

Delta Tips

NMDT_0064

Delta V5.3.1 積分範囲の移植機能

NMR data processing software

Delta

NMR Software
v5.0



Delta V5.3.1における「積分範囲の移植」機能について紹介します。

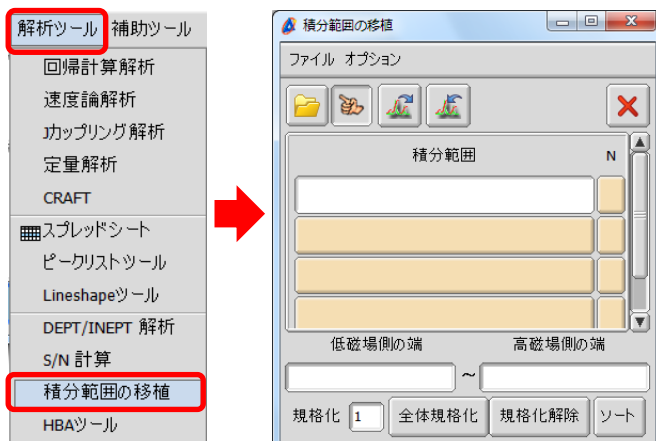
新しい「積分範囲の移植」機能では、積分ベースライン始点および終点の値を算出するのに用いるデータポイント数をウインドウ上で設定できます。

- ★ Delta V5.3.0以前における「積分範囲の移植」機能については、Delta Tips「複数のスペクトルの積分範囲を同じにする」(⇒NMDT_0037)を参照してください。


「積分範囲の移植」ウインドウは、スペクトルのデータ処理で設定された積分範囲を保存し、他のスペクトルデータへ保存された積分範囲を適用することができる機能です。使用方法は、V5.3.0以前における「積分範囲の移植」機能と同様です。

① メニューバー[解析ツール]—[積分範囲の移植]を選択する。

⇒ 「積分範囲の移植」ウインドウが開きます。

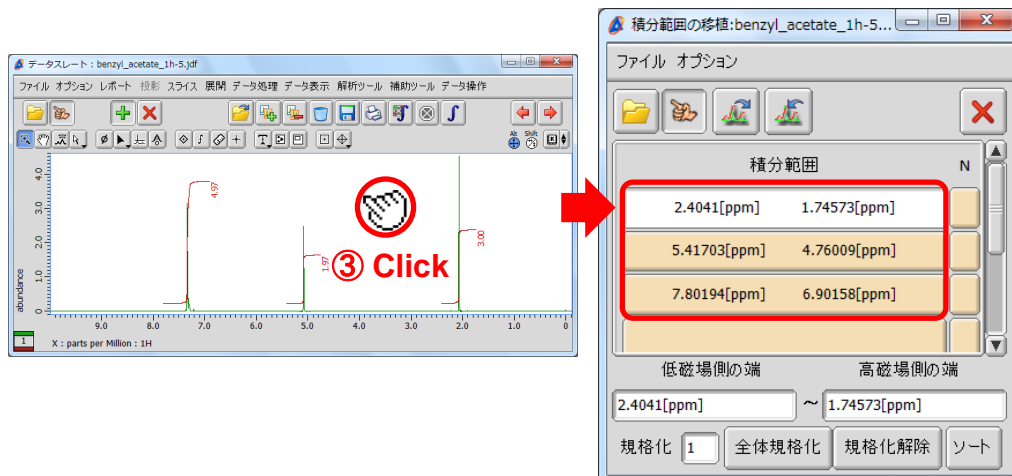


② 「積分範囲の移植」ウインドウの ボタンをクリックする。

⇒ マウスポインターが  に変わります。


③ 積分範囲をコピーするデータをマウスポインター でクリックする。

⇒ 積分範囲のデータが「積分範囲の移植」ウインドウに表示されます。



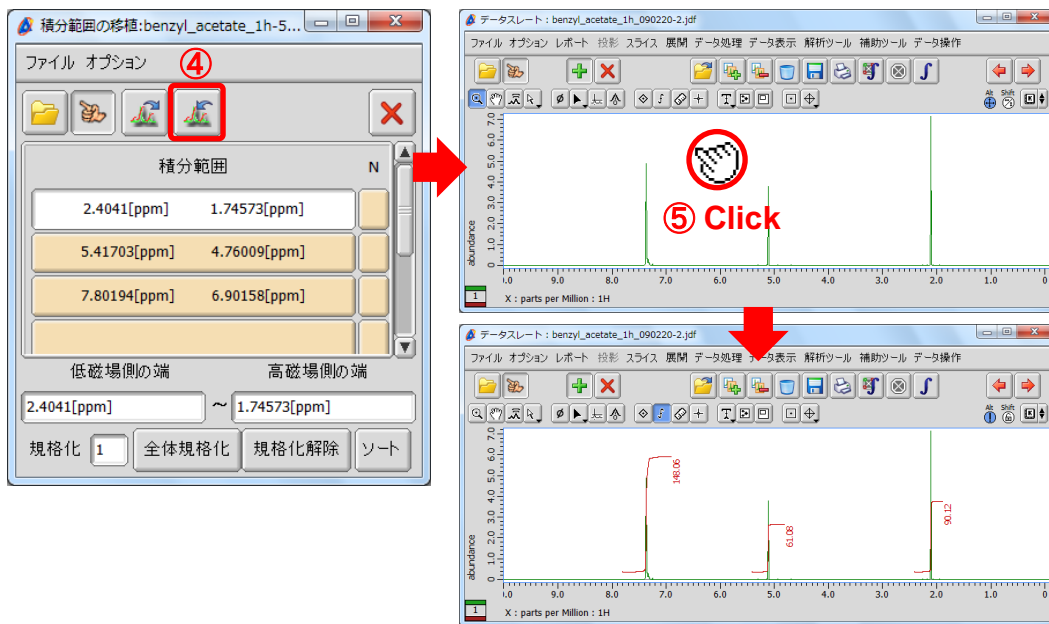


④ 「積分範囲の移植」ウインドウの  ボタンをクリックする。

⇒ マウスポインターが  に変わります。

⑤ 積分範囲を適用するデータをマウスポインター  でクリックする。

⇒ 選択されたデータに積分結果が表示されます。



積分値の規格化:

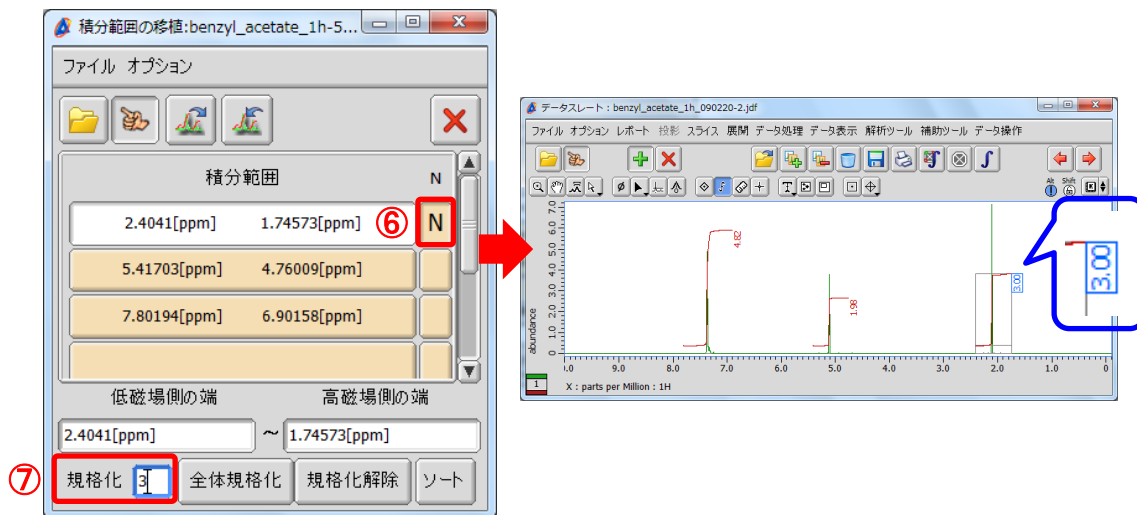
⑥ 「積分範囲の移植」ウインドウで、基準とするスペクトル範囲の「N」ボックスをクリックする。

⇒ 「N」ボックスに「N」が表示されます。

⑦ 「積分範囲の移植」ウインドウの「規格化」ボックスに規格化値を入力する。

⑧ 積分範囲を適用するデータを選択する(⇒手順④および⑤を参照)。

⇒ 規格化された積分結果が表示されます。

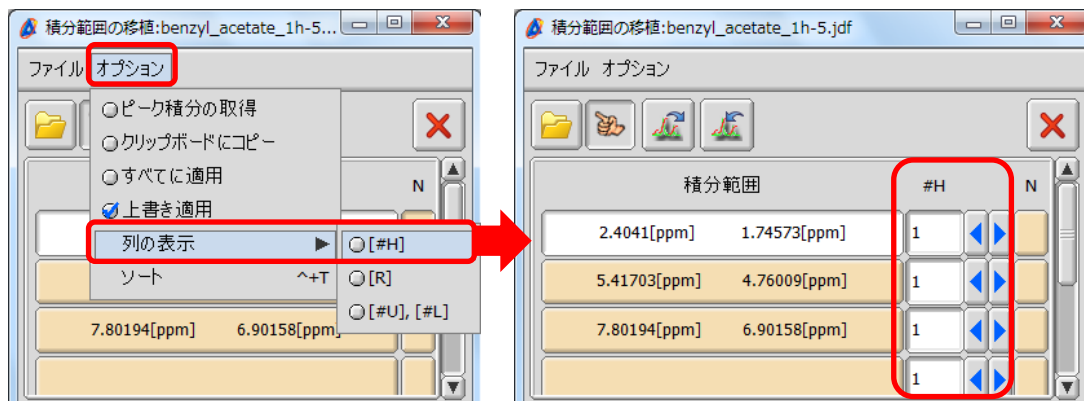




1H数の設定:

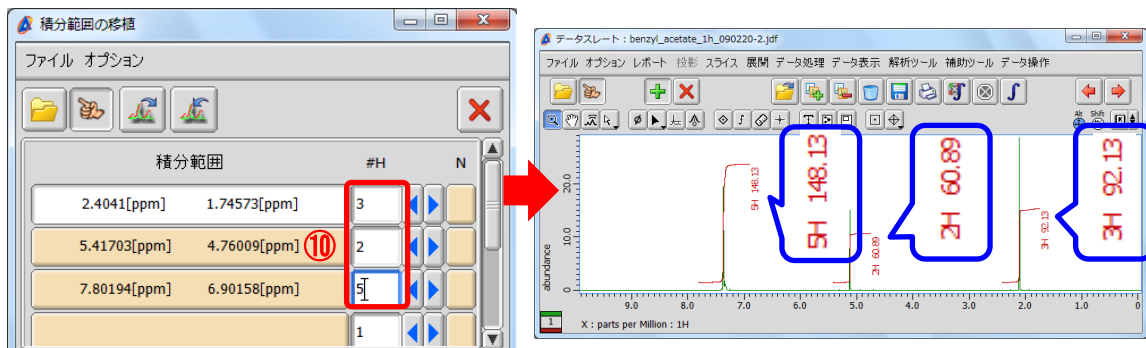
⑨ 「積分範囲の移植」ウインドウの[オプション]—[列の表示]—[#H]を選択する。

⇒ 1H数を設定する「#H」ボックスが表示されます。



⑩ 「#H」ボックスに1H数を入力し、適用するデータを選択する(⇒手順④および⑤を参照)。

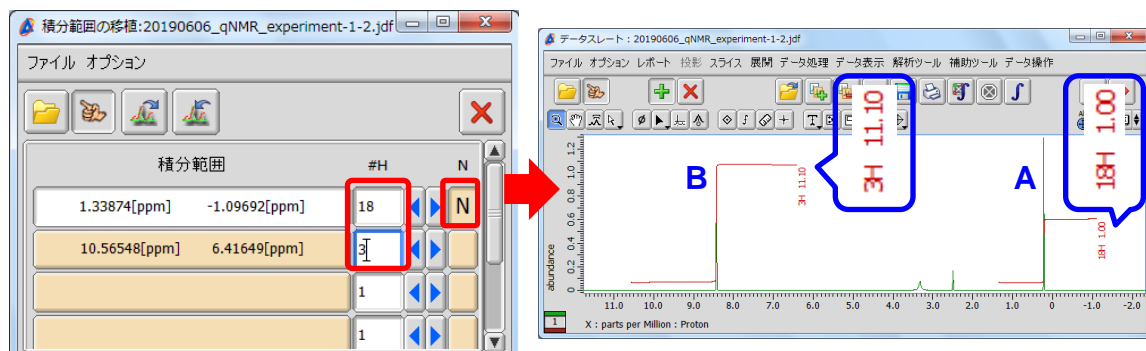
⇒ 積分結果に1H数が表示されます。



★ 規格化有りの場合

異なる物質が混在している試料の場合、1H数の設定と規格化を行うことで、混在している物質濃度の相対比がわかります。

以下の例は、物質Aおよび物質Bが含まれる試料の1Hスペクトルの積分比から、物質Aに対する物質Bの相対的な濃度比を示したものです。

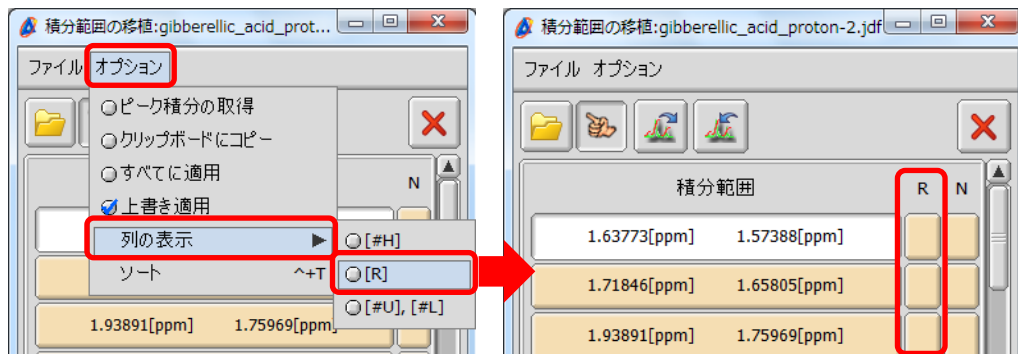




積分ベースラインにおけるスロープおよびオフセット0値の設定:

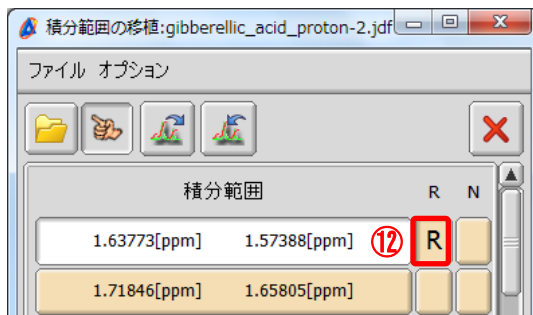
⑪ 「積分範囲の移植」ウィンドウの[オプション]—[列の表示]—[R]を選択する。

⇒ 「R」ボックスが表示されます。



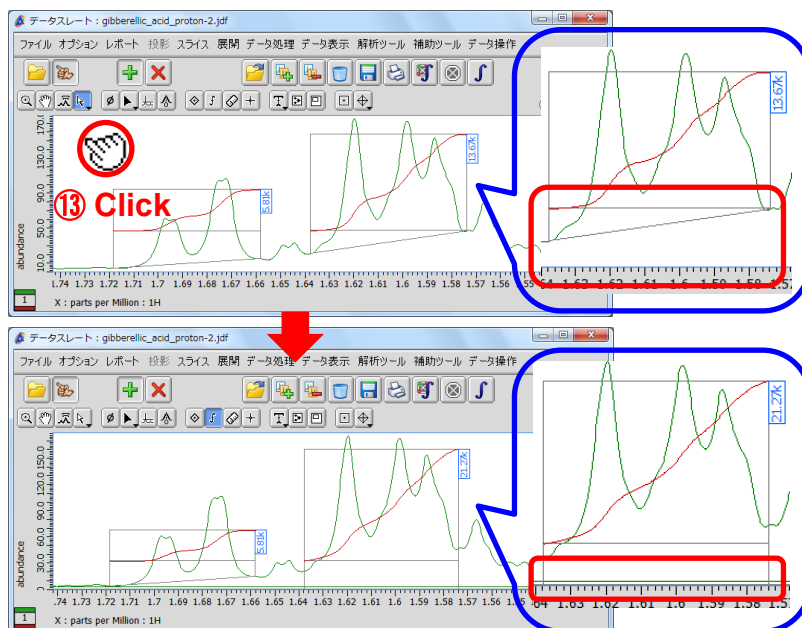
⑫ 「R」ボックスをクリックする。

⇒ 「R」ボックスに「R」が表示されます。



⑬ 積分範囲を適用するデータを選択する(⇒手順④および⑤を参照)。

⇒ 積分ベースラインのスロープおよびオフセット0値における積分値が表示されます。



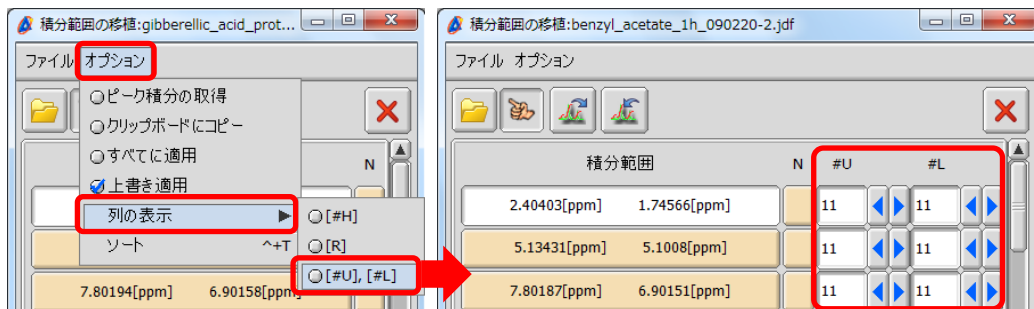
★ Deltaにおける積分ベースラインの詳細については、Delta Tips「積分範囲と積分ベースライン」(⇒NMDT_0060)を参照してください。



積分ベースライン始点および終点の平均値を算出するデータ範囲の設定：

⑭ 「積分範囲の移植」ウィンドウの[オプション]—[列の表示]—[#U],[#L]を選択する。

⇒ 「#U」および「#L」ボックスが表示されます。

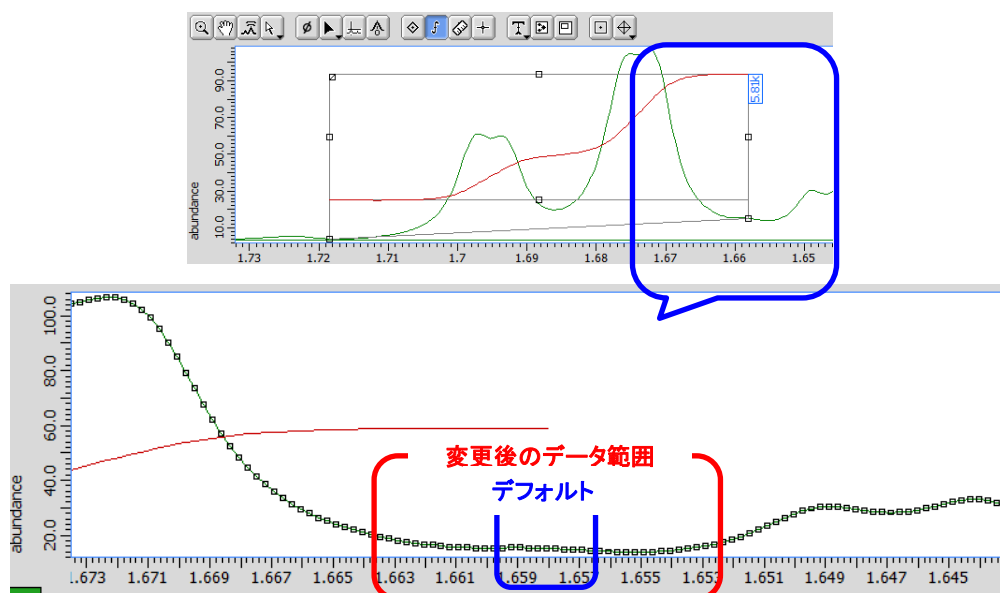


⑮ 「#U」および「#L」ボックスに、ベースライン始点および終点の値を算出するのに用いるデータポイント数を入力する。「#U」ボックスには始点(低磁場側)、「#L」ボックスには終点(高磁場側)のデータポイント数を入力する。



⑯ 積分範囲を適用するデータを選択する(⇒手順④および⑤を参照)。

⇒ 積分結果が表示されます。



★ 積分ベースライン始点および終点の平均値を算出するデータ範囲詳細については、Delta Tips「積分範囲と積分ベースライン」(⇒NMDT_0060)を参照してください。