

目 次

第 1 章	フーリエ変換NMRのデータ処理	1
1-1	1次元NMRデータ処理の流れ	1
1-2	2次元NMRデータ処理の流れ	3
第 2 章	NMRのデータ処理操作の概要	5
2-1	解析できるファイルについて	5
2-2	1次元NMRのデータ処理の概要	5
2-2-1	アプリケーションの開始	6
2-2-2	データの読み込み	7
2-2-3	スペクトルデータの保存	8
2-2-4	スペクトルの印刷	9
2-3	2次元NMRのデータ処理の概要	9
2-3-1	アプリケーションの開始	10
2-3-2	データの読み込み	11
2-3-3	1Dデータの貼り付け	13
2-3-4	スペクトルデータの保存	14
2-3-5	スペクトルの印刷	14
第 3 章	1次元NMRデータ処理の操作	16
3-1	基本ツールバー	16
3-2	基本メニュー	18
3-2-1	ファイルメニュー	18
3-2-2	編集メニュー	19
3-2-3	表示/環境メニュー	20
3-2-4	Array(T1/T2)データメニュー	22
3-2-5	ピーク(波形)分離メニュー	23
3-2-6	その他メニュー	23
3-3	ファイル	24
3-3-1	読込	24
3-3-2	読込(T1/T2個別ファイル)	25
3-3-3	ユーザー設定のファイルタイプ	26

3-3-4	解析できるファイルについて	26
3-3-5	名前を付けて保存	26
	(1) Ver. 4形式(*. rml/*.*. rmo1 *. rmo)	26
	(2) Ver. 3形式(*. rml)	27
	(3) Alice形式(*. als)	27
	(4) JCAMP(拡張)形式(*. jdx)	27
	(5) JCAMP(縮小)形式(*. dx)	27
	(6) ASCII形式(*. txt, *. dat, *. asc)	27
3-3-6	重ね書きを保存	28
3-3-7	積分曲線を保存(ASCII形式)	28
3-3-8	印刷(スペクトル)・編集	28
3-3-9	印刷(ピークリスト)	28
3-3-10	ピークリストをファイルに保存	29
3-3-11	積分リストの印刷	29
3-3-12	積分リストをファイルに保存	29
3-3-13	印刷(Arrayデータの積分リスト)	29
3-3-14	履 歴	30
3-3-15	履歴の削除	30
3-3-16	終 了	30
3-4	編 集	31
3-4-1	位相補正	31
3-4-2	Referenceの設定	32
3-4-3	ベースライン補正	34
3-4-4	ピーク検出	35
3-4-5	積 分	37
3-4-6	拡大図の添付	40
3-4-7	区間色の設定	43
3-4-8	重ね書きスペクトルの設定・編集	44
3-4-9	重ね書きスペクトルの個別編集	47
3-4-10	差スペクトル	47
3-4-11	DEPT微調整	48
3-4-12	その他の変更	48
	(1) スペクトルの左右反転	48
	(2) パラメータの修正	48

3-4-13	データの履歴	48
3-4-14	取り消し(UnDo)	49
3-5	表示/環境	50
3-5-1	表示範囲の変更	50
3-5-2	編集用表示 Font・色・線の変更	50
3-5-3	印刷用表示 Font・色・線の変更	53
3-5-4	グリッドの設定	56
3-5-5	動作環境の設定	57
3-5-6	すべてを表示/表示するもの	60
3-5-7	ピーク位置の表示場所	60
3-5-8	ピーク間距離/ピークデータ	60
3-5-9	構造式・イメージ等の表示	61
3-5-10	Powerスペクトル表示	61
3-6	Array(T1/T2)データの解析	62
3-6-1	Arrayデータの読み込み	62
3-6-2	Arrayデータ表示	62
3-6-3	Arrayデータ表示のプロパティ	63
3-6-4	Arrayパラメータの変更	63
3-6-5	Arrayデータの選択範囲の積分値の印刷	63
3-6-6	T1/T2の計算	63
3-7	ピークの波形分離	67
3-7-1	ピークの波形分離	67
3-7-2	ツールバー	67
3-7-3	メニュー	69
3-7-4	その他の注意点	70
3-7-5	印刷	70
3-8	その他	71
3-8-1	パラメータファイルの編集	71
3-8-2	オペレータ名の追加・削除	71
3-8-3	Reference用装置データの整理	72
3-8-4	文字の入力	72
3-8-5	バージョン情報	73
3-8-6	ユーザー情報	73
3-8-7	その他	73

3-9	フーリエ変換	74
3-9-1	ファイル	74
3-9-2	Linear Prediction	74
3-9-3	窓関数ツールバー	75
3-9-4	位相補正ツールバー	77
3-9-5	基本ツールバー	77
3-10	印刷・編集 (スペクトル : 1D/2D共通)	78
3-10-1	印刷実行	78
3-10-2	印刷のプロパティ	79
3-10-3	Printer設定	79
3-10-4	印刷プレビューでのメニュー	79
3-10-5	プレビューの編集	80
第4章	2次元NMRのデータ処理の操作	87
4-1	基本ツールバー	87
4-2	基本メニュー	89
4-2-1	ファイル	89
4-2-2	編集	90
4-2-3	表示/環境	91
4-2-4	その他	92
4-3	ファイル	93
4-3-1	読み込み	93
4-3-2	ユーザー設定のファイルタイプ(1D, 2D)	95
4-3-3	解析できるファイルについて	95
4-3-4	1Dデータの読み込み	95
4-3-5	1Dデータの保存	96
4-3-6	名前を付けて保存	96
	(1) Ver. 4形式(*.rm2/*.*.rmo2 *.rmo)	96
	(2) Ver. 3形式(*.rm2)	97
	(3) Alice形式(*.als)	97
	(4) ASCII形式(*.txt, *.dat, *.asc)	97
4-3-7	ピークリストをファイルに保存	97
4-3-8	印刷(スペクトル)・編集	97
4-3-9	ピークリストの印刷	97

4-3-10	履 歴	98
4-3-11	履歴の削除	98
4-3-12	終 了	98
4-4	編 集	99
4-4-1	F2位相補正 (Phase)	99
4-4-2	F1位相補正 (Phase)	100
4-4-3	2D Reference	100
4-4-4	1D Reference (F2) 設定	101
4-4-5	1D Reference (F1) 設定	102
4-4-6	F1方向ベースライン補正	102
4-4-7	F2方向ベースライン補正	102
4-4-8	対称処理	103
4-4-9	ピーク線引き	105
	(1) 通常の線引き	105
	(2) INADEQUATEの線引き	106
4-4-10	1Dスペクトルの編集	106
4-4-11	スペクトルの反転	107
4-4-12	F1/F2の入れ替え	107
4-4-13	パラメータの修正	107
4-4-14	データの履歴	108
4-4-15	INADEQUATEモード変更	108
4-4-16	取り消し (Undo)	109
4-5	表 示	110
4-5-1	表示の設定 (等高線等)	110
4-5-2	表示範囲の変更	110
4-5-3	編集用表示Font等の変更	111
4-5-4	印刷用表示Font・線・色の変更	112
4-5-5	動作環境の変更 (表示の初期設定等)	115
4-5-6	グリッドの設定	118
4-5-7	F1 (1D) スペクトルの表示位置	118
4-5-8	構造式・イメージ等の表示	118
4-5-9	分割表示の設定/表示	118
4-5-10	1Dデータの表示選択	119

4-6 その他	120
4-6-1 パラメータファイルの編集	120
4-6-2 オペレータ名の編集	120
4-6-3 バージョン情報	120
4-6-4 ユーザー情報	120
4-6-5 解析するファイルに関する注意／動作環境の設定	120
4-7 フーリエ変換	121
4-7-1 解析法の設定	121
4-7-2 First Point補正の設定, Bruker補正	121
4-7-3 フーリエ変換	122
4-7-4 Linear Prediction	125
第5章 スペクトルを使う	126
5-1 プレゼンテーション(PowerPointやWordなど)に使う	126
付録 付属CDの使い方	
付-1 付属CDのインストール	128
付-2 Windows Vista, 7, 8, 8.1, 10でのインストールについて	131
付-3 FT-NMR解析プログラム解析可能ファイル一覧	132
付-4 印刷サンプル	134