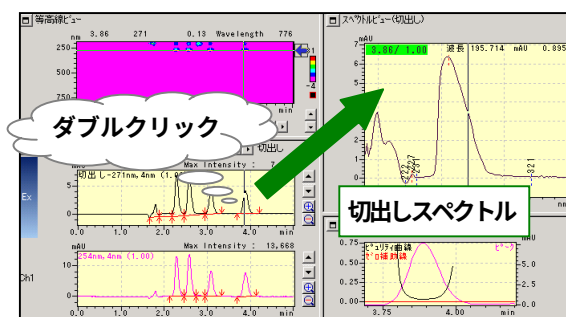


スペクトルの重ね書き方法

■[スペクトルビュー]について

[PDA データ解析]画面の[スペクトルビュー]には、クロマトグラム上でダブルクリックした時間位置のスペクトル (以下切出しスペクトルと呼ぶ) が表示されます。[スペクトルビュー]はスペクトルの切出しの他、スペクトルの重ね書きやスペクトルファイルを保存する機能も備えています。

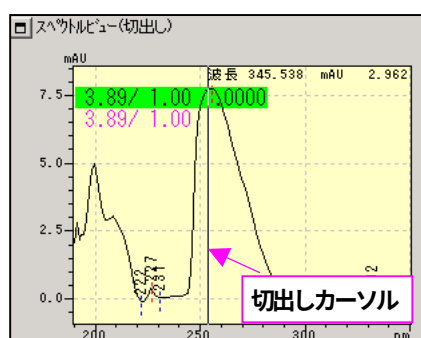


【切出しスペクトル】

[スペクトルビュー]には、下記のような(切出し)モードと(登録)モードがあります。[スペクトルビュー]の右クリックメニューの[登録スペクトル表示]でモードを切り替えることができます。([登録スペクトル表示]にチェックをつけると(登録)モードになります。)

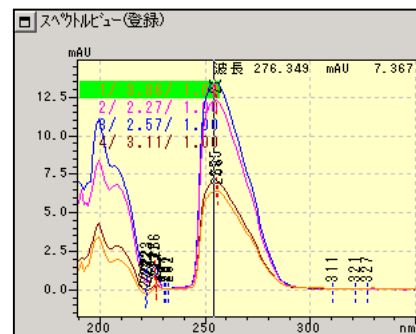
登録スペクトル表示(M)
データ処理/パラメタ(E)...
切出しスペクトルをスペクトルテーブルに登録(R)
スペクトルテーブルの表示(W)...
ライブラリ検索(C)...

【登録スペクトル表示】



◆切出し◆

[等高線ビュー]または[クロマトグラムビュー]からの切出し時間によって、随時表示スペクトルを更新します。



◆登録◆

[スペクトルテーブル]に登録されたスペクトルから、必要なものを選んで表示。複数同時表示や演算も可能です。(切出しスペクトルは非表示。)

■スペクトルの重ね書き

スペクトルを重ね書きする方法は、下記の2通りあります。

[1] スペクトルテーブルへ登録

切出しスペクトル、UV スペクトル、ライブラリをスペクトルテーブルに登録します。スペクトルテーブルに登録されたスペクトルを重ね書き表示できます。

[2] 参照スペクトルを設定 (但し、重ね書きは2スペクトルまで)

切出しスペクトル、UV スペクトル、ライブラリのいずれか一つを参照スペクトルとして設定しておきます。更に、切出しスペクトルを重ね書きできます。

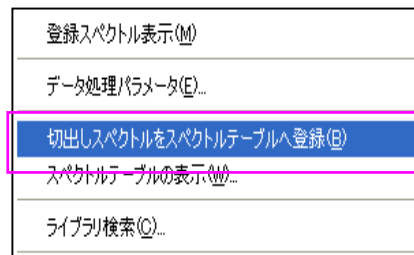
[1] スペクトルテーブルへ登録

- 1) [スペクトルビュー]を(切出し)モードにします。

重ね書きしたい切出しスペクトルを表示します。右クリックメニュー[切出しスペクトルをスペクトルテーブルへ登録]、またはツールバーの  をクリックすると

スペクトルテーブルへ登録できます。

この操作を繰り返すことにより、複数の必要なスペクトルを登録できます。



[スペクトルビュー]の右クリックメニュー

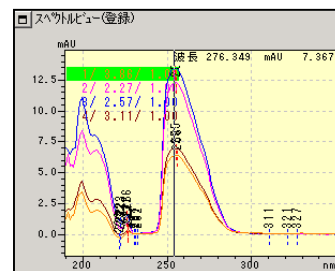
参考 1: (登録) モードでは、クロマトグラム上でピーク時間位置をダブルクリックすることで、切出しスペクトルをスペクトルテーブルに直接登録できます。

参考 2: クロマトグラムの検出ピークのスペクトルをまとめてスペクトルテーブルに登録したい場合は別紙をご参照ください。

- 2) 右クリックメニュー[登録スペクトルを表示]を選択すると登録スペクトルが重ね書き表示されます。

- 3) 重ね書きされているスペクトルの詳細な情報は、右クリックメニュー[スペクトルテーブルの表示]で確認できます。

予めファイル保存されているスペクトルファイル(ライブラリも含む)を重ね書きしたい場合は、[スペクトルテーブル]の[対象]を[スペクトル](または[ライブラリ])にし[対象パラメータ]で必要なファイルを設定します。



スペクトルテーブル						
表示するかしないかを設定できる						
ID#	表示	対象	対象パラメータ	スケール	表示倍率	λ max
1	☒	時間	3.92	設定	1.00	256/227
2	☒	時間	3.07	設定	1.00	256/226
3	☒	スペクトル	3.86	設定		
4	☒	ライブラリ	3.07	設定		

スケール調節できる

[スペクトルテーブル]

参考 1: [UV スペクトル]ファイルの作成方法

ファイル保存したいスペクトルを切出し、[スペクトルビュー]上の右クリックメニュー[スペクトルのエクスポート]を選びます。

[名前を付けて保存]画面が表示されるので、名前を付けて保存すると[UV スペクトル]ファイルを作成できます。

参考 2: スペクトルテーブルでスペクトル間の類似度を比較することができます。詳細は別紙をご覧ください。

[2] 参照スペクトルを設定

- 1) スペクトル比較に使いたいスペクトルを参照スペクトルとして登録します。[スペクトルビュー]を

(切出し)モードにします。

現在の切出しスペクトルを参照スペク

トルに使う場合は、[スペクトルビュー]

の右クリックメニューの[参照スペクトル

の設定]から[切出しスペクトル]を選ぶ

と、前述スペクトルが参照スペクトルとして設定されます。

参照スペクトルの設定で切出しスペクトルとした場合

右図のようにスペクトラベルにピンク色の字で、上記

切出しスペクトルの保持時間が表示されます。(参照スペ

クトルとして[UV スペクトル]を選んだ場合はファイル名、

[ライブラリ]を選んだ場合はライブラリファイル名と登録 No.

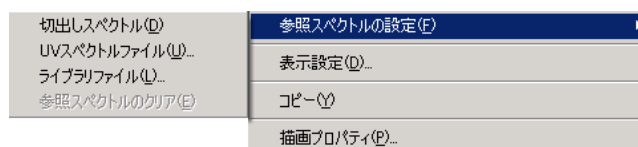
が表示されます。) 注)[UV スペクトル]ファイルの作成方法

は[1]の(2)参考 1 をご参照ください。

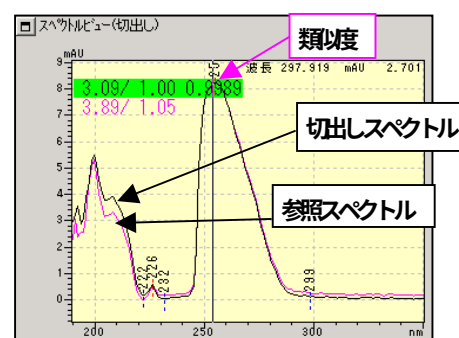
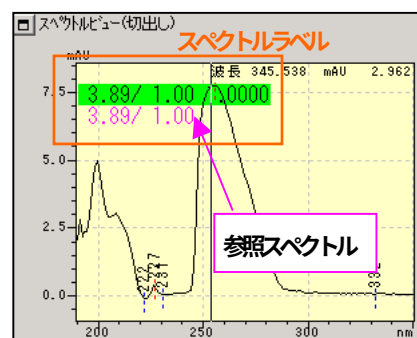
- 2) クロマトグラム上で、スペクトルを重ねたいピーク時間位置をダブルクリックして下さい。右図のようにスペクトルが重ね書きされます。

スペクトラベルの一番右に、参照スペクトルとの類似度が表示されます。(類似度の表示が無い場合、右クリックメニュー[描画プロパティ]で表示するよう設定します。)

右クリックメニューの[コピー]でレポートや Word などにスペクトルの重ね書きを貼り付け可能です。



[スペクトルビュー]の右クリックメニュー



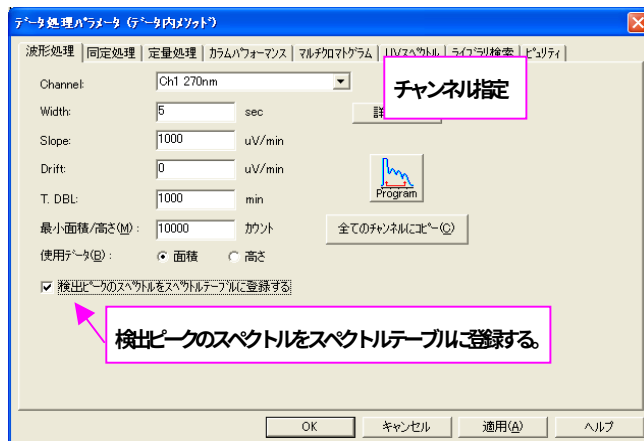
<別紙>

■クロマトグラムの検出ピークのスペクトルをまとめてスペクトルテーブルへ登録

1) [スペクトルビュー]を(登録)モードにします。[クロマトビュー]上の右クリックメニュー[データ処理パラメータ]→[波形処理]タブを開きます。

2) チャンネルを指定し、[検出ピークのスペクトルをスペクトルテーブルに登録する]チェックボックスをオンにして[適用]をクリックします。

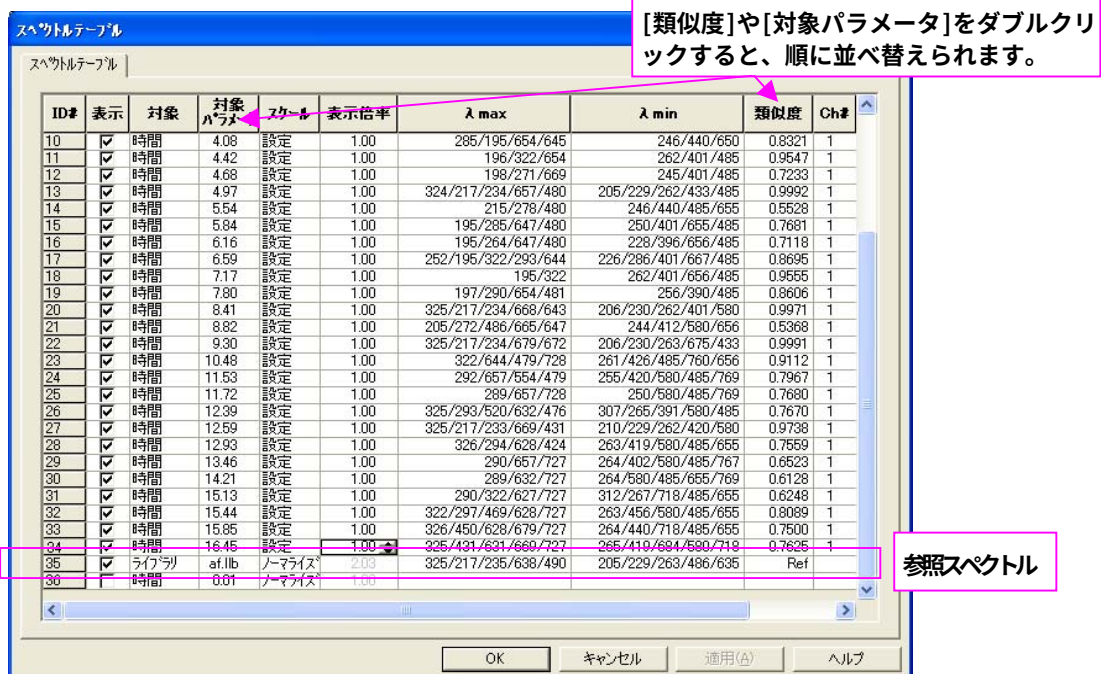
3) [OK]で画面を終了します。



■スペクトルテーブル内の比較

1) 基準にするスペクトルの行左端の[ID#]をクリックして行を反転表示します。右クリックメニュー[類似度用参照スペクトルに設定]を選択します。[類似度]に[Ref]と入力されます。

2) [適用]をクリックするとλ max、λ min、類似度が表示されます。



同様にスペクトルの行左端の[ID#]をクリックして行を反転表示にし、[ライブラリ検索]や[スペクトルをライブラリへ登録]が可能です。