

JEOL
Solutions for Innovation

佐賀大学DELTAセミナー ～DELTA NMRソフトウェアの導入と1次元データ処理～

日本電子株式会社
科学・計測機器営業本部 朝倉 克夫

ソフトウェアの入手と登録

JEOL

Deltaソフトウェアは、
以下の方法で入手することができます。

- ✓ Webサイトからのダウンロード
日本電子株式会社 公式サイト www.jeol.co.jp ←※推奨
JEOL USA NMRサポートサイト nmrsupport.jeol.com

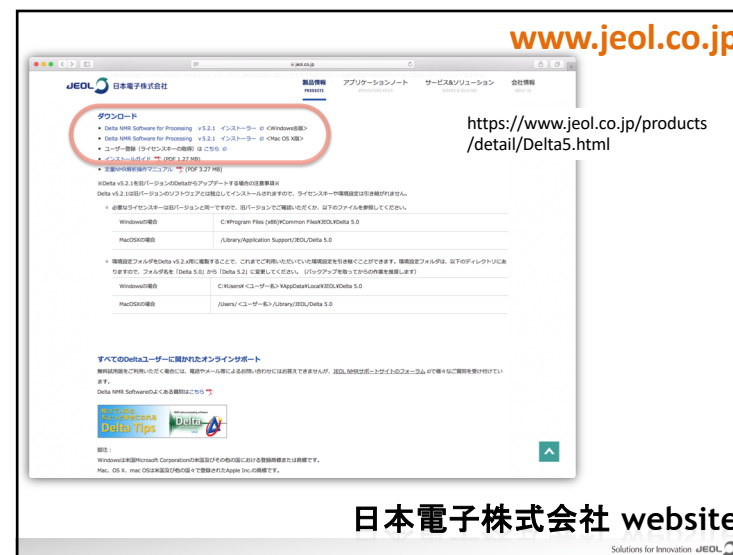
Deltaソフトウェアの入手

Solutions for Innovation JEOL

www.jeol.co.jp

日本電子株式会社 website

Solutions for Innovation JEOL



nmr.support.jeol.com

JEOL USA Inc.による、Deltaソフトウェア用ポータルサイト

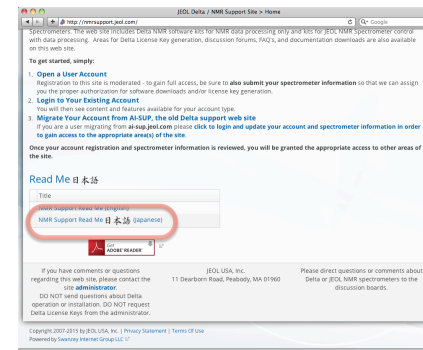


NMRサポートサイト

Solutions for Innovation JEOL

nmr.support.jeol.com

JEOL USA Inc.による、Deltaソフトウェア用ポータルサイト

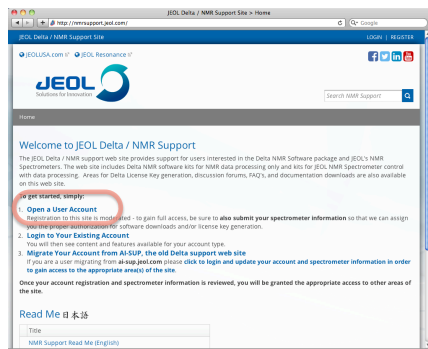


日本語版 Read Meファイル

Solutions for Innovation JEOL

nmr.support.jeol.com

JEOL USA Inc.による、Deltaソフトウェア用ポータルサイト

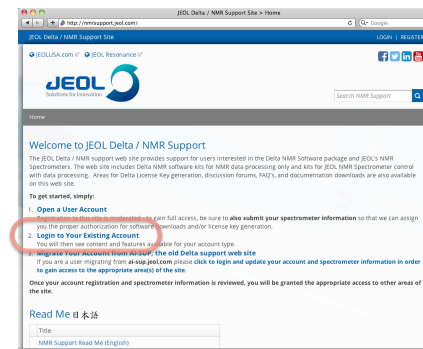


アカウントの申請

Solutions for Innovation JEOL

nmr.support.jeol.com

JEOL USA Inc.による、Deltaソフトウェア用ポータルサイト

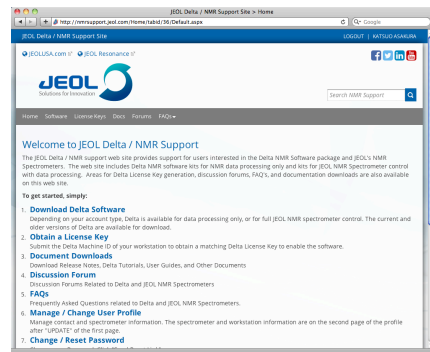


ログイン

Solutions for Innovation JEOL

nmrsupport.jeol.com

JEOL USA Inc.による、Deltaソフトウェア用ポータルサイト



※アカウントの認証には、最大48時間要します。

Solutions for Innovation JEOL

nmrsupport.jeol.com

Welcome to JEOL Delta / NMR Support

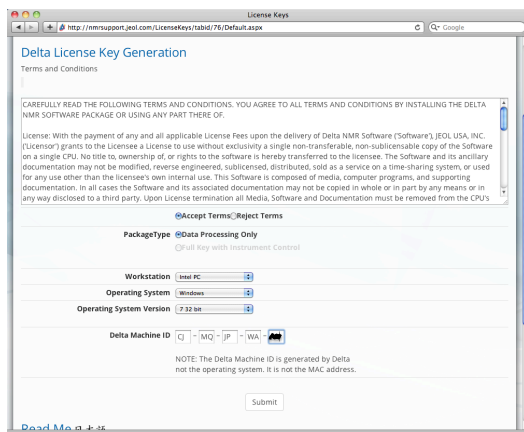
The JEOL Delta / NMR support web site provides support for users interested in the Delta NMR Software package and Spectrometers. The web site includes Delta NMR software kits for NMR data processing only and kits for JEOL NMR Spectrometers with data processing. Areas for Delta License Key generation, discussion forums, FAQs, and documentation downloads are available on this web site.

To get started, simply:

1. **Download Delta Software**
Depending on your account type, Delta is available for data processing only, or for full JEOL NMR spectrometer control. **Older versions of Delta are available for download.**
2. **Obtain a License Key**
Submit the Delta Machine ID of your workstation to obtain a matching Delta License Key to enable the software.
3. **Document Downloads**
Download Release Notes, Delta Tutorials, User Guides, and Other Documents
4. **Discussion Forum**
Discussion Forums Related to Delta and JEOL NMR Spectrometers
5. **FAQs**
Frequently Asked Questions related to Delta and JEOL NMR Spectrometers.
6. **Manage / Change User Profile**
Manage contact and spectrometer information. The spectrometer and workstation information are on the second page after "UPDATE" of the first page.
7. **Change / Reset Password**
Change your Password. Click "Send Reset Link".

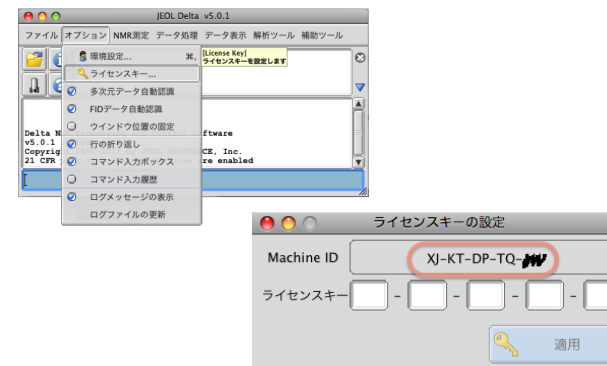
ライセンスキーの発行

Solutions for Innovation JEOL



ライセンスキーの発行

Solutions for Innovation JEOL



Machine IDの確認

Solutions for Innovation JEOL

ライセンスキーの発行

ライセンスキーの入力

nmr.support.jeol.com

Welcome to JEOL Delta / NMR Support

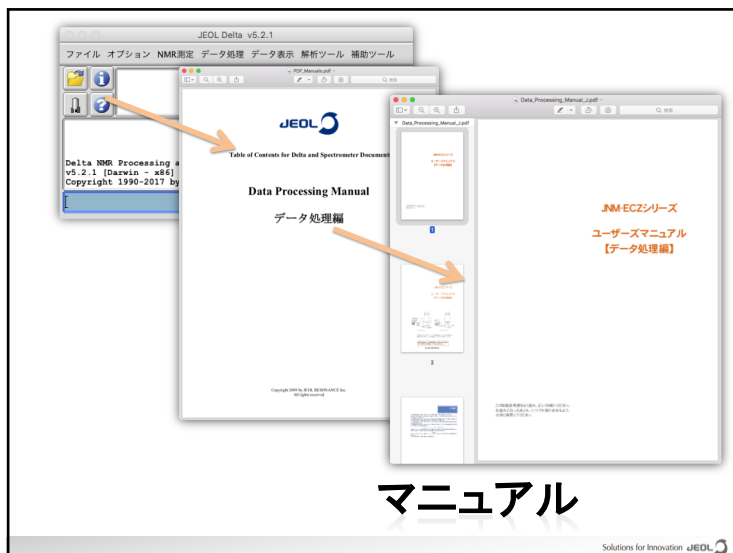
The JEOL Delta / NMR support web site provides support for users interested in the Delta NMR Software package and Spectrometers. The web site includes Delta NMR software kits for NMR data processing only and kits for JEOL NMR Spectrometers with data processing. Areas for Delta License Key generation, discussion forums, FAQ's, and documentation download on this web site.

To get started, simply:

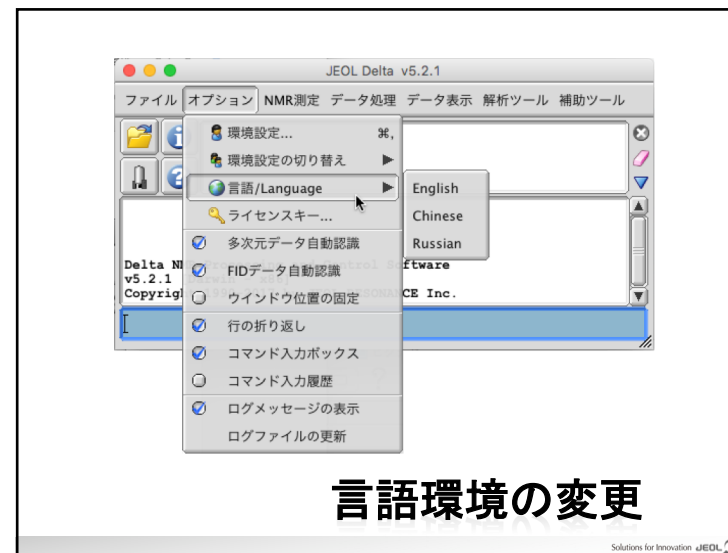
1. **Download Delta Software**
Depending on your account type, Delta is available for data processing only, or for full JEOL NMR spectrometer and older versions of Delta are available for download.
2. **Obtain a License Key**
Submit the Delta Machine ID of your workstation to obtain a matching Delta License Key to enable the software.
3. **Document Downloads**
Download Release Notes, Delta Tutorials, User Guides, and Other Documents
4. **Discussion Forum**
Discussion Forums Related to Delta and JEOL NMR Spectrometers
5. **FAQs**
Frequently Asked Questions related to Delta and JEOL NMR Spectrometers.
6. **Manage / Change User Profile**
Manage contact and spectrometer information. The spectrometer and workstation information are on the second page after "UPDATE" of the first page.
7. **Change / Reset Password**
Change your Password, Click "Send Reset Link"

Discussion Forum

日本語フォーラム完備



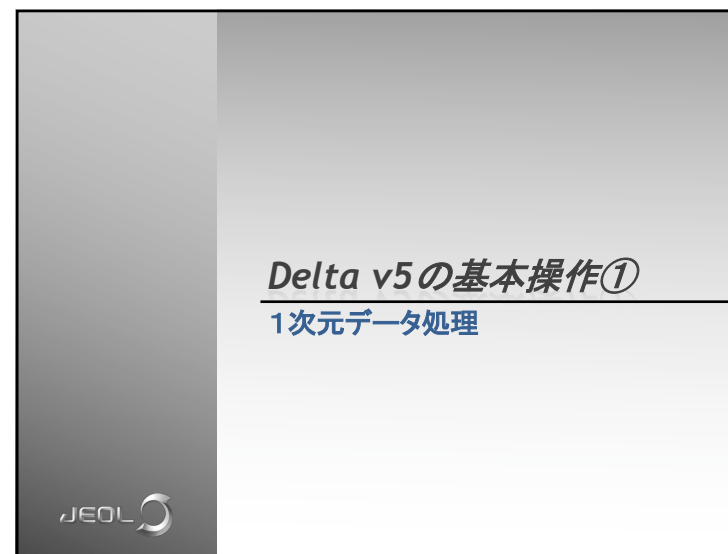
マニュアル

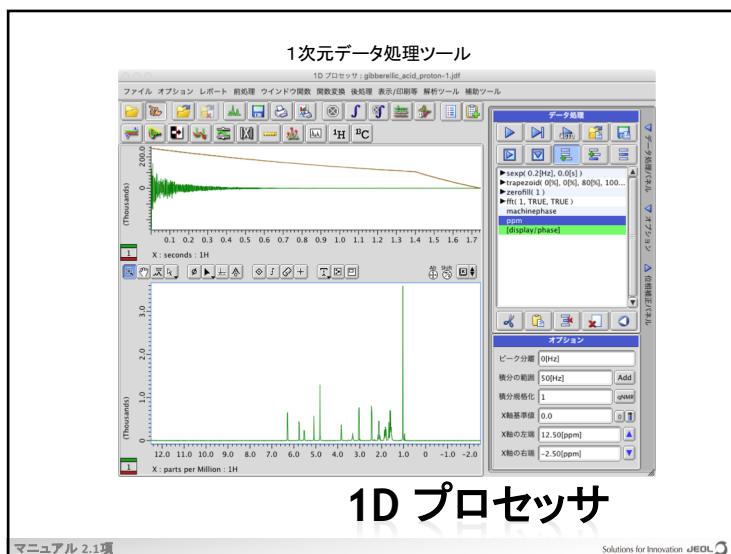
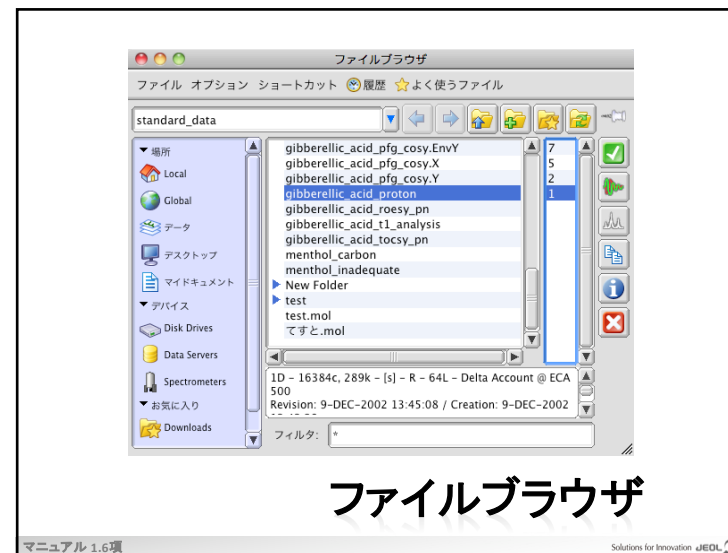
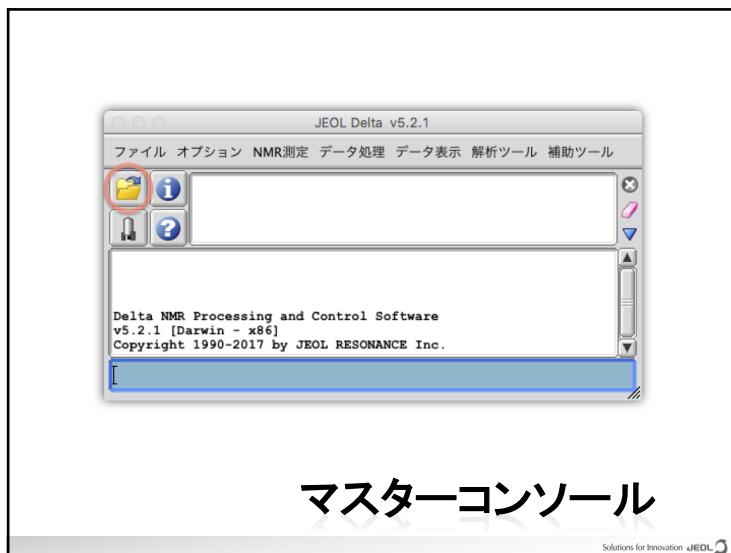


言語環境の変更



日英中露4言語対応





ボタンバー

Browserモード
ファイルデータを選択する際に、
ファイルブラウザを使用する

Fingerモード
ファイルデータを選択する際に、
指型カーソルを使用する

データスレートに送る
表示中のデータを
データスレートで開く

保存
表示中の処理済みデータを保存する

印刷
表示中のデータを
印刷する

レポート印刷
ピークレポートと積分
レポートを印刷する

Statisticsの表示
スレッシュホールドを表示

自動ピークピク
自動積分
自動ピークピク & 積分
自動位相補正

ファイルを開く
新たにファイルを開く

ファイルを開く※
プロセスリストを除いて
新たにファイルを開く

マニュアル 2.1項

1D プロセッサ

メニューバー
ボタンバー
マクロバー

FID表示部

データ表示部
(ジオメトリ)

カーソルツール

データ処理
プロセスリスト
ガイドモード
マクロ

データ処理パネル

オプションパネル

位置補正
位相補正パネル

マニュアル 2.1項

データ処理パネル

プロセスリストの逐次実行
コマンドごとに実行する

プロセスリストの自動実行
リスト変更時に自動実行する

プロセスリストを開く

プロセスリストを保存

プロセスリストの実行

Append Mode
プロセスを最後に追加

Insert Mode
選択されたプロセスの前に挿入

Revise Mode
選択されたプロセスと入替

プロセスをリストア
デフォルトのプロセスリストに戻す

全てのプロセスを削除

パラメータ欄の展開

パラメータ欄の格納

選択されたプロセス
(青いハイライト)

次に実行されるプロセス
(緑のハイライト)

選択されたプロセスをカット

カットされたプロセスをペースト
選択されたプロセスの前に挿入される

選択されたプロセスを削除

マニュアル 1.5項

プロセスリスト

DC Balance
0Hz(センターグリッチ)除去

Single Exponential Window関数
指数関数型ウィンドウ関数

Trapezoidal Window関数
台形関数型ウィンドウ関数

Zero Filling
ゼロフィリング

Fast Fourier Transformation
高速フーリエ変換

Machine Phase
自動位相補正

PPM変換
軸の単位変換(Hz→ppm)

プロセスリスト
ガイドモード
マクロ

▶ dc_balance(0, FALSE)
▶ sexp(0.1[Hz], 0.0[s])
▶ trapezoid(0[%], 0[%], 80[%], 100[...]
▶ zerofill(1)
▶ fft(1, TRUE, TRUE)
machinephase
[display/phase]

マニュアル 1.5項

パラメータ欄の展開/格納

Line Broadening Factor
線幅拡大係数 (指数関数の係数)

Shift Parameter
ウィンドウのシフト量

プロセスリスト

マニュアル 1.5章

各種処理関数など

マニュアル 11章

1D プロセッサ

マニュアル 11章

独立したピークとして認識されるための
ピーク間距離の最小値
(設定値より近いピークは検出されない)

自動で積分をとる際の範囲
(ピークの周辺を設定値分だけ積分する)

積分の規格化で使用する規格化値

化学シフトリファレンスの基準値
右側のボタンで0もしくは溶解媒の化学シフト値を選択可

表示範囲の左端

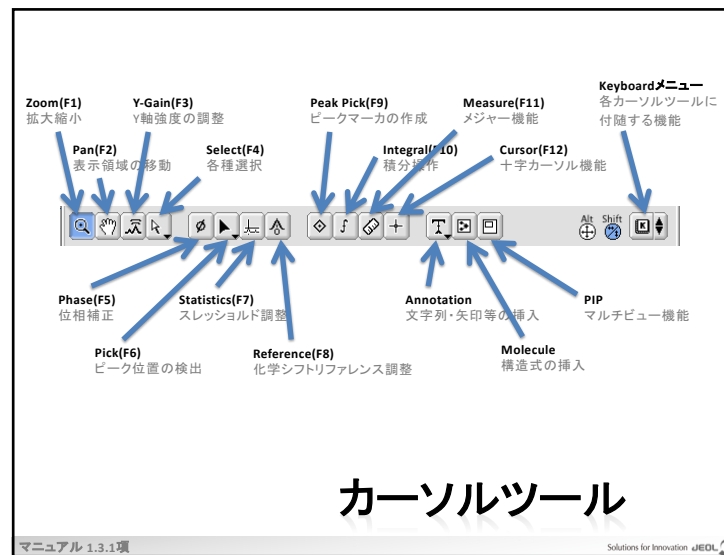
表示範囲の右端

オプションパネル

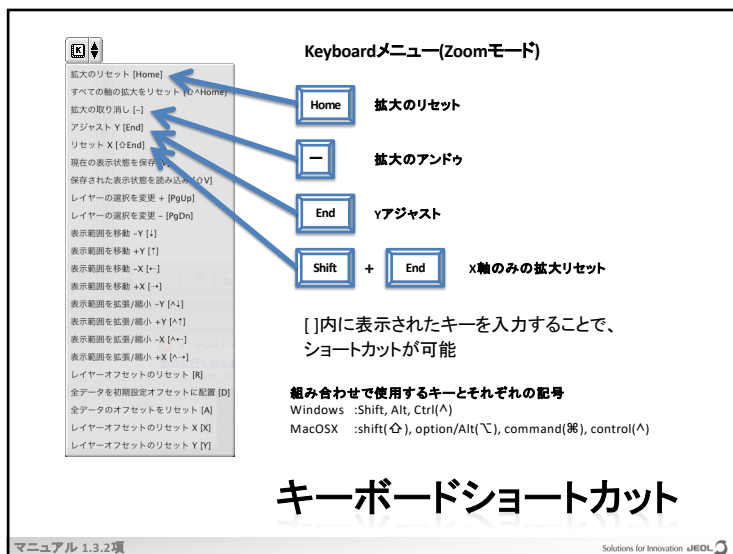
マニュアル 11章



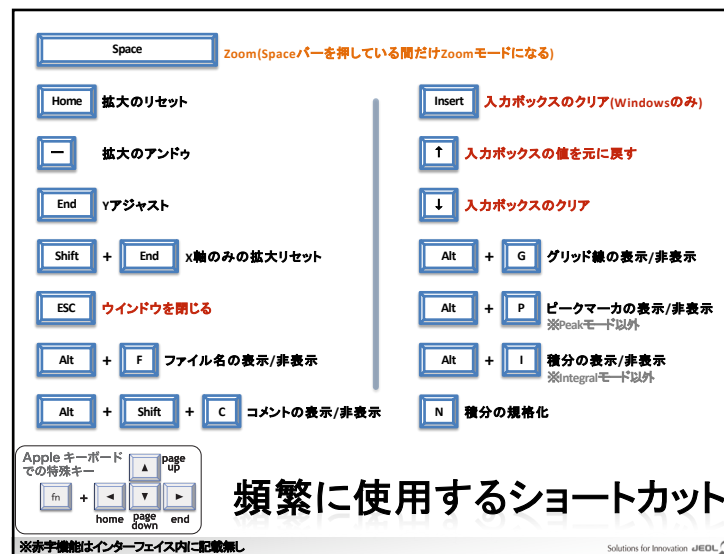
1D プロセッサ



カーソルツール

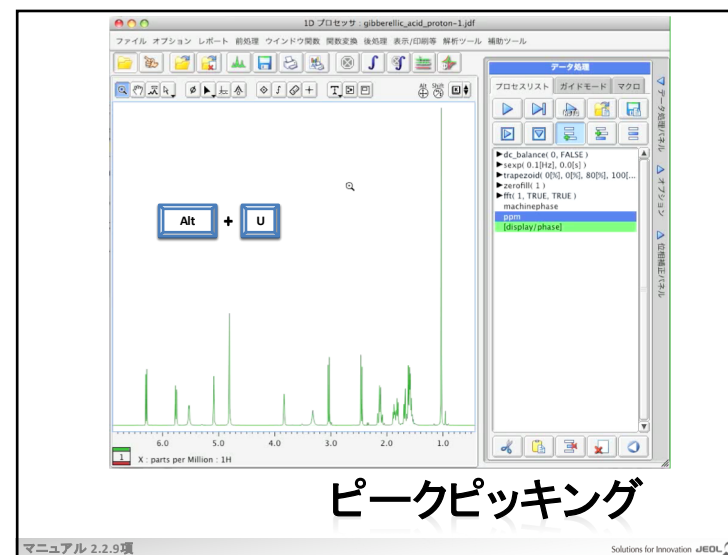
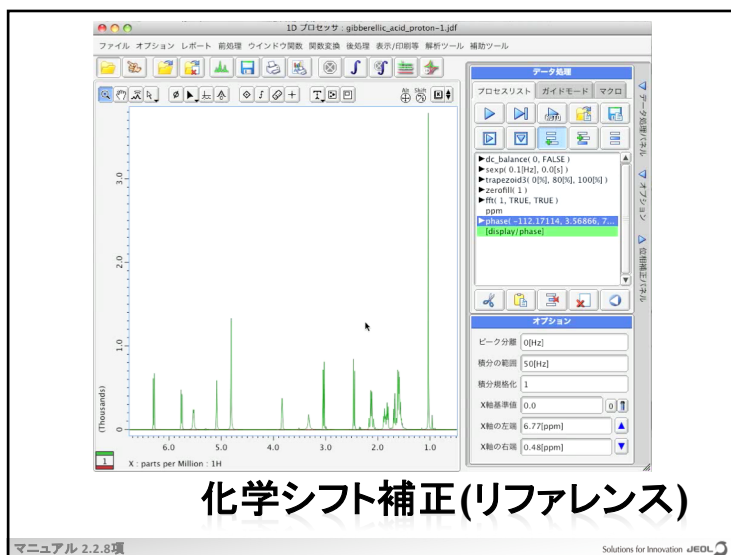
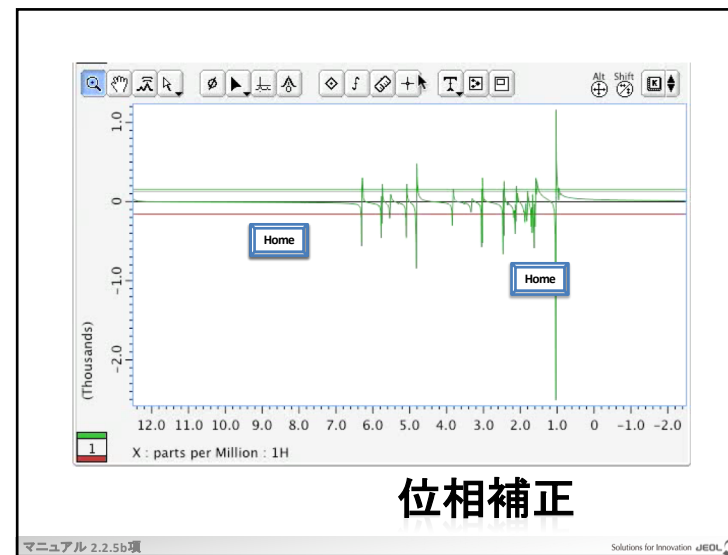
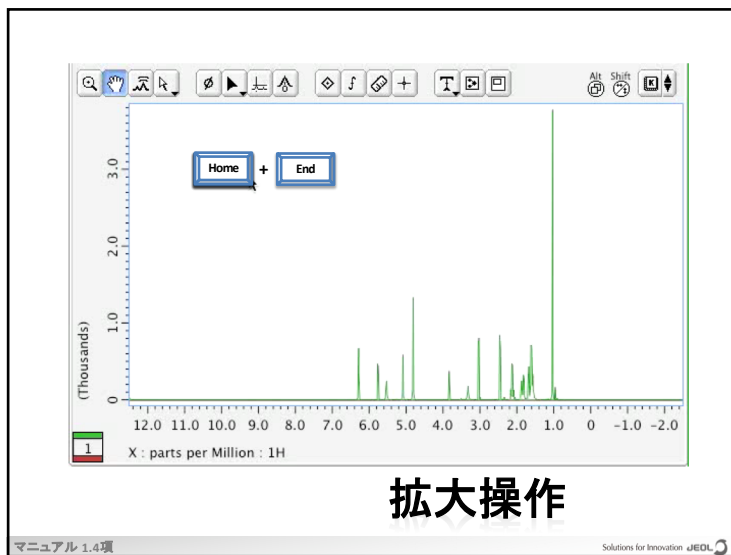


キーボードショートカット



頻繁に使用するショートカット

※赤字機能はインターフェイス内に記載無し



ピークリストツール

| [ppm] | [hertz] |
|--------|-----------|
| 6.3021 | 3152.0474 |
| 6.2838 | 3142.8830 |
| 5.7719 | 2886.8515 |
| 5.7650 | 2883.4149 |
| 5.7535 | 2877.6871 |
| 5.7455 | 2873.6776 |
| 5.5359 | 2768.8594 |
| 5.5234 | 2762.5588 |
| 5.0870 | 2544.3307 |
| 4.8099 | 2405.7185 |
| 3.8342 | 1917.7122 |
| 3.3234 | 1662.2535 |
| 3.0486 | 1524.7869 |
| 3.0268 | 1513.9042 |
| 2.4657 | 1233.2433 |

J: 選択された2つのピーク間の距離(Hz)を表示します。

Delete

J値を読む

Jカップリング解析

| No. | 位置 | 積分値 | パターン | J |
|-----|-----------|-----|------|----------------------------|
| 1 | 6.29[ppm] | 1 | d | J1 = 9.3[Hz] |
| 2 | 5.76[ppm] | 1 | dd | J1 = 9.3[Hz], J2 = 3.6[Hz] |
| 3 | 5.53[ppm] | 1 | d | J1 = 5.9[Hz] |
| 4 | 5.09[ppm] | 1 | s | |

論文書式

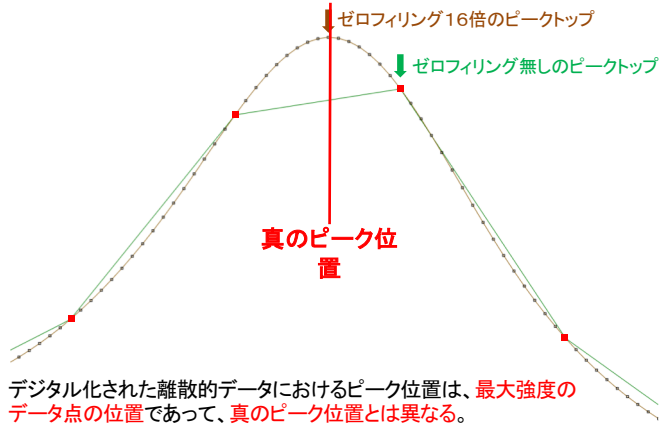
$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, DMSO-d_6) δ 6.29 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 5.76 (dd, J = 9.3, 3.6 Hz, 1H), 5.53 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 5.09 (s, 1H), 4.81 (t, 2H), 3.83 (s, 1H), 3.04 (d, J = 10.8 Hz, 1H), 2.46 (d, J = 10.8 Hz, 1H), 2.19-2.06 (m, 2H), 1.93-1.75 (m, 2H), 1.75-1.51 (m, 5H), 1.03 (s, 3H)

J値が微妙に合わない? - ゼロフィリング

標準的な測定条件で測定したデータでは、データポイントの不足により、ポイント落ちという現象が起きるため、真のピーク位置を再現することができない。

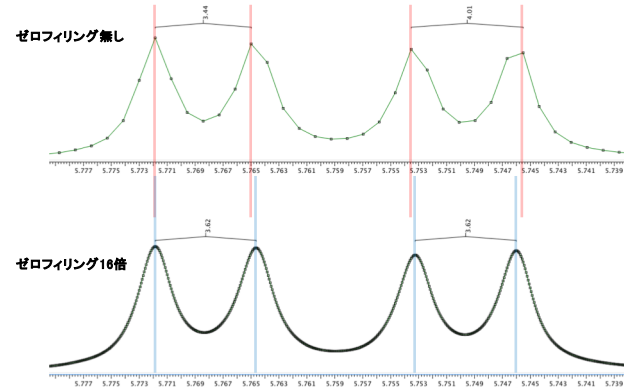
ゼロフィリングによって解決可

真のピーク位置とは...



デジタル化された離散的データにおけるピーク位置は、最大強度のデータ点の位置であって、真のピーク位置とは異なる。

ダブルダブレットなのにJ値が一致しない？



ゼロフィリングを行うことによって、より正確なJ値を読み取ることが出来る。

Jカップリング解析ツールの計算結果

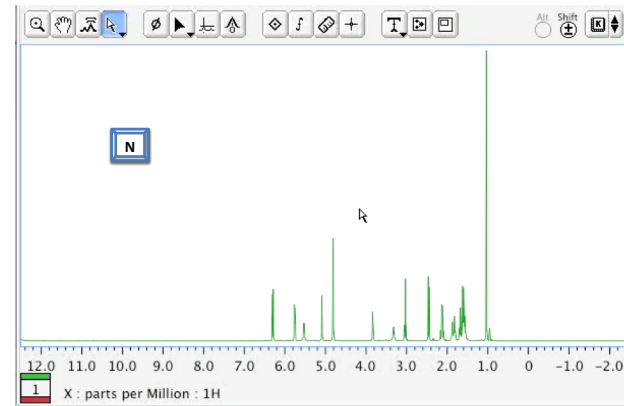
ゼロフィリング8倍

ゼロフィリング無し

| No. | 位置 | 積分値 | パターン | J |
|-----|-----------|-----|------|---|
| 1 | 6.29(ppm) | 1 | d | $J_1 = 9.33(\text{Hz})$ |
| 2 | 5.76(ppm) | 1 | dd | $J_1 = 9.33(\text{Hz}), J_2 = 3.6(\text{Hz})$ |
| 3 | 5.53(ppm) | 1 | d | $J_1 = 5.9(\text{Hz})$ |
| 4 | 5.09(ppm) | 1 | s | |

ピーク分類 [0]Hz 積分の範囲 [50]Hz 積分規格化 [1] 許容誤差 [3]ppm

小数点以下1桁の読み取りであれば、8倍程度のゼロフィリングで十分
 ※極端にデータポイントを増やすと、ファイルサイズが大きくなりすぎ、ソフトウェアの動作が遅くなる。
 16kポイントで測定したデータの処理後のファイルサイズは296KBだが、
 8倍のゼロフィリングをすると2.1MB、128倍のゼロフィリングで33.6MBになる。



積分操作

Word、Power Point等への貼付けが容易です

クリップボードへの書き出し

マニュアル 2.2.15項

Windows

ページ設定機能による、印刷の向き指定

印刷

Mac OS X

マニュアル 2.2.15項

印刷ダイアログ(OS依存)

Windows

Mac OS X

パラメータの印刷の有無や位置
プロセスリストの印刷の有無
PDF出力(Windowsは"JEOL PDF"プリンタ等を使用)
などの設定が可能

印刷

マニュアル 2.2.15項


差スペクトルの作成
FIDの加算など

データの加減算

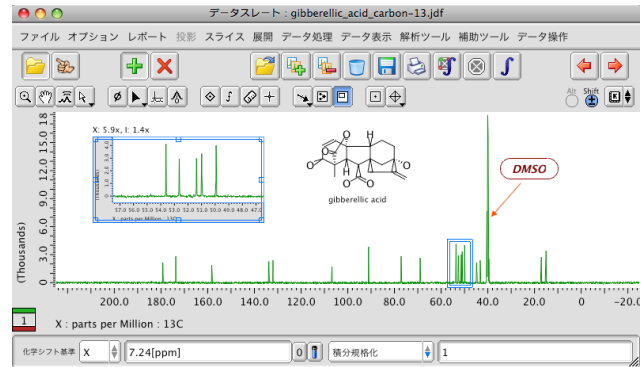
マニュアル 5章

データスレート

様々な表示方式

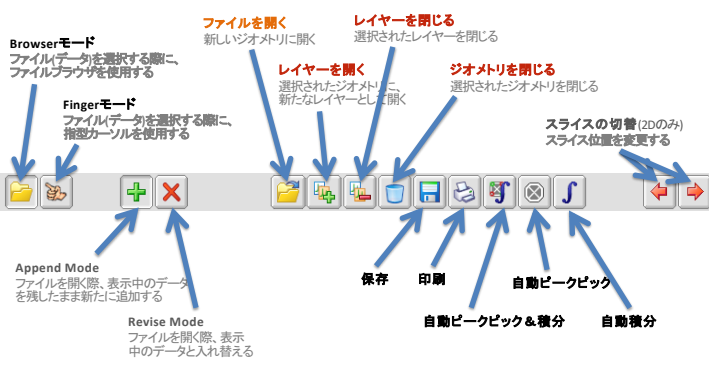


マルチビュー、分子構造式、コメントなど



データスレート

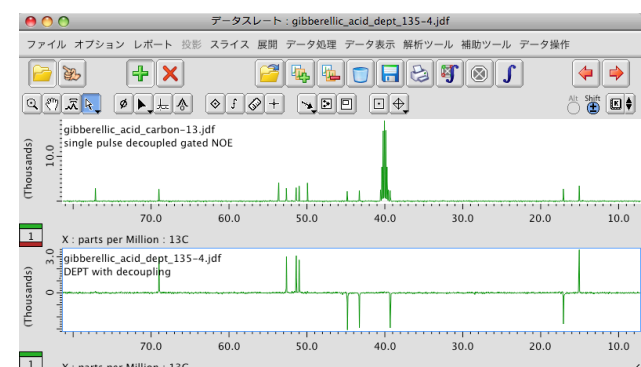
マニュアル 3章



データスレートのボタバー

Solutions for Innovation JEOL

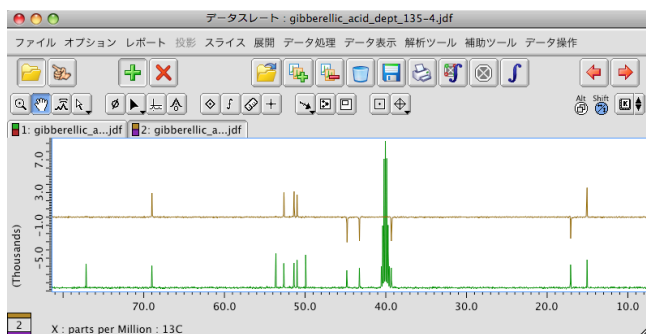
複数のデータを表示、連携



データスレート

マニュアル 8.3.1項

複数のデータを同一ジオメトリに表示

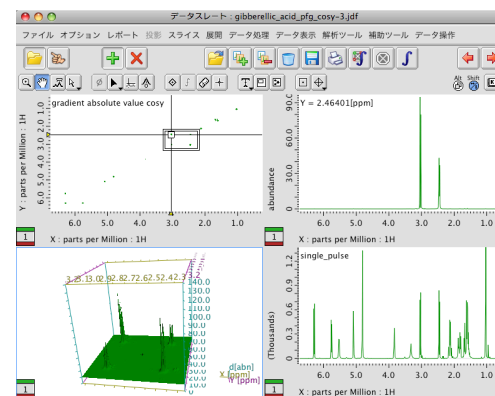


データスレート

マニュアル 8.3.2項

Solutions for Innovation JEOL

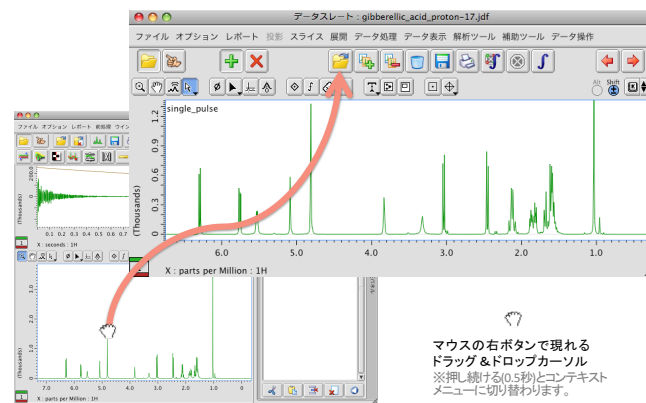
2次元データ、スライス、3D表示、1Dとの連携



データスレート

マニュアル 8.3.2項

Solutions for Innovation JEOL



マウスの右ボタンで現れる
ドラッグ&ドロップカーソル
※押し続ける(0.5秒)とコンテキスト
メニューに切り替わります。

ドラッグ&ドロップによる簡単操作

Solutions for Innovation JEOL

Free Delta に関するお問い合わせ、御要望は下記まで

kasakura@jeol.co.jp 朝倉 克夫



お楽しみ下さい

Solutions for Innovation JEOL

