

NUTs 处理NMR谱图技巧



NMR处理软件

- 核磁数据处理软件有：NUTS、MestRe-C、Gifa等，NUTS可以处理一维及二维核磁数据，其功能包括付立叶变换、相位校正、差谱、模拟谱、匀场练习等几乎所有核磁仪器操作软件的功能，其演示版可以在<http://www.acornnmr.com/>下载；MestRe-C为处理一维核磁数据的免费软件，功能完善。其最新版本为2.3，有兴趣者可以在<http://qobrue.usc.es/jsgroup/MestRe-C/MestRe-C.html>处查看有关信息即下载；Gifa可以处理一至三维核磁数据，为运行在LINUX操作系统中X-Window上的免费软件，有关信息可查看<http://www.cbs.univ-montp1.fr/GIFA/>。

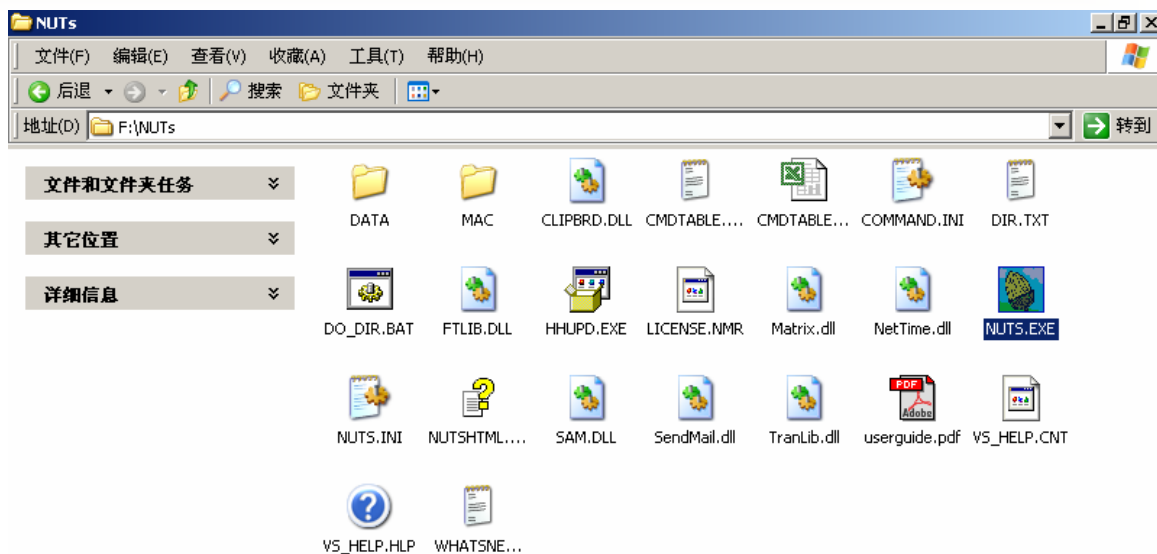
NUTs 基本操作

- 下载原始数据和NUTs软件
- 运行软件NUTs

可下载NUTs的服务器

10.13.51.87

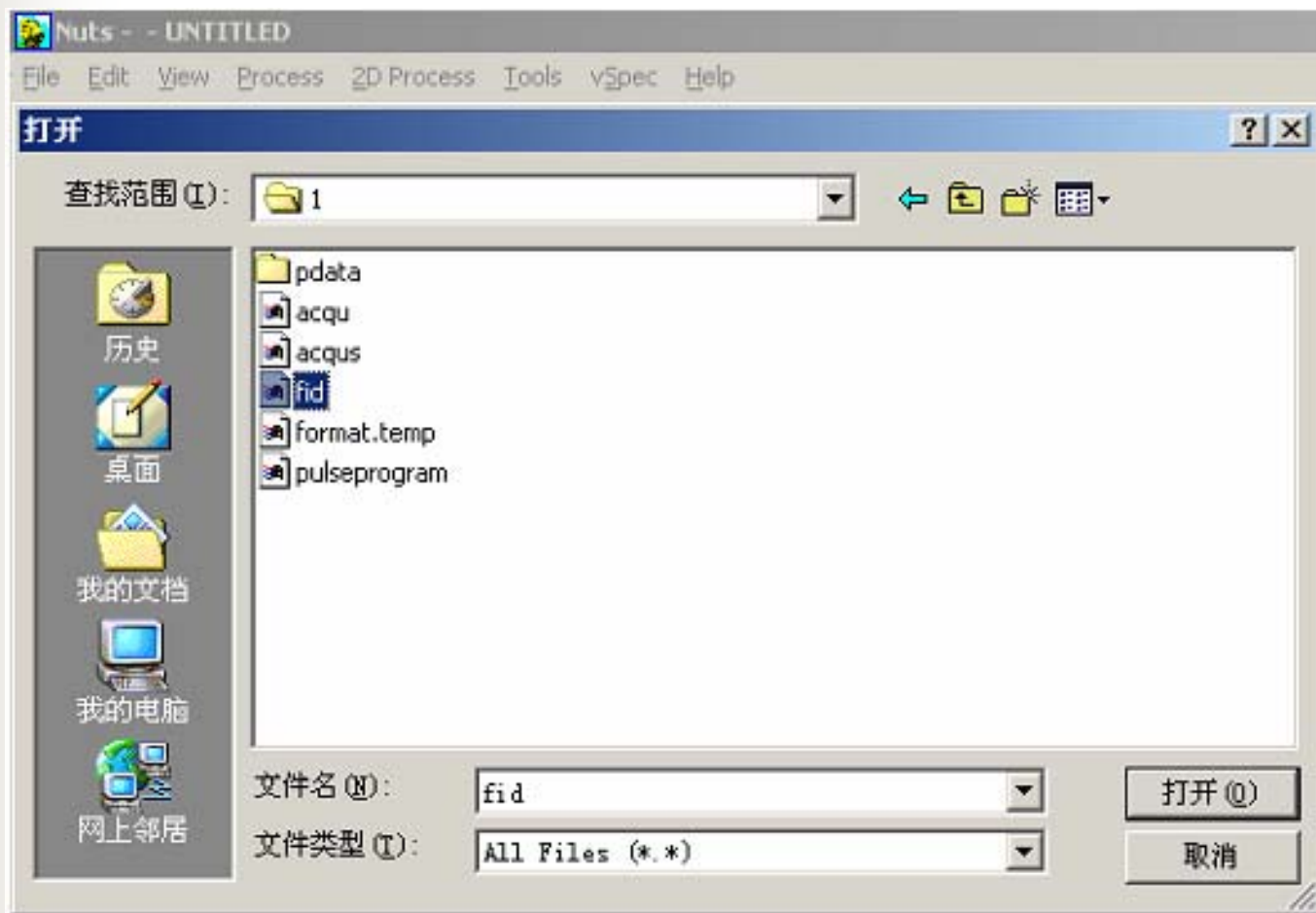
10.13.51.238



NUTs 基本操作

■ 获取NMR原始文件

打开NMR原始文件（可从服务器上下载）。一般文件名为FID
快捷命令“GA”

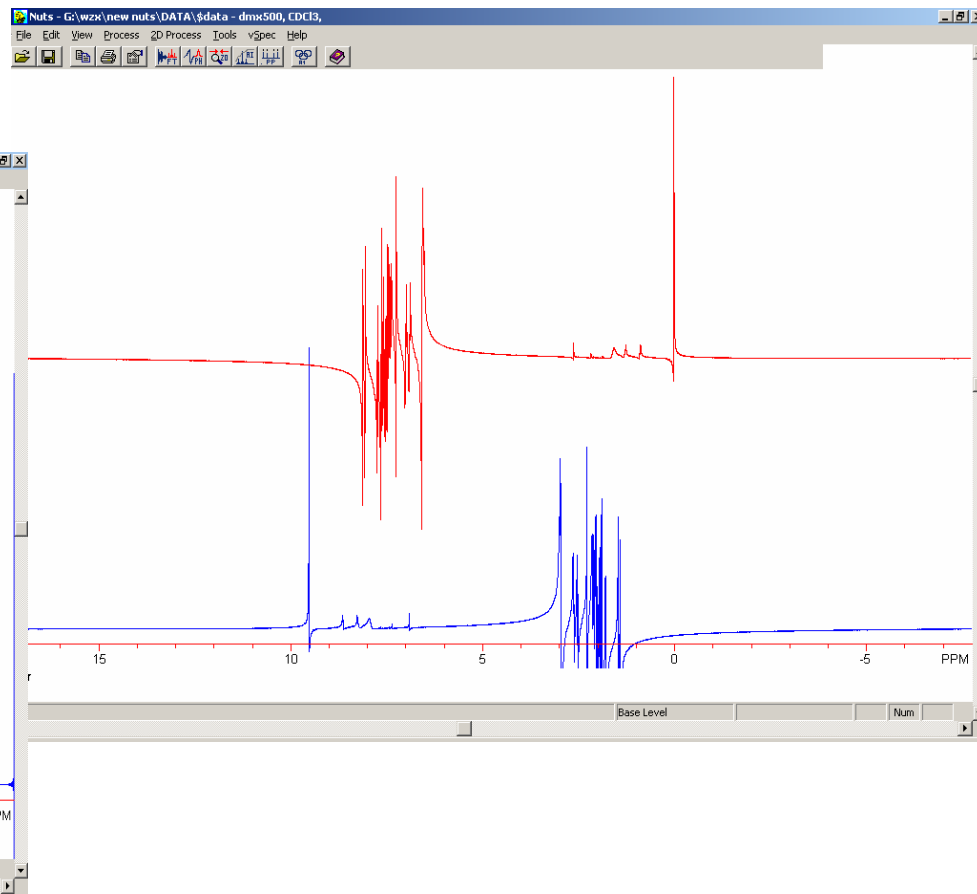
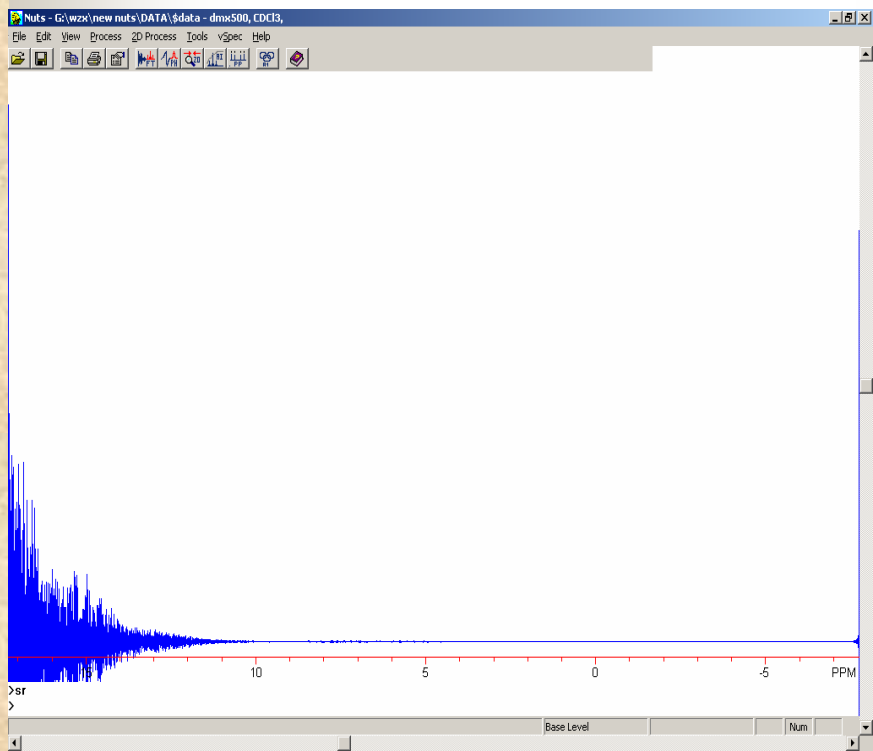


NUTs 基本操作

■ 谱图的傅立叶转换和翻转

快捷命令“SR”

快捷命令“FT”



NUTs 基本操作

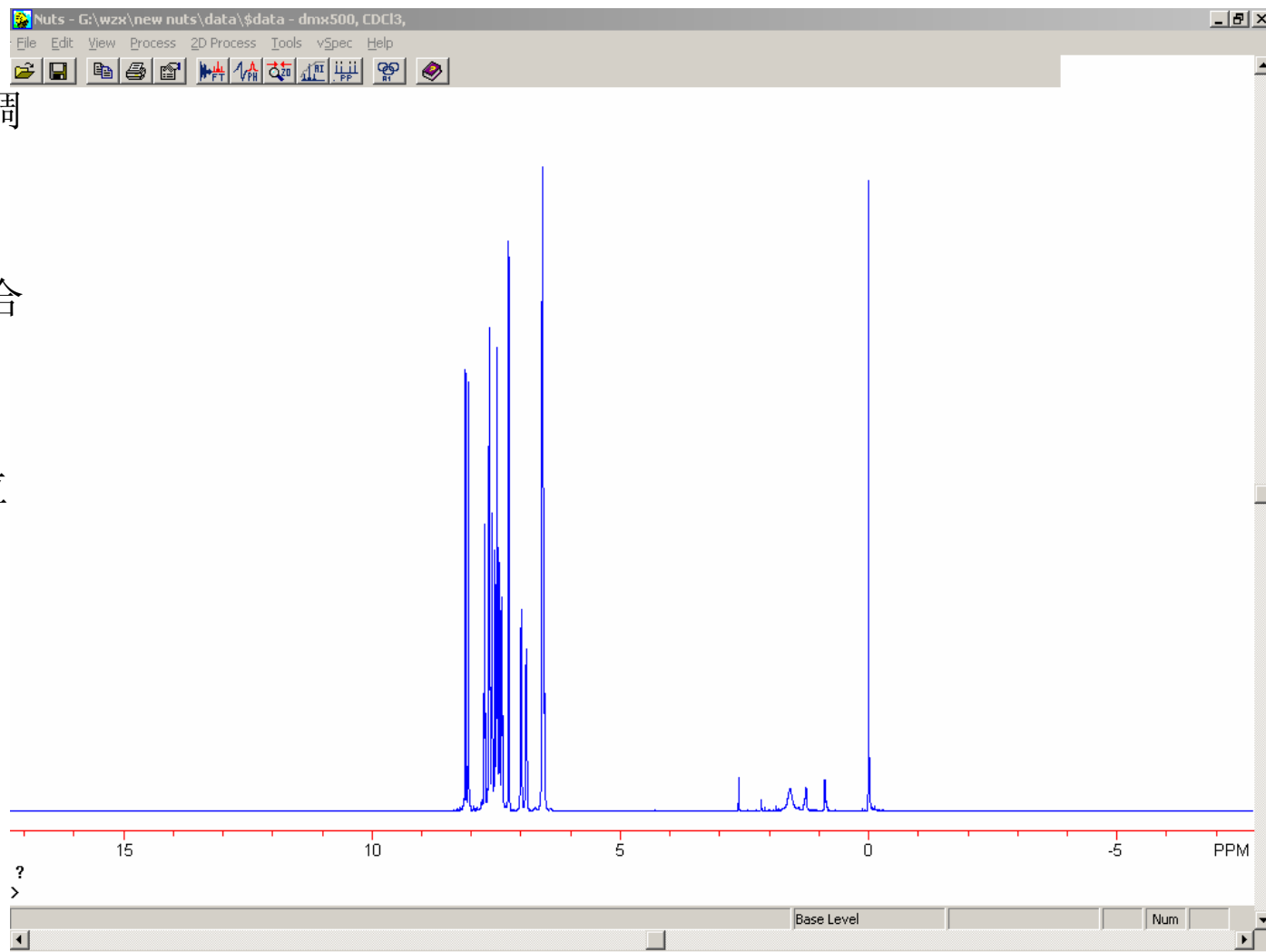
■ 相位调整

常用命令

“QP”、“AP”、
“QA”自动相位调整

“PH” 一般结合
“ZP” 命令应用

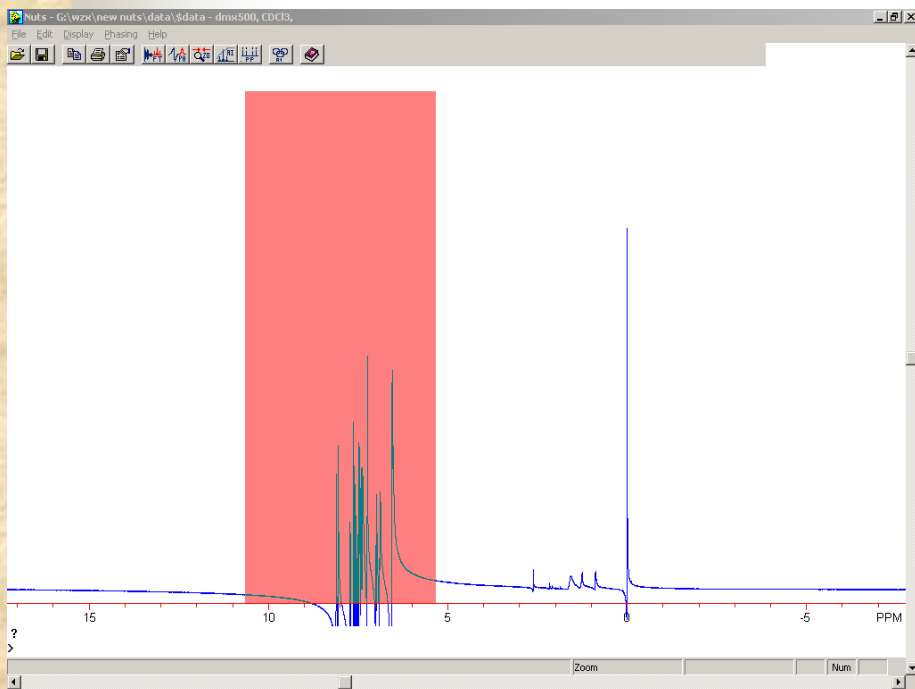
“PE” 手动相位
调整



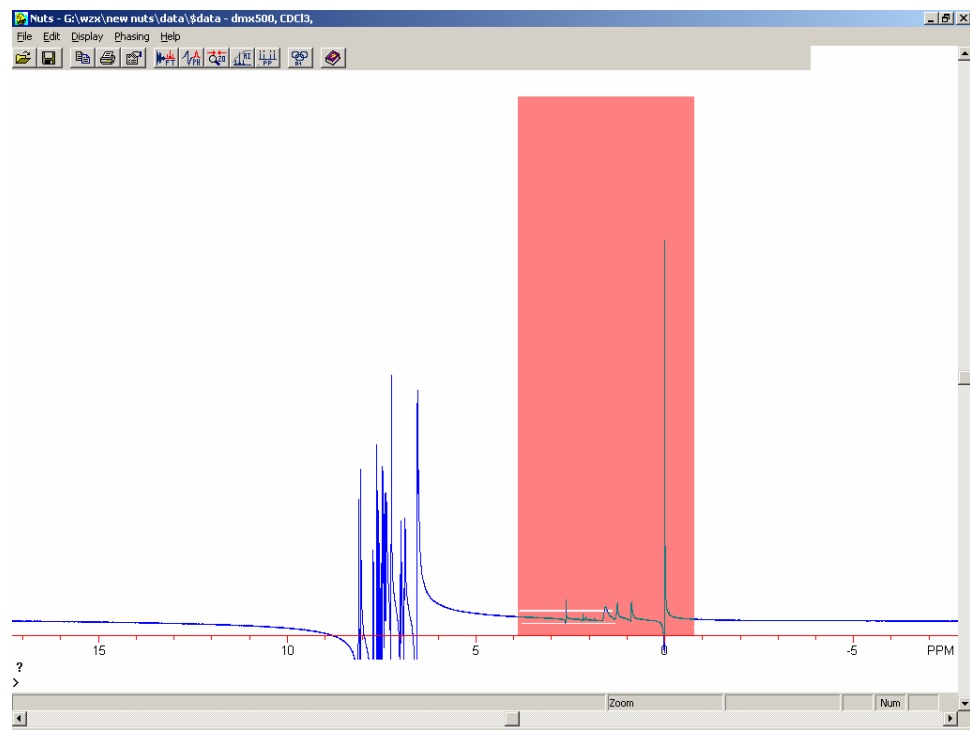
NUTs 基本操作

■ 相位调整

用“PE”命令对谱图作手动调整



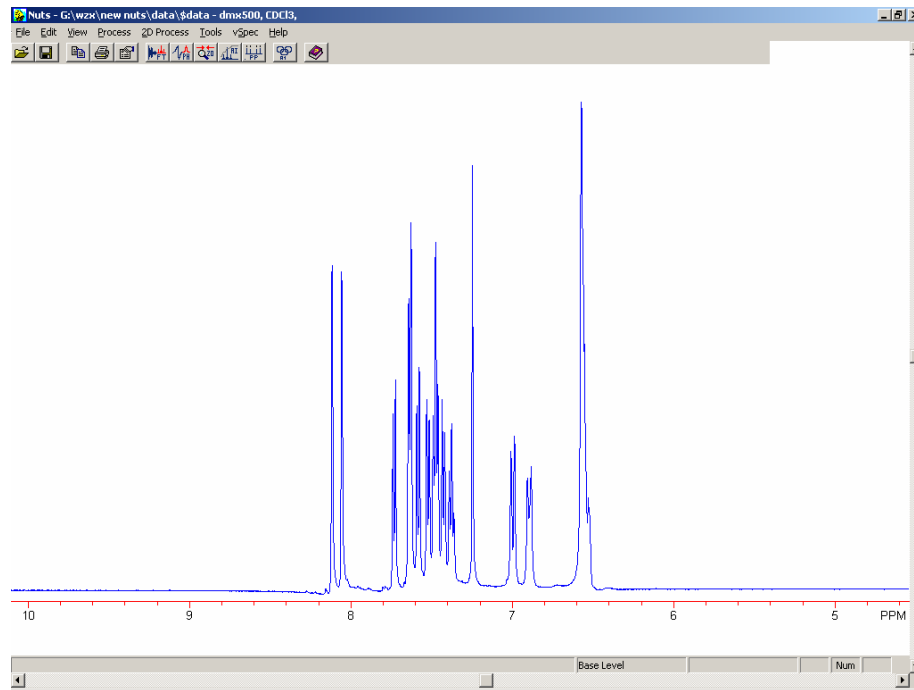
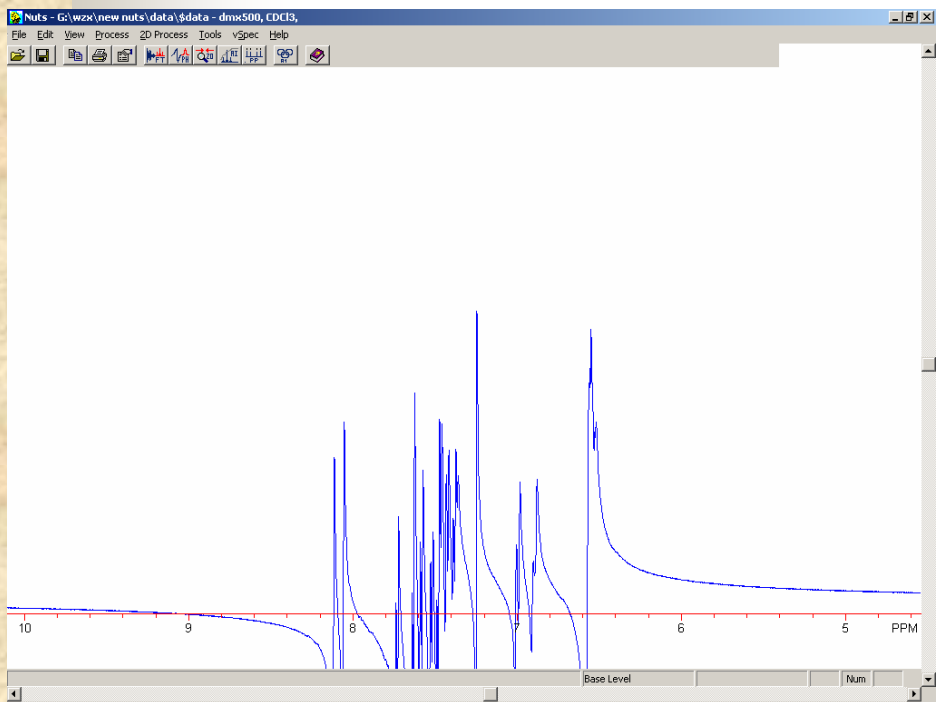
一、在图形界面上任意位置双击鼠标左键，将光标移到将要选定区域的起始位置后，按住鼠标的左键，拖动鼠标至区域终点，出现红色区域，选定后，按键“1”，定义为第一区域；用相同的方法选定第二区域，按“2”，定义为第二区域。选择完毕后输入回车（Enter）



NUTs 基本操作

■ 相位调整

用“PE”命令对谱图作手动调整

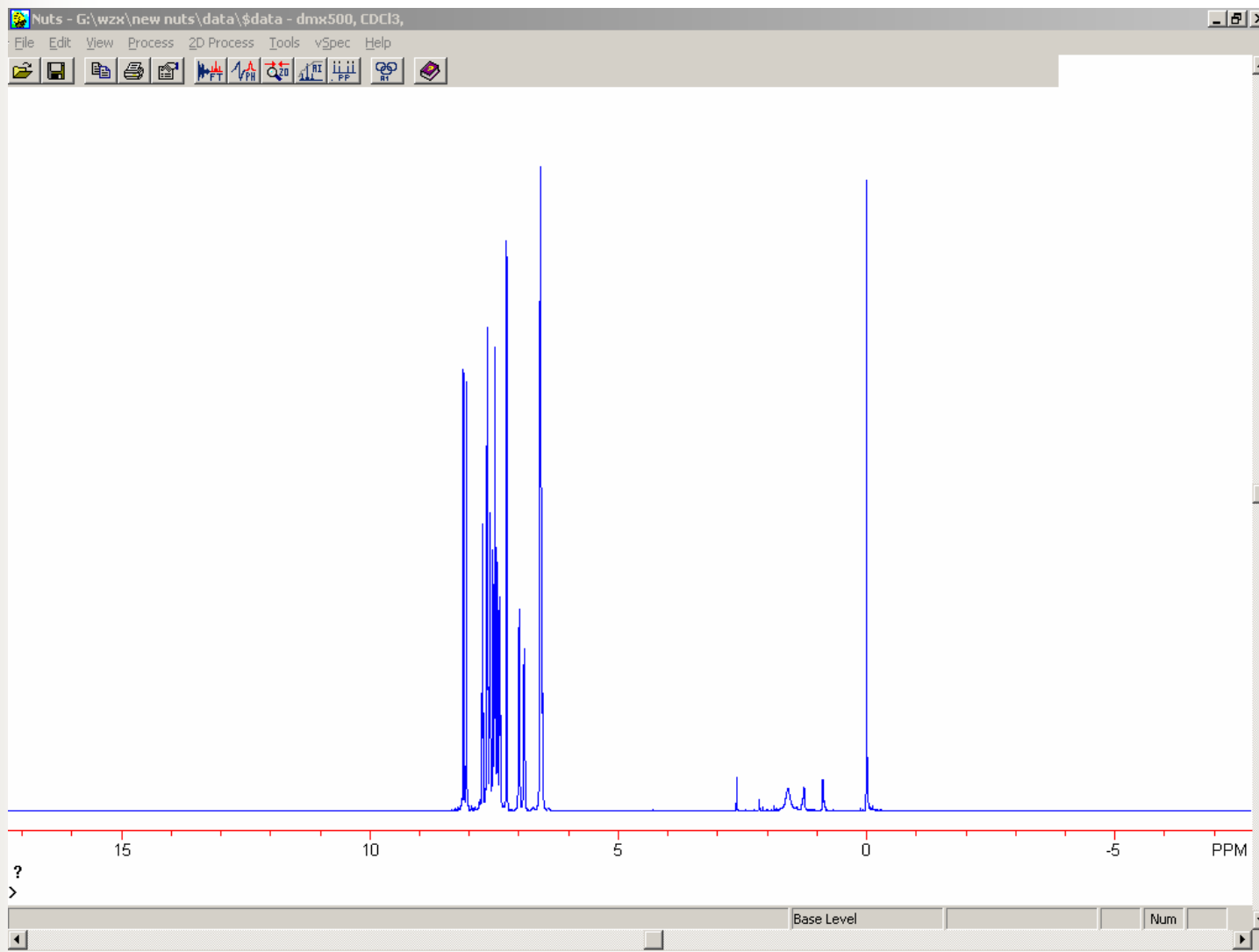


二、键入命令“PE”后，按住鼠标的左键，左右拖动对第一区域进行相位调整，调整完毕后，松开左键，按住右键，左右拖动对第二区域进行相位调整，调整完毕后，松开左键，输入回车（Enter）即完成手动相位调整。

NUTs 基本操作

■ 相位调整

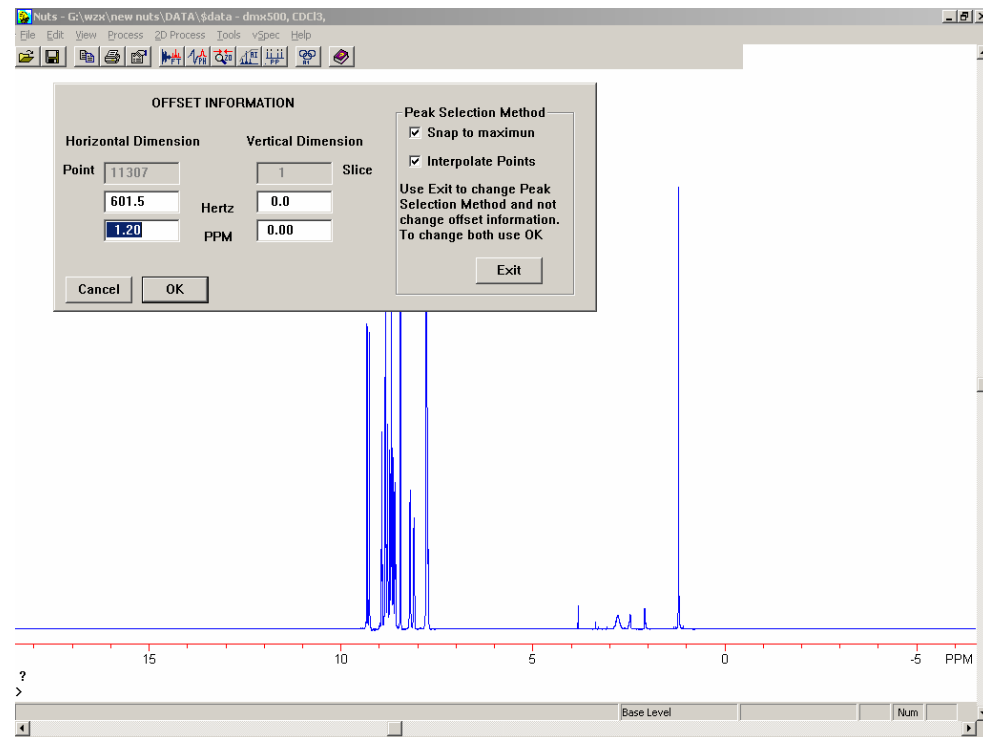
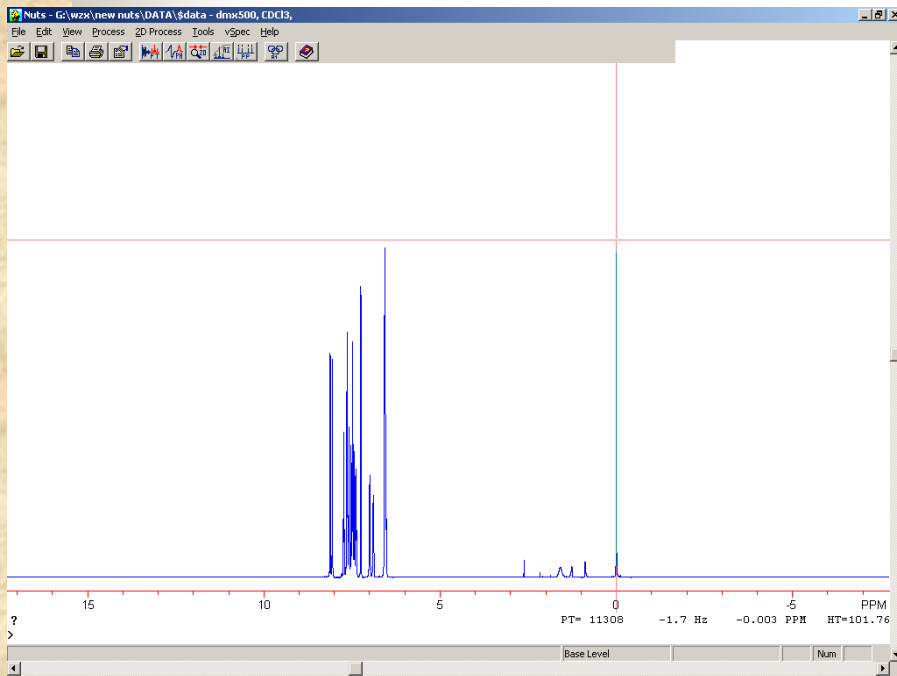
用“PE”命令对谱图作手动调整后的结果



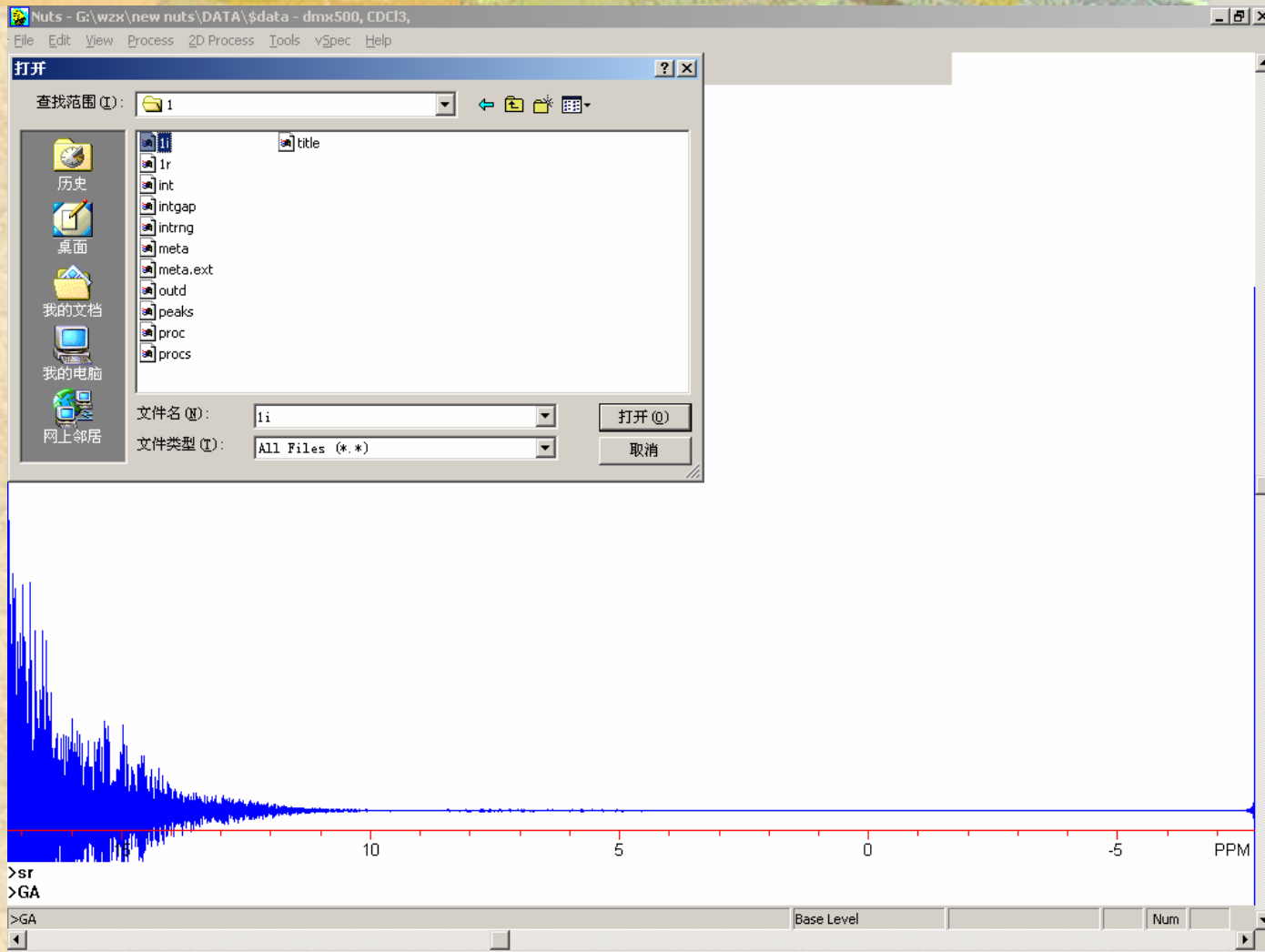
NUTs 基本操作

■ 确定零点或标准位移

按住鼠标左键，出现大的十字形光标，将光标移动到目标峰位置后，在不放松情况下，按键“O”，出现对话框，在对话框内输入相应的数值后，回车。



NUTs 基本操作

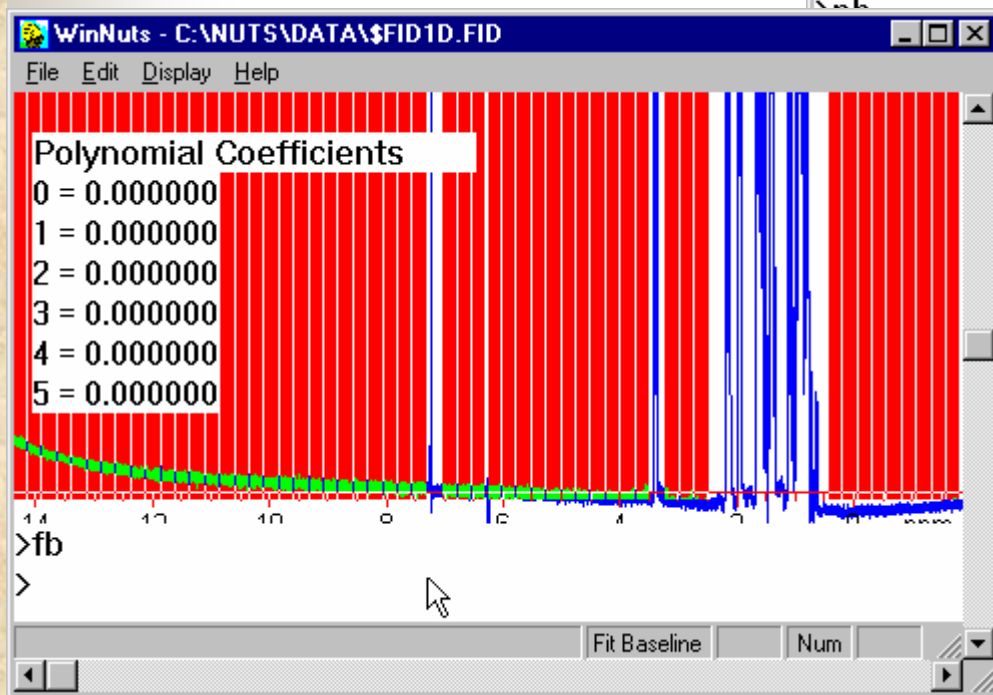
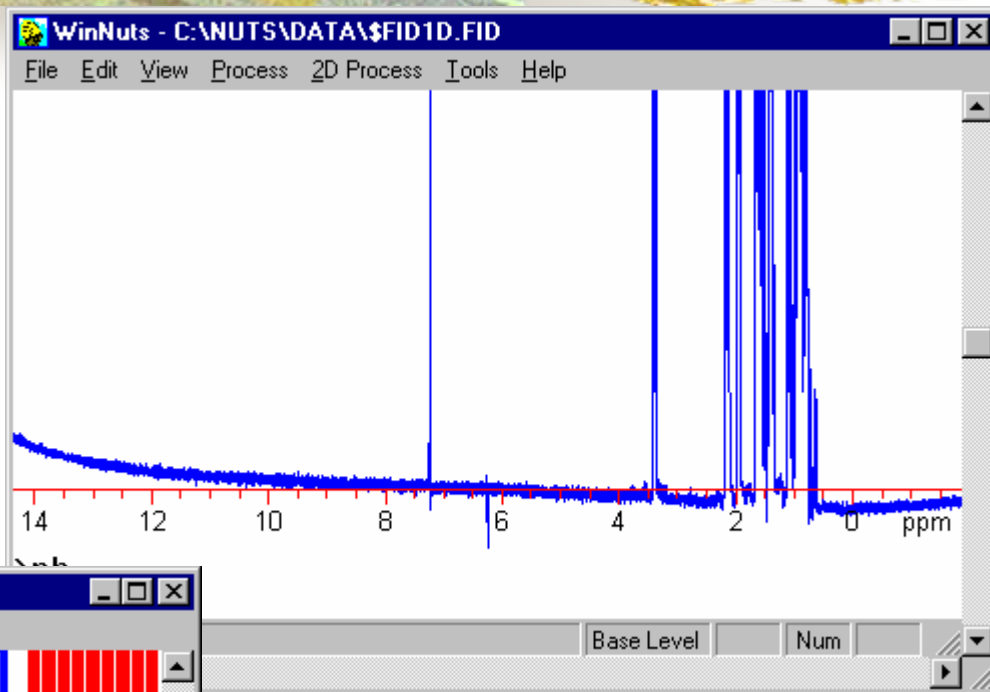


省略以上操作，直接得到已调整相位和零点的谱图的方法：
打开原始数据文件夹中“\pdata\1\”目录下的“1i”文件

NUTs 基本操作

■ 基线校正

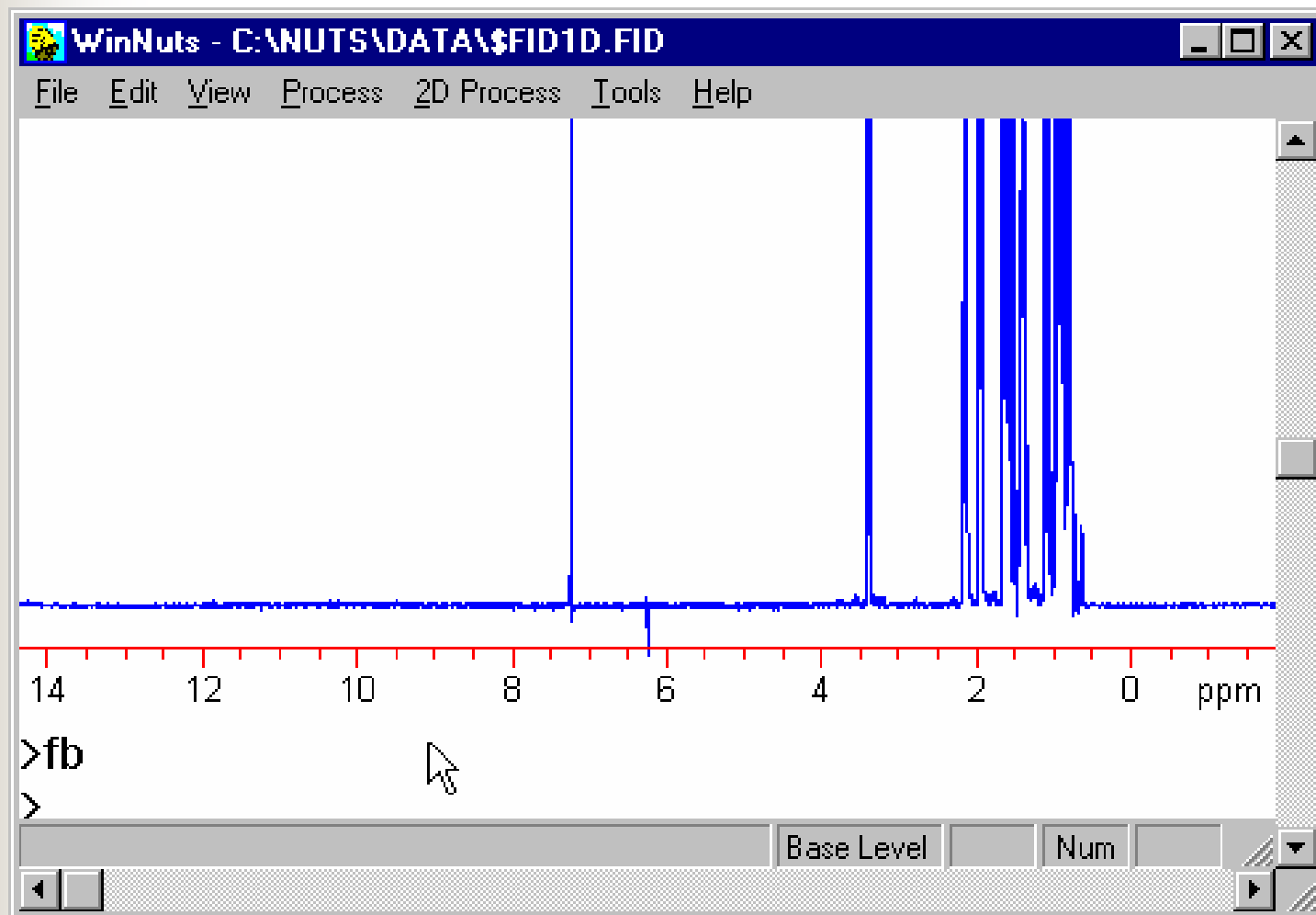
主要命令“**FB**”



在“**FB**”状态下，用命令“**L**”对基线进行最小二次校正，校正完毕后，用命令“**A**”确认校正。

NUTs 基本操作

■ 基线校正

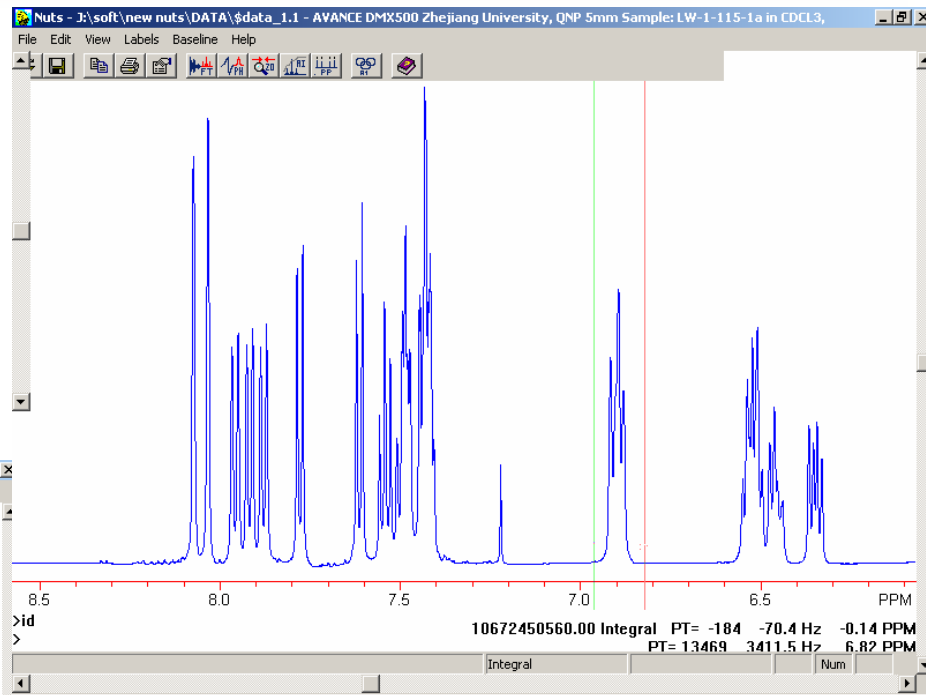


NUTs 基本操作

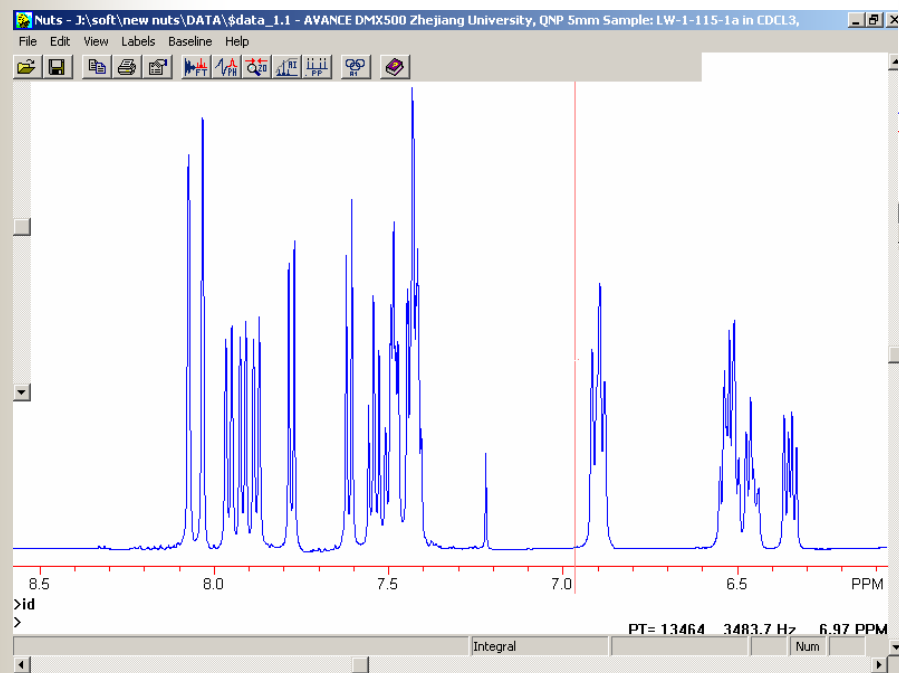
■ 积分

主要命令“ID”

用鼠标选定需要放大的区域后，点击鼠标右键，即可对选定区域进行放大操作；按 Enter 退出区域选定命令。



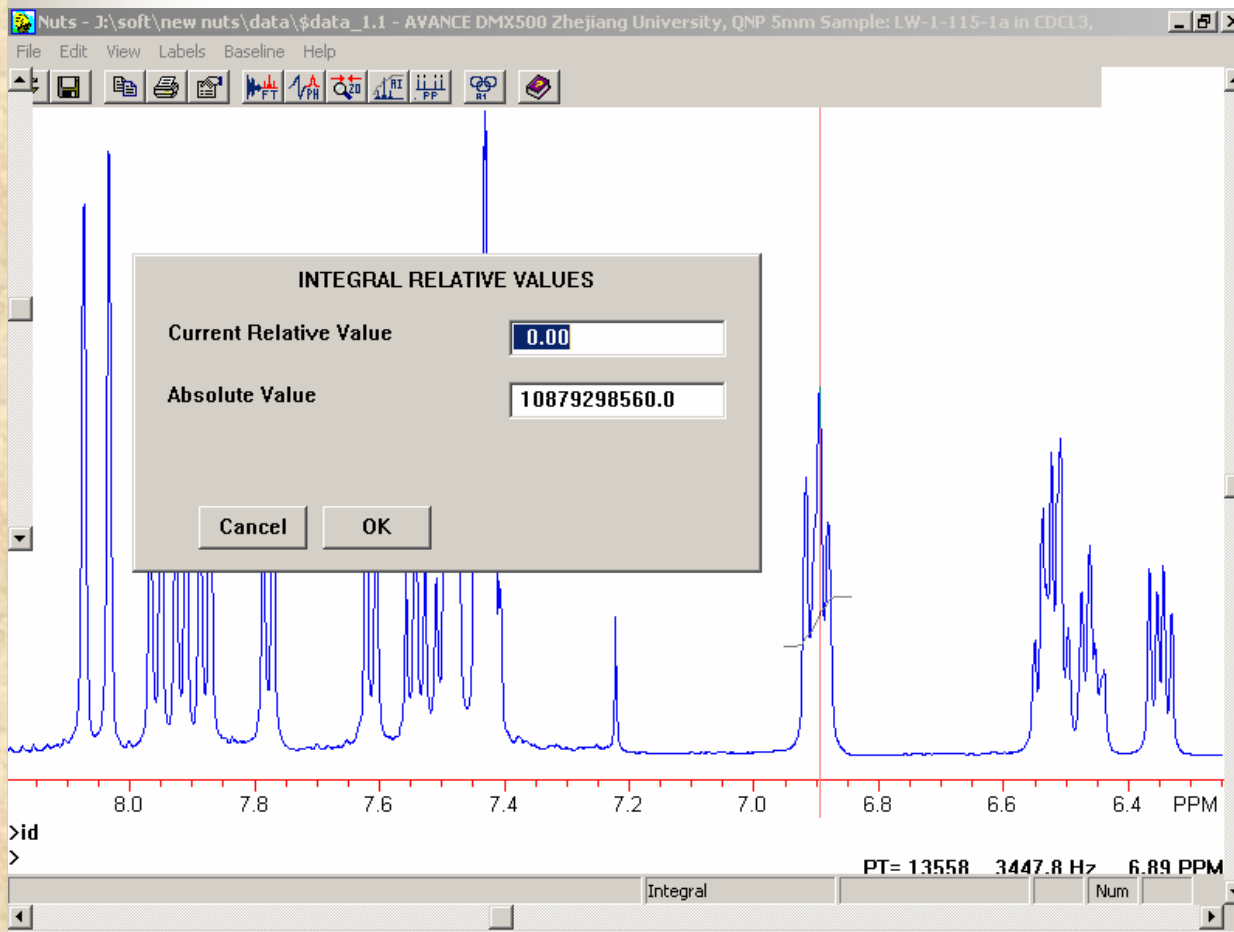
单击鼠标左键出现红色光标线，移动到积分的起点，单击左键，此时出现绿色光标线，移动到积分的终点，单击左键，即完成对某一峰的积分工作。重复操作即可对每个峰进行积分工作。



NUTs 基本操作

■ 积分

主要命令“**ID**” 按“**Ctrl+I**”显示积分值



单击鼠标左键，出现红色光标线，将光标移动到已积分好的峰上：

键入“**V**”，确定该峰的积分值，确定积分面积标准。

键入“**D**”可删除该积分，进行重新积分。

键入“**M**”可调节积分数值在谱图中的位置：**1**次-底部；**2**次-上部；**3**次-复原。

分别键入“**1**”，“**2**”，“**3**”分别调节积分数值的高低

NUTs 基本操作

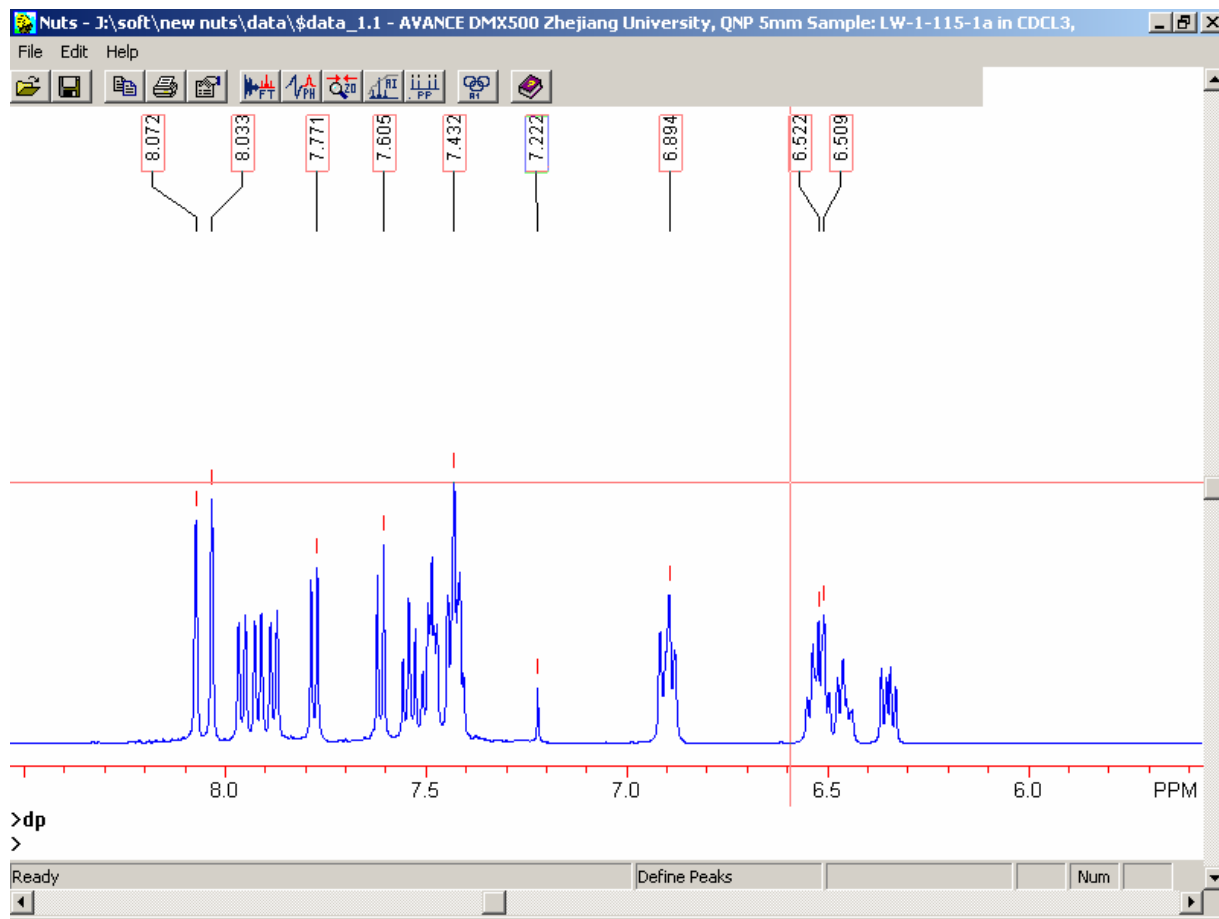
■ 峰值标定

主要命令“PP”，“DP”

键入“DP”命令后，出现十字光标，将光标移动到想要标示的峰上，点击鼠标左键，重复操作可以对每一个想要标示的峰进行标示。

可以在此命令状态下，按住鼠标左键（此时数字框变成蓝色），键入命令“D”来删除某一个特定的峰值

用“Ctrl+P”命令决定是否显示峰值。



NUTs 基本操作

■ 峰值编译

主要命令 “PP”, “DP”

键入“DP”命令后, 将光标放在所要编译的峰上, 点击鼠标右键, 出现编译对话框。

PEAK INFORMATION

Peak Number	Horizontal	Point	Vertical
5	12854		0
0	3716.9	Hertz	0.0
0.000000	7.432	PPM	0.000

Absolute Intensity: 493952992 Absolute Area/Volume: NA
Relative Intensity: 102.5 Relative Area/Volume: NA

Show info field only Vertical Font Label at Page Top
 Show line to peak Show first argument only

Label (Info Field)

5

Automatically attempt to prevent label overlaps Cancel OK

Label at Page Top: 决定峰值的显示是否在谱图的最上面。如果取消对其的选择可以将峰值放在任何想要放的位置。

Show Info field only: 显示用户想要显示的数据或文字

NUTs 基本操作

■ 字体设定

在菜单栏中选择“EDIT”下“SET FONTS”中的各个命令，对字体进行设定

■ 图谱的复制和粘贴

Copy enhanced metafile to clipboard (**Alt-Shift-E**)

Copy enhanced metafile to file (**Ctrl-Alt-E**)

NUTs 特殊操作

■ 多重图谱的显示

主要命令：“**IS**”，“**DD**”，“**BU**”

IS: 插入图谱。

选定想要插入部分谱图后，键入或选择命令“**IS**”，在此状态下键入命令“**A**”，即完成对谱图的插入。重复操作，可插入多个谱图单元。在键入命令“**IS**”之前也可以打开另一个图谱，将当前图谱插入下一谱图中。

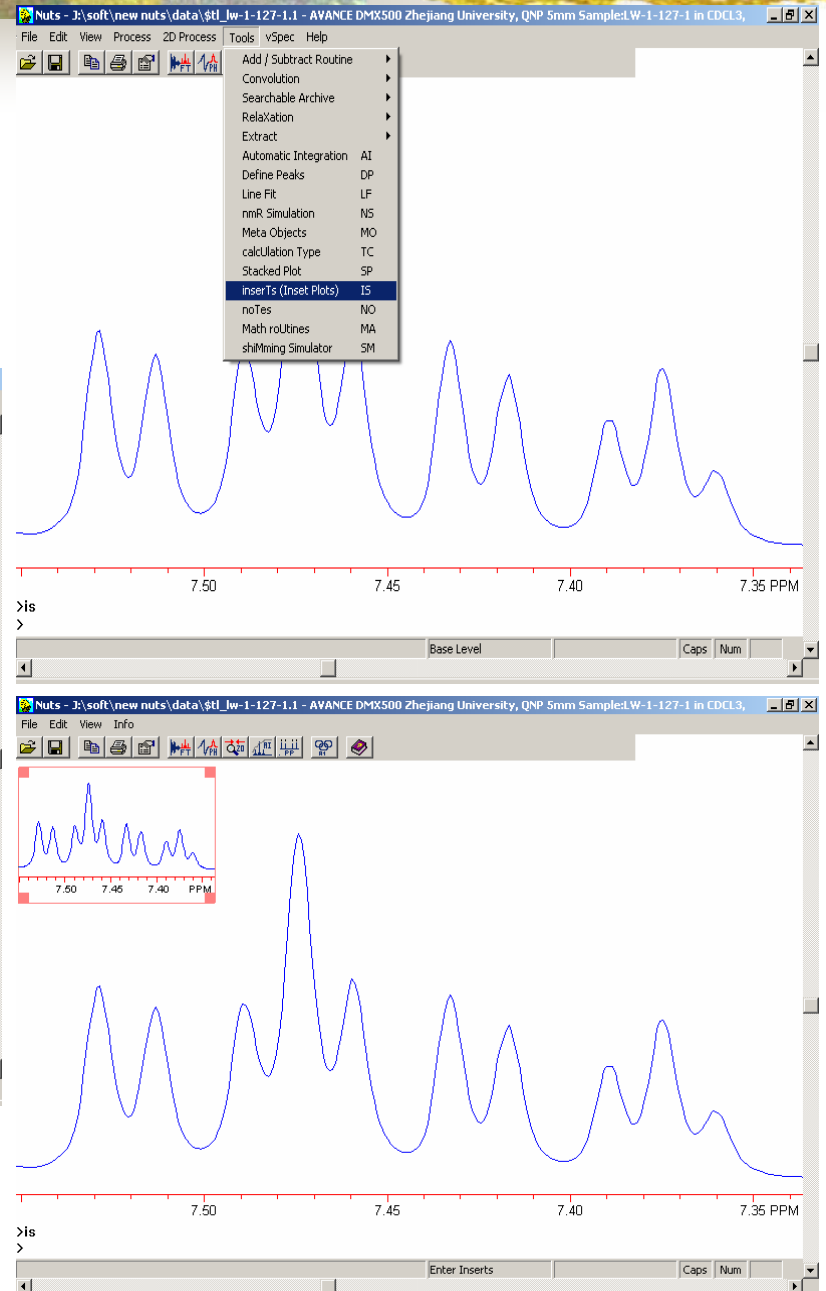
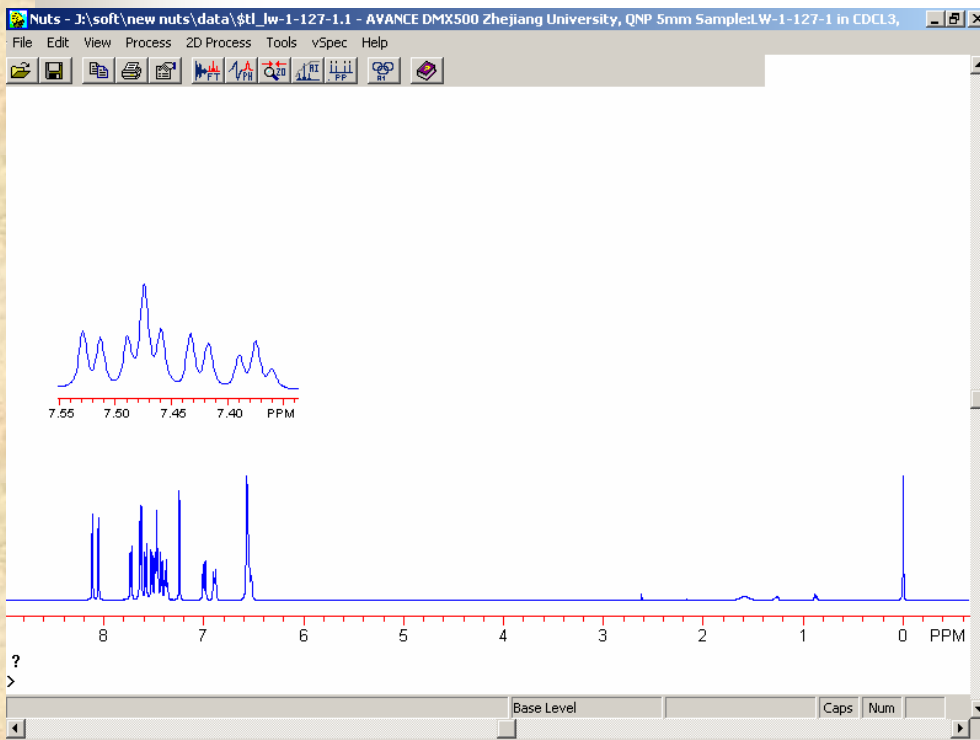
在“**IS**”命令状态下，对插入的图谱进行移动、字体、坐标轴、显示等方面的编译

优点：插入的谱图有坐标轴、可以对其进行编译

缺点：只能显示双谱，且不可进行两谱图间的操作

NUTs 特殊操作

■ 多重图谱的显示 IS



NUTs 特殊操作

■ 多重谱图的显示

主要命令：“**IS**”，“**DD**”，“**BU**”

DD：双图谱显示，并对其对比和进行加、减操作

先将需要插入的图谱进行一些基本操作（如FT、SR、PE）之后，键入或选择命令“**AL**”，打开另一个需要对比的图谱，适当处理后，键入命令“**DD**”，即可调出上一图谱。用“**AM**”编译前一谱图。

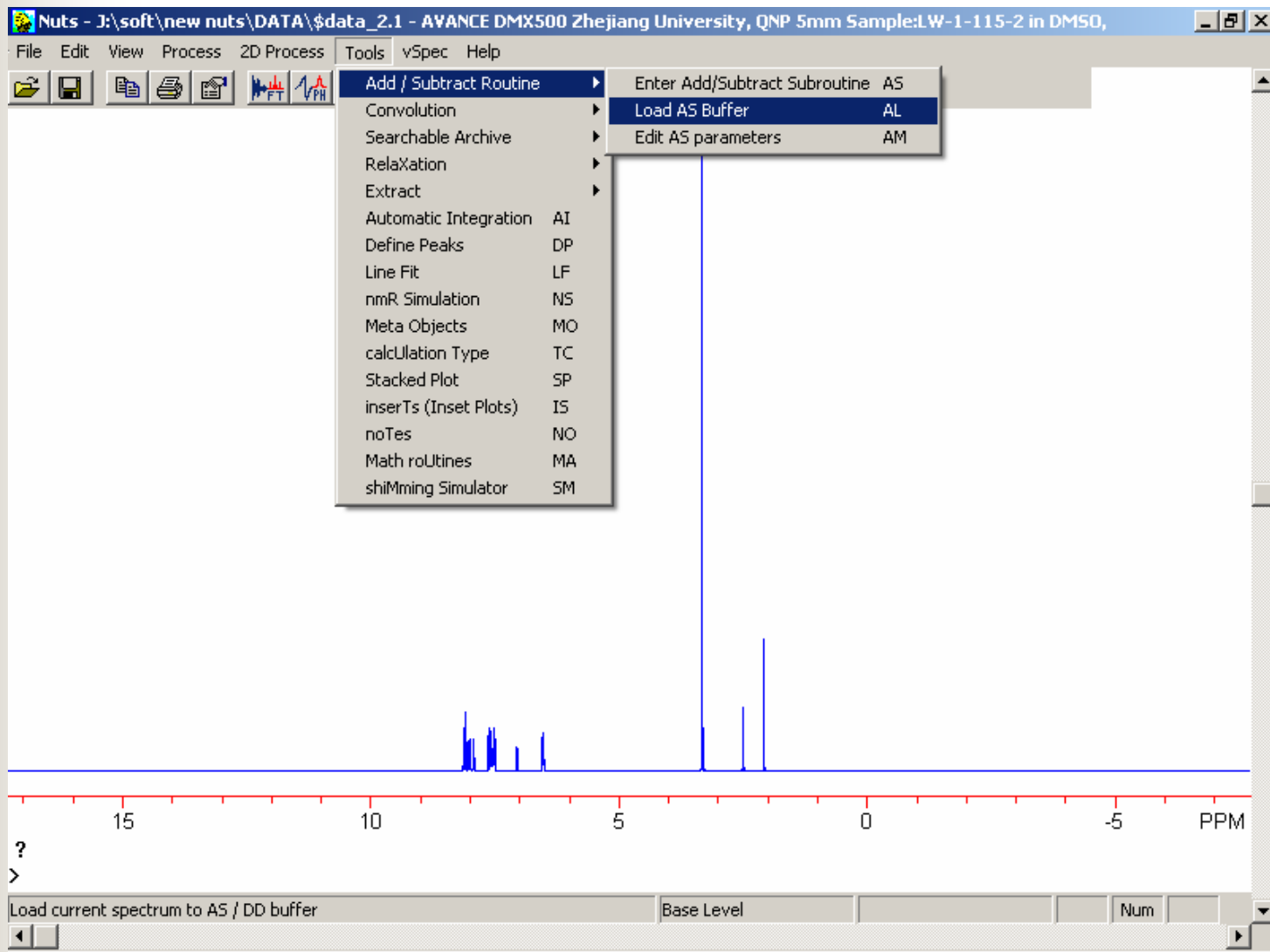
AS命令下可以对两个谱图进行加、减等操作。

优点：双谱图显示，可进行加减操作，应用广泛

缺点：无法实现多谱图显示

NUTs 特殊操作

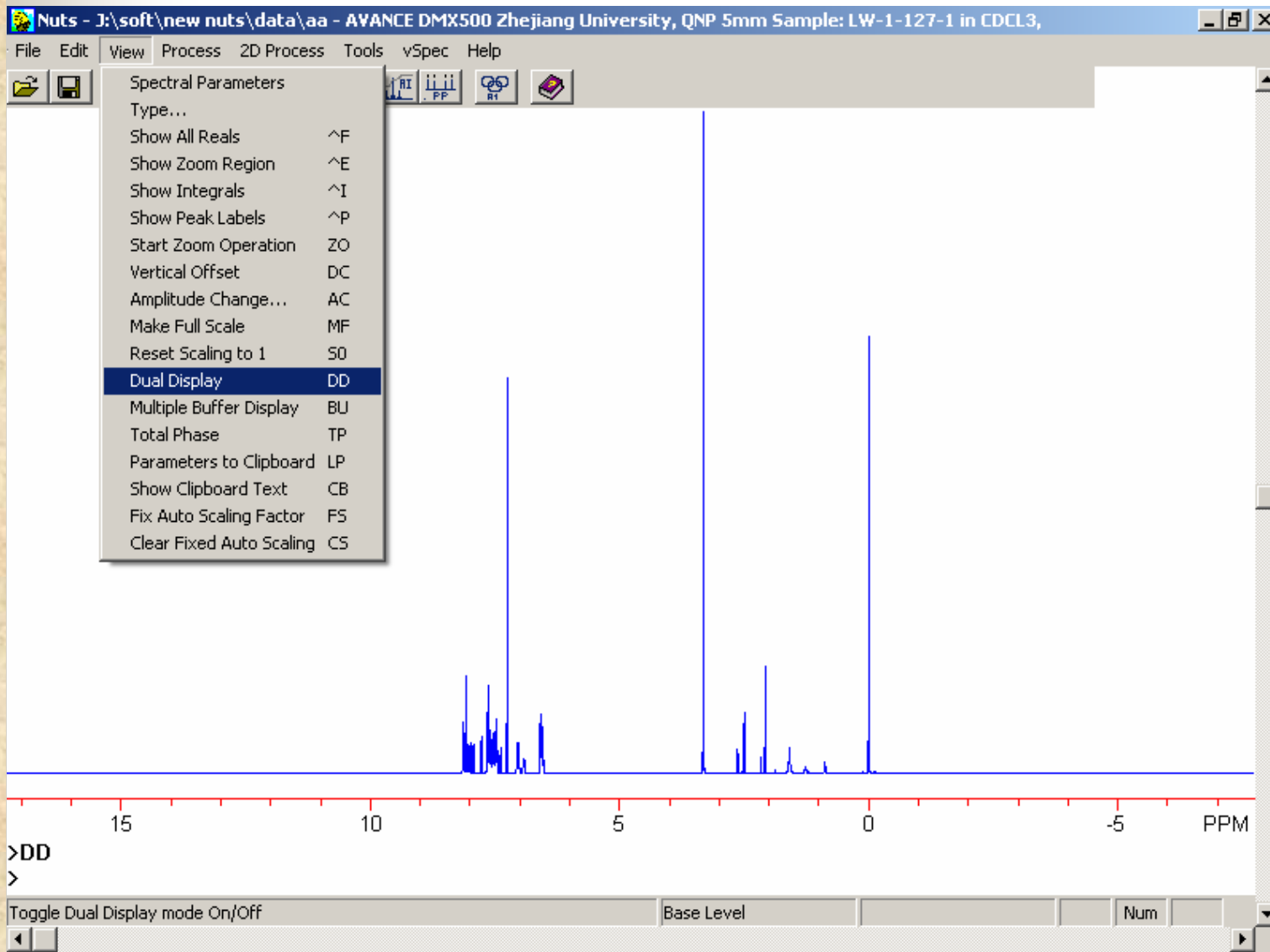
■ 双重谱图的显示 DD



“AL”
命令

NUTs 特殊操作

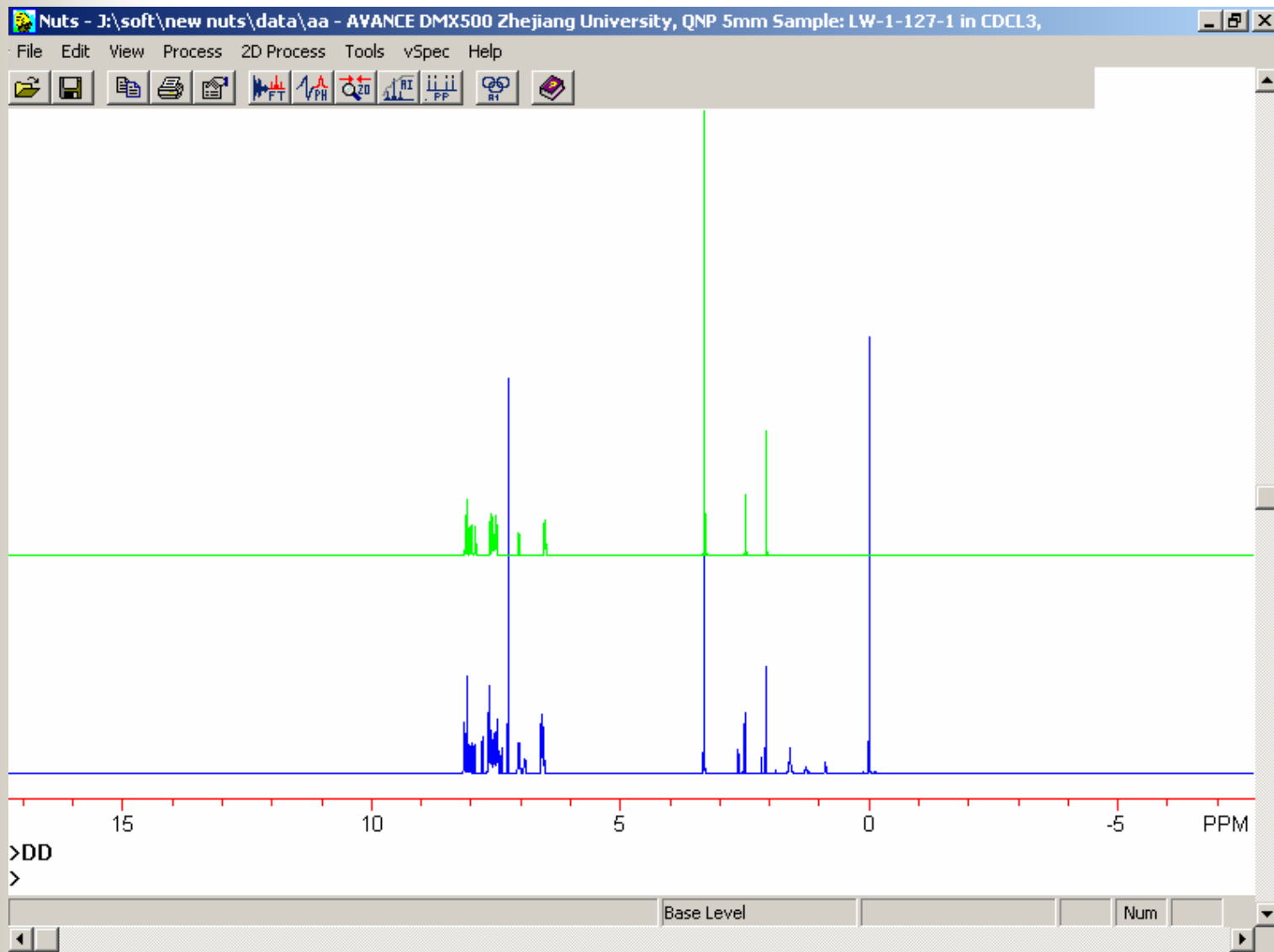
■ 双重谱图的显示 DD



图示运用“DD”命令

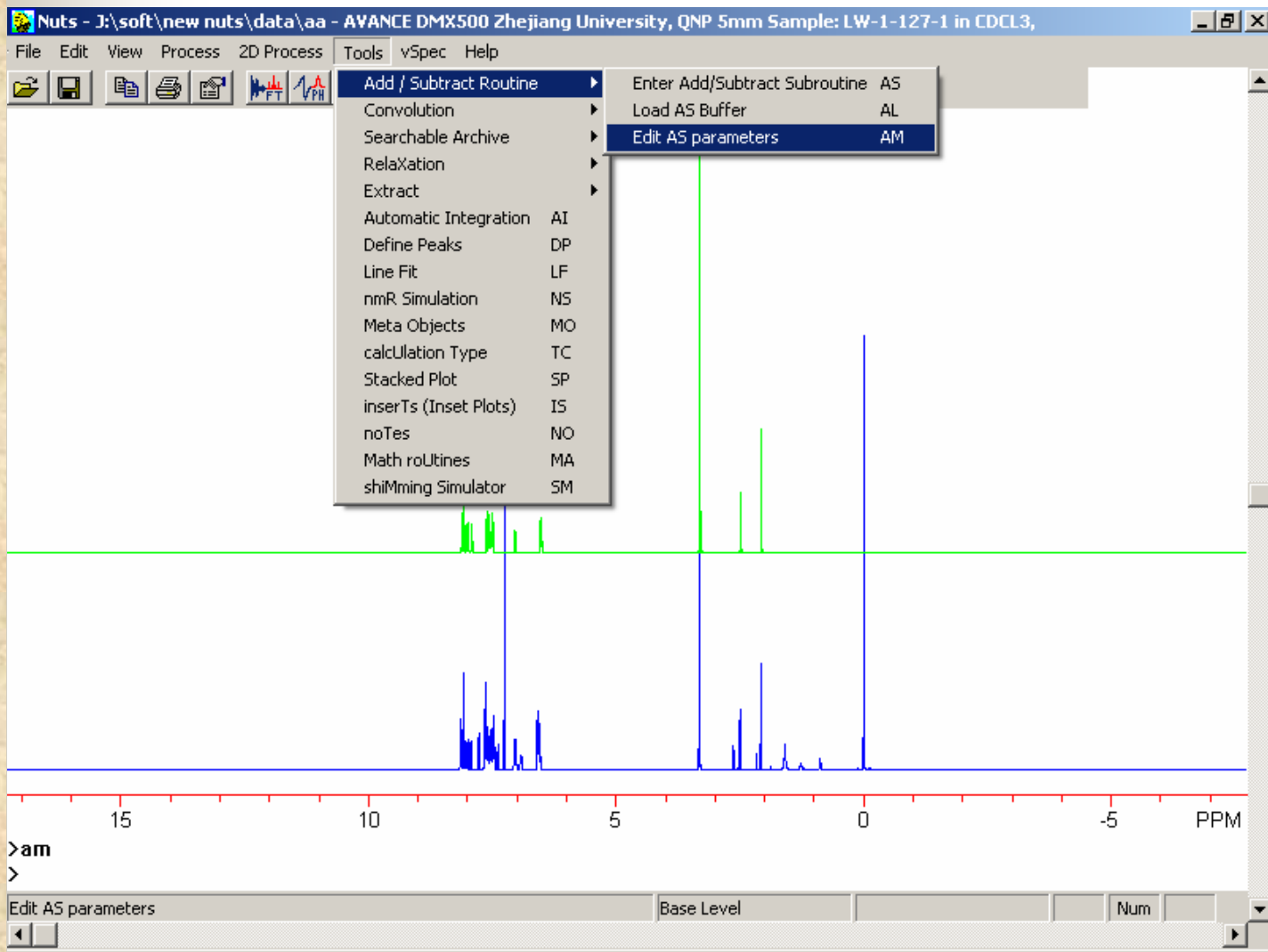
NUTs 特殊操作

■ 双重谱图的显示 DD



NUTs 特殊操作

■ 双重谱图的显示 DD

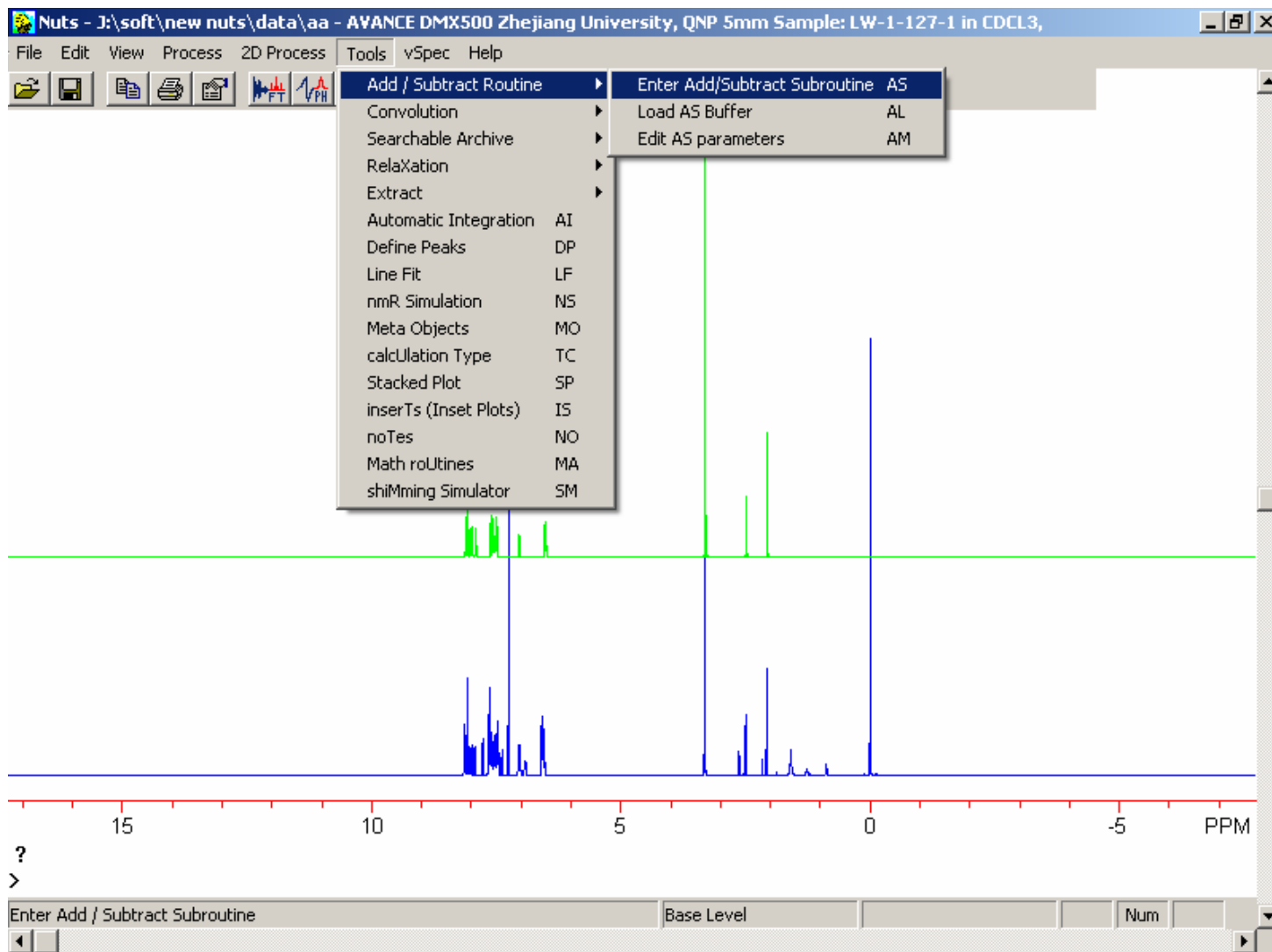


图示运用
“AM”命令

NUTs 特殊操作

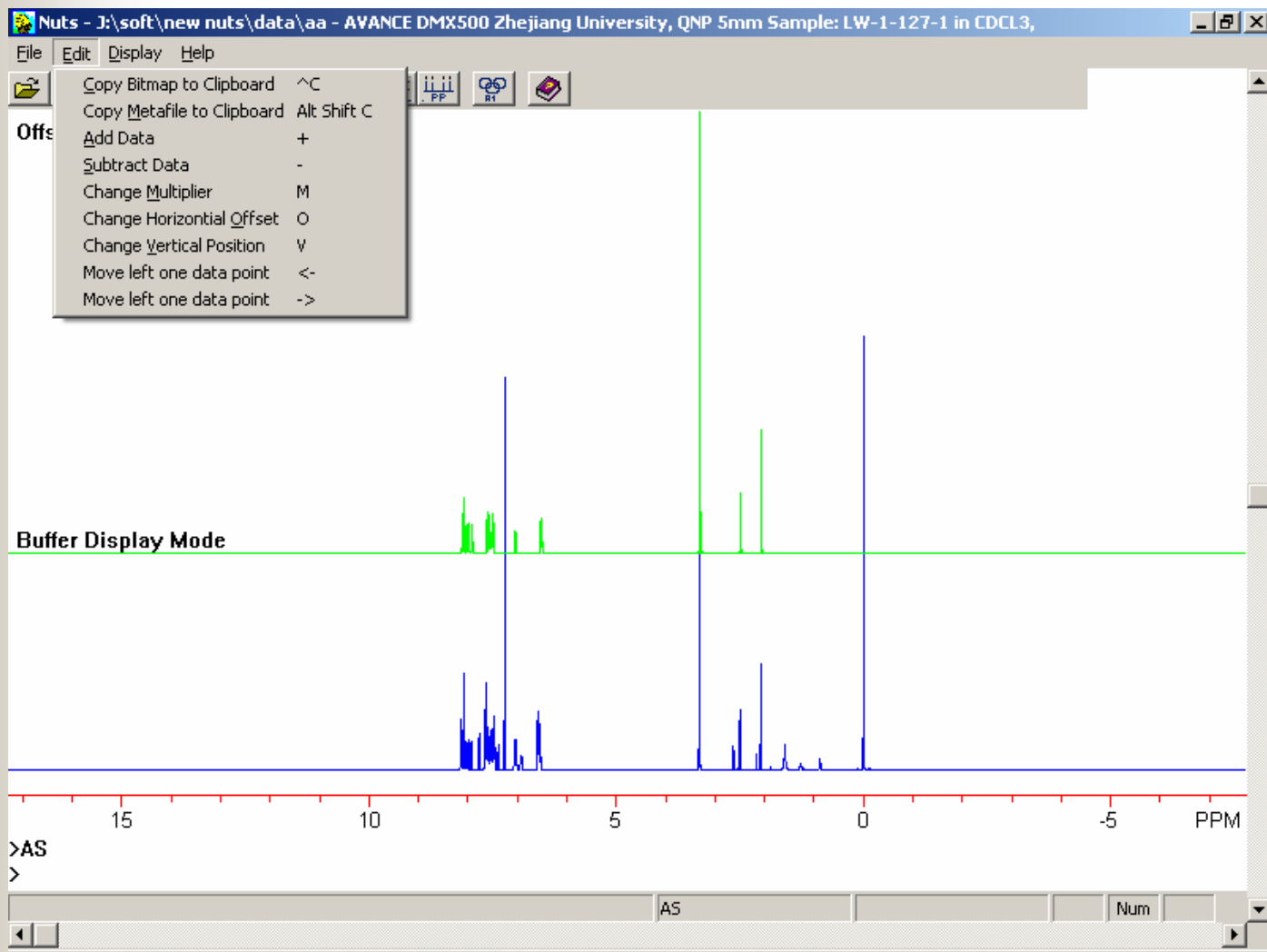
■ 双重谱图的显示 DD

图示运用“AS”命令



NUTs 特殊操作

■ 双重谱图的显示 DD



在AS命令
状态下的
编译栏命
令

NUTs 特殊操作

■ 多重谱图的显示 BU

BU: 将需要对比的谱图进行一般的处理之后，键入或选择命令“BU”，在此命令状态下将当前谱图转入缓存通道中，回车退出“BU”后，即可打开第二张谱图，一般处理完毕后，键入命令“BU”即可对两张图谱进行对比操作，也可以将当前图谱加入其余的缓存通道内，继续打开第三张图谱。

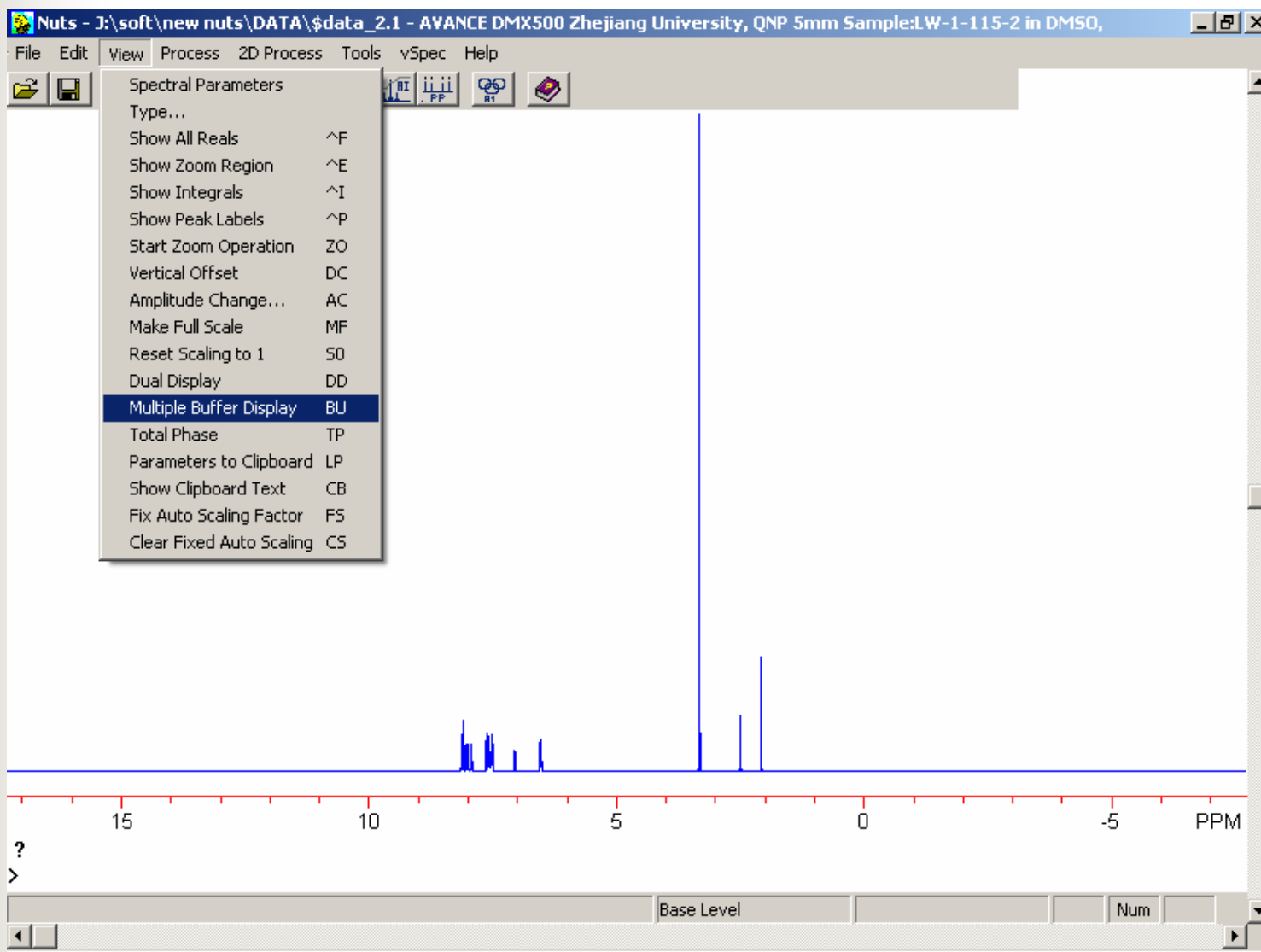
在“BU”命令条件下可以对每个缓存谱图进行处理。

将所有需要对比的谱图放入相应的缓存内后，可以显示每个缓存内的图谱，点击在“BU”状态下“View”菜单下的“Display buffers outside of BU”命令，回车后即可在无BU状态下，显示所有的缓存谱图。

优点：可显示多谱图，并对其进行处理

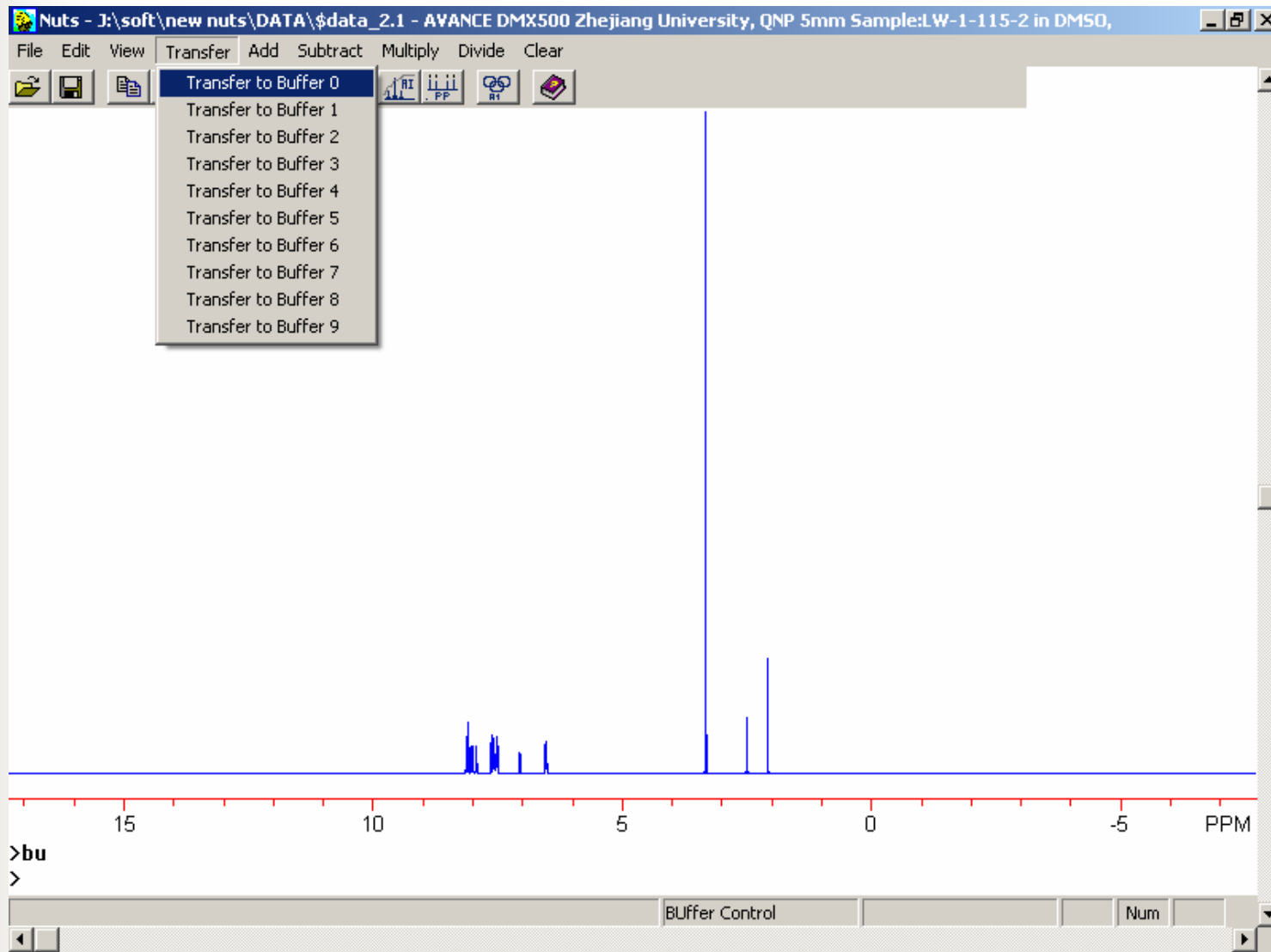
NUTs 特殊操作

■ 多重谱图的显示 BU



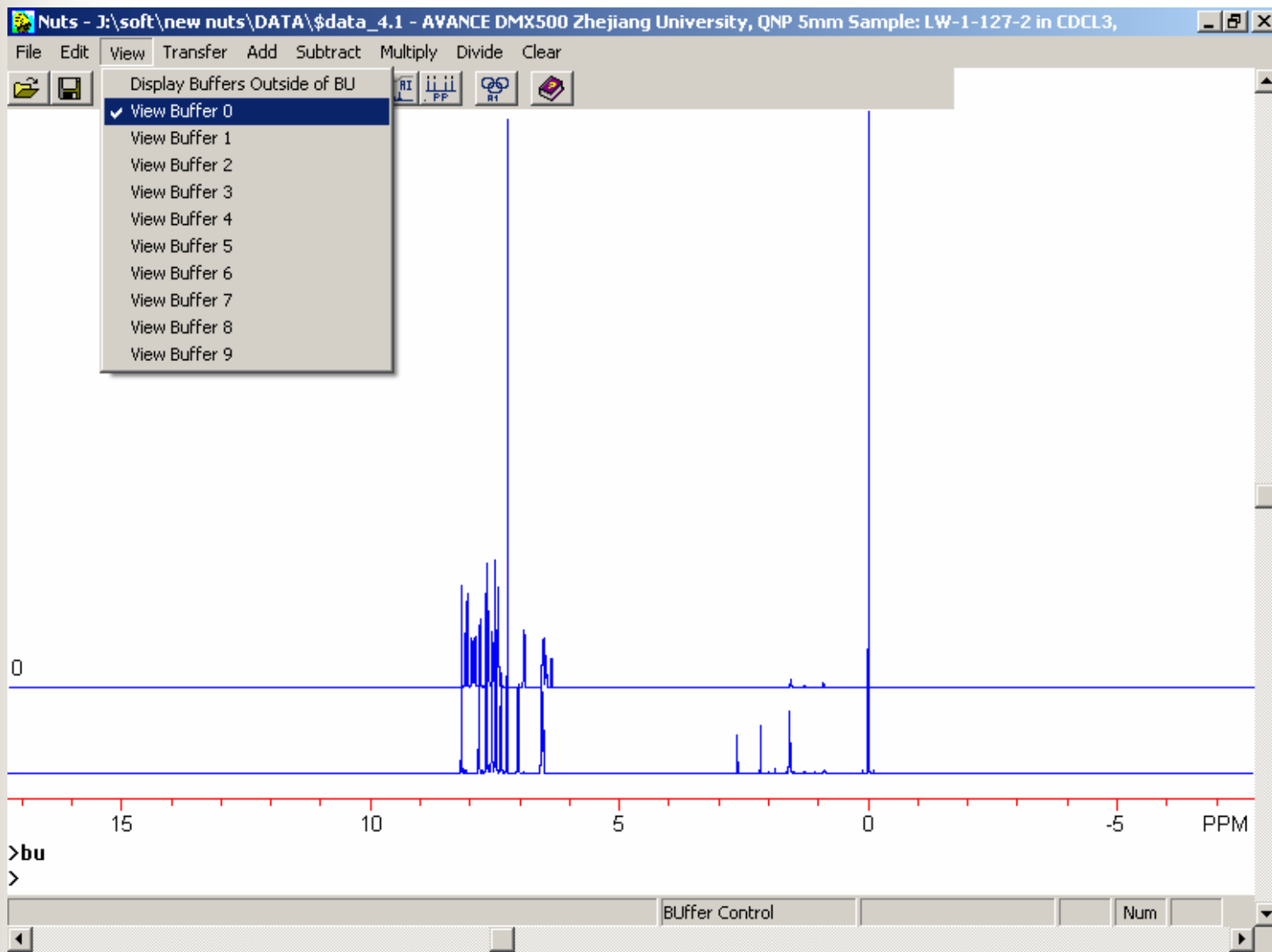
NUTs 特殊操作

■ 多重谱图的显示 BU



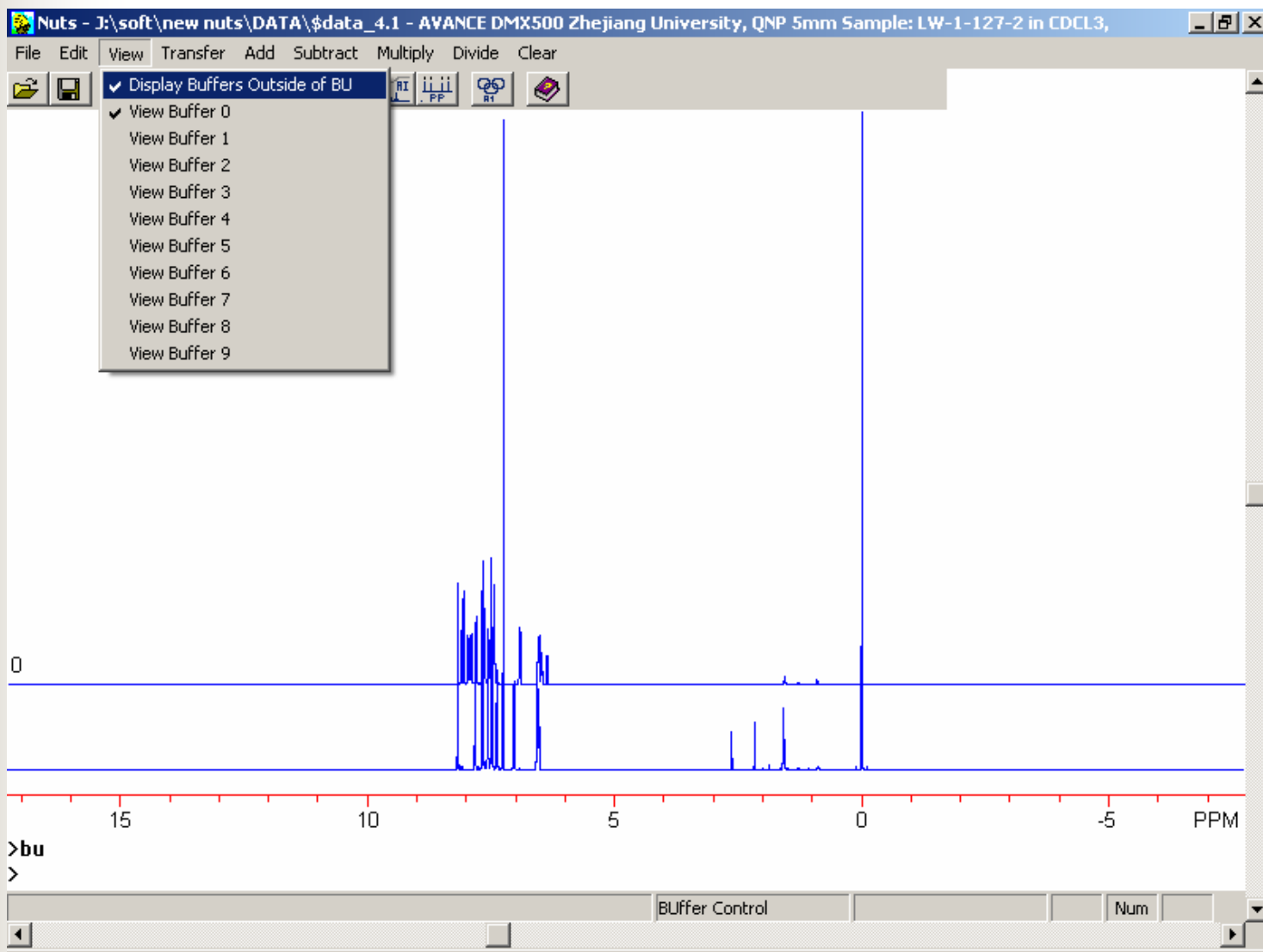
NUTs 特殊操作

■ 多重谱图的显示 BU



NUTs 特殊操作

■ 多重谱图的显示 BU



NUTs 特殊操作

■ 插入注释用图片或文字

主要命令“**MO**”和“**NO**”

键入或选择命令“**MO**”,会出现如右图的对话框

I: 插入Windows 图元文件（后缀名为 wmf）

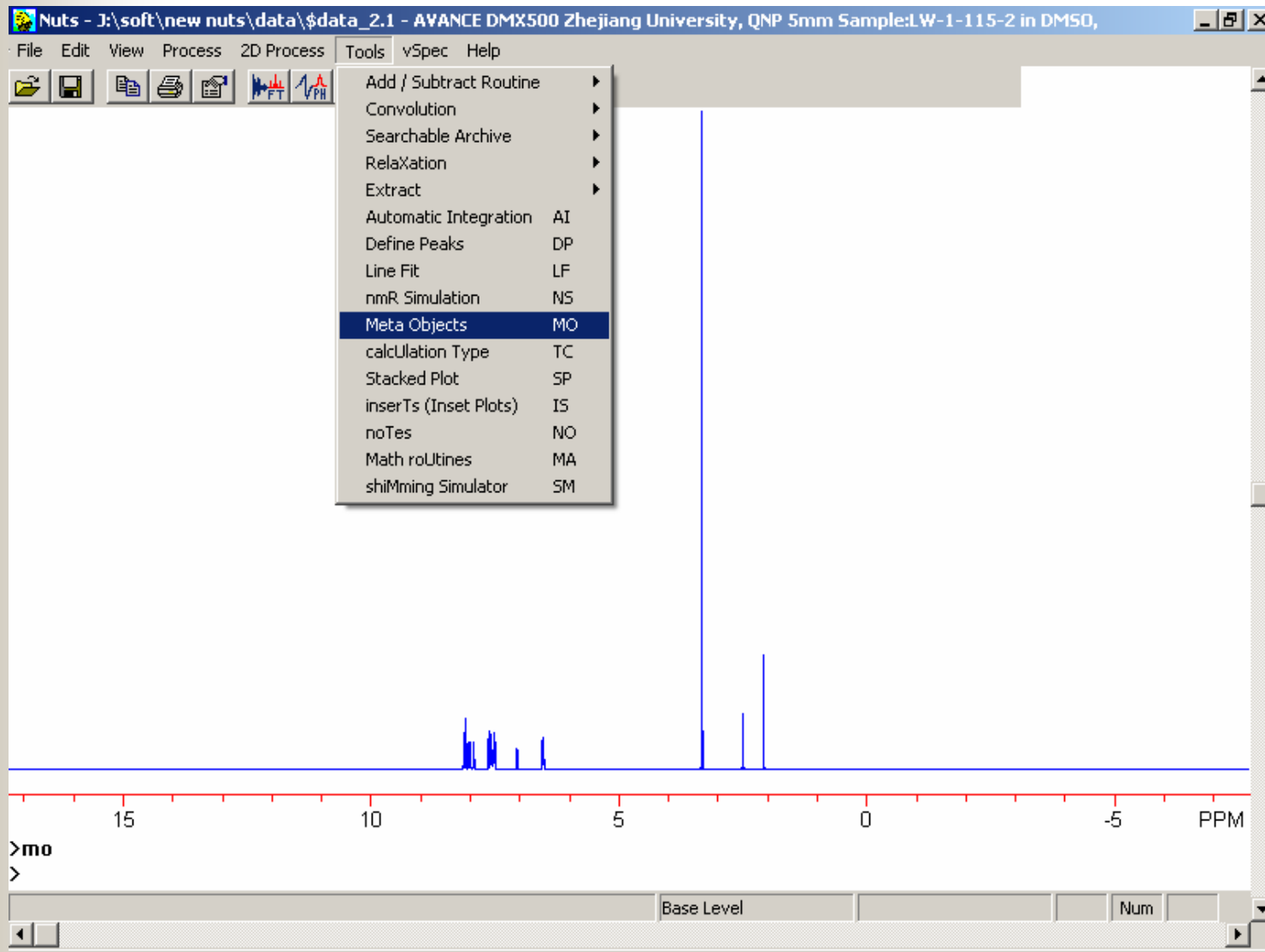
C: 插入剪贴板中预存的图片

A: 将当前谱图显示插入谱图中（和**IS**命令等同，图片质量有所降低）



NUTs 特殊操作

■ 插入注释用图片或文字



图例“MO”

主要用于图片的插入

NUTs 特殊操作

■ 插入注释用图片或文字

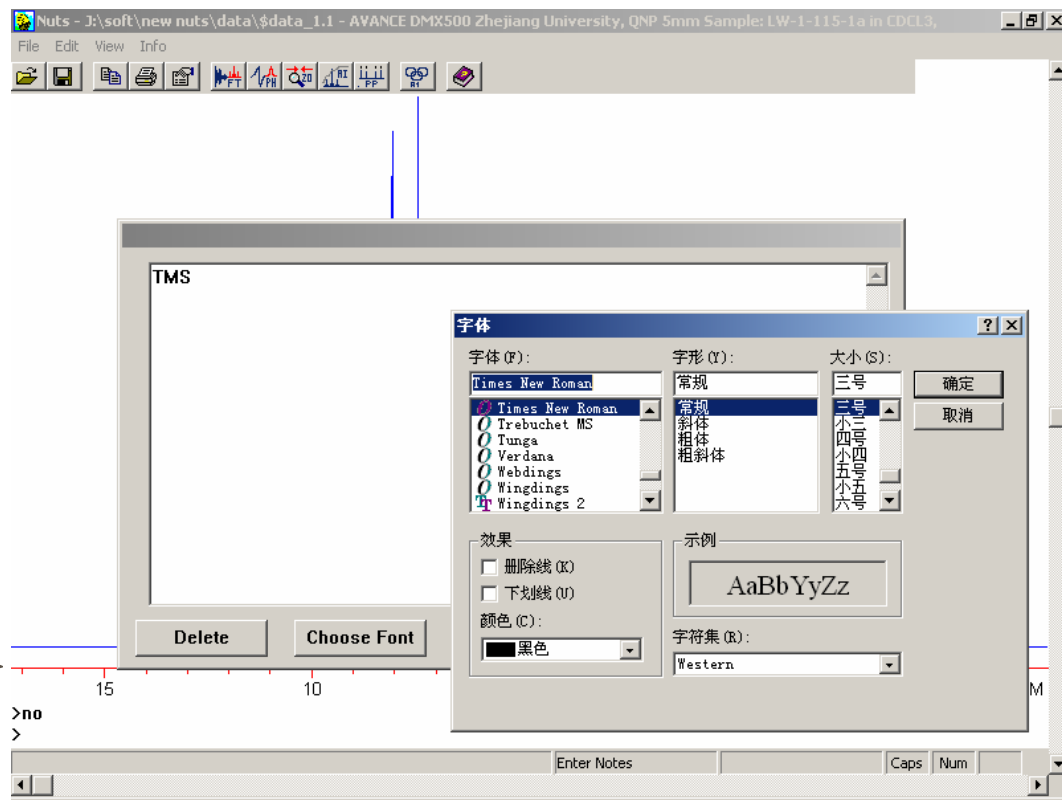
键入或选择命令“**NO**”，用鼠标左键点击任意位置或键入命令“**A**”，出现对话框，输入所需的信息。

在此命令状态下，选定某一文本，按鼠标右键可对其再编译，或删除。

键入“**C**”，取消所有插入

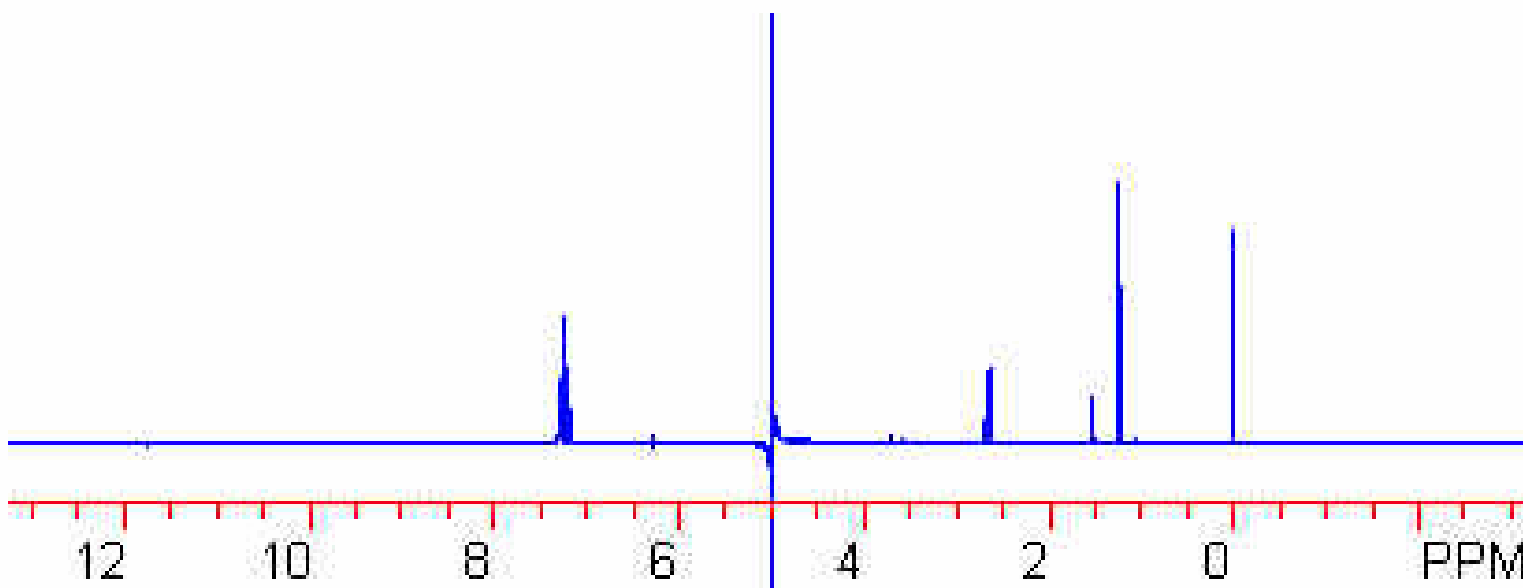
键入“**P**”，显示实验参数

键入“**S**”，控制是否显示插入的文本



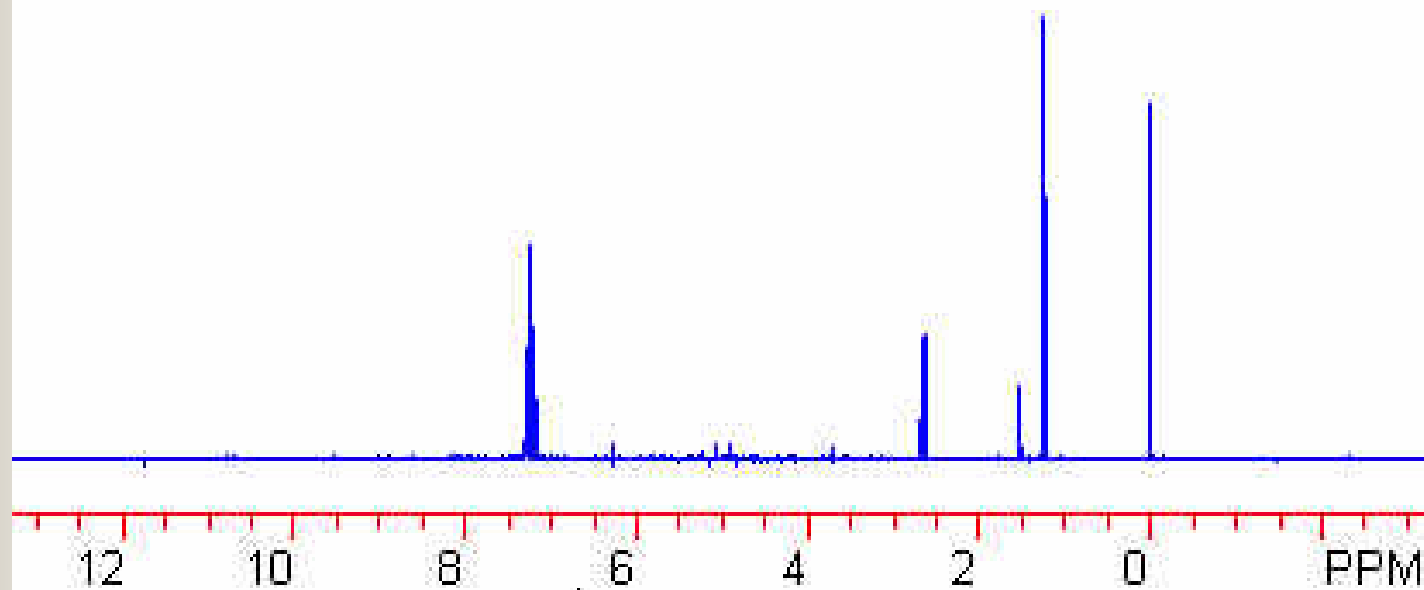
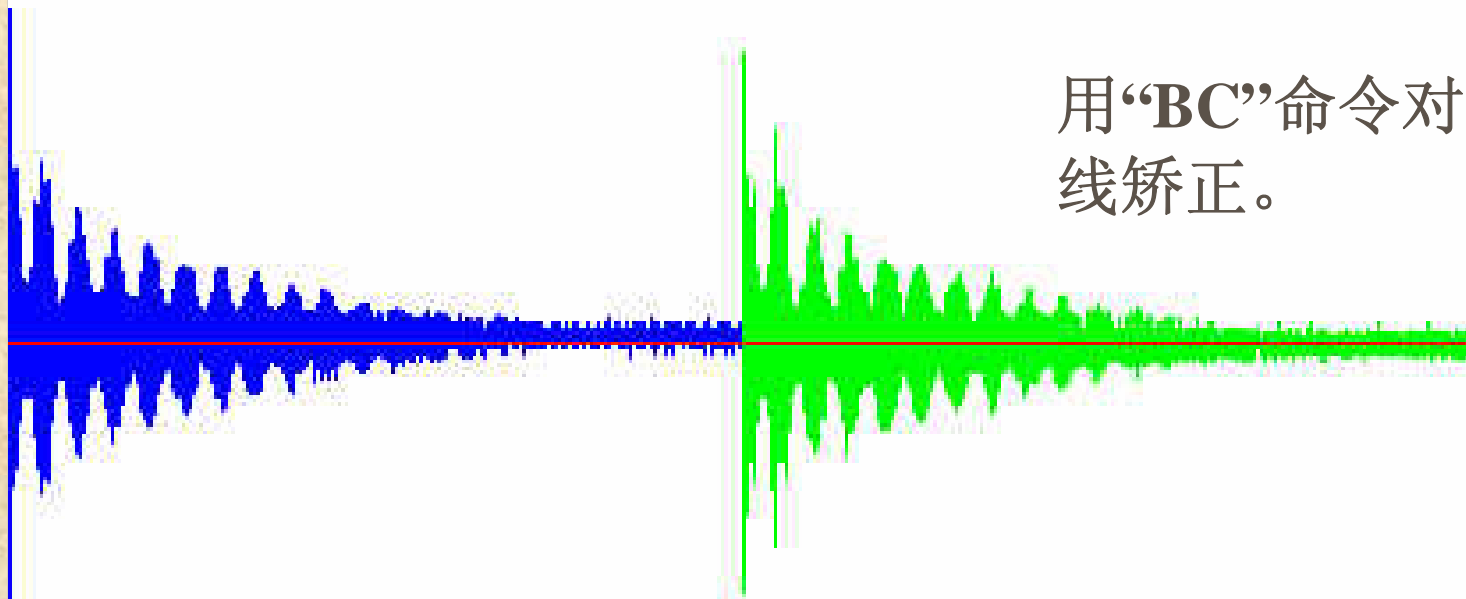
NUTs 特殊操作

■ 基线矫正 (Baseline Correction)



键入3次“FT”，重新回到傅立叶变换前的图谱

用“BC”命令对其进行基线校正。





具体参考**help**文件