

JASON Tips

NMJT_0010

化学シフト予測

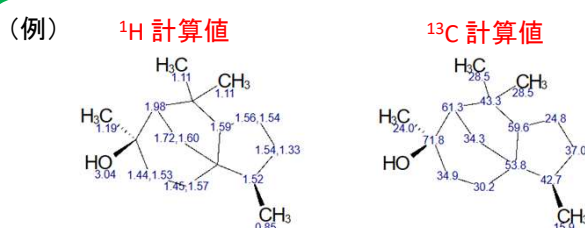
JASON

JEOL Analytical Software Network

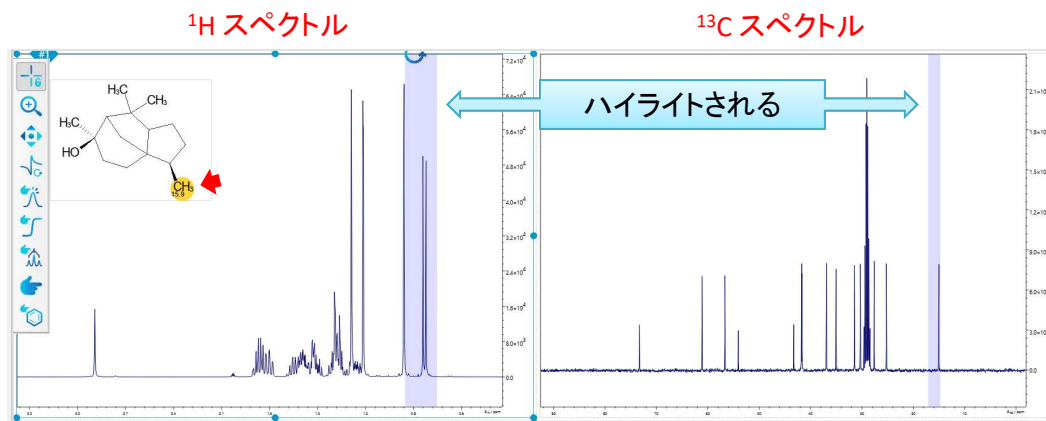


● 化学シフト計算値を表示する

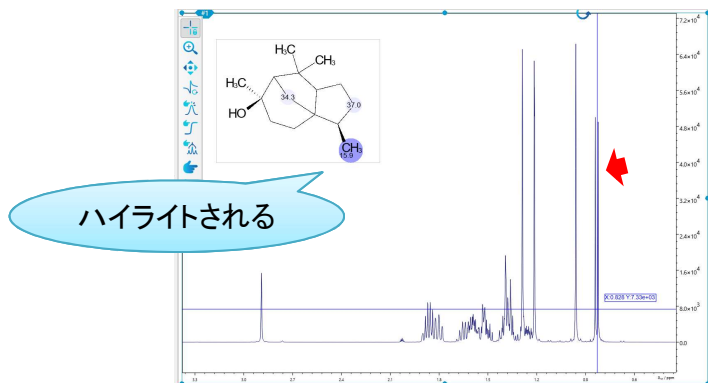
構造式ツールを開き、‘原子ラベルの表示’にチェックを入れます。 ^{13}C または ^1H の‘計算’を選択すると、それぞれの化学シフトの計算値が表示されます。



構造式の一部にカーソルをあてると、その構造から予測される化学シフト範囲がハイライトされます。



一方で、スペクトルの一部にカーソルをあてると、その化学シフトから予測される構造がハイライトされます。ハイライトには濃淡があり、色が濃い方がより計算値に近いことを示します。

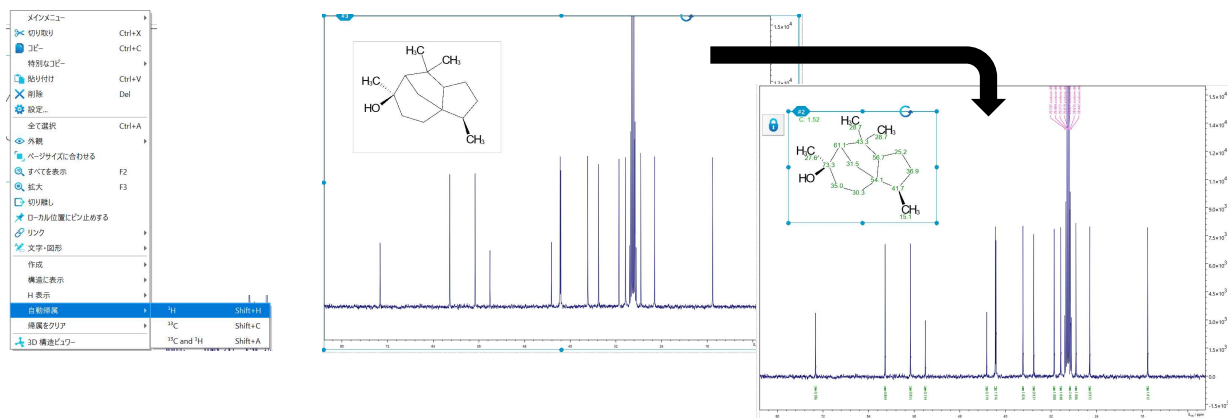




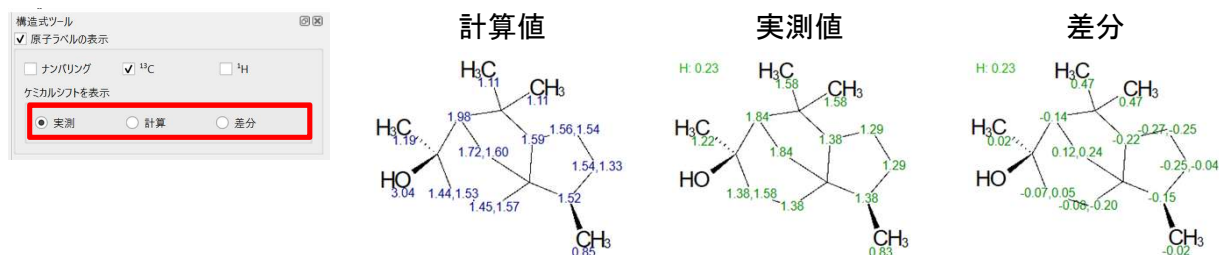
● ピークを帰属する

JASONでは構造式に測定したスペクトルのピークを自動で帰属することができます。
構造式を選択した状態で右クリックし、[自動帰属]を選択すると自動帰属が行われます。

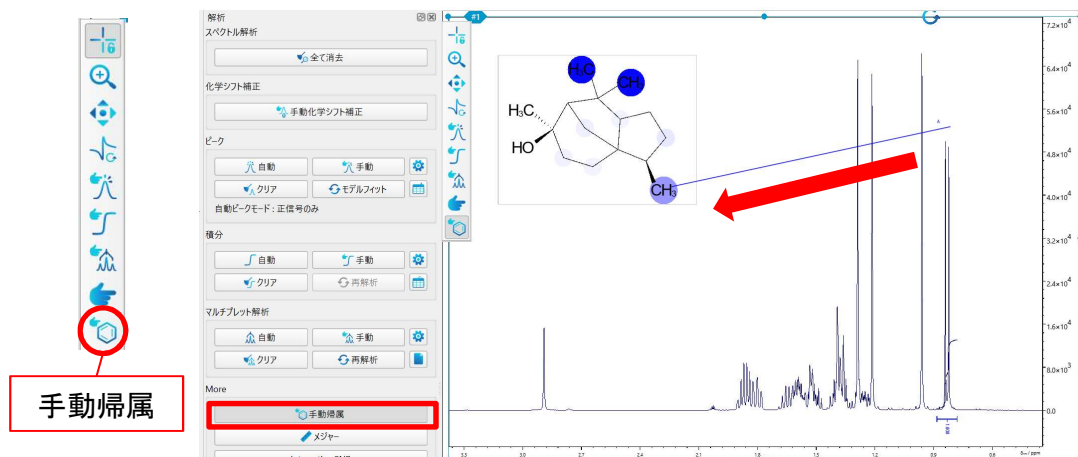
※自動帰属は化学シフト計算値に基づいて行われるため、実際の帰属と異なる可能性があります。



構造式ツールの[実測]を選択すると帰属された実測値が表示され、[差分]を選択すると実測値と計算値の差が表示されます。



また、帰属はピークを一つずつ手動で行うことも可能です。ツールバーもしくは解析タブページの[手動帰属]を選択し、対応しているピークラベルや積分値、マルチプレットバーから構造式にドラッグすると、ピークを構造式とリンクさせることができます。



※これらはJASON (JEOL Analytical Software Network) ver.5.1によるものです。