

二维谱图数据处理



1. 等高线显示的设定

打开文件, 谱图在文件处理窗口中显示, 如下图

\delta nD Processor : CACHE-CDCl3 2_NOESY-1-1.jdf	
File Options PreTransform Window Transform PostTransform Display Analyze Tools	nlav in Viewe
Q () X () 🐇 🖏 () X ()	
0-	ameters
9 +	
* * * 50 50	xperime
O M	int
• •	
e.o	
7.0 Y.0	
9.0 parts p	
→ ♀ → ♀ → 0 8.0 7.0 6.0 5.0 4.0 3.0 2.0 1.0	 0
1 X : parts per Million : Proton	

再点击图中红框按钮, 打开谱图浏览窗口

1. 等高线显示的设定

在二维数据显示区域内长按鼠标右键,从弹出的菜单中选择[Level tool]。





□ 一般使用偏置滑条和水平按钮来调整等高线。

2.2D 图谱相位校正



2.2D 图谱相位校正



步骤:

- ▶ 再点击按钮①进行相位校正;
- ▶ 点击按钮②完成
 校正。

3.2D 图谱基线(以F2维为例)及平滑处理(NOESY中常用)



4. 化学位移标定

打开2D浏览窗口, 依次按图中①②③顺序操作



5. 一维数据粘贴



步骤:

- ▶ 选择手指按钮①;
- ▶ 点开Layout_Load 1D_Load X + Y Projections
- ▶ 鼠标图形变成手指形
 状 ♥♥;
- ▶ 点击要粘贴的高清谱图
 - 如果X轴与Y轴数据
 不同,请选择Load
 X Projection Load Y
 Projection分别导入

6. 二维数据的堆叠与对比

与一维谱图堆叠类似, 依次以下图中①②③的顺序点击相应按钮

Spectrum A

Spectrum B



7. 同步二维谱图横纵轴坐标



在数据书写板中打 开需要同步的谱图, 点击Tools_Geometry Tools_Connection Tool,如左图所示 ▶ 点击手指按钮①③,选择文件;再选择需要同步的轴,最后点击Connect



▶ 连接之后,缩放其中一个图的横纵坐标时,另一图也随之改变



若要结束同步显示功能,需点击断开按钮 Disconnect