

知っているのと、ちょっと幸せになれる

Delta Tips

NMDT_0065

二次元NMRデータのピークピック

NMR data processing software

Delta
NMR Software
v5.0



二次元NMRデータにおけるピークピック方法およびスレッシュホールドレベルの設定方法について説明します。

自動ピークピック

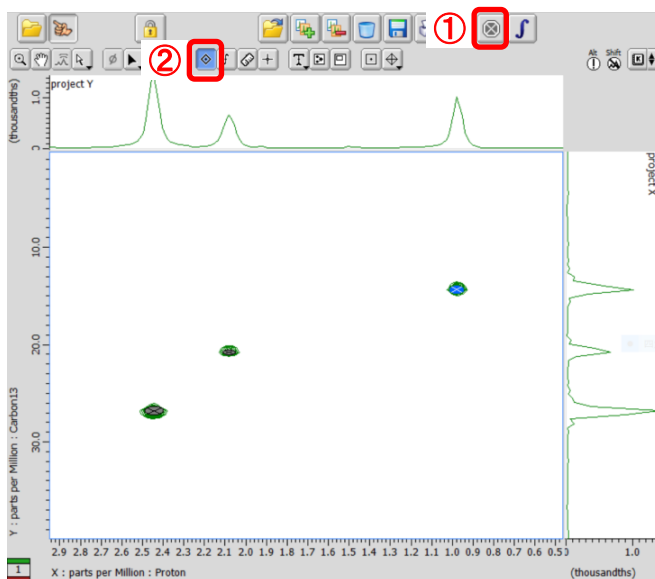
- ① ツールバー  ボタンをクリックする。

⇒ ピークスレッシュホールドレベルよりも強度の大きなピークが自動でピークピックされます。

手動ピークピック

- ② ポインターバー  ボタンをクリックし、マウスポインター  で二次元データをクリックする。

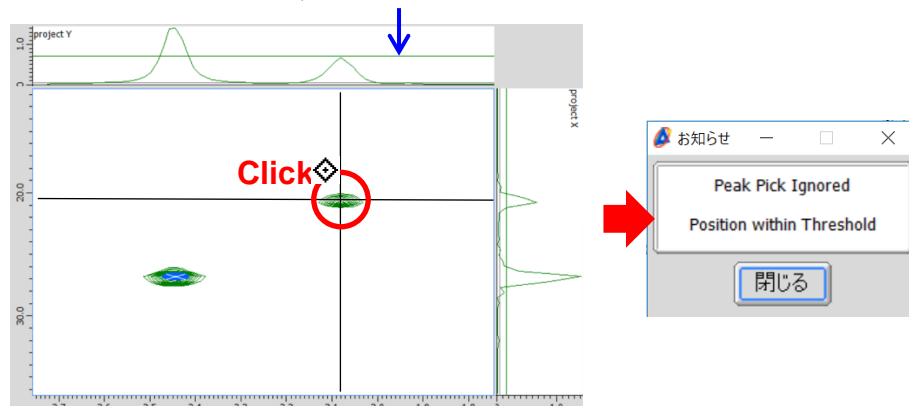
⇒ ピークスレッシュホールドレベルよりも強度の大きなピークを選択できます。



ピークピックされた二次元NMRデータ

- ★ スレッシュホールドレベル以下のピークが選択された場合、「お知らせ」ダイアログボックスが表示されます。

スレッシュホールドレベルマーカー





スレッシュホールドレベルは手動で設定することができます。
以下、スレッシュホールドレベル設定方法について説明します。

「等高線調整ツール」を使用する方法

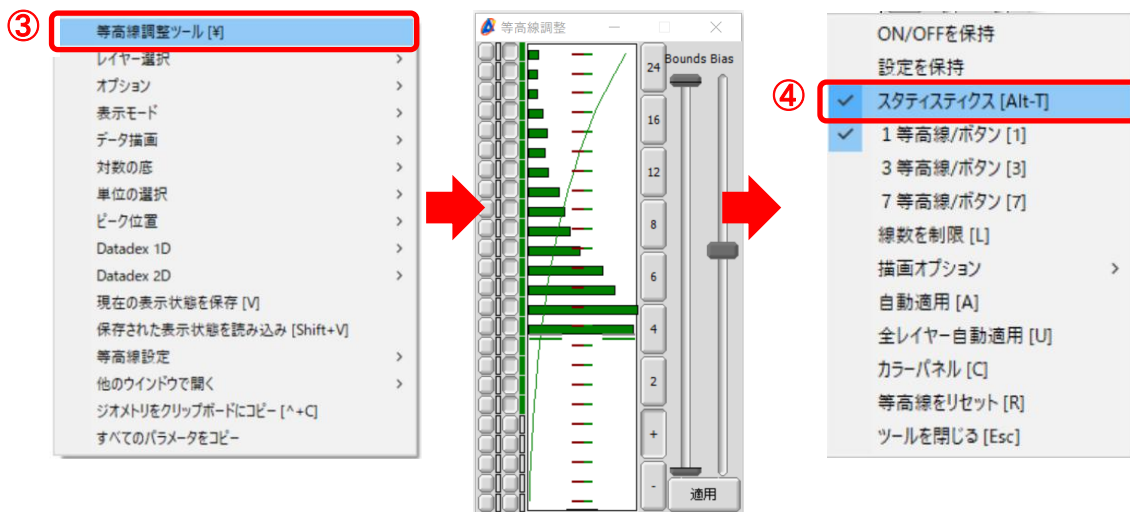
③ 二次元データ上でのポップアップメニュー[等高線調整ツール]を選択する。

⇒ 「等高線調整ツール」ウインドウが開きます。

④ 「等高線調整ツール」ウインドウ上でのポップアップメニュー[スタティスティクス]を選択する。

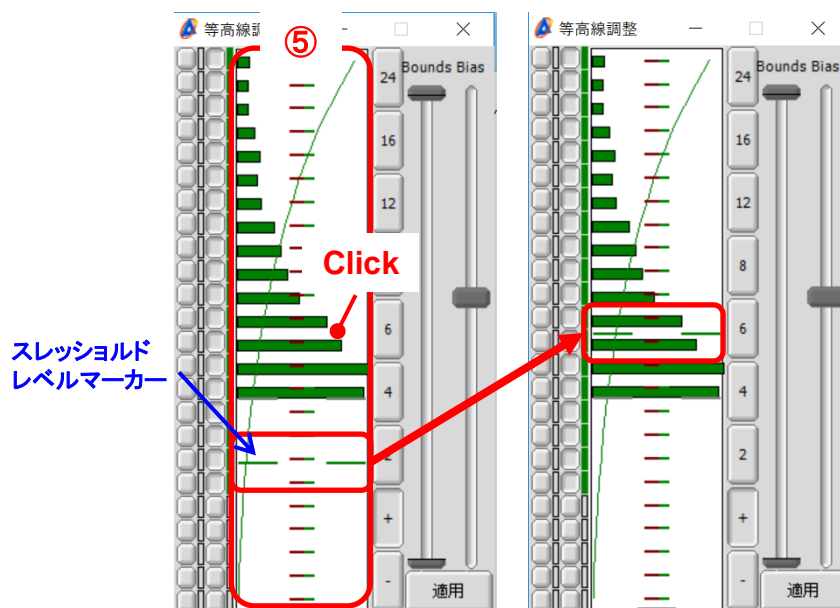
⇒ 「等高線調整ツール」ウインドウでスレッシュホールドレベルを設定できるようになります。

★ ポップアップメニューは、各々のウインドウ上でのマウス右ボタン長押しで表示できます。



⑤ 「等高線調整ツール」ウインドウの下図⑤領域をクリックする。

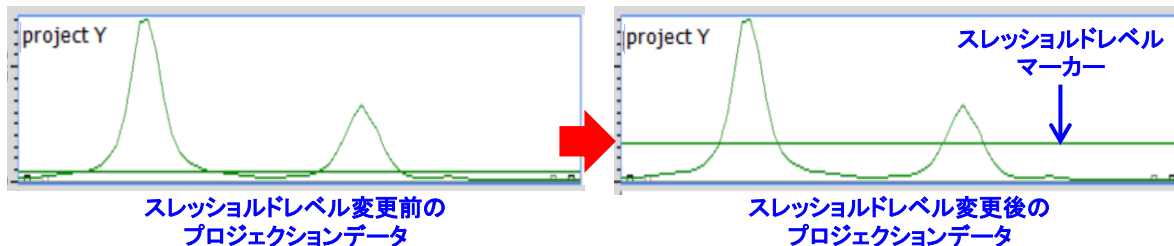
⇒ クリック位置にスレッシュホールドレベルが設定されます。





⑥ 「等高線調整ツール」ウインドウの ボタンをクリックする。

⇒ スレッシュホルドレベルの設定がデータに適用されます。



★ 「等高線調整ツール」ウインドウのポップアップメニュー[自動適用]を選択すると、

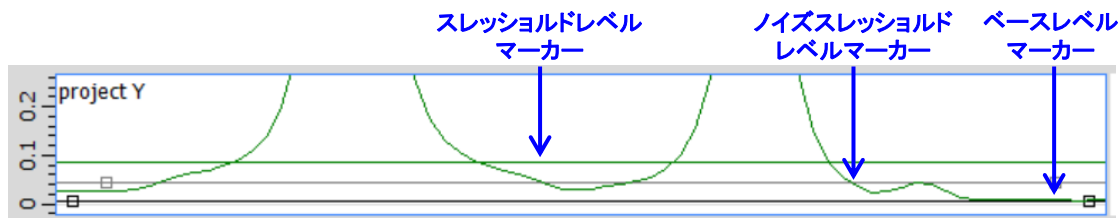
ボタンが に変わり、設定変更が自動で適用されます。

「プロジェクションデータ」を使用する方法

⑦ 「2Dビューワ」ウインドウのプロジェクションデータをクリックし、

ポインターバー ボタンをクリックする。

⇒ プロジェクションデータにスレッシュホルドレベルマーカーが表示されます。

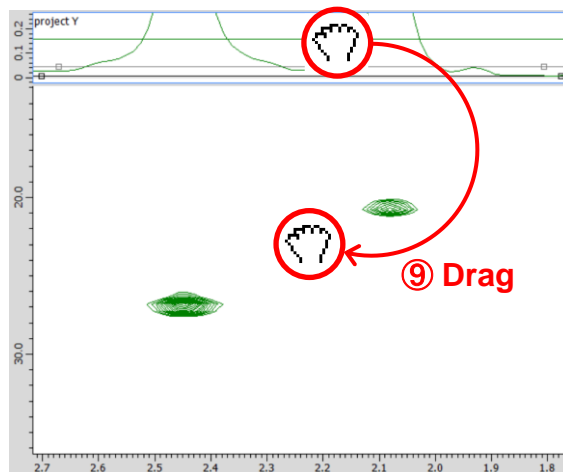


⑧ スレッシュホルドレベルマーカーをドラッグする。

⇒ マウスポインターが に変わります。

⑨ ボタンが選択された状態 でプロジェクションデータを右クリックし、二次元データへドラッグする。

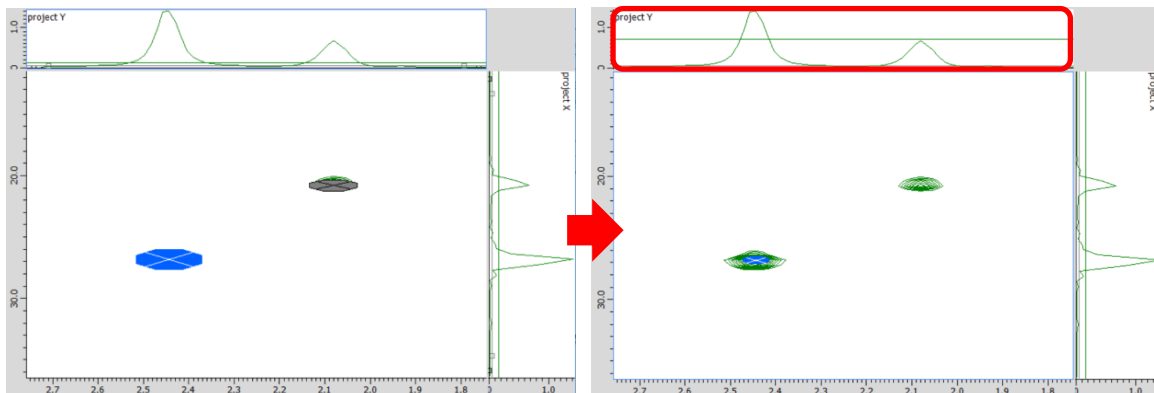
⇒ 設定されたスレッシュホルドレベルが二次元データへ適用されます。





⑩ 操作①および②を参照し、ピークピックする。

⇒ 設定されたスレッシュホールドレベルよりも強度の大きなピークがピークピックされます。



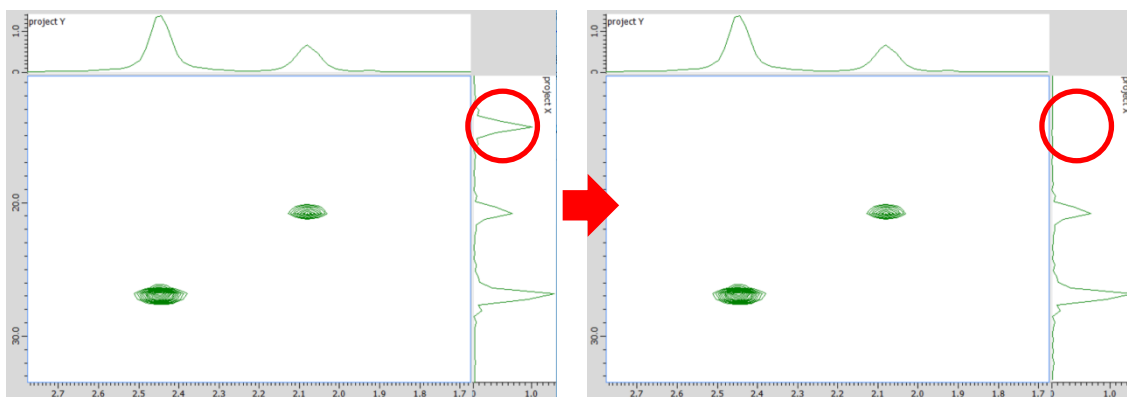
スレッシュホールドレベル変更前の
ピークピックデータ

スレッシュホールドレベル変更後の
ピークピックデータ

★ デフォルト「2Dビュー」ウインドウに表示されるプロジェクションデータは、二次元データ全域の投影スペクトルです。

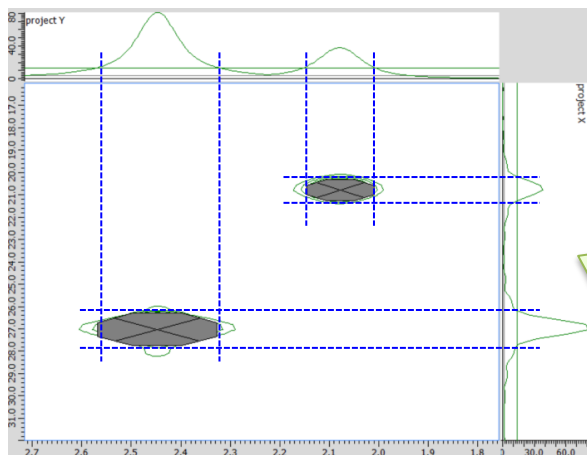
表示された領域におけるプロジェクションデータは以下の方法で表示できます。

メニューバー[投影]—[表示された領域を投影]を選択してください。



全域スペクトルが投影された
プロジェクションデータ

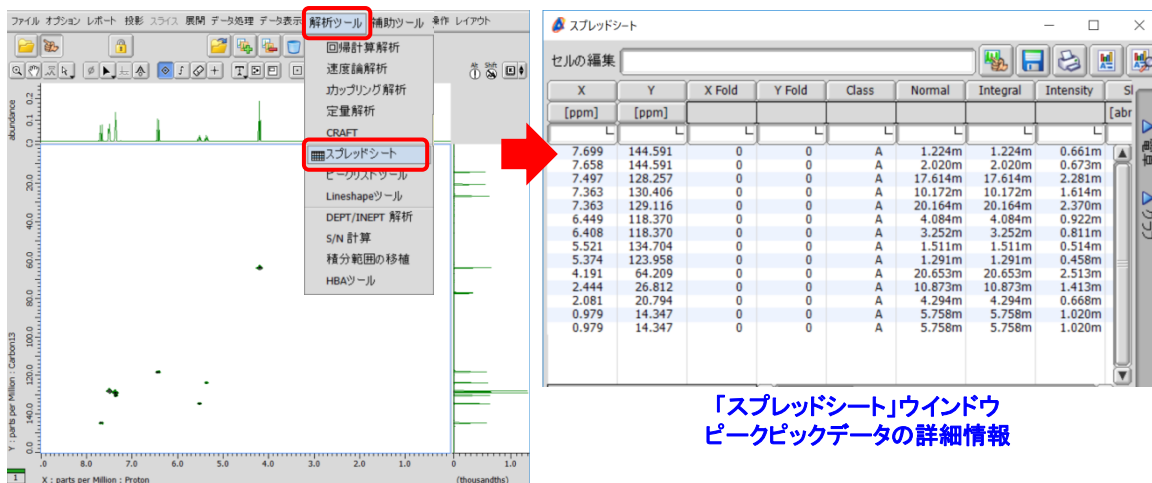
表示された領域の
プロジェクションデータ



「二次元データピークピックマーカーの
大きさについて」
設定されたスレッシュホールドと
スペクトルピーク接点から作成されます。



- ★ ピークピックデータの詳細は「スプレッドシート」ウインドウで参照できます。
「スプレッドシート」ウインドウは以下の方法で表示できます。
メニューバー[解析ツール]–[スプレッドシート]を選択してください。



- ★ 「スプレッドシート」ウインドウについては、Delta Tips 「スプレッドシート編(1)」(⇒NMDT_0008) および「重なっているピークを分離する」(⇒NMDT_0059)を参照してください。