


4-4 編集

2Dデータの位相補正やベースライン補正などの編集を行います。位相補正はPhase Sensitive (位相検出)データに対してのみ出来ます。

4-4-1 F2位相補正 (Phase)

0次の補正をするピークを基本ツールバー中の  ボタンをクリックして選び、そのスライスデータをF2軸の1Dデータ領域に表示させます。(図4-24)

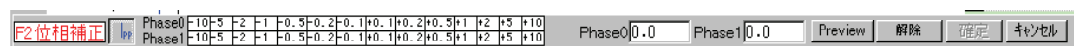




図4-23 F2 位相補正ツールバー

 をクリックして、F2軸の1Dデータの該当ピークにマウスをクリックしてピボット点(pp)を設定します。

Phase-0の数値を、「Phase-0スライダー」を使うか、Phase-0の数値をクリックして調整します。

次に、基本ツールバー中の  ボタンをクリックして上記pp点より離れたピークのスライスを表示させます。

全体のピークの位相が合うようにPhase-1を変更します。

「Preview」ボタンをクリックすると、位相補正された2Dスペクトルが表示されます。

「解除」ボタンをクリックすると最初の2Dスペクトルに戻ります。

修正を確定するには「確定」ボタンをクリックします。必ず「Preview」を行ってから「確定」してください。

補正を取りやめるときは「キャンセル」をクリックします。

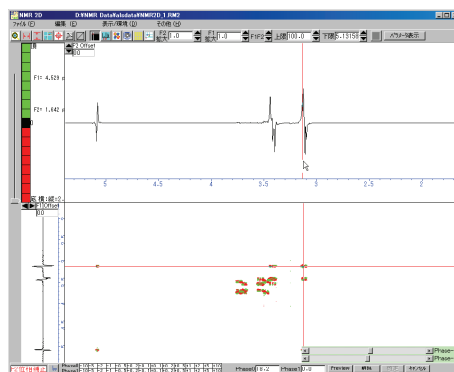


図4-24 F2 位相補正 ppの設定、phase-0の補正

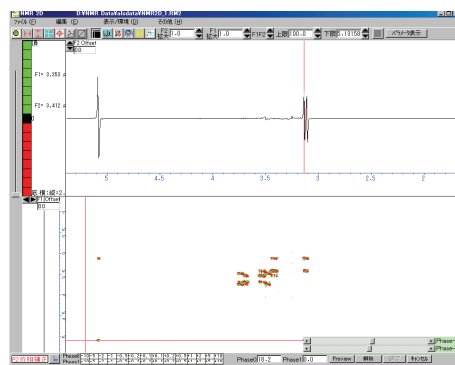


図4-25 F2 位相補正 phase-1の補正

4-4-2 F1位相補正 (Phase)

F1軸の位相補正を行います。F2軸の位相補正と操作は、ほぼ同じです。(図4-26)

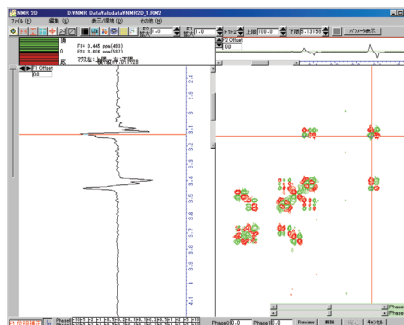


図4-26 F1 位相補正

4-4-3 2D Reference


2DスペクトルのReferenceを設定します。これは、1Dスペクトルとの位置的対応を修正することに相当します。





図4-27 2D Reference 設定ツールバー



「Ref値 F1」：F1軸方向の基準点のケミカルシフト値を入力します。

「Ref値 F2」：F2軸方向の基準点のケミカルシフト値を入力します。

 カーソルの近くのピークトップにRefを設定します。

 カーソルの位置にRefを設定します。

「F2軸の微調整」：矢印, の方向にF2軸の1Dスペクトルを移動します。

「F1軸の微調整」：矢印, の方向にF1軸の1Dスペクトルを移動します。


「SetCenter (F1)」：1Dと2Dスペクトルの測定条件からF1軸の1Dスペクトルの位置関係を修正します。

「SetCenter (F2)」：1Dと2Dスペクトルの測定条件からF2軸の1Dスペクトルの位置関係を修正します。


「装置Date (F1)」：3-8-3で示される装置データを使ってF1軸のReferenceを設定します。

「装置Date (F2)」：3-8-3で示される装置データを使ってF2軸のReferenceを設定します。

2DスペクトルのReferenceが正しく設定されると、1Dスペクトルとの対応がとれるようになります。

設定の仕方(1)：「Ref値 F1」と「Ref値 F2」にケミカルシフトの分かっているピークのケミカルシフト値を入力します。次に、をクリックした後、マウスで対象とするピ

ークを囲みます。囲んだ中のピークトップにF1,F2のReference値が設定されます。

設定の仕方(2)：(1)と同様ですが、をクリックして、マウスで対象とするピークの上でクリックします。マウスの位置にF1,F2のReference値が設定されます。

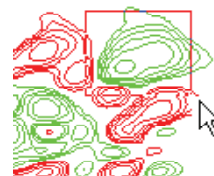


図4-28 PeakTop に設定





設定の仕方(3)：1Dスペクトルを読み込むときに、「中心周波数で合わせる」設定の時は、2Dのreference値は自動的に設定されます。「SetCenter(F1)」をクリックすると、F1軸に対して同様の設定を行います。F2軸に対しては「SetCenter(F2)」をクリックします。

設定の仕方(4)：以前、1Dを測定してデータ処理(Reference設定)をしたことがあるときは、「装置Data(F1)」または「装置Data(F2)」で2DのReference設定を行うことができます。



図4-29 装置データの選択

「装置Data(F1)/(F2)」をクリックした後、右のウィンドウ(図4-29)が開きます。該当する変更候補の中から適当な測定条件を選択します。

上記の設定法でも、1Dと2Dスペクトルの間には若干のずれが生じます。矢印, , , をクリックして、微調整してください。また、設定がうまく行かなかったときは、メニューで「取り消し(Reference設定)」をクリックすると、前の状態にもどります。


4-4-4 1D Reference(F2)設定


1DスペクトルのReferenceを変更します。なお、操作法は3-4-2「Referenceの設定」と同じですので、そちらを参照してください。




図4-30 1D Reference 設定ツールバー (F2)


「Ref値」：基準点のケミカルシフト値を入力します。

 カーソルの近くのピークトップにRefを設定します。

 カーソルの位置にRefを設定します。

「SetCenter (F2)」：1Dと2Dスペクトルの測定条件からF2軸の1Dスペクトルの位置関係を修正します。

設定の仕方(1)：「Ref値」にケミカルシフトの分かっているピークのケミカルシフト値を入力します。次に、をクリックした後、マウスで対象とするピークをはさみます。はさんだ中のピークトップにF2のReference値が設定されます。


設定の仕方(2)：(1)と同様ですが、をクリックして、マウスで対象とするピークの上でクリックします。マウスの位置にF2のReference値が設定されます。

注意事項：1DのReference設定は2Dと独立に行われます。従ってそのままにすると2Dとの対応がずれてしまいます。変更後は必ず、「SetCenter (F2)」をクリックして、1Dと2Dとの対応をとってください。微調整は4-4-3「2D Reference」で行ってください。

4-4-5 1D Reference (F1) 設定

F1側の設定を行います。「1D Reference (F2) 設定」の時と操作はほとんど同じです。

4-4-6 F1方向ベースライン補正

F1方向に筋状のノイズがあるときは、データ読み込み時(4-3-1)に、に従ってFirst Point補正を行ってください。

それでも消去できない場合に、このベースライン補正を行います。操作方法は、下記の「F2方向ベースライン補正」と同じですので、そちらを参照してください。

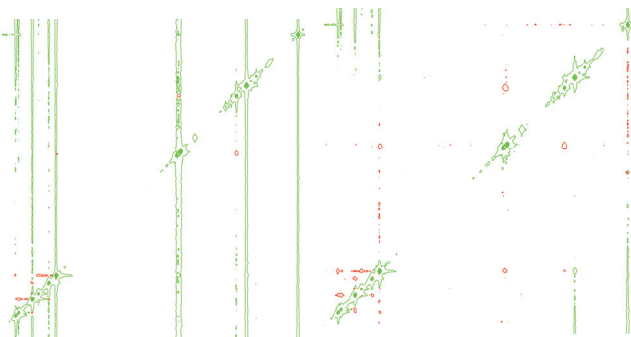



図4-31 First Point 補正をしない場合(左)と、行った場合(右)


4-4-7 F2方向ベースライン補正

スペクトルのF2方向のベースラインが曲がっていたり、0点からずれている時、これを補正するために行います。特に、F2方向に横の筋がある時にこれを除去するのに有効です。0点に補正する点を複数設定できます。



図4-32 F2 ベースライン補正ツールバー (F2)

 補正点の設定モードにします。ピークにかからない様にしてください。

 補正点を削除します。

「Ave. Point数」：補正点前後の平均値の計算のためのデータ点数


「Preview」：補正点を使って補正した結果を一時的に表示します。


「解除」：Previewを解除します。

「確定」：補正結果を確定し、補正を終了します。

「キャンセル」：補正前の状態に戻し、終了します。

(1) 補正の行い方

 をクリックし、補正点の設定モードにします。マウスで補正する場所でクリックすると、横の線（緑）が表示されます。必要な場所に設定しますが、ピークにかからない様に注意してください。

不要な補正点（線）がある場合は、 をクリックして削除モードにし、マウスカーソルと補正点（線）を一致させ左クリックすると、その点は削除されます。

これらの操作は、メニュー「編集 - 取り消し」で5つ前まで操作を取り消せます。

補正点を設置したら、「Preview」ボタンをクリックして補正結果を表示させてください。よければ「確定」をクリックして終了します。必ず「Preview」を行ってから「確定」してください。また、「解除」をクリックすると、補正前のスペクトルに戻ります。

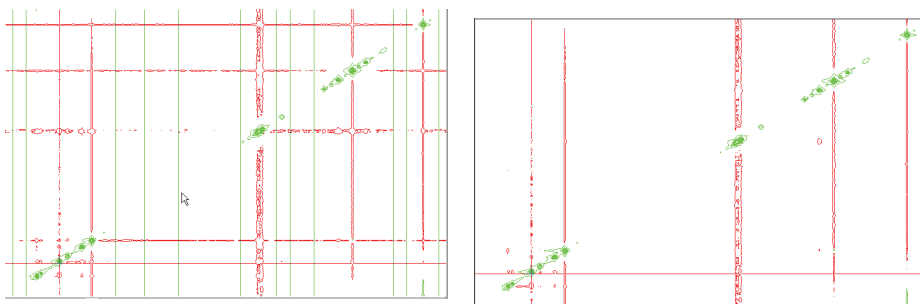


図4-33 補正位置を設定した状態(左)。F2 方向を補正したスペクトル(右)

4-4-8 対称処理

同核種2Dスペクトルでは、一部(INADEQUATE等)を除いて、全てのシグナルは対角線に対して対称となります。したがって、対称的に存在しないピークは、すべてノイズです。対角線から等距離にあるデータを比較して絶対値の小さな値に揃えることによってかなりのノイズを除去できます。但し、T1ノイズなどが存在したまま、この操作を行うとゴースト(偽)ピークが現れるので、十分に注意する必要があります。必ず、F1およびF2方向

のベースライン補正を行ってからこの作業を行ってください。



図4-34 対称処理ツールバー

対称中心線(対角線)を0.25 point右にずらします。(最大10 point)

対称中心線(対角線)を0.25 point左にずらします。(最大10 point)

「Shift」: 何point ずらしたかを表示します。

「Preview」: 現在の設定で対称処理を行ってみます。

「解除」: 対称処理のPreviewを解除して元の状態にします。

「確定」: 表示されている状態の対称処理を確定します。

「キャンセル」: 対称処理せずに終了します。

(1) 処理の仕方

この処理モードになると、対角線が表示されます。対角線をやを使って対角ピークの中心に合わせて、「Preview」をクリックします。この操作は何度でもできます。よければ、「確定」をクリックして終了します。「Preview」をしないと対称処理は行われません。

対称位置にあるピークの大きさが最大になる様にします。この操作を行う前に必ずベースライン補正を行ってください。

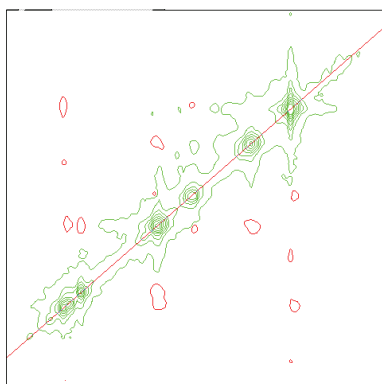


図4-35 対称処理の対角線
対称処理前

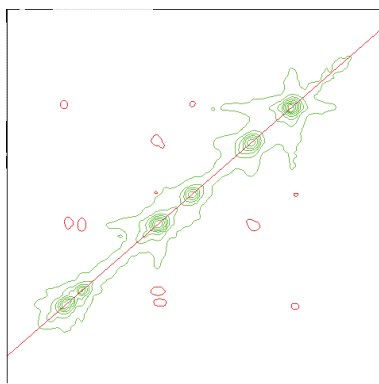








図4-36 対称処理後のスペクトル

4-4-9 ピーク線引き

2Dスペクトルにおいて、ピークが1Dスペクトルのどのピークに対応するかを見るための線引きを行います。INADEQUATEスペクトルの場合は線の引き方が異なります。



図4-37 ピーク線引きツールバー

-  カーソル位置にピーク線を追加するモードにします。
-  カーソル位置に一番近いピークトップ位置にピーク線を追加します。
-  カーソル位置のピーク線を削除します。
-  全範囲のピークトップを検索して、ピーク線を追加します。
-  表示範囲内のピークトップを検索して、ピーク線を追加します。
-  ピーク位置を移動します。

「計算上のピークTop」：データ補間表示の場合計算上のピークトップにピーク線を引きます。

「データ点上」：実際のデータ点上にピーク線を引きます。


「全削除」：設定されているピークを全て削除します。


「閉じる」：Peak線引きのモードを終了します。


「ピークリスト」：現在表示されているピーク位置の一覧を表示（印刷）します。

(1) 通常の線引き

通常の2Dスペクトルの線引き (INADEQUATEが設定されていない) 線引きです。

自動で線引きするときは  または  をクリックします。

 をクリックして、引きたいピークの上にマウスでクリックします。近くのピークトップを捜して、その点から1Dスペクトルに向かってF1とF2方向に線を引きます。

 をクリックしたときは、マウスカーソルを離れた位置に線引きを行います。

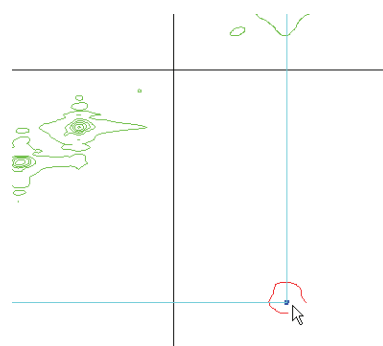



図4-38 ピークの設定

ピークの位置を移動するときには、 をクリックしてピーク移動モードにします。カーソルを、移動したいピークトップに近づけます。カーソルのそばに「このピークを移動」と

いうTool-Tipが表示されたら、マウスでドラッグして、希望の位置に移動します。(図4-39)

ピークを削除するときは~~Del~~クリックしてピーク削除モードします。カーソルを、削除したいピークトップに近づけます。カーソルのそばに「このピークを削除」というTool-Tipが表示されたら、マウスでドラッグして、削除します。

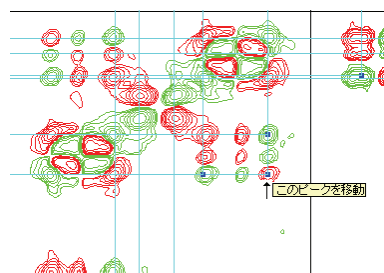


図4-39 ピークの移動

以上の操作は、「取り消し」メニューで5つ前まで戻れます。

(2) INADEQUATEの線引き

INADEQUATEスペクトルの測定法にはいくつかありますが、F1軸のケミカルシフトがF2軸の2倍となるモードで測定した場合は、ピーク線引きの方法が通常の2Dとは異なります。F2の1Dスペクトル上のピークから、右の図のように、同じF1軸のケミカルシフト上のピークをたどってF2軸のピークに戻る様な線を引く必要があります。

ピークトップは「傾き2」の直線に対称的に2つ設定されます。移動するときも対称的な2点がセットで移動します。削除するときも同様に、対称的な2点がセットで削除されます。

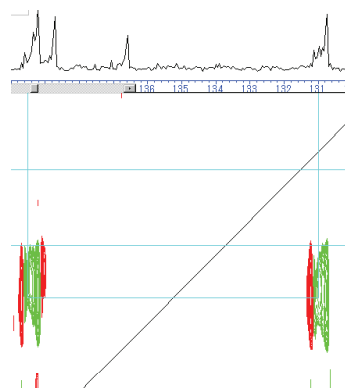


図4-40 INADEQUATE
ピークの線引き

4-4-A 拡大図の挿入

2Dスペクトルの一部を拡大して、2Dスペクトル上に重ね描きします。
メニューから「編集」－「拡大図の挿入」を選択する。



図4-40-A-1 拡大図添付のツールバー

Add 拡大する領域を追加します。範囲を設定するモードにします。

Del カーソル位置にある拡大図を削除するモードにします。

✕ カーソル位置にある拡大図を移動するモードにします。**Add**と**Del**が選択されていないときも、このモードです。

「**拡大率の初期値**」：この拡大率で拡大図を作成します。拡大率は、後でF1,F2軸方向別に変更出来ます。

(1) 拡大図の作成・追加

Addをクリックして「**追加モード**」にします。マウスで拡大したい部分を囲みます。(赤い四角で囲まれます：図4-40-A-2)

マウスの左ボタンを離すと、適当な位置に拡大図が配置されます。この時の拡大率は、F1軸，F2軸方向とも「**拡大率の初期値**」で設定したものになります。

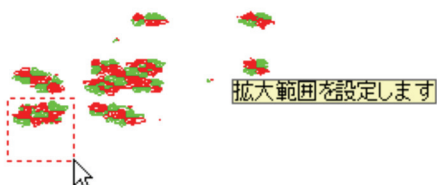


図4-40-A-2 拡大範囲の設定

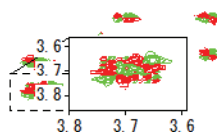


図4-40-A-3 拡大図の初期配置

(2) 拡大図の移動

移動したい拡大図の上にマウスカーソルを移動させます。ToolTipが表示されるので、左ボタンを押しながら、適当な位置でボタンを放すと移動できます。拡大範囲や拡大図の枠をドラッグして変更すると、拡大範囲や拡大図の大きさを微調整出来ます。

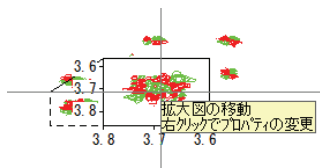


図4-40-A-4 拡大図の移動，プロパティの変更

(2) 拡大図のプロパティの変更

拡大図の上にマウスカursorを移動させます。ToolTipが表示されるので、右ボタンをクリックします。(図4-40-A-4)

拡大図のプロパティの画面が表示されるので変更できます。(図4-40-A-5~7)

「表示」:

- (1) 「座標軸・枠等の表示/印刷」. 拡大図の座標軸・枠や引き出し線を描く可を設定します。チェックを付けると表示されるようになります。数値の表示位置を設定します。数値を不透過にすると数値の周辺を白抜きにします。
- (2) 「2D表示方法」. 拡大図の表示方法を設定します。
- (3) 「拡大率」. 拡大範囲や拡大図の大きさを変更すると、F1,F2軸の拡大率が変わってしまいます。拡大率を変更すると、拡大図の大きさが変わります。F1とF2の拡大率を同じにすることが出来ます。

「座標軸/Font」:

- (1) 「座標軸の目盛り」. 拡大図の座標軸の目盛りを設定します。数字間隔・小目盛を任意に設定するときは「自動」のにチェックを外してください。
- (2) 「目盛りの向き」. 目盛りの向きを内側か外側に設定します。数字は常に外側です。
- (3) 「Font」. 数字のフォントを設定します。「変更」をクリックして設定します。

「線の色/線幅」:

- (1) 「拡大図の輪郭」. 拡大図の輪郭の線幅・線の種類・色を設定します。また、拡大図の背景色と透過/不透過も設定できます。
- (2) 「引き出し線」. 拡大図と拡大範囲の対応を示す引き出し線の線幅・線の種類・色を設定します。
- (3) 「拡大の範囲」. 拡大範囲を示す線の線幅・線の種類・色を設定します。

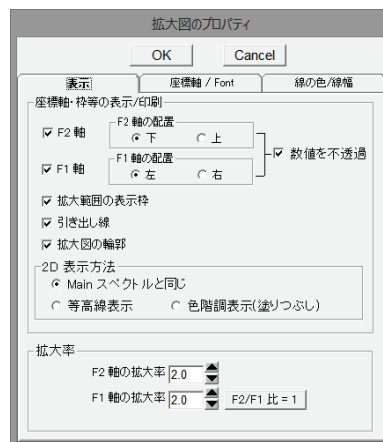


図4-40-A-5 拡大図;表示

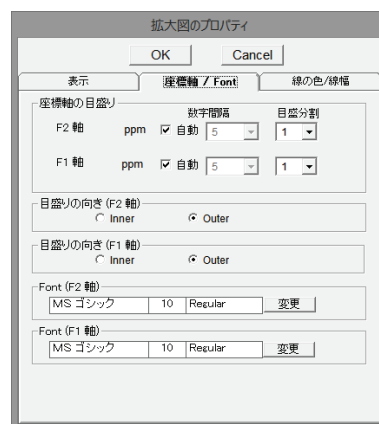


図4-40-A-6 拡大図;座標/Font

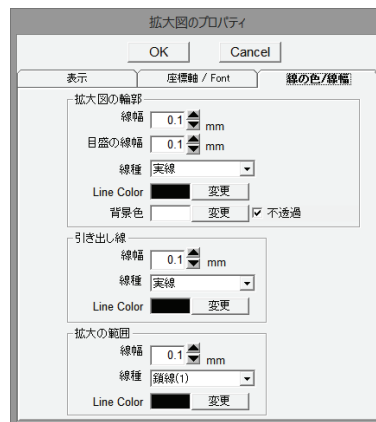


図4-40-A-7 拡大図;線の色/線幅

4-4-B 拡大図の表示

作成・挿入された拡大図を画面上に表示されないようにします。また、消えている拡大図を表示されるようにもできます。メニューから「編集」-「拡大図の表示」を選択すると現れるサブメニューから「表示」もしくは「拡大領域」を選択します。なお、拡大図が設定されていないときは、このメニューは選択できません。

また、「拡大図の挿入」モードでは、以下の操作を行ってもすべての拡大図が表示されたままになります。

(1) 拡大図の表示/非表示

サブメニュー「表示」を選択すると拡大図が表示されている場合は「非表示」になり、「表示」の前にチェックが消えます。拡大図が表示されていない時に選択した場合は「表示」され「表示」の前にチェックがつきます。



図4-40-A-7 拡大図の表示(1)

(2) 拡大図の選択的な表示/非表示

サブメニュー「表示」にチェックがついている場合にこの操作ができます。拡大範囲をマウスで選択すると、拡大範囲のチェックがON - OFFできます。チェックがついている範囲が表示されます。設定した拡大図を消去せずに非表示にしたい場合に便利です。

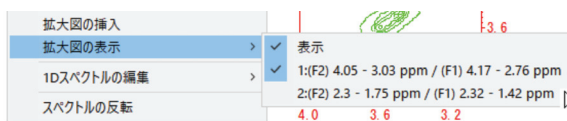


図4-40-A-7 拡大図の表示(2)

4-4-10 1Dスペクトルの編集

添付されている1Dスペクトルに位相補正やベースライン補正などの修正を加える必要がある場合は、それぞれを修正することが出来ます。メニュー「編集」の「1Dスペクトルの編集」で「F1軸1Dスペクトルの編集」または「F2軸1Dスペクトルの編集」を選択して、それぞれのスペクトルを編集します。編集の行い方は第3章の1Dスペクトル編集を参照してください。

また、1Dスペクトルが存在していなくても、1Dスペクトルの編集画面に移行します。この場合は、1Dデータを読み込むことが出来ます。(フーリエ変換済みでなくても可)

4-4-11 スペクトルの反転

測定時の位相回しによってはスペクトルの左右もしくは上下のケミカルシフトの大小の向きが違っていることがあります。この場合にこの操作を行ってください。取り消すためには、同じ操作をもう一度行ってください。

なお、スペクトルとケミカルシフトとの対応が合っている場合はこの操作は行わないでください。単に表示を反転させるだけの場合は、4-5-2「表示範囲の変更」で、表示開始位置を入れ替えてください。1Dではケミカルシフトは左に向かって大きくなるようにしか表示出来ませんが、2Dの場合はこの向きは自由に変えられます。

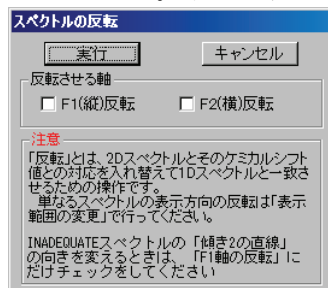


図4-41 スペクトルの反転

4-4-12 F1/F2の入れ替え

Hetero Nuclear(異核種)2Dスペクトルの場合に、F1軸とF2軸の関係を交換します。

右の質問に「OK」をクリックすると交換が行われます。取り消しは、この操作をもう一度行ってください。なお、Homo Nuclear(同核種)の場合は意味がありませんので、実行できません。

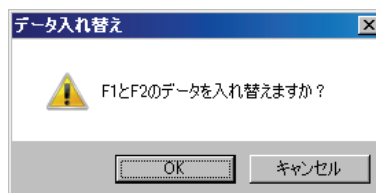


図4-42 スペクトルの入れ替え反転

4-4-13 パラメータの修正

右図のウィンドウが開きますので、測定条件や、コメントなどの修正ができます。スペクトルが変更される様なパラメータ（たとえば観測周波数）は変更対象外です。

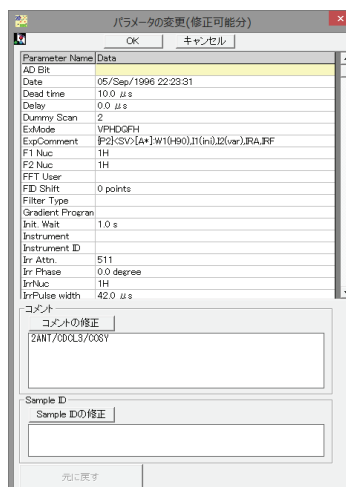


図4-43 パラメータの修正

4-4-14 データの履歴

現在のスペクトルの履歴を表示します。

「いつ測定されたか」「いつ編集されたか」「いつ保存されたか」等が記載されています。修正は出来ません

事項	実行者	日付
Measured		1999-11-20 14:40:41
FFT	Unknown	
Saved 1	共通	2008-03-02 09:57:20
Saved 2	共通	2009-02-03 21:33:23
Saved 3	共通	2009-02-06 12:14:23

図4-44 データの履歴

4-4-15 INADEQUATEモード変更

対角線が傾き2となるINADEQUATEスペクトルの処理モードに設定します。右図で「INADEQUATEスペクトルとして解析」に設定して「確定」をクリックします。解除するときは「通常」に設定して「確定」をクリックします。

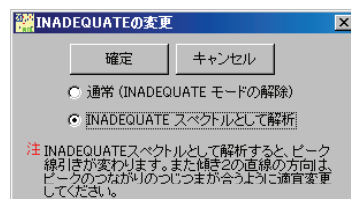


図4-45 INADEQUATE スペクトルの処理モード

「INADEQUATEスペクトルとして解析」に設定すると「編集」に図4-46のサブメニューが追加されます。

次の作業が行えます。

- 1) 傾き2の直線の表示 (図4-40)
- 2) 折り返しを展開する
- 3) 専用の線引き 4-4-9を参照

「傾き2の直線の方向」: INADEQUATEモードのときはスペクトルの中心を通る傾き2の直線を自動的に引きます。このの向きが違っているときはこのメニューで変更します。F1軸を反転することになりますので、図4-47を実行してください。戻すときは、もう一度同じ操作をします。

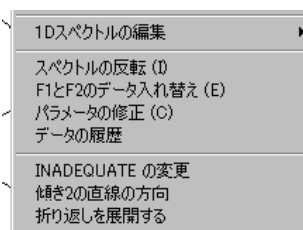


図4-46 INADEQUATE モードの追加メニュー

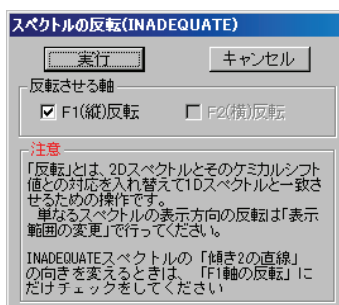
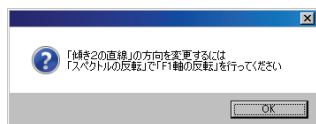


図4-47 傾き2の直線の向きの変更

「折り返しを展開」：INADEQUATE測定の時、F1軸の観測範囲をF2軸と同じにすると左上と右下に「折り返し」データが含まれます。これを本来の位置に移動すればF1軸全範囲のスペクトルが得られます。「折り返しを展開」を選択すると図4-48が表示されます。「実行」をクリックすると展開されます。

「折り返し」が右上と左下に現れる場合は、前述の「傾き2の直線の方法」を実行した後にこの操作を行ってください。

なお「折り返しを展開」した場合は、展開前の状態には戻せません。

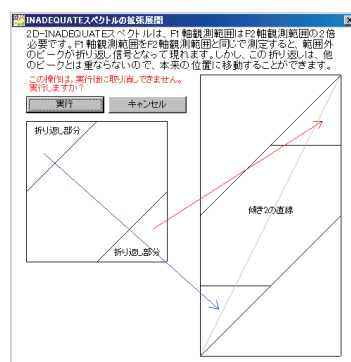


図4-48 折り返しの展開

4-4-16 取り消し (UnDo)

以下の編集作業の取り消しができます。5回前までさかのぼれます。

- ・ピークトップの削除
- ・ピークトップの追加
- ・ピークトップの移動
- ・ベースライン補正
- ・縦横比の変更
- ・1D/2D Reference設定