

知っているのと、ちょっと幸せになれる

# Delta Tips

NMDT\_0059



## 重なっているピークを分離する

NMR data processing software

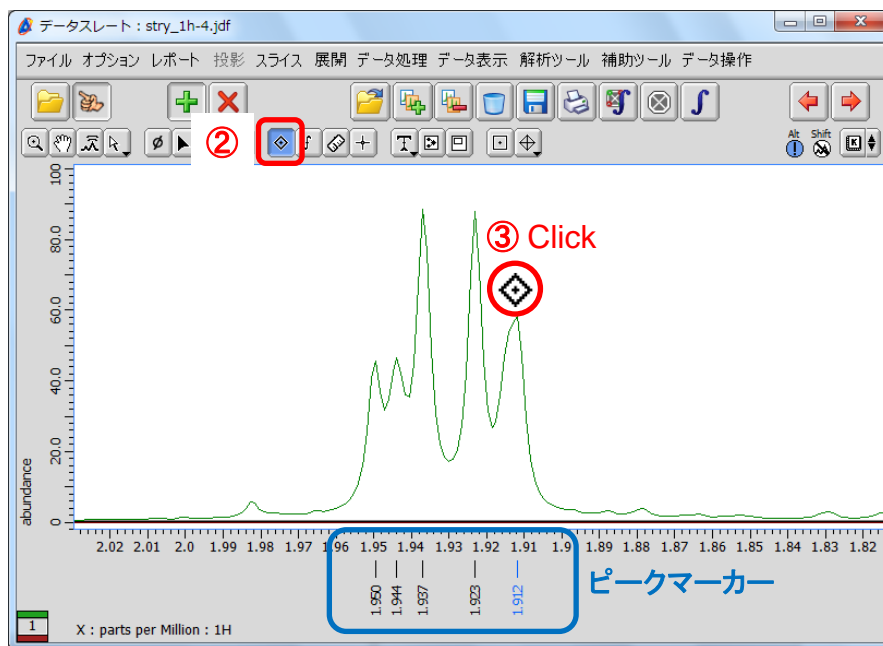
Delta  
NMR Software  
v5.0



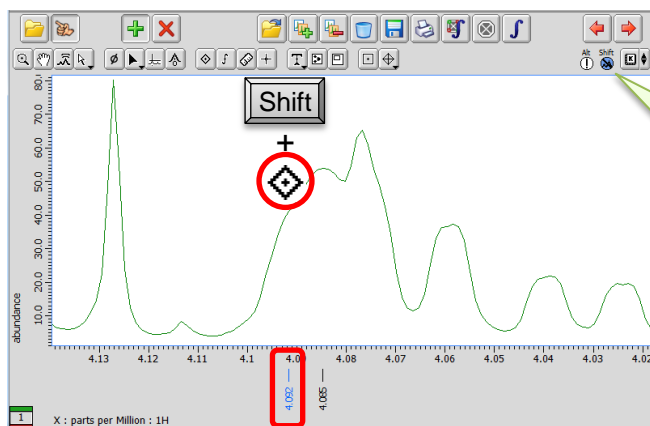
重複ピークをローレンツ形, ガウス形, およびそれらの混合波形で近似することができます。波形分離結果は「スプレッドシート」ウインドウのピーク情報で確認できます。

- ① 「1D プロセッサ」ウインドウ, もしくは「データスレート」ウインドウにデータを表示する。
- ② ポインターバーの  ボタンをクリックする。
- ③ マウスポインター  でピークをクリックする。

⇒ ピークマーカーが表示されます。



★ 大きなピークの肩にあるピークを選択する場合は **Shift** を押しながらかlickしてください。



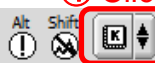
**Shift**  
[Shift]キー  
ピーク自動検索機能が  
OFFになります。



④ ポインターバーの  ボタンを長押しする.

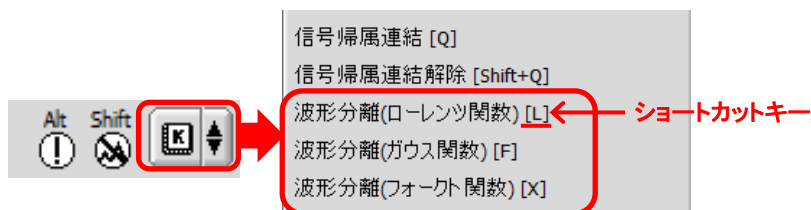


④ Click



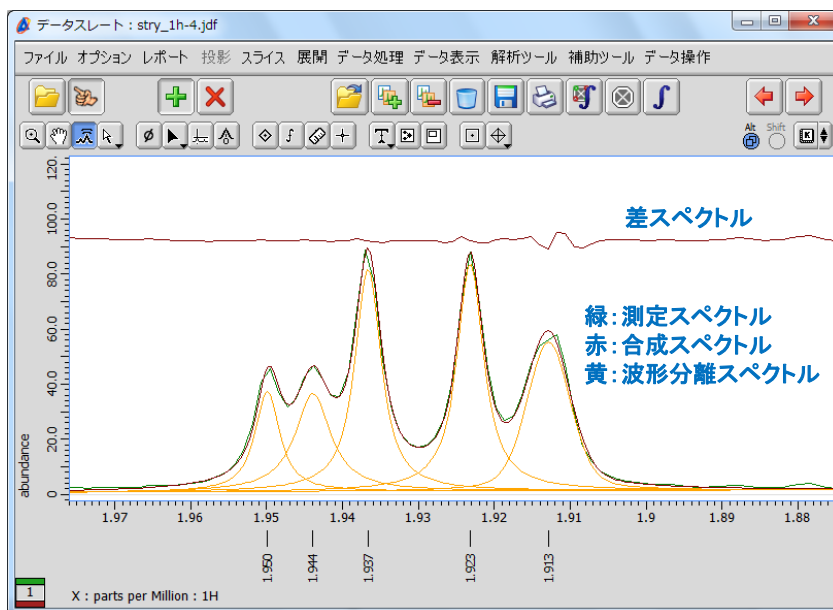
⑤  メニューから波形分離の関数を選択する.

⇒ 波形分離結果がデータ上に表示されます.



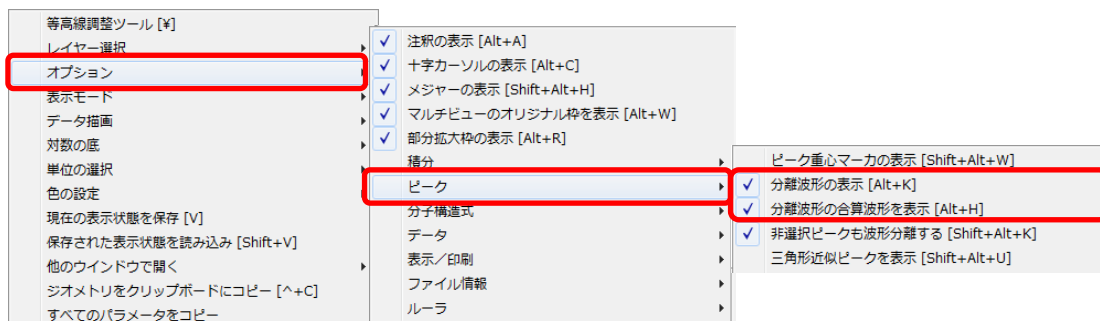
★ フォーク関数はローレンツ関数とガウス関数の混合関数です.

★ ショートカットキー **[L]** , **[F]** および **[X]** でも波形分離の関数を選択できます.



★ 波形分離スペクトルの表示について

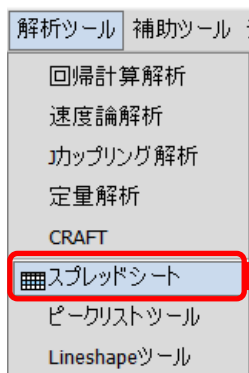
ポップアップメニューの[オプション]—[ピーク]—[分離波形の表示]および[分離波形の合算波形を表示]で選択できます.





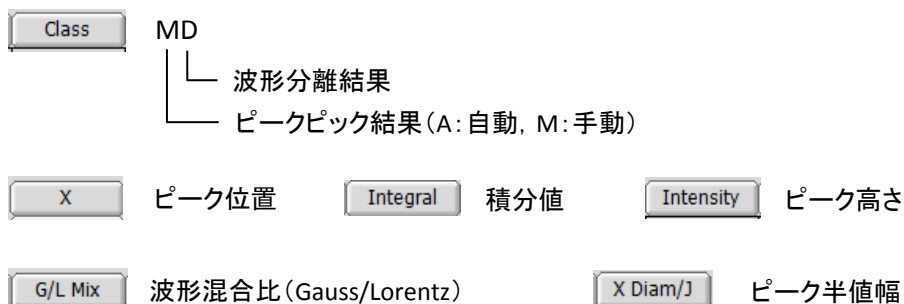
⑥ メニューバー[解析ツール]—[スプレッドシート]を選択する.

⇒「スプレッドシート」ウインドウに波形分離結果が表示されます.



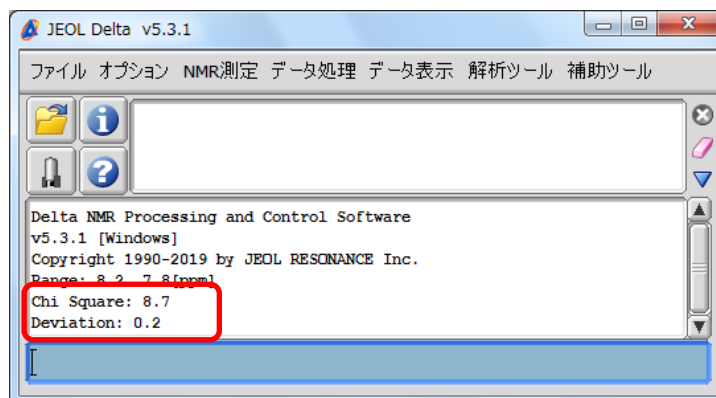
X [ppm]	X Fold	Class	Normal	Integral	Intensity	Slope [abn/ppm]	Offset	G/L Mix	Protons	Molarity [mmol/L]	X Diam/J [ppm]
1.950	0	MD	0.432	184.097	37.298	4.128	6.367m	6.425m	1	0.432	4.036m
1.944	0	MD	0.573	244.055	35.693	4.128	-18.494m	5.618u	1	0.573	5.578m
1.937	0	MD	0.974	414.487	81.626	4.128	-48.474m	99.445m	1	0.974	4.310m
1.923	0	MD	1.000	425.760	82.322	4.128	-0.105	62.179m	1	1.000	4.304m
1.913	0	MD	0.999	425.236	55.859	4.128	-0.147	0.497	1	0.999	7.596m

★「スプレッドシート」ウインドウについて



★ 波形分離結果の判定

「Delta Console」ウインドウにカイニ乗値と標準偏差の値が表示されます.



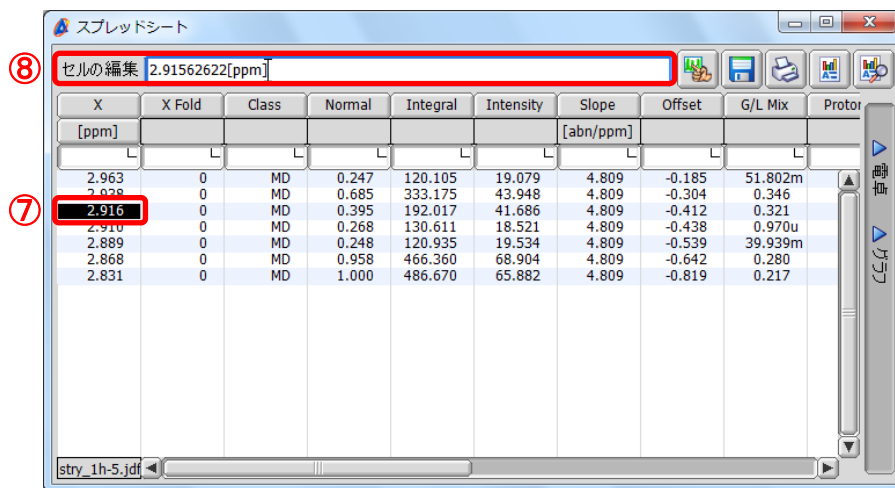


★ 再波形分離計算

ピーク位置, ピーク高さ, およびピーク半値幅の値を変更し再度波形分離計算をすることができます.

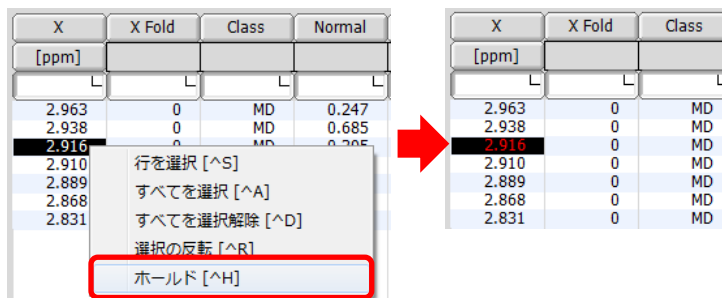
⑦ 「スプレッドシート」ウインドウで値を変更するセルをクリックする.

⑧ 「セルの編集」ボックスに値を入力する.



⑨ セルを右クリックし, ポップアップメニュー[ホールド]を選択する.

⇒ 選択されたセルの数値が赤色で表示されます.



⑩ メニューから波形分離の関数を選択する.

⇒再波形分離結果が, データ上および「スプレッドシート」ウインドウに表示されます.