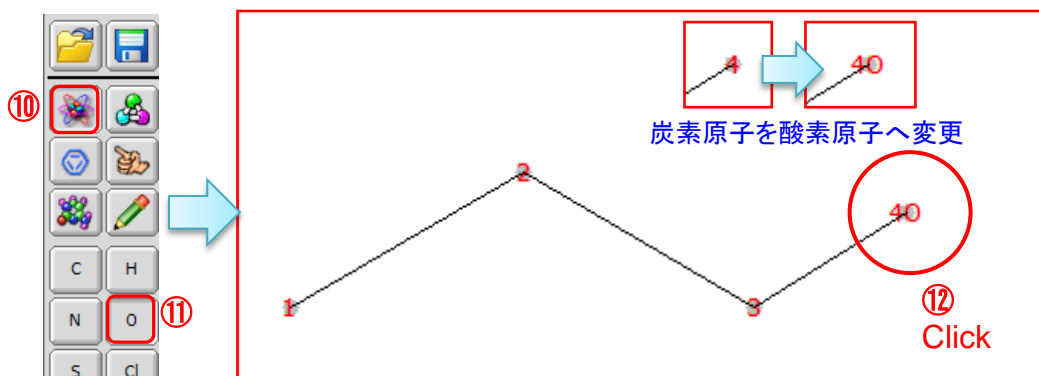


[propyl]テンプレートに単結合が追加された

⑩  [原子を配置]ボタンを押し, ⑪  [酸素原子]ボタンを押す。

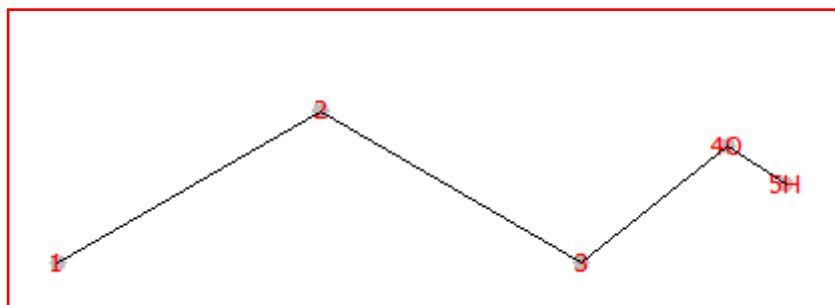
⑫ 原子ナンバー4をクリックする。

⇒原子ナンバー4(CH₃)の炭素原子が酸素原子に変更されます。



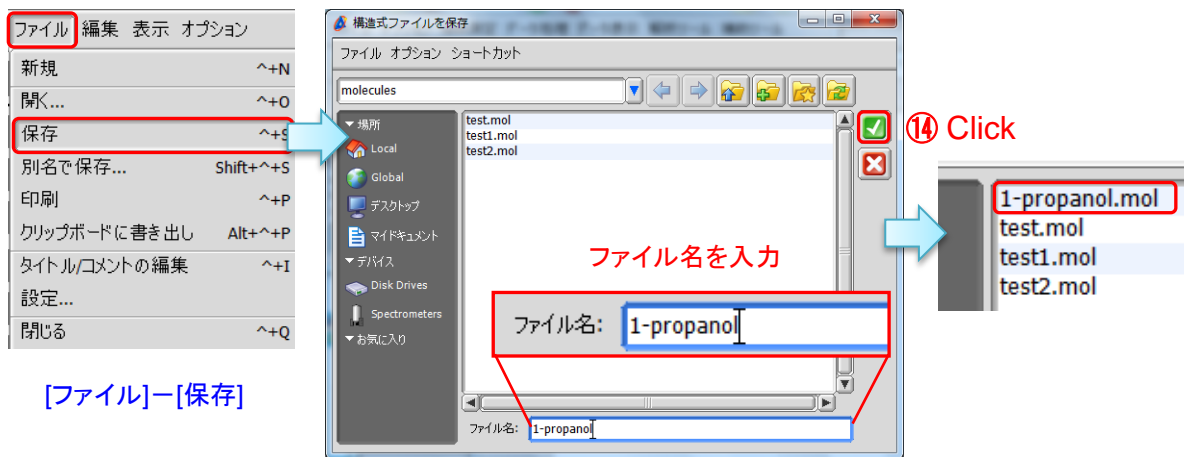


- ⑬ ⑧から⑫を参考に、原子ナンバー4に単結合を追加し、原子ナンバー5を水素原子に変更する。
⇒ 1-プロパノールのヒドロキシ基(-OH)が作成されます。



1-プロパノール C_3H_7OH の分子構造式

- ⑭ [ファイル]-[保存]を選択し、「構造式ファイルを保存」ウインドウの「ファイル名」入力ボックスにファイル名を入力、 [保存]ボタンを押す。
⇒「構造式ファイルを保存」ウインドウが開きます。
作成した分子構造式が(.mol)形式で保存されます。



[ファイル]-[保存]

「構造式ファイルを保存」ウインドウ