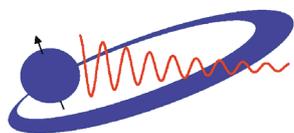


topspin

2.0 中文導覽手冊



磊葳科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

目錄

第一章	介面介紹 (The TOPSPIN Interface)	3
1-1.	子視窗切換鍵	3
1-2.	上層工具列	3
1-3.	下層工具列	5
1-4.	命令列	6
1-5.	狀態列	7
1-6.	檔案瀏覽器	8
1-7.	NMR 檔案結構	9
第二章	光譜收集 (Data Acquisition)	12
2-1.	實驗設定小幫手	12
2-2.	收訊功能鍵	13
2-3.	氬鎖定視窗	14
2-4.	BSMS 控制視窗	15
第三章	光譜處理 (Data Processing)	16
3-1.	手動處理光譜	16
3-2.	光譜處理小幫手	16
第四章	光譜介面 (Spectrum Display)	19
4-1.	1D 光譜介面	19
4-2.	2D 光譜介面	26
4-3.	3D 光譜介面	28
第五章	1D 光譜處理操作 (1D Interactive Manipulation)	30
5-1.	即時視窗函數調整功能	30

	5-2. 光譜處理	31
第六章	2D 光譜處理操作 (2D Interactive Manipulation)	41
第七章	列印/輸出 (Printing/Exporting Data)	50
	7-1. 光譜列印	50
	7-2. 光譜複製與輸出	51
	7-3. 積分值與 peak 標定值之列印	52
第八章	光譜分析 (Analysis)	53
	8-1. 訊雜比計算	53
	8-2. 重疊峰拆解	54
	8-3. 偶合常數分析	56
	8-4. Daisy 光譜模擬程式	65
第九章	常用指令 (Frequently Command)	67

吳英彥 Casper Wu

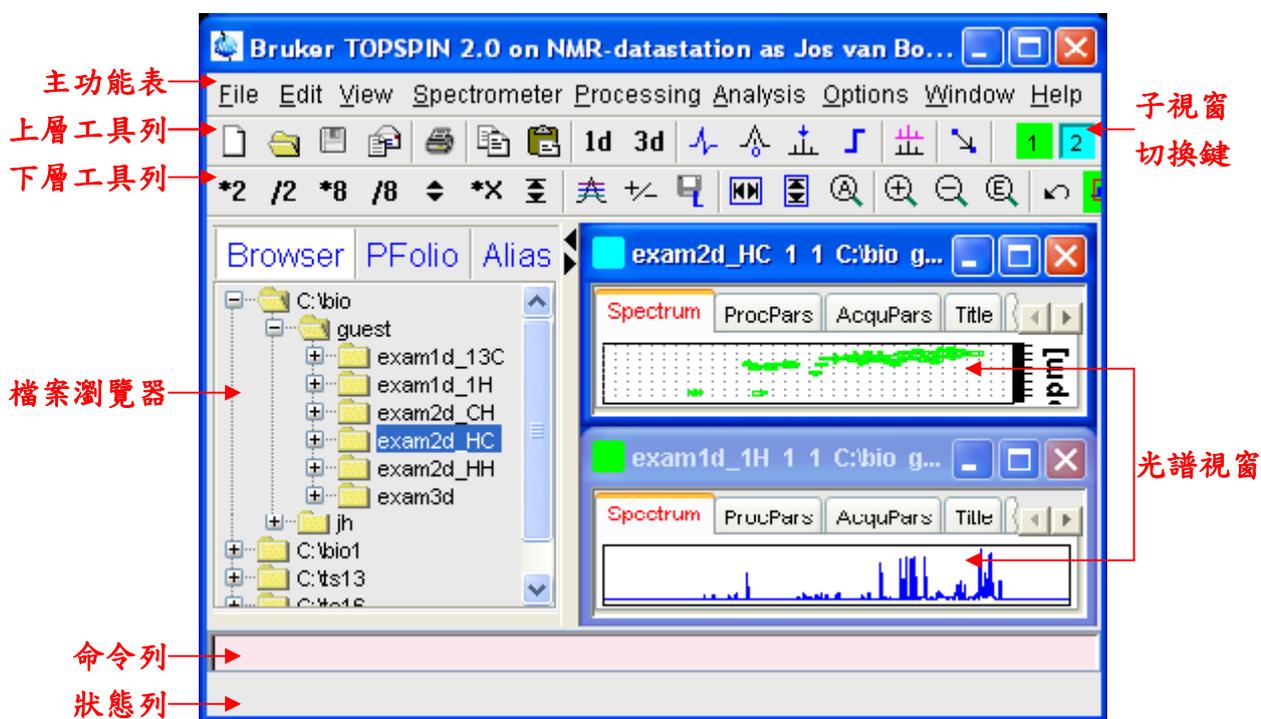
磊葳科技公司

TEL: 02-26989266-12

FAX: 02-26989267

Casper@rezwave.com.tw

第一章 介面介紹 (The TOPSPIN Interface)



1-1. 子視窗切換鍵

當光譜視窗內開啟多個視窗，或其他功能視窗(如 temperature monitor 功能)，每個子視窗會以一有顏色的小方塊表示，按下小方塊即可切換子視窗。

1-2. 上層工具列(中括號內為輸入指令)

1. 檔案管理鍵



 建立一個新的實驗資料檔 [edc]

 開啟已經存在的實驗設定檔 [open]，其中又分三種格式：

1. Open NMR data stored in standard Bruker format :

開啟標準 Bruker 檔

2. Open NMR data stored in special formats : 開啟其他格式檔案

3. Open other file : 開啟其他類型檔案

 儲存目前的實驗資料檔 [sav]

 將目前的實驗資料檔以 e-mail 寄出 [smail]

 列印實驗資料檔 [print]

 複製目前的實驗資料檔路徑 [copy]

 貼上複製的實驗資料檔路徑 [paste]

 回到最近期的 2D 光譜 [.2d]

 回到最近期的 3D 光譜 [.3d]

2. 互動功能鍵



 進入相位修正調整模式 [.ph]

 進入座標修正模式(重新定義 ppm 位置) [.cal]

 進入基線修正模式 [.basl]

 進入 peak 標定模式(peak picking) [.pp]

 進入積分模式 [.int]

 進入光譜重疊模式 [.md]

 進入距離量測模式

3. 顯示功能鍵



-  切換 Hz/ppm 單位 [.hz]
-  切換 Y 軸顯示相對高度或絕對高度 [.y]
-  顯示圖譜總覽(於光譜上方出現一子畫面) [.ov]
-  於圖譜上顯示格線 [.gr]

1-3. 下層工具列

1. 垂直方向變化鍵



-  光譜強度比例乘 2 [*2]
-  光譜強度比例除 2 [/2]
-  光譜強度比例乘 8 [*8]
-  光譜強度比例除 8 [/8]
-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵，上下拉動調整光譜強度比例
-  將光譜強度重設至視窗最適大小 [.vr]

[附註] 亦可使用滑鼠滾輪進行光譜強度調整

2. 水平方向變化鍵



-  將全光譜寬度重設至視窗大小 [.hr]
-  顯示全光譜 [.all]
-  放大光譜寬度 [.zi]
-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵，左右拉動調整光譜寬度比例
-  縮小光譜寬度 [.zo]

-  出現對話框，自行設定左右邊界 [.zx]
-  以滑鼠拖曳方框方式進行放大，可同時進行垂直與水平方向之放大，按鈕呈綠色即開啟功能，再按一次即解除 [.zoommode]
-  回到上一次光譜寬度範圍 [.zl]
-  鎖定目前顯示範圍，則不論開啟其他光譜時，會限定顯示鎖定時的範圍，按鈕呈綠色即鎖定，再按一次即解除 [.keep]

3. 水平方向移動鍵



-  光譜顯示向右移動 [.sl]
-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵，左右拖曳移動光譜
-  光譜顯示向左移動 [.sr]
-  移至光譜最左側 [.sl0]
-  移至光譜最右側 [.sr0]

4. 垂直方向移動鍵



-  移至光譜最上方 [.su]
-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵，上下拖曳移動光譜
-  移至光譜最下方 [.sd]

1-4. 命令列

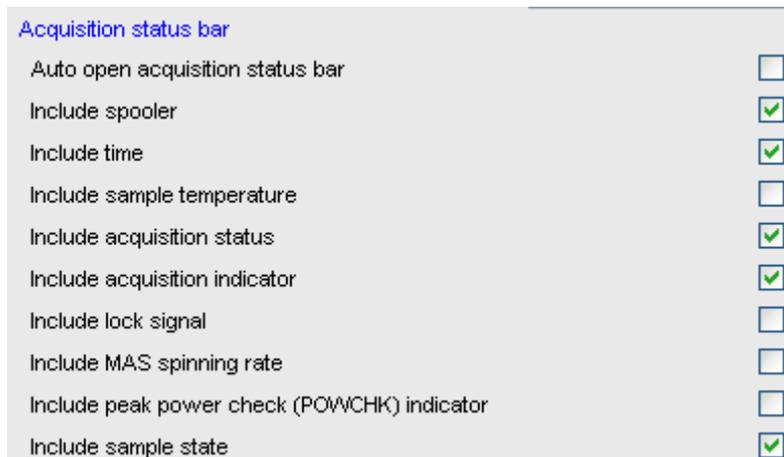
指令輸入欄位，使用鍵盤的↑、↓按鍵，可來回搜尋輸入過的指令。或從主功能表→ View → Command Line History，查看所有執行

過的指令。

輸入"**cmdindex**"指令時，可察看所有指令，並可點擊查看說明。或直接以"**help+指令名**"查看說明。如"**help ft**"會出現"**ft**"指令說明。可將指令框選後，利用"**Ctrl+x**"、"**Ctrl+c**"、"**Ctrl+v**"進行指令的"剪下"、"複製"、"貼上"等功能。

1-5. 狀態列

顯示指令執行狀況及各項狀態之小視窗，使用"**Options**" → "**Preferences**"或鍵入"**set**"指令，可控制各種小視窗的開啟或關閉。



以上圖所開啟的功能選項為例，於狀態列中會出現如下之各種小視窗

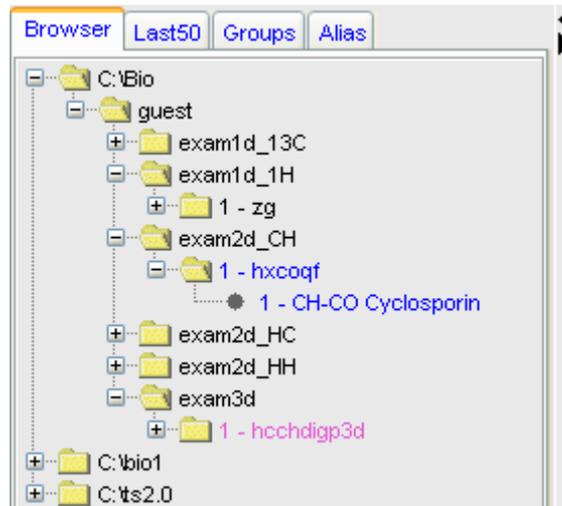
Acquisition information	Fid Flash	Sample	Time	Spooler
scan: 2 / 16 residual time: 1m27s experiments: 1 / 1			10:49 Jul 15	running: 0 queued: 0 delayed: 0

- Acquisition information：顯示實驗進行狀況及所剩實驗時間等。
- Fid Flash：若有脈衝正在進行，則會顯示紅色之FID圖形。
- Sample：顯示樣品所在位置，上圖表示樣品已在探頭中。
- Time：顯示今天的日期與現在的時間。
- Spooler：顯示實驗的個數，包括進行的實驗、佇列的實驗與將進

行的實驗(使用"qu"或"at"指令才會在此區顯示)。

1-6. 檔案瀏覽器

共分 Browser, Last50, Groups, Alias 四項，如下圖示：



1. Browser：以樹狀結構圖表示目錄階層，在含實驗資料的目錄上，以左鍵拖曳到右側光譜區即可開啟，或按右鍵有其他選項。

1.1 利用不同顏色顯示不同維度之光譜

- 黑色為一維光譜。
- 藍色為二維光譜。
- 洋紅色為三維光譜。

1.2 顯示每一個檔案所使用的脈衝程式與標題(title)

- 利用實驗序號(EXPNO)顯示脈衝程式(如上圖之 zg, hxcoqf, hcchdigp3d)。
- 利用圖譜處理序號(PROCNO)顯示實驗標題(如上圖之 CH-CO Cyclosporin)。

2. Last50：顯示最近開啟過的 50 個光譜，顯示其實驗名稱、編號等。

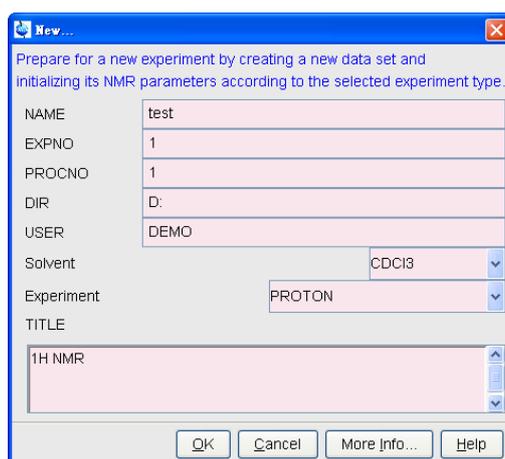
3. Groups：為光譜建立群組，可將相關之光譜設為一群。於 Groups

頁面按右鍵，選擇"Add new Dataset Group"，輸入一個群組名(必須以英文字母開頭)，再將相關光譜加入此群組中。

4. **Alias**：為光譜取一個別名，以期更快速索引。於 Alias 頁面按右鍵，選擇"Define Alias For Data in Selected Window"，輸入一個別名(必須以英文字母開頭)即完成別名建立。

1-7. NMR 檔案結構

NMR 的檔案儲存位置具有一定之規則，是依據開啟新檔案時的設定。當要開啟新檔案時，可鍵入"edc"指令或按下  或由主功能表的"File"中選擇"New"，即可開啟如下視窗：



其中 **NAME**、**EXPNO**、**PROCNO**、**DIR** 與 **USER** 與檔案儲存路徑有關，檔案儲存路徑為：

<**DIR**>\DATA**USER**\NMR**NAME**\<**EXPNO**>\PDATA**PROCNO**>

依上圖所示，其檔案結構為：

D:\DATA\DEMO\NMR\test\1\PDATA\1

其中 DATA、NMR 與 PDATA 為既定出現之檔案結構，而其他各項設定之意義為：

- **DIR**：此為檔案儲存時最基本之目錄，但不一定設為磁碟的根目錄，亦可設定為某一個資料夾，例如可將實驗室或群組的代號設定

於此參數中，便於實驗室或群組之間的區分，若將 **DIR** 設定為 "D:\LABNAME" 則其檔案目錄為：

D:\LABNAME\DATA\<USER>...

- **USER**：一般設定為使用者名稱，便於實驗室或群組內人員的區分。
- **NAME**：一般設定為樣品名稱、編號或日期編號，主要做為樣品之間的區分。
- **EXPNO**：必須設為數字，可設定之範圍為 1 ~ 99999999，一般做為同一樣品不同實驗之間的區分，例如 **EXPNO** = 1 為氫光譜，**EXPNO** = 2 為碳光譜的區分方式，而所收集到的 NMR 資料(如 FID) 將會儲存於此資料夾下。
- **PROCNO**：必須設為數字，可設定之範圍為 1 ~ 999999999，主要做同一實驗不同處理方式的區分，如相同的 FID 但使用不同視窗函數處理光譜時，便可設定於不同之 **PROCNO**，而處理後的 NMR 資料將會儲存於此資料夾下。

◎如何 開啟/關閉 檔案瀏覽器?

從主功能表 → "View" → "Browser Panel On/Off" 進行切換。

◎如何在檔案瀏覽器關閉顯示脈衝程式和標題?

在 "Browser" 頁面中按右鍵，選擇 "On/Off: Show PULPROG/Title"。

◎如何以多重視窗的方式開啟多個光譜?

在 "Browser" 頁面中選擇一個要開啟的 **EXPNO** 檔案，於檔案上按滑鼠右鍵，選擇 "Display in New Window"，則選擇的光譜將以新視窗開啟，並可用子視窗切換鍵進行視窗切換，亦可由主功能表的 "Window" 中選擇多重視窗的排列方式。

◎如何在"Browser"頁面中新增資料夾?

在頁面中按右鍵，點選"Add New Data Dir..."，僅要輸入<DIR>的路徑即可增加新的資料夾，但此資料夾中需先有 NMR 的資料存在，才可由檔案瀏覽器檢視到檔案。

◎如何將複製光譜資料檔案?

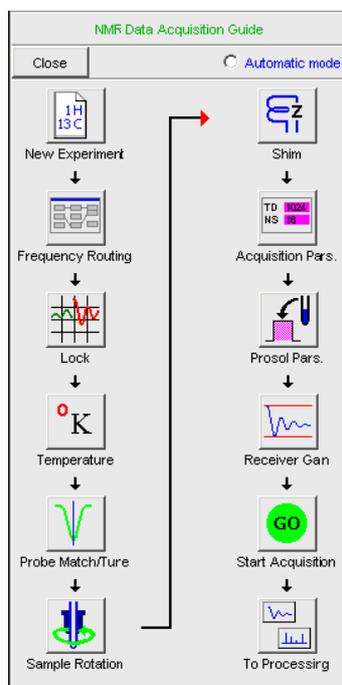
將光譜開啟後，於命令列輸入"expl"會開啟一個 Windows 的檔案總管視窗，並且開啟的路徑於"PROCNO"中，當要複製資料時，則複製"NAME"的資料夾，即可將此樣品的所有資料加以複製。

第二章 光譜收集 (Data Acquisition)

以下介紹在 TOPSPIN 中，實驗設定與信號收集的操作介面。關於詳細的實驗設定參數，請參閱"Acqu. Commands & Parameters" (由主功能表 → "Help" → "Manuals"中選取)。

2-1. 實驗設定小幫手 (Data Acquisition Guide)

點選主功能表中的"Spectrometer" → "Data Acquisition Guide"或鍵入"aqguide"指令，開啟實驗設定小幫手，如下圖：



1. **New Experiment**：建立一個新的實驗資料檔。
2. **Frequency Routing**：確認與選擇實驗核種。
3. **Lock**：選擇樣品所加入的 D-solvent 進行鎖定。
4. **Temperature**：設定實驗所需溫度。
5. **Probe Match/Tune**：調整 Match/Tune 以達到訊號最佳共振點^{註一}。
6. **Sample Rotation**：依需求決定樣品是否需要旋轉及轉速設定。

7. **Shim**：進行磁場勻場動作。若無自動勻場功能，則需要手動勻場。
8. **Acquisition Pars.**：點擊後進入實驗參數頁面，設定實驗參數^{註二}。
9. **Prosol Pars.**：點擊後會自動執行"getprosol"指令，取得記錄於"edprosol"中的脈衝參數值。
10. **Receiver Gain**：可手動輸入 RG 值或選擇自動計算。
11. **Go**：開始實驗。
12. **To processing**：切換進入光譜處理功能 ([參閱第三章](#))。

※**註一**：調整 Match / Tune 的動作，若探頭本身沒有自動化功能，則需儀器負責人同意才能操作，以免傷害探頭。

※**註二**：在此頁面下，一般依使用者樣品特性，僅需輸入光譜的中心(O1P、O2P)，光譜寬度(SW)與掃瞄次數(NS)，而其餘參數則不需更動，參數詳細說明請參閱"Acqu. Commands & Parameters" (由主功能表 → "Help" → "Manuals"中選取)。

2-2. 收訊功能鍵

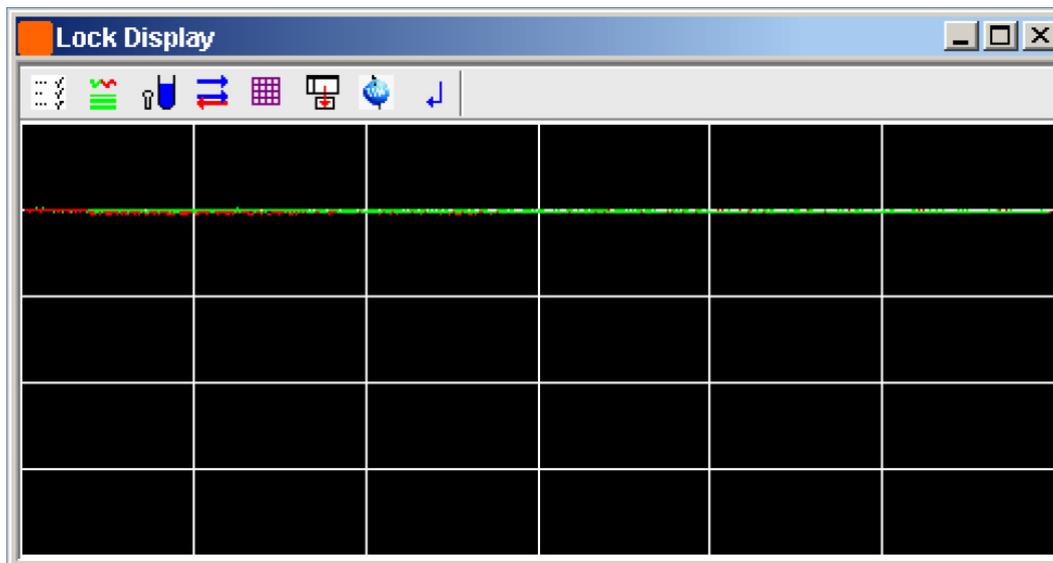


-  開始進行實驗 [zg]
-  暫停實驗的執行(會存入目前所獲得之 FID) [halt]
-  停止實驗的執行(不會存入目前所獲得之 FID) [stop]
-  開啟即時之收訊視窗，僅在訊號收集時可開啟 [acqu]
-  開啟氬鎖定視窗 [lockdisp]
-  開啟 BSMS 控制視窗 [bsmsdisp]
-  計算實驗所需時間與檔案大小 [expt]

-  設定各頻道之中心(O1, O2, O3)
-  將目前所視之光譜，設定成新的光譜寬度(SW)與光譜中心(O1)
-  設定頻率表(具 FQLIST 參數之實驗使用)

2-3. 氬鎖定視窗

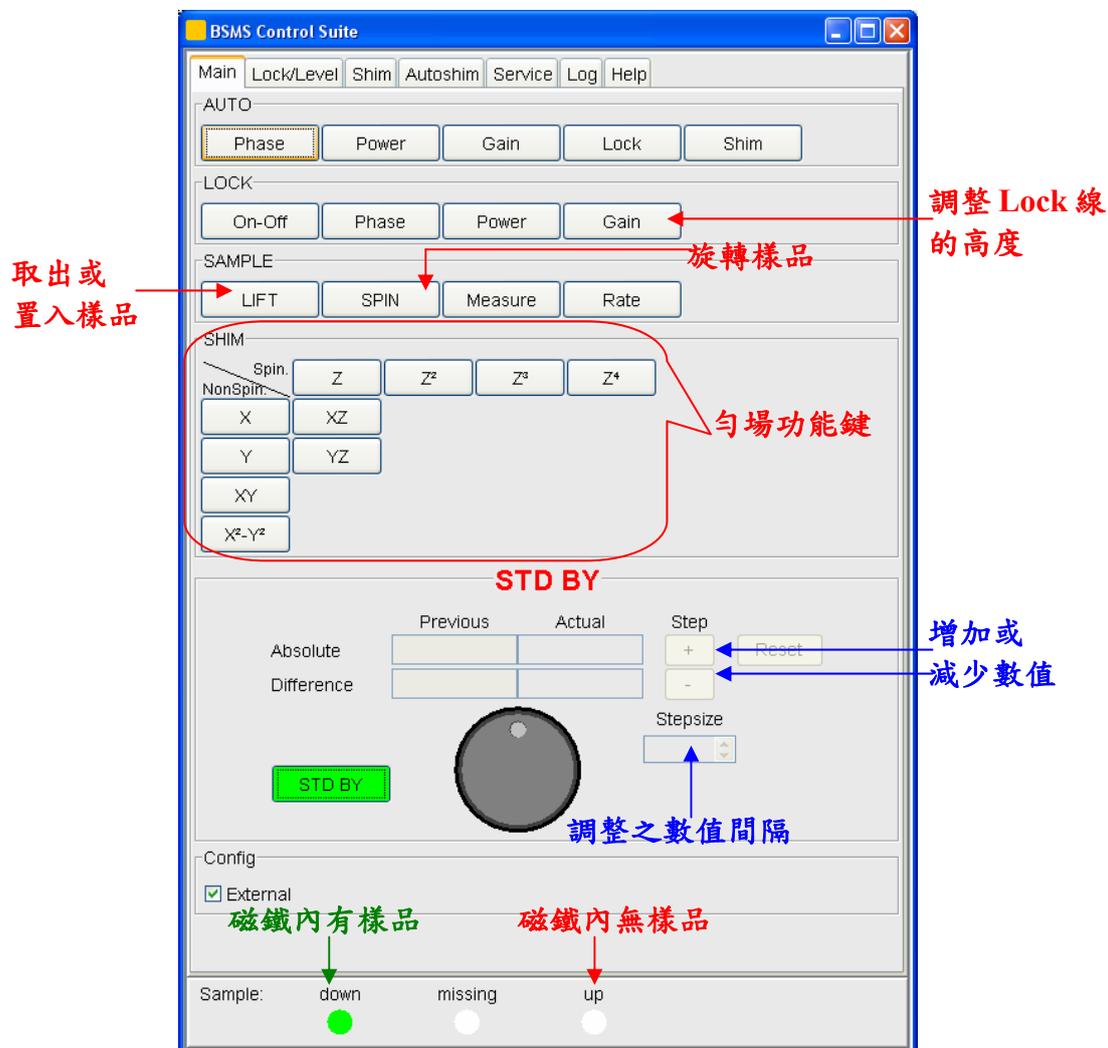
按下  按鍵或鍵入 "lockdisp" 指令即可開啟氬鎖定視窗。



-  開啟 TOPSPIN 功能設定視窗 [set]
-  切換狀態列中氬鎖定視窗之顯示模式(線條模式或數字模式)
-  進行磁場鎖定[lock]
-  切換氬鎖定視窗中單線與雙線之顯示模式
-  切換氬鎖定視窗中格線之顯示模式
-  切換氬鎖定視窗顯示位置(獨立顯示或置入 TOPSPIN 主視窗)
-  切換至 TOPSPIN 主視窗
-  關閉氬鎖定視窗

2-4. BSMS 控制視窗

按下  或鍵入 "bsmsdisp" 指令即可開啟 BSMS 控制視窗，可利用滑鼠滾輪之增減數值。



- 當按下按鍵，功能運作時，按鍵會顯示紅色 。
- 當功能運作完成時，按鍵會顯示綠色 。
- 當勻場功能鍵執行時，按鍵會顯示黑色 。

第三章 光譜處理 (Data Processing)

以下介紹在 TOPSPIN 中，光譜處理的操作介面。關於詳細的光譜處理之相關設定參數，請參閱主功能表 → "Help" → "Manuals" → "Proc. Commands & Parameters"。

3-1. 手動處理光譜

光譜處理的參數記載在 Processing Parameter 表格中^{註三}。將光譜轉換的指令輸入於指令列中，即會套用參數進行處理，指令列舉如下(1D 光譜使用指令)：

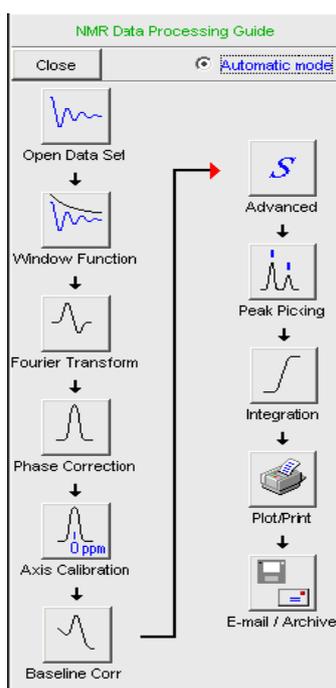
- **ft**: Fourier transform (傅立葉轉換)
- **fp**: Fourier transform + phase correction (傅立葉轉換+相位修正)
- **ef**: Exponential multiplication + ft (套用EM視窗函數+ ft)
- **efp**: Exponential multiplication + fp (套用EM視窗函數+ fp)
- **gf**: Gaussian multiplication + ft (套用GM視窗函數+ ft)
- **gfp**: Gaussian multiplication + fp (套用GM視窗函數+ fp)
- **apk**: automatic phase correction (自動相位修正)
- **abs**: automatic baseline correction (自動基線校正)

※**註三**：此頁面的參數皆已設定，一般不需要更動，可參考"Proc. Commands & Parameters"中之說明進行各項參數之修改(由主功能表 → "Help" → "Manuals"中選取)。

3-2. 光譜處理小幫手 (Data Processing Guide)

點選主功能表中的"Processing" → "Data Processing Guide"或鍵入

"prguide"指令，開啟光譜處理小幫手，如下圖：



若選取右上角"Automatic mode"，則所有步驟中的參數都自動設定，按照流程圖依序點選即可完成。此方法並不建議使用於 2D 圖譜上，因在 "Window Function"選項中，會自動採用"SINE"之視窗函數並設定 $SSB = 0$ ，且仍需手動調整相位。若不選取右上角的"Automatic Mode"，則每點選一個步驟，即會出現此步驟的參數調整視窗。

1. **Open dataset**：開啟一個實驗檔。
2. **Window function**：選擇視窗函數進階處理 FID ^{註四}。
3. **Fourier Transform**：進行傅立葉轉換。
4. **Phase correction**：相位校正。[\(參閱第五章\)](#)
5. **Axis Calibration**：座標軸校正。[\(參閱第五章\)](#)
6. **Baseline Corr.**：基線校正。[\(參閱第五章\)](#)
7. **Advanced**：進階選項，可進行圖譜 相加/相減/重疊峰拆解 等。
[\(參閱第八章\)](#)
8. **Peak picking**：Peak 標定。[\(參閱第五章\)](#)

9. Integration：Peak 積分。(參閱第五章)

10. Plot/Print：圖檔排版/列印。(參閱第七章)

11. E-mail/Archive：將光譜 以 e-mail 寄出/製成壓縮檔。

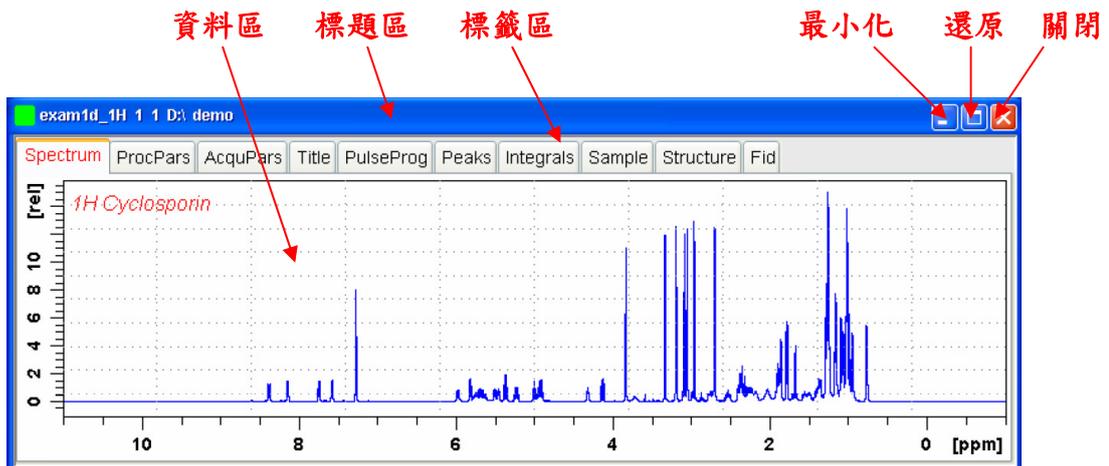
※註四：視窗函數是一種數學函式，與原本收集到的 FID 做相乘處理，藉以獲得較佳之光譜。對於 1D 光譜常用的視窗函數有 EM、GM，對於 2D、3D 則常用 SINE、QSINE。



第四章 光譜介面 (Spectrum Display)

4-1. 1D 光譜介面

1D 光譜，可以分成以下區塊：

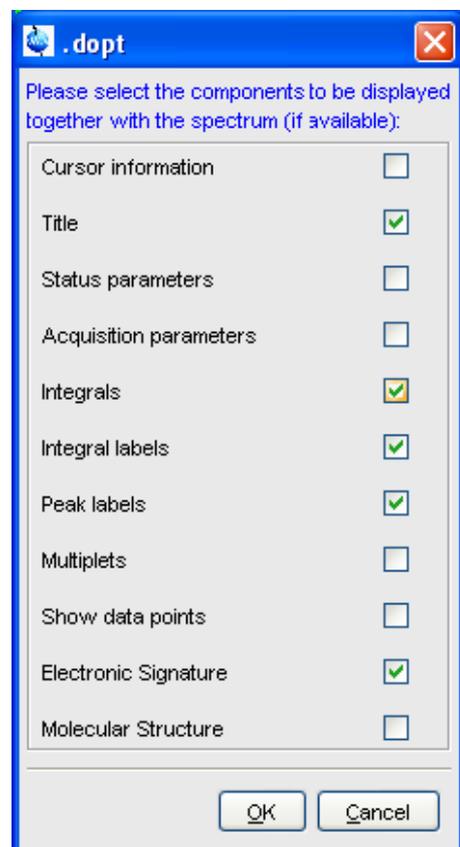


1. 資料區：顯示光譜

在光譜顯示區上按滑鼠右鍵，會出現如下選項：



選擇其中之"Display Properties"會出現如右之視窗(或鍵入".dopt"指令)，用以選擇資料區中光譜上所顯示的資訊種類。



2. 標題區：顯示實驗名稱、路徑等。

3. 標籤區：切換各種功能頁面，其中標籤區分為：

3.1 Spectrum：光譜顯示

光譜顯示的調整請參閱[第一章](#)工具列介紹。

3.2 ProcPars：設定光譜處理參數

關於詳細參數說明請參閱"Proc. Commands & Parameters" (由主功能表 → "Help" → "Manuals" 中選取)。

工具列按鍵：

-  回復上一次的更動
-  查看上次光譜處理的參數狀態 [dpp]
-  改變光譜處理時之實驗維度
-  切換隱藏或展開顯示所有的參數
-  輸入關鍵字搜尋參數

3.4 AcquPars：設定實驗參數

關於詳細參數說明請參閱"Acqu. Commands & Parameters" (由主功能表 → "Help" → "Manuals" 中選取)。

工具列按鍵：

-  回復上一次的更動
-  進入"ased"模式，調整實驗參數
-  查看上次做此實驗的參數狀態 [dpa]
-  進入"edasp"模式，選擇偵測核種

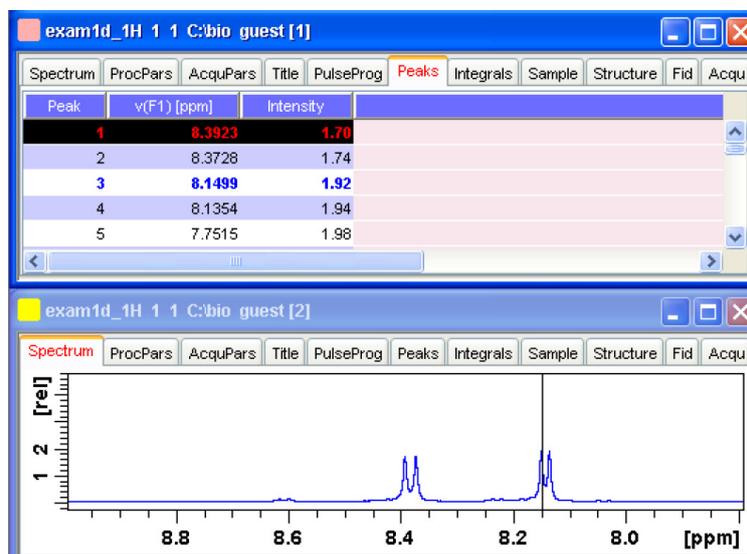
-  執行"getprosol"指令，取得脈衝校正值
-  改變實驗維度，可在 1D、2D、3D 之間做切換
-  切換隱藏或展開顯示所有的參數
-  輸入關鍵字搜尋參數

3.5 Title：實驗標題命名

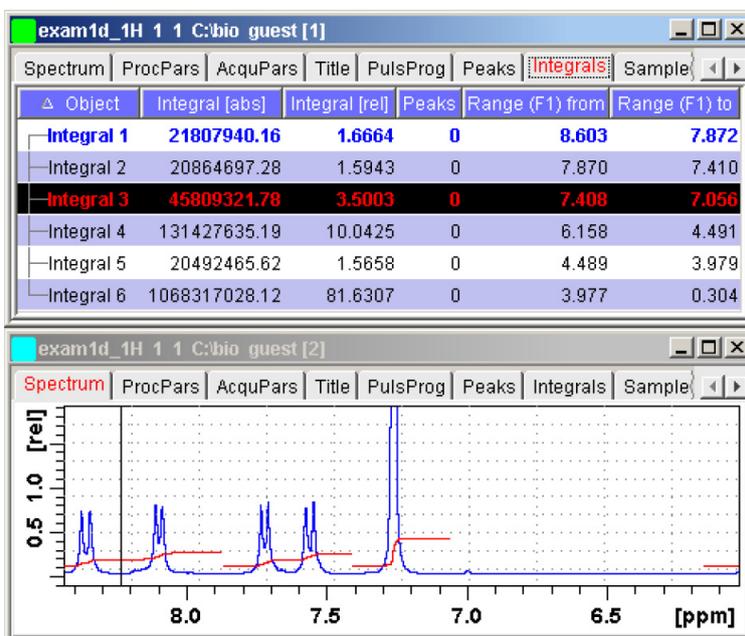
-  將寫入的標題儲存
-  將寫入的標題另存新檔
-  取消正在修正的編寫區，回復到儲存值
-  E 利用使用者設定之文字編輯程式開啟標題檔案

3.6 PulseProg：顯示脈衝程序內文及顯示實驗設定的參數與提示等。

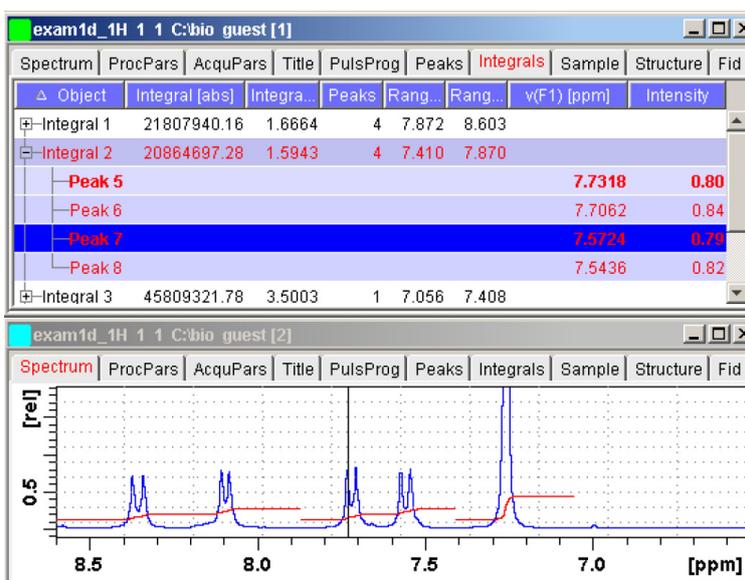
3.7 Peaks：peak 列表，若有執行 peak 標定的動作，則從此頁面可以看到 peak 標定資訊，於任一 peak 上按下滑鼠右鍵，可出現更多的功能。例如可利用雙視窗顯示之方式，同時顯示 peak 資訊與其光譜所在位置：



3.8 Integrals：積分列表，若有執行積分的動作，則從此頁面可以看到積分列表，於任一積分數值中按下滑鼠右鍵，可出現更多的功能。例如可利用雙視窗顯示之方式，同時顯示積分資訊與其光譜所在位置：



亦可將積分數值展開，顯示此範圍內所標定之 peak 位置：



3.9 Sample：樣品註解，可輸入樣品的相關資訊，方便以後查詢。

工具列按鍵：



將新寫入的註解儲存



將新寫入的註解另存新檔



取消更改後之欄位，回復到預設欄位



增加註解之欄位

以下按鍵需先於欄位文字上雙擊滑鼠左鍵，使其變為紅色文字後，其按鍵才可作用



刪除所選取之欄位



將此欄位向上移動



將此欄位向下移動

3.10 Structure: 繪製分子結構或載入結構資料檔(支援之格式為:.mol, xyz, .pdb, .cml, .out)，則可於TOPSPIN中顯示分子結構。更詳細的說明與步驟，請參考"Structure Analysis Tools" (由主功能表 → "Help" → "Manuals"中選取)

3.11 Fid: 顯示光譜原始 FID 圖形。

工具列按鍵：



顯示實部之 FID 圖形



顯示實部與虛部之 FID 圖形

4. 顯示範圍的儲存

於資料區中壓滑鼠右鍵出現功能選單，選取其中之"Save Display Region To..."，會顯示如下圖的選單，可將目前顯示的範圍，隨著不同的功能選取，而存入不同的參數中：



- **Parameters F1/2 [dpl]**

將目前顯示的範圍存入參數"F1P"和"F2P"，以便爾後回到相同範圍的視窗。利用資料區中壓滑鼠右鍵選取"Restore Display Region from Params F1/2"，光譜的範圍即可回到存入的範圍。

- **Parameters ABSF1/2**

將目前顯示的範圍存入參數"ABSF1"和"ABSF2"，此為設定限定範圍的自動基線調整與自動相位調整指令所使用的範圍(指令分別為"absf"和"apkf")

- **Parameters STSR/STSI**

將目前顯示的範圍存入參數"STSR"和"STSI"，此參數的設定，可進行局部的光譜處理。

- **Parameters NOISF1/2**

將目前顯示的範圍存入參數"NOISF1"和"NOISF2"，用以使用"sino"指令計算訊雜比。

- **Parameters SIGF1/2**

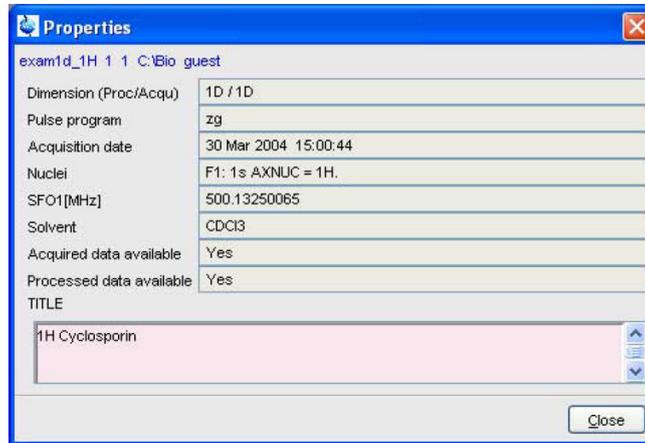
將目前顯示的範圍存入參數"SIGF1"和"SIGF2"，用以使用"sino"指令計算訊雜比。

- **A text file for use with other programs**

將目前顯示的範圍存成文字檔，其中包含光譜邊界、所含點數與各點強度等資訊。

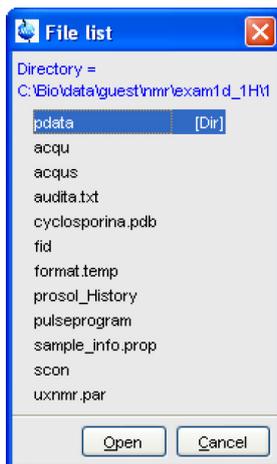
◎如何顯示目前的檔案屬性?

於資料區中壓滑鼠右鍵出現功能選單，選取其中之"File Properties"，顯示之檔案屬性如下圖所示：

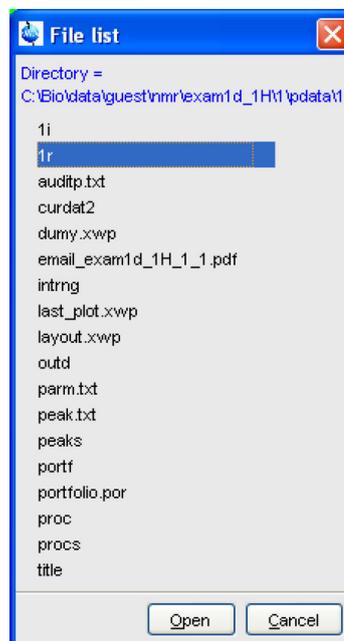


◎如何顯示目前光譜資料的相關檔案?

於資料區中壓滑鼠右鍵出現功能選單，選取其中之"Files"，顯示之光譜資料的相關檔案如下圖所示：



未執行傅立葉轉換前：
顯示光譜收集的資料檔案
(EXPNO 中的檔案)

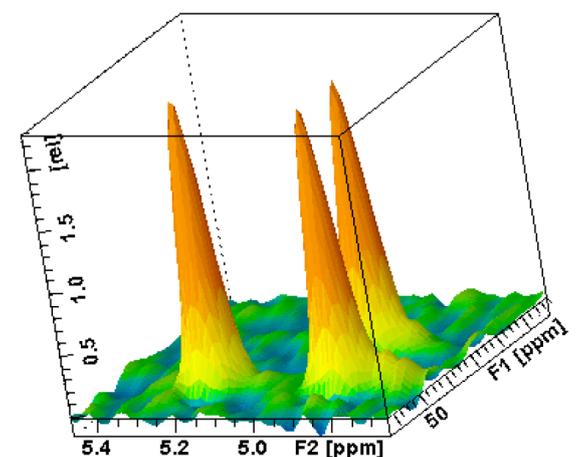


執行傅立葉轉換後：
顯示光譜處理的資料檔案
(PROCNO 中的檔案)

4-2. 2D 光譜介面

2D 光譜介面的操作模式類似 1D 操作，並增加以下功能鍵：

-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，以改變等高線倍率值
-  設定等高線參數，當光譜以等高線圈表示時，由此功能設定圈數及每圈的倍率值 [edlev, .lv]
-  切換 正訊號/負訊號/同時顯示 之功能鍵 [.lt]
-  儲存目前光譜等高線圈參數值 [.ls]
-  切換顯示 2D 圖譜中，兩個維度的投影 1D 圖 [.pr]
-  將光譜以等高線圈模式顯示 [.co]
-  將光譜以漸層色表示 [.im]
-  點壓滑鼠左鍵拖曳，可將 2D 光譜上下左右移動
-  將光譜以立體圖畫出，如下圖： [.st]

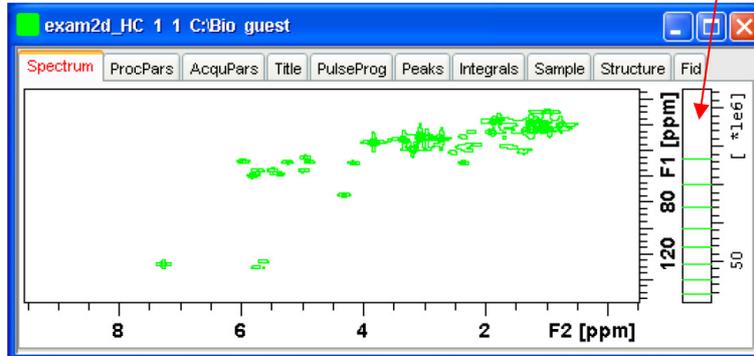


於立體圖顯示之模式中，以下功能鍵才可作用：

-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，進行平行螢幕方向旋轉
-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，進行垂直螢幕方向旋轉
-  回復至內定之立體圖觀察視角

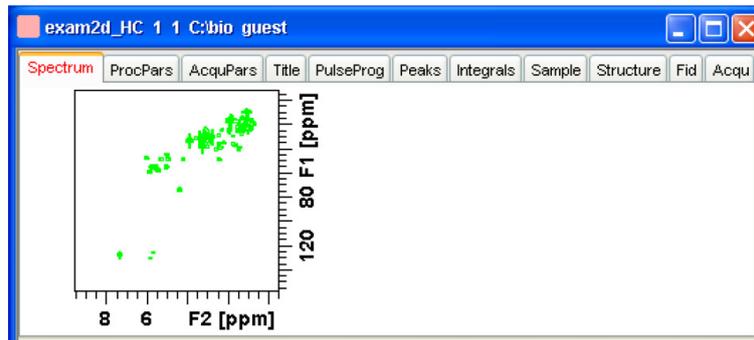
◎如何顯示 2D 光譜之等高線圈高度標示？

於資料區中壓滑鼠右鍵出現功能選單，選取其中之"Display Properties..."，並勾選"Contour Levels Bar"即可顯示。



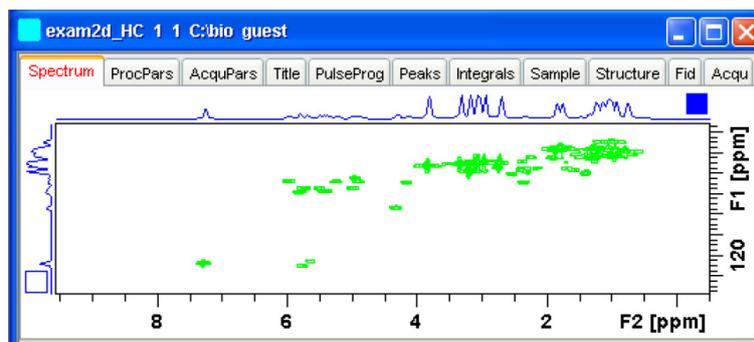
◎如何將 2D 光譜顯示成正方形？

於資料區中壓滑鼠右鍵出現功能選單，選取其中之"Square Layout On/Off"即可將光譜顯示成正方形。



◎如何在 2D 光譜旁顯示 1D 光譜？

於工具按鍵中按下  即可顯示 1D 光譜。



◎如何選擇 2D 光譜旁之 1D 光譜檔案?

於 1D 光譜上使用滑鼠右鍵，可出現一選單：

- **External Projection**：需輸入 1D 光譜檔案位置，則會出現指定之 1D 光譜。
- **Internal Projection**：顯示沿此軸之 1D 投影圖
- **Baseline at Center**：控制 1D 光譜的基線位置於視窗中間。
- **Baseline at Bottom**：控制 1D 光譜的基線位置於視窗下方。

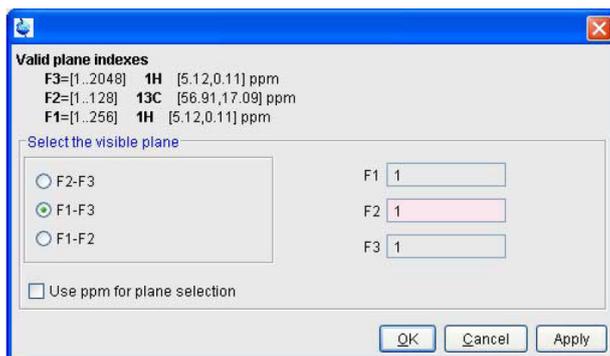
◎如何調整 2D 光譜旁之 1D 光譜高度?

點選於 1D 光譜旁之正方形方框，使其變為實心之正方形，此時即可用高度調整鍵進行調整。

4-3. 3D 光譜介面

3D 光譜介面的操作模式類似 1D 與 2D 操作，並增加以下功能鍵：

- 12** 切 F3，顯示 F1、F2 平面
- 23** 切 F1，顯示 F2、F3 平面
- 31** 切 F2，顯示 F3、F1 平面
- +** 切換到下一個平面(平面數等於光譜處理參數中各軸 SI 值)
- 切換到上一個平面(平面數等於光譜處理參數中各軸 SI 值)
- ↑↓** 於此鍵上壓住滑鼠左鍵，上下拖曳以瀏覽各平面
- E** 出現視窗，輸入欲觀察的平面數值，可用 SI 參數或 ppm 作為選取的單位，如下圖所示：



 將 2D 光譜以立體圖畫出

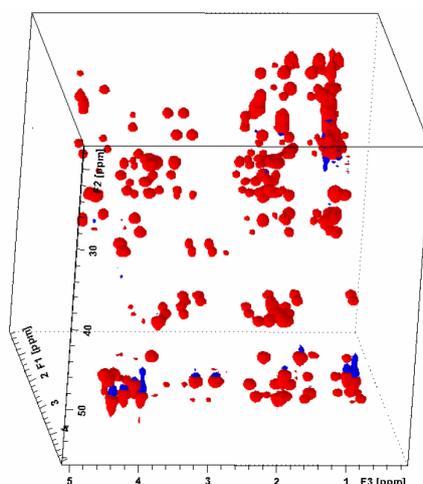
於立體圖顯示之模式中，以下功能鍵才可作用：

 於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，進行平行螢幕面旋轉

 於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，進行垂直螢幕方向旋轉

R 回復至內定之立體圖觀察視角

 將 3D 光譜以立方體顯示，如下圖



於立方體顯示之模式中，將會增加以下功能鍵：

 於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，將 3D 方塊沿著 X 軸旋轉

 於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，將 3D 方塊沿著 Y 軸旋轉

 於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，將 3D 方塊沿著 Z 軸旋轉

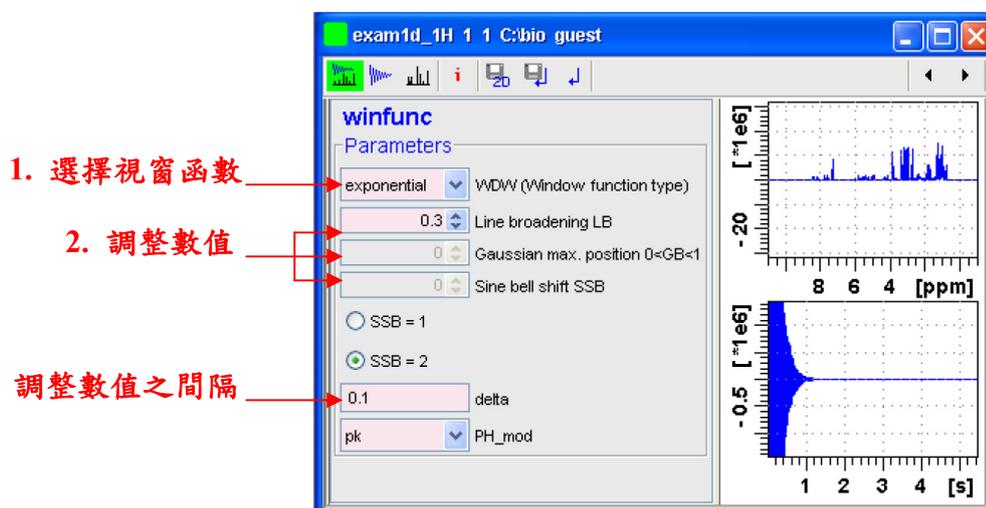
R 回復至內定之立方體觀察視角

第五章 1D 光譜處理操作 (1D Interactive Manipulation)

5-1. 即時視窗函數調整功能

可調整視窗函數並即時顯示調整後的光譜與 FID 變化。

由主功能表 → "Processing" → "Window Multiplication" [wm] → 點選 "Manual window adjustment" → OK 或鍵入 "winf" 指令即可開啟如下視窗：



工具列按鍵：

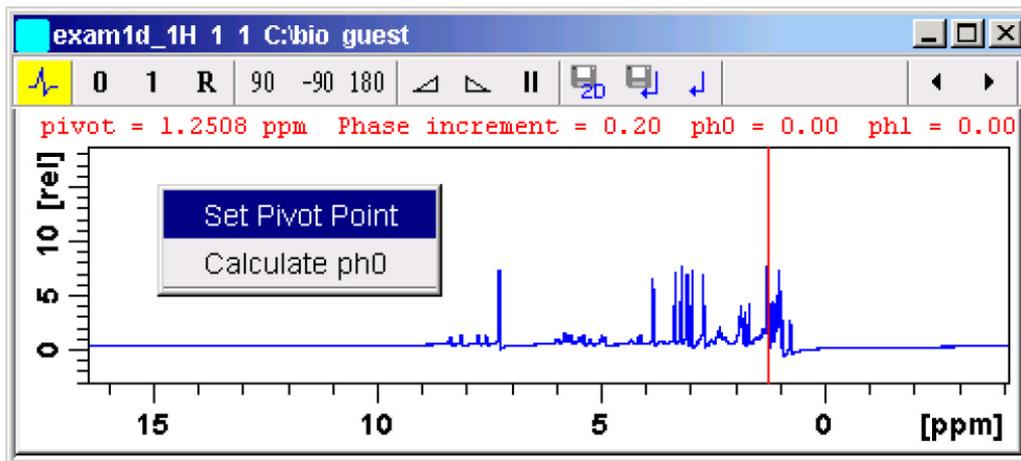
-  同時顯示光譜與 FID
-  僅顯示 FID
-  僅顯示光譜
-  切換 開啟/關閉 游標資訊
-  將視窗函數調整結果存入 2D 光譜中
-  將視窗函數調整結果存入光譜中^{註五} 並離開此視窗
-  不儲存離開

※註五：即時視窗函數調整功能僅限於 1D 光譜，因此 2D 光譜必須執行"rser"指令，將其中的 1D 光譜取出才可進入此功能。

5-2. 光譜處理

光譜的處理由光譜處理工具列進行控制。

1. 相位修正模式：點選按鍵或鍵入".ph"指令



進入相位修正模式後視窗如上，其中表示在相位修正模式中。

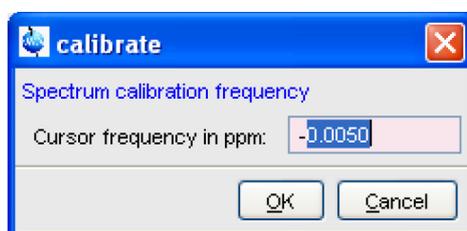
工具列按鍵：

-  以滑鼠左鍵拖曳，調整 0 次方相位修正(調整紅色線所在 peak)
-  以滑鼠左鍵拖曳，調整 1 次方相位修正(調整紅色線以外 peak)
-  回復到未調整前的數值
-  將相位正向轉 90 度
-  將相位反向轉 90 度
-  將相位旋轉 180 度
-  增加滑鼠敏感度，使拖曳速度增加
-  減少滑鼠敏感度，使拖曳速度減少

- || 重設滑鼠靈敏度
-  將相位修正調整結果存入 2D 光譜中
-  將相位修正調整結果存入光譜中並離開此模式
-  不儲存離開

2. 座標軸校正：點選  按鍵或鍵入 ".cal" 指令。

於光譜區上，將紅線移到參考訊號上，點擊左鍵即會出現一對話框，填入欲定義的座標值，如圖：

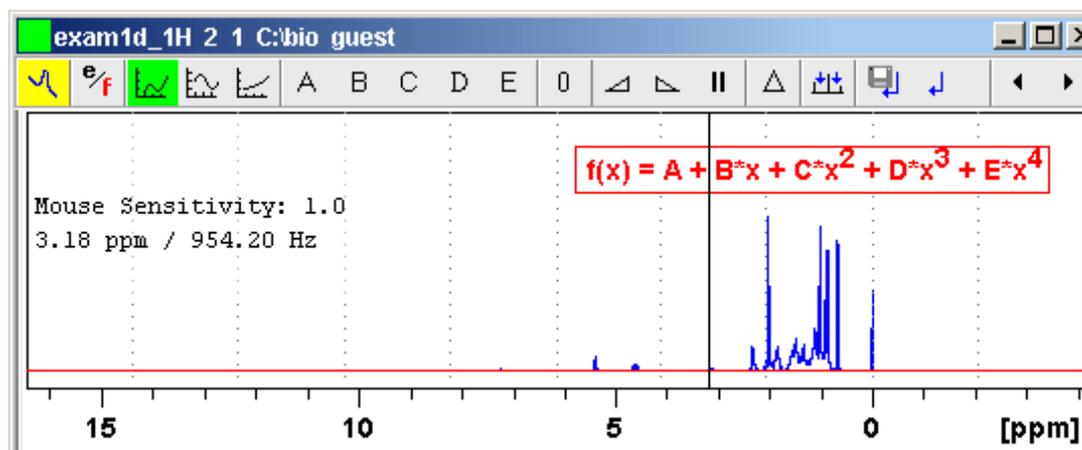


按下 **OK** 即完成座標軸校正。

3. 基線調整：

於一般 1D 圖譜之基線校正，僅需鍵入 "abs"(auto baseline correction) 指令，即可獲得良好的校正結果。2D 圖譜則分別鍵入 "abs2" 與 "abs1" 或僅鍵入 "abs2d"，即可將兩軸皆進行基線校正。

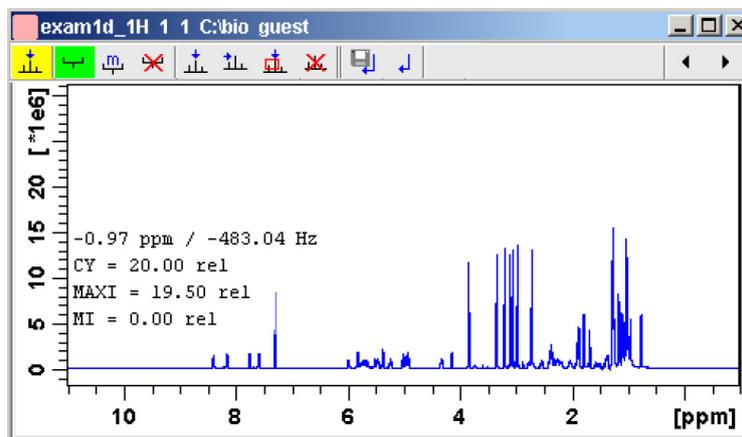
若點選  按鍵或鍵入 ".bas1" 指令，則出現如下視窗：



工具列按鈕：

-  切換 全光譜/最近一次範圍值 為基線調整的寬度
-  採用多項式函數進行調整，右側紅框內會顯示函數公式
-  採用 Sine 函數進行調整，右側紅框內會顯示函數公式
-  採用指數函數進行調整，右側紅框內會顯示函數公式
-  調整公式內的每個參數值
-  重設所有參數值
-  增加滑鼠敏感度，使拖曳速度增加
-  減少滑鼠敏感度，使拖曳速度減少
-  重設滑鼠靈敏度
-  預覽調整後的光譜結果
-  自行定義基線值的點(至少五個)，再由程式計算基線校正
-  將基線調整結果存入光譜中並離開此模式
-  不儲存離開

4. peak 標定：點選  按鍵或鍵入".pp"指令。



當功能鍵呈現綠色底色 ，即表示此功能運作中，如  代表 peak 標定功能運作中，再點選一次功能鍵，可取消此功能之運作。

工具列按鍵：

-  點選此模式，可在光譜區上拖曳出方框，方框內若含有 peak 峰頂，則此 peak 將被標記。方框的左右即代表欲標記 peak 的光譜範圍邊界；方框的高低即代表上下限(peak 峰頂低於方框下緣不取，peak 峰頂高於方框上緣也不取)，可同時畫出許多方框
-  調整方框的大小
-  刪除所有方框
-  手動標定 peak。點選此模式，則滑鼠移到欲標記的位置，按滑鼠左鍵標記
-  半自動標定 peak。此模式會從按下左鍵的位置向右尋找 peak 峰頂，則不需精確對準峰頂
-  刪除所有 peak 標定值
-  將 peak 標定值存入光譜中並離開此模式
-  不儲存離開

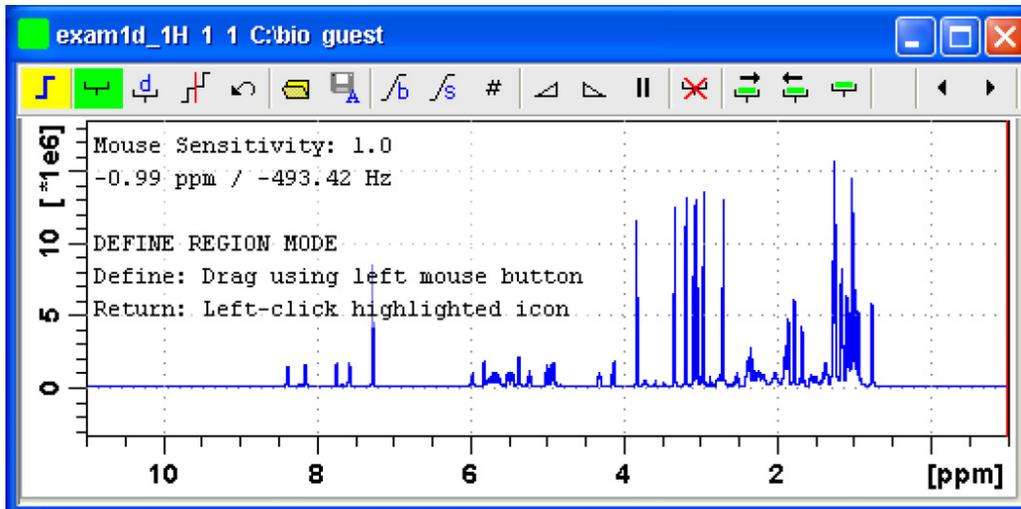
於 peak 標定功能運作中(功能鍵顯示為)時，按下滑鼠右鍵，會出現如下之功能表：

Pick Peaks On Ranges
Show Peak List
Delete All Regions
Delete Region Under Cursor

- **Pick Peaks On Ranges**：標定定義方框內之 peak，一般不需使用此選項，當定義方框完成時 peak 會自動標定。
- **Show Peak List**：顯示已定義之 peak 數值列表。
- **Delete All Regions**：刪除所有方框。

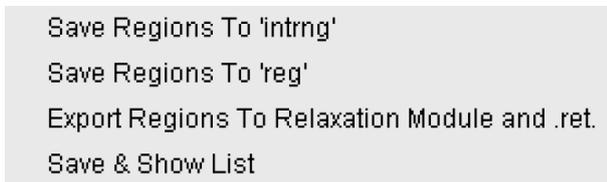
- **Delete Region Under Cursor**：僅刪除游標所在之方框。

5. 積分模式：點選  按鍵或鍵入".int"指令。



工具列按鍵：

-  以滑鼠拖曳欲積分範圍
-  出現對話框，輸入欲積分的範圍值
-  分割積分區段
-  回復上一一次的動作
-  開啟已存在的積分紀錄檔
-  儲存目前所定義的範圍區段，會出現以下視窗：



- **Save Regions To 'intrng'**

將積分範圍、斜度(bias)與斜率(slope)等值寫入積分文件檔。

- **Save Regions To 'reg'**

將積分之範圍存入範圍文件檔，以供其他實驗之用。

● Export Regions To Relaxation Module and .ret.

將積分範圍輸出至弛豫分析使用(T_1/T_2 /diffusion 實驗)。

● Save & Show List

儲存積分值，並顯示積分列表。

-  微調積分曲線之斜度(bias)
-  微調積分曲線之斜率(slope)
-  定義積分範圍最小寬度，若設為 1ppm 則以滑鼠拖曳範圍時，須大於 1ppm 積分範圍才成立，一般設為零，即不限定
-  增加滑鼠拖曳敏感度
-  減少滑鼠拖曳敏感度
-  重設滑鼠拖曳敏感度
-  刪除所選取的積分區段
-  向右選取積分區段
-  向左選取積分區段
-  選取所有的積分區段
-  將積分曲線乘 2 顯示
-  將積分曲線除 2 顯示
-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵上下拖曳，調整積分曲線大小
-  出現對話框，自行輸入積分曲線倍率值
-  所有的積分曲線顯示成等高度
-  將積分線之底端置於光譜底部
-  將積分線之底端置於光譜中央
-  於此鍵上壓住滑鼠左鍵上下拖曳，調整積分曲線位置



將積分值存入光譜中並離開此模式



不儲存離開

當完成積分範圍選取後，可將游標紅線移至任一積分區域內並壓下滑鼠右鍵，會出現如下之功能表：

Select / Deselect
Calibrate current integral
Normalize sum of integrals
Use lastscale for calibration
Delete current integral

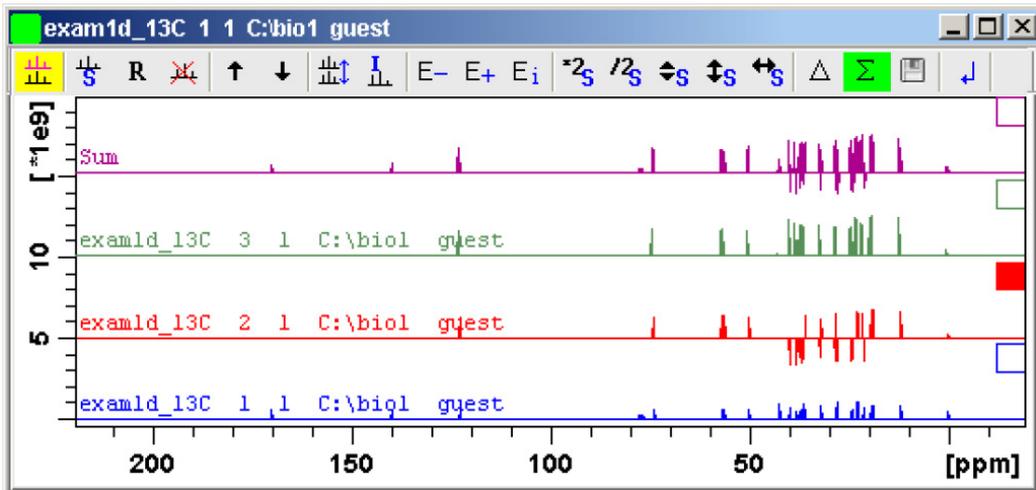
- **Select / Deselect**：選擇/取消選擇 此積分區域。
- **Calibrate current integral**：校正此積分區域之積分值，選擇此項後，輸入此積分區域應有之積分值，則全部之積分值會以此值為標準而重新計算顯示。
- **Normalize sum of integrals**：正規化所有之積分值，選擇此項後，輸入所有積分區域總和數值，則全部之積分值會以此值為總和而重新計算顯示。
- **Use lastscale for calibration**：採用上一張光譜的積分值總和為標準，則目前光譜之積分值會以此值為總和而重新計算顯示。
- **Delete current integral**：刪除此積分區域。

6. 光譜重疊模式：點選  按鍵或鍵入".md"指令。

將多份光譜重疊比較的方法有二：

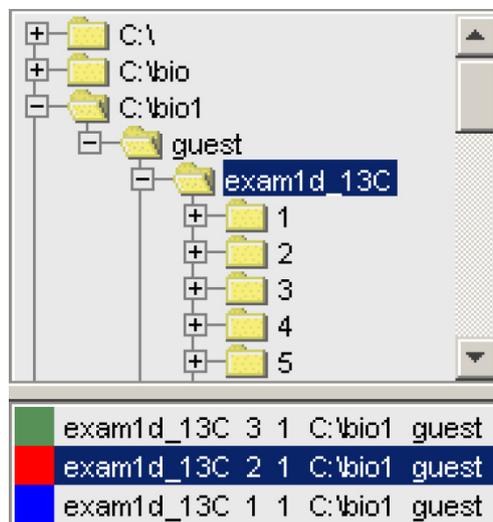
1. 在"data browser"中，將"檔案"以滑鼠左鍵拖曳進入光譜區
2. 在命令列以"re"指令讀入光譜，如鍵入"re 3 1"即是讀入 EXPNO = 3, PROCNO = 1 的光譜進行重疊

可出現如下視窗：



在重疊模式下選擇個別光譜的方法有二：

1. 若在分隔顯示模式中(如上圖)可點擊每個光譜右側方框即可選取，但不可多重選取。
2. 若在重疊顯示模式下，因所有光譜重疊在一起，則不會有小方框提示，而重疊的檔案資訊顯示於檔案瀏覽器的下方，如下圖所示：

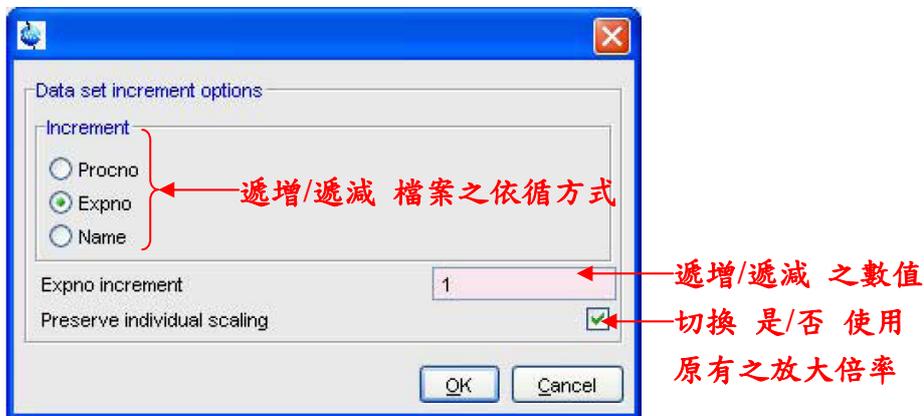


其中顯示顏色方框與光譜對照，可直接點擊選取，可使用鍵盤的 **Ctrl** 鍵或 **Shift** 鍵進行多重選取。

工具列按鍵：

 取消選取所有的光譜

- R** 重設所有光譜的大小及位移
- X** 將所選取的光譜移除
- ↑** 選取目前已選取光譜的上一張光譜
- ↓** 選取目前已選取光譜的下一張光譜
- ≡↑** 切換 重疊/分隔 顯示
- I** 切換是否顯示各別光譜的檔名、放大率等資訊
- Ei** 設定 E- 和 E+ 功能鍵的 遞增/遞減 模式，設定如下圖所示：

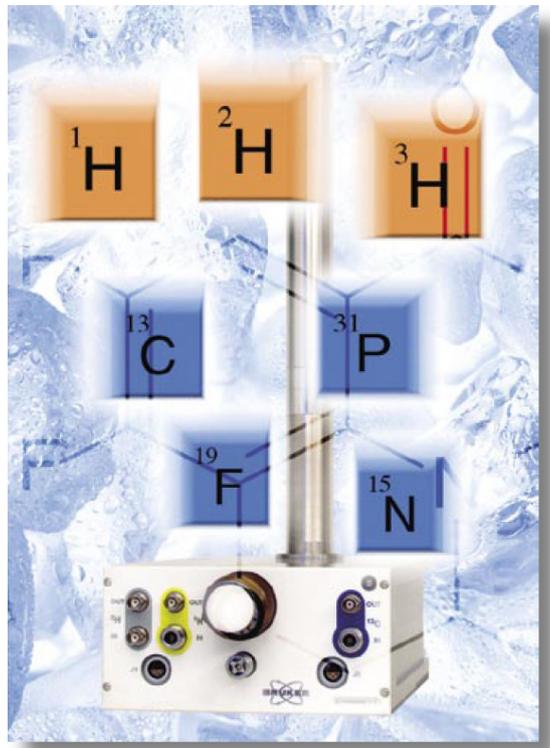


- E-** 顯示遞減之光譜
- E+** 顯示遞增之光譜
- *2_S** 將選取光譜乘 2 顯示，若無光譜選取，則所有光譜同時放大
- /2_S** 將選取光譜除 2 顯示，若無光譜選取，則所有光譜同時縮小
- ◆_S** 以拖曳滑鼠方式將選取的光譜進行垂直縮放，若無光譜選取，則所有光譜同時垂直縮放
- ↑↓_S** 以拖曳滑鼠方式將選取的光譜進行上下移動，若無光譜選取，則所有光譜同時移動
- ←→_S** 以拖曳滑鼠方式將選取的光譜進行左右移動，若無光譜選取，則所有光譜同時移動

-  顯示目前所有光譜的相減結果
-  顯示目前所有光譜的相加結果
-  將 相加/相減 的結果存入一個 PROCNO 中
-  離開重疊模式

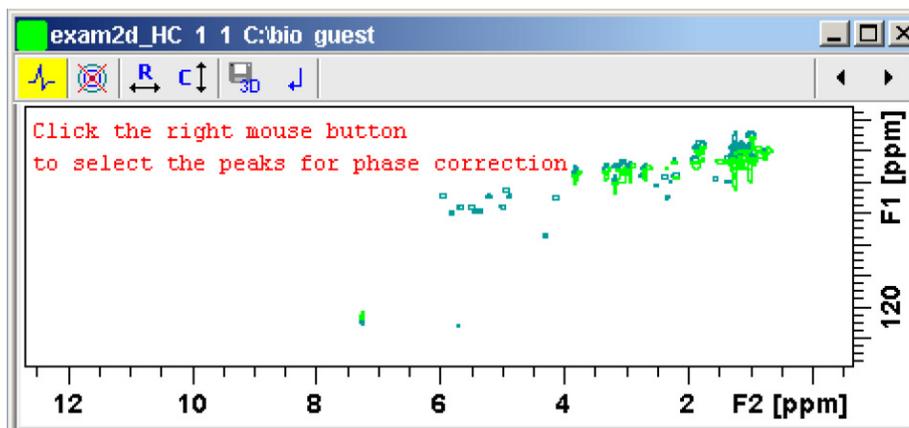
7. 距離量測模式：

一般進行距離量測，可直接於光譜上壓住滑鼠左鍵拖曳，即可出現距離數值(ppm 與 Hz)，但亦會將光譜放大，另可採用功能鍵 ，進入距離量測模式，以滑鼠左鍵點選之方式進行量測，當滑鼠游標離開資料區時，即會離開此模式。

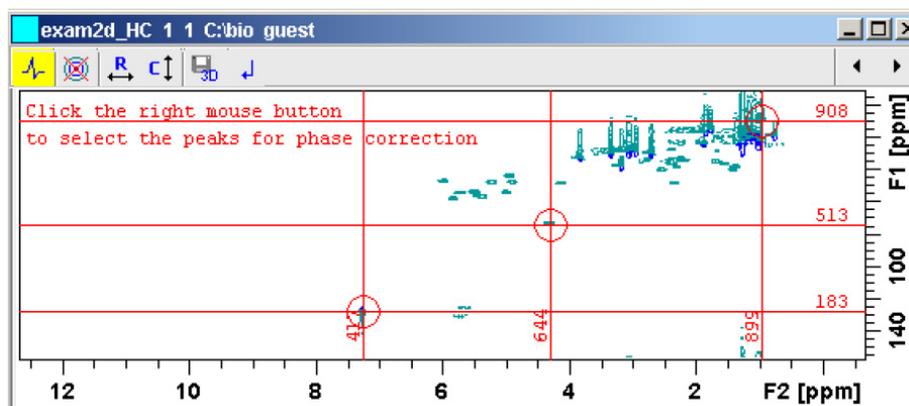


第六章 2D 光譜處理操作 (2D Interactive Manipulation)

1. 相位修正模式：點選  按鍵或鍵入 ".ph" 指令



一般會於光譜的右上角與左下角各選一個 peak，或在其他位置加選一個 peak，在其上按滑鼠右鍵並選擇功能選單中的 "Add"，以這些 peak 做為相位調整的參考點，動作完成如下圖：



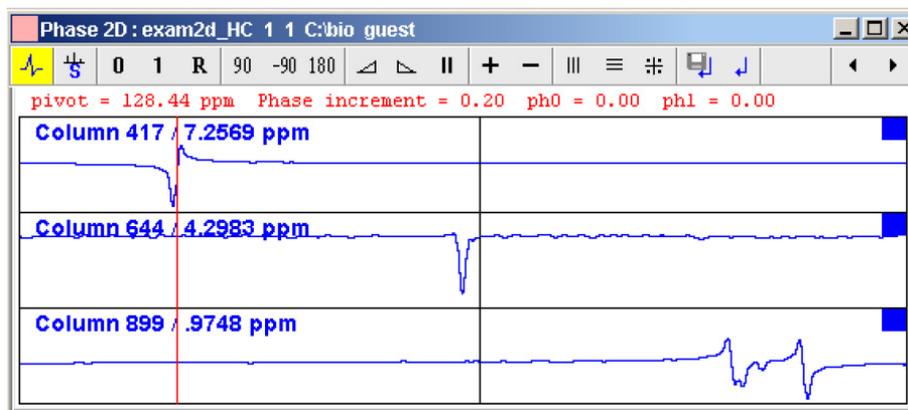
工具列按鍵：

-  切換進入等高線顯示
-  進入橫軸(row)相位調整
-  進入縱軸(column)相位調整

 將相位修正調整結果存入 3D 光譜中

 不儲存離開

當進入橫軸或縱軸相位調整模式時，即類似 1D 的相位調整模式，按鍵功能亦相同：



其中增加五個功能鍵：

 切換到下一個 1D 光譜

 切換到上一個 1D 光譜

 將多個相位修正的 1D 光譜以左右並排的方式排列

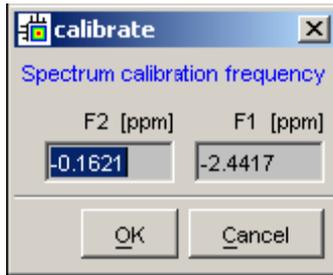
 將多個相位修正的 1D 光譜以上下並排的方式排列

 將多個相位修正的 1D 光譜以上下左右的方式排列

將橫軸與縱軸兩個維度個別進行相位調整完成後，即完成 2D 相位調整。

2. 座標軸校正：點選  按鍵或鍵入 ".cal" 指令。

於光譜區上，將十字紅線移到參考訊號上，點擊左鍵即會出現一對話框，填入欲定義的座標值，如圖：

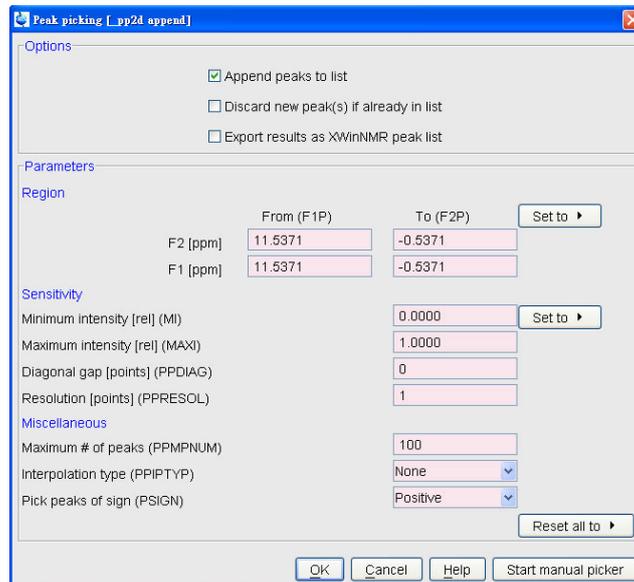


再分別填入兩個軸的校正值。一般使用"SR"值與 1D 光譜相同，即可達成座標軸校正之目的。

3. peak 標定

3.1 手動 peak 標定：點選  按鍵圖示，在 peak 上按滑鼠右鍵並選擇功能選單中的"Add Peak to List"。

3.2 自動 peak 標定：由主功能表 → "Analysis" → "Peak Picking" [pp] 會出現如下視窗：

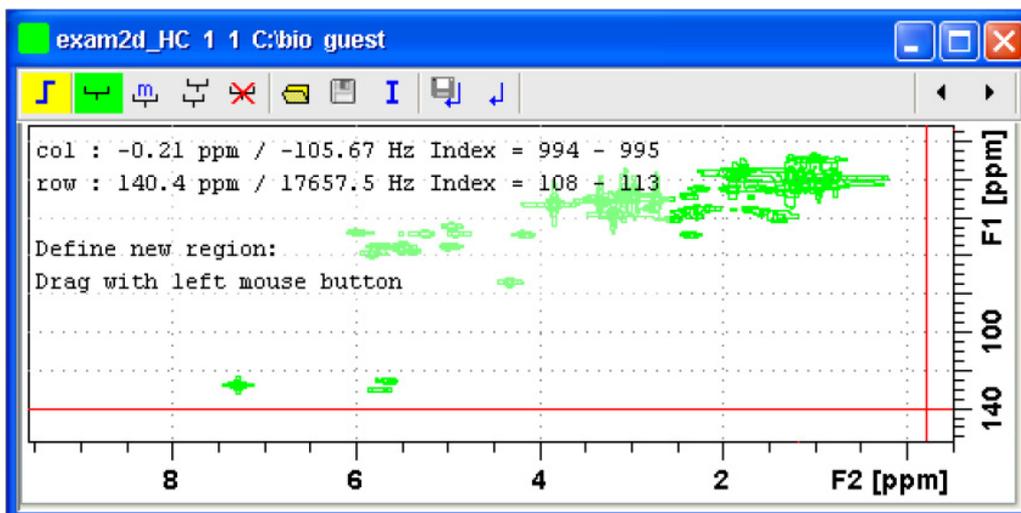


(1) 由"Region"設定欲 peak 標定的範圍，亦可由"Set to"選擇：

- Full range：全光譜。
- Displayed Range：目前顯示的光譜範圍。
- Range defined by stored parameters：以設定於"edp"中的範圍參數("F1P"與"F2P")為範圍。

- Most recent range stored in peak list: 以最近做 peak 標定的範圍為範圍。
- (2) 將"Minimum Intensity [rel] (MI)"以"**Set to**"選擇"Lowest contour level"(需先將光譜高度調到合適值)。
 - (3) 依目測預估是否需要更動 peak 最大數量(Maximum # of peaks)之數值。
 - (4) 依欲做 peak 標定之 peak, 選擇 peak 的相位(Pick peaks of sign)。
 - (5) 按下 **OK** 即進行自動 peak 標定。

4. 積分模式：點選  按鍵或鍵入".int"指令。



工具列按鍵：

-  以滑鼠拖曳欲積分範圍
-  移動積分範圍
-  複製積分範圍，在此模式下，移動任一積分範圍時，即進行範圍複製
-  刪除所有積分範圍
-  開啟已存在的積分記錄檔



儲存目前所定義的範圍區段，會出現以下視窗：

Save Regions To 'int2drng' and integrate
Export integration regions

- **Save Regions To 'int2drng' and integrate**

將積分相關數值寫入積分文件檔(於 PROCNO 資料夾中的 "int2drng"檔案)。

- **Export integration regions**

將積分範圍儲存成檔案，可提供給其他光譜使用。



定義參考標準值，會出現以下視窗：

Integrate current regions
Integrate current regions rel to a reference
Define current dataset as reference
Integrate and use ref. dataset for calibration
List integral values

- **integrate current regions**

積分所選取的範圍。

- **integrate current regions rel to a reference**

校正積分區域之積分值，選擇此項後，輸入欲當為積分標準的範圍編號，再輸入此積分區域應有之積分值，則全部之積分值會以此值為標準而重新計算顯示。。

- **Define current dataset as reference**

定義目前的光譜積分範圍與數值為其他光譜之標準。

- **integrate and use ref. dataset for calibration**

以定義為標準的光譜進行積分值校正。

- **List integral values**

列出積分相關數值。



將積分值儲存並離開此模式



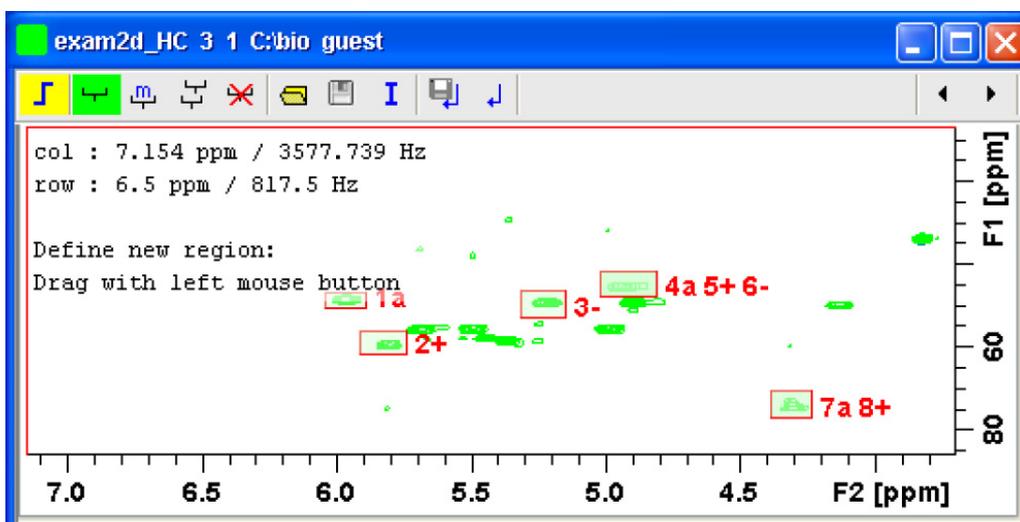
不儲存離開

2D 光譜積分步驟如下：

4.1 於選取積分範圍之功能運作中(功能鍵顯示為)時，按下滑鼠右鍵拖曳出範圍後，會出現以下之選項：

- **Cancel**：取消此積分範圍
- **Integrate:a**：顯示此範圍內正、負 peak 之積分總和
- **Integrate:+**：顯示此範圍內正 peak 之積分總和
- **Integrate:-**：顯示此範圍內負 peak 之積分總和
- **Integrate:a + -**：分別顯示此範圍內正、負 peak 之積分總和、正 peak 之積分總和與負 peak 之積分總和三個積分數值
- **Integrate:a +**：分別顯示此範圍內正、負 peak 之積分總和與正 peak 之積分總和兩個積分數值
- **Integrate:a -**：分別顯示此範圍內正、負 peak 之積分總和與負 peak 之積分總和兩個積分數值
- **Integrate:+ -**：分別顯示此範圍內正 peak 之積分總和與負 peak 之積分總和兩個積分數值

當選擇完成後，會於選取範圍旁出現編碼與積分種類，如下圖所示：

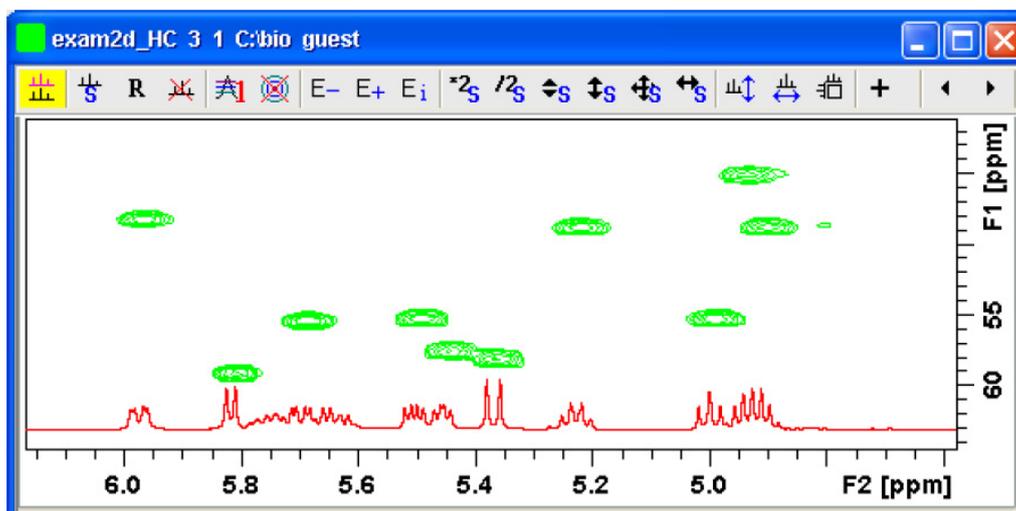
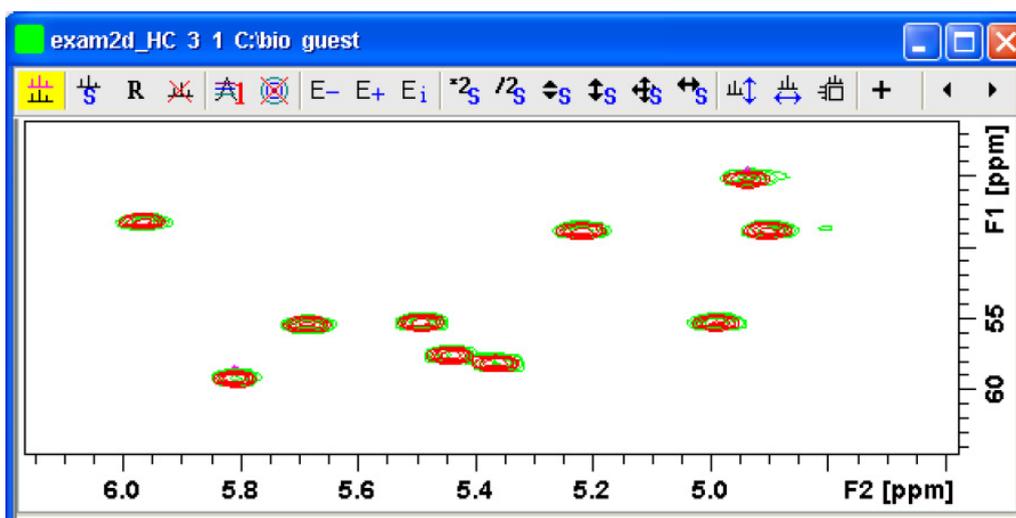


4.2 按下 **I**，選擇"integrate current regions"即會對選取之範圍進行積分。

4.3 按下 **I**，選擇"List integral values"即會顯示目前積分數值之結果。

5. 光譜重疊模式：點選 **≡** 按鍵或鍵入".md"指令。

將多份光譜重疊比較與選擇個別光譜的方法與 1D 光譜相同，但於 2D 光譜中可做 2D 與 2D 和 1D 與 2D 的重疊，如下圖：



當進入光譜重疊模式時，即類似 1D 的光譜重疊模式，按鍵功能亦相同，其中增加七個功能鍵：



將所有光譜的等高線參數設成與第一張光譜相同



切換第一張光譜之等高線圈顯示與否



點選此模式，滑鼠在圖譜上移動會顯示游標處橫軸(row)的 1D 圖像，轉動滑鼠滾輪可調整 1D 圖像大小，此時按滑鼠右鍵可出現選單：

Toggle Rows/Columns
Extract Row/Column
Grab Row/Column
Baseline At Center
Baseline At Bottom

● **Toggle Rows/Columns**

切換橫軸與縱軸之 1D 光譜顯示。

● **Extract Row/Column**

將 1D 光譜另存至一個 PROCNO 中。

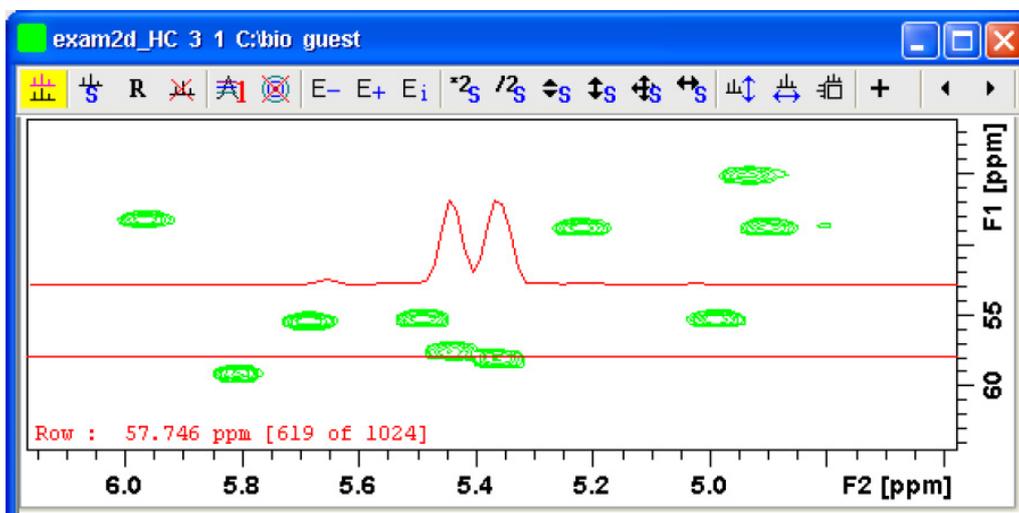
● **Grab Row/Column**

固定顯示此時掃瞄所獲得之 1D 光譜。

● **Baseline At Center 或 Baseline At Bottom**

控制 1D 光譜的基線位置於中間或在下方。

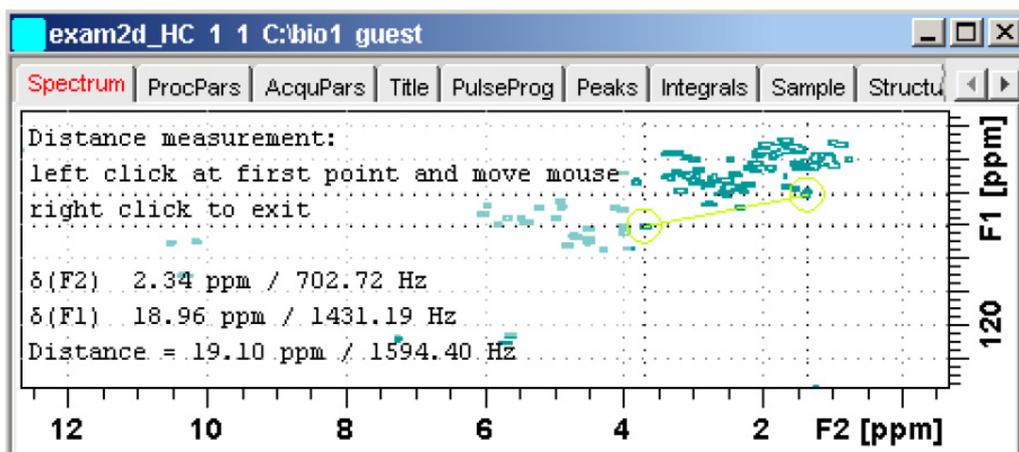
顯示結果如下：



-  點選此模式，滑鼠在圖譜上移動會顯示游標處縱軸(column)的 1D 圖像，其餘功能與  相同
-  進入計算投影模式，可將橫軸或縱軸維度的投影量存至一個 PROCNO 中
-  當執行"Grab Row/Column"獲得 1D 時，以此按鍵來調整所顯示的層數往上移動
-  當執行"Grab Row/Column"獲得 1D 時，以此按鍵來調整所顯示的層數往下移動

6. 距離量測模式：點選 按鍵。

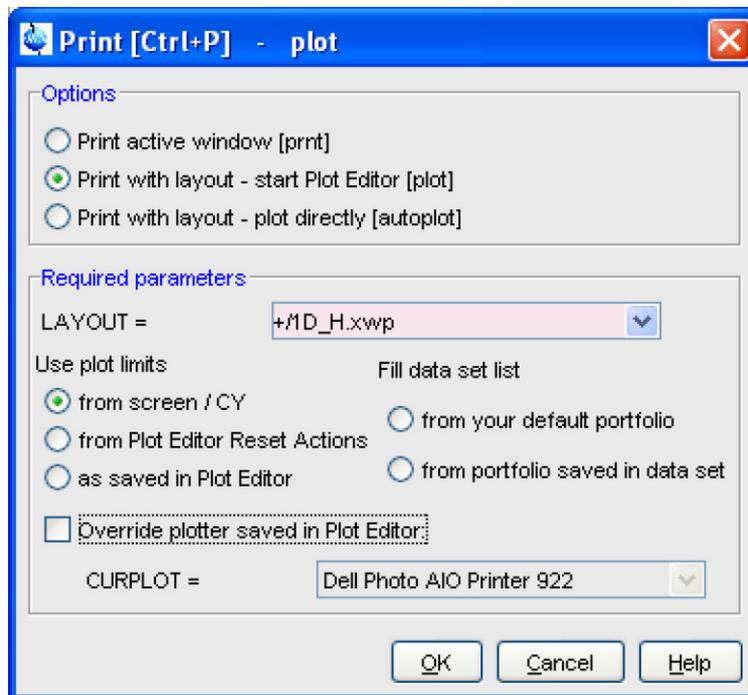
進入距離量測模式後，以滑鼠左鍵點選之方式進行量測，可出現橫向、縱向與直線間之距離數值(ppm 與 Hz)，當滑鼠游標離開資料區時，即會離開此模式。



第七章 列印/輸出 (Printing/Exporting Data)

7-1. 光譜列印

- 有四種方式可進入列印模式
- 按下  按鍵
- 由主功能表 → File → Print
- 鍵入 "print" 指令
- 同時按下鍵盤中的 "Ctrl" 與 "P" 按鍵



1. Options :

- **Print active window [prnt]**

將目前 TOPSPIN 視窗所顯示的光譜直接列印。

- **Print with layout - start Plot Editor [plot]**

進入 "Plot Editor" 視窗，即使用 TOPSPIN Plot Editor 程式，此時會套用 "LAYOUT" 的格式再進一步編輯。(關於編輯部份與 TOPSPIN Plot Editor 的程式應用，請參閱程式中的 "Help" 說明)

- **Print with layout – plot directly [autoplot]**

套用"LAYOUT"格式，直接將光譜輸出成檔案。

2. **LAYOUT**：此欄位可選擇圖譜列印範本檔，用以套用列印格式。

除預設的範本檔，亦可自行在 TOPSPIN Plot Editor 程式中建立並儲存自己設定的範本檔。

3. **Use plot limits**：選擇光譜邊界與高度設定的方法

- **from screen/ CY**

當"edp"中參數"F1P"、"F2P"和"CY"未設定時(= 0)，使用 TOPSPIN 顯示之範圍與高度作為列印標準；當三個參數設定時(≠ 0)，使用參數所設定之數值作為列印標準。

- **from Plot Editor Reset Actions**

使用 TOPSPIN Plot Editor 程式中"Automation Reset Actions"功能設定之範圍與高度作為列印標準。(於 TOPSPIN Plot Editor 程式的光譜中壓滑鼠右鍵，並選擇"Automation..."可進行設定)

- **as saved in Plot Editor**

使用"LAYOUT"格式內所儲存之範圍與高度作為列印標準。

7-2. 光譜複製與輸出

1. **光譜複製**：於主功能表選擇"Edit" → "Copy"或鍵入"copy"指令，可

將目前 TOPSPIN 的光譜複製到 Windows 的剪貼簿中，而於其他文書編輯程式(如 Word)即可使用"貼上"功能，將光譜進行複製。

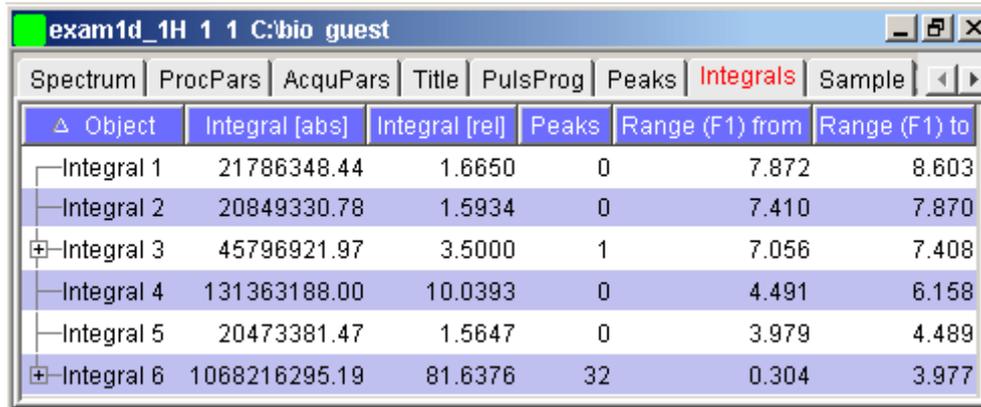
2. **光譜輸出**：於主功能表選擇"File" → "Export"或鍵入"exportfile"指

令，再鍵入檔案輸出的位置與檔名，即可將光譜輸出成圖形檔案，

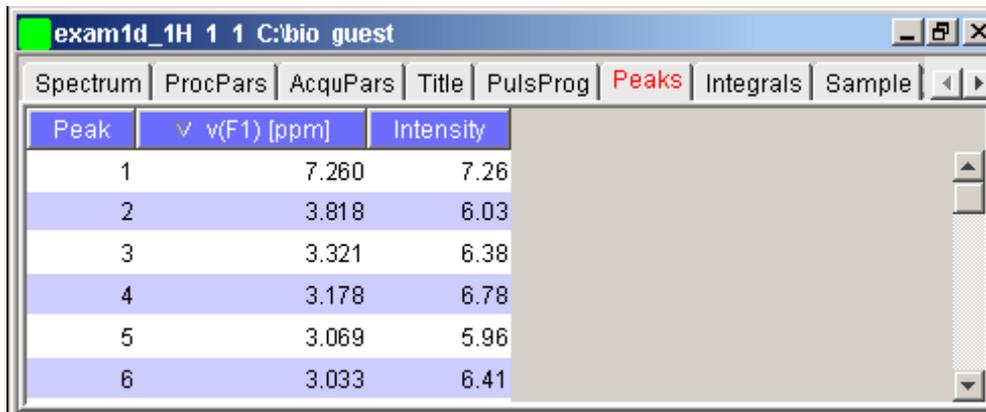
可輸出的格式為：.png、.jpg、.jpeg、.bmp、.emf、.wmf。

7-3. 積分值與 peak 標定值之列印

於光譜視窗中，將頁面切換到積分頁面或 peak 標定值頁面，再於命令列中輸入"print"或於頁面中壓滑鼠右鍵，於功能表中選取"Print..."即可列印。如下圖所示：



Object	Integral [abs]	Integral [rel]	Peaks	Range (F1) from	Range (F1) to
Integral 1	21786348.44	1.6650	0	7.872	8.603
Integral 2	20849330.78	1.5934	0	7.410	7.870
Integral 3	45796921.97	3.5000	1	7.056	7.408
Integral 4	131363188.00	10.0393	0	4.491	6.158
Integral 5	20473381.47	1.5647	0	3.979	4.489
Integral 6	1068216295.19	81.6376	32	0.304	3.977



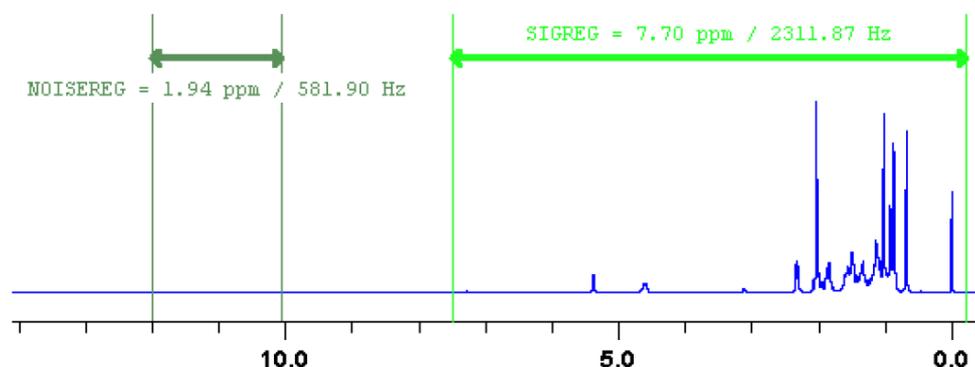
Peak	v(F1) [ppm]	Intensity
1	7.260	7.26
2	3.818	6.03
3	3.321	6.38
4	3.178	6.78
5	3.069	5.96
6	3.033	6.41

第八章 光譜分析 (Analysis)

8-1. 訊雜比計算 (Signal to Noise Calculation)

由主功能表選擇"Analysis" → "Signal/Noise Calculation" [.sino]，進入訊雜比計算模式。

壓住滑鼠左鍵，並拖曳一段範圍做為訊號範圍，再拖曳一段範圍做為背景雜訊範圍。訊號範圍需涵蓋想計算的訊號，背景雜訊範圍則挑平坦沒有訊號的背景區段即可。舉例如下圖：



選擇區段後，按滑鼠右鍵會出現功能表，如下圖：

Quit
Clear NOISEREG
Clear SIGREG
Edit Regions ..
Change Region Widths ...
Start S/N Calculation
Enter Zoom

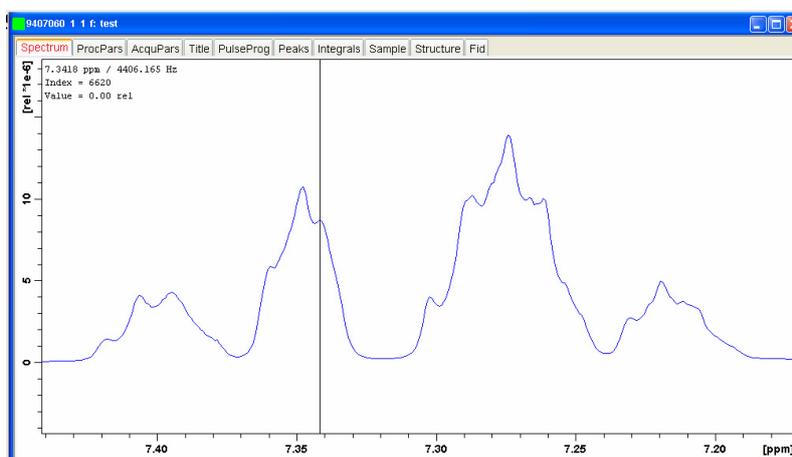
- **Quit**：離開訊雜比計算模式。
- **Clear NOISEREG**：取消所選取的雜訊範圍。
- **Clear SIGREG**：取消所選取的訊號範圍。
- **Edit Regions**：手動輸入訊號或雜訊範圍。
- **Change Region Widths**：改變所選取範圍的寬度。

- **Start S/N Calculation**：開始進行訊雜比計算。
- **Enter Zoom**：進入光譜放大模式，此時按下滑鼠左鍵拖曳，是進行光譜左右之放大功能，若在此模式中按下滑鼠左鍵並選取"Exit Zoom"，則會回到訊雜比計算模式。

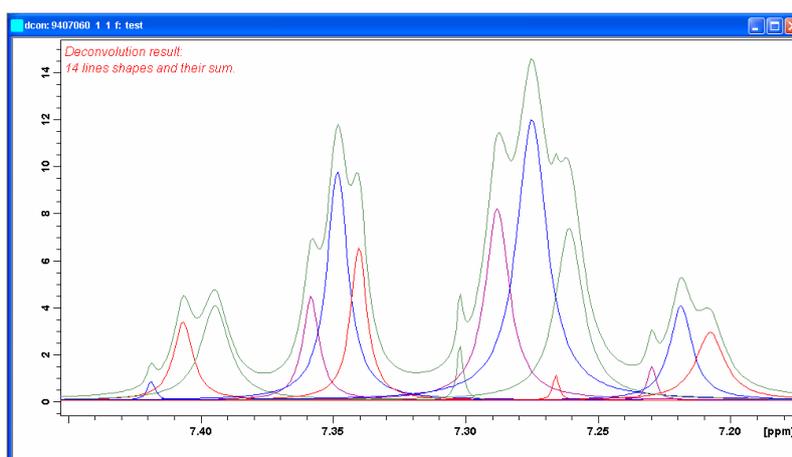
8-2. 重疊峰拆解 (Deconvolution)

其使用目的是將 peak 相互重疊的地方，利用 Gaussian 或 Lorentzian 曲線將每個 peak 進行區分，如圖所示：

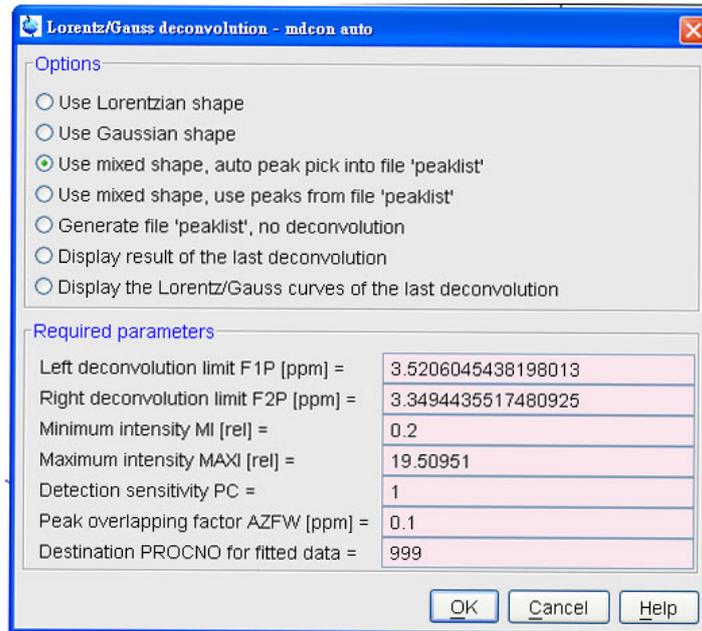
- 重疊的光譜：



- 重疊峰拆解結果圖：



將顯示範圍移到需要執行重疊峰拆解的範圍，由主功能表選擇 "Analysis" → "Deconvolution" 或鍵入 "dcon" 指令進入參數設定視窗：



1. Options :

- **Use Lorentzian shape** : 使用 100% Lorentzian 函數。
- **Use Gaussian shape** : 使用 100% Gaussian 函數。
- **Use mixed shape, auto peak pick into file 'peaklist'** : 使用混合函數，將自動判定出的 peak 標定值存入"peaklist"的檔案中。
- **Use mixed shape, use peaks from file 'peaklist'** : 使用混合函數，並以"peaklist"檔案中所存入的 peak 做為區分重疊之依據。
- **Generate file 'peaklist', no deconvolution** : 只將自動判定出的 peak 標定值存入"peaklist"的檔案中，但不執行重疊峰拆解。
- **Display result of the last deconvolution** : 顯示最後一次重疊峰拆解的數據結果(以文字顯示)。
- **Display the Lorentz / Gauss curves of the last deconvolution** : 顯示最後一次重疊峰拆解的 peak 區分結果(以圖形顯示)。

2. Required parameters

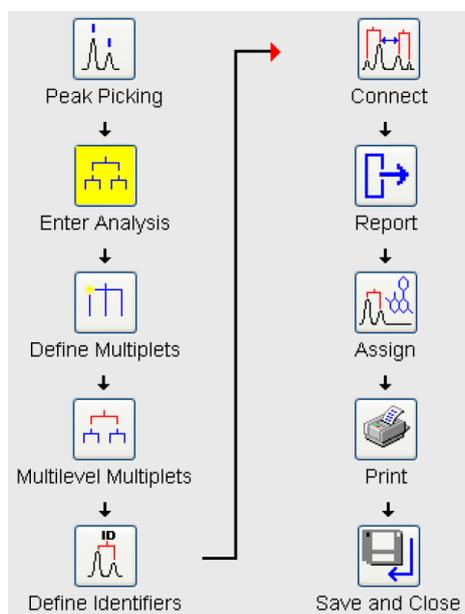
- **Left deconvolution limit F1P [ppm]** : 設定欲做重疊峰拆解的光譜

左邊界(預設為目前光譜所見之左邊界)。

- **Right deconvolution limit F1P [ppm]**：設定欲做重疊峰拆解的光譜右邊界(預設為目前光譜所見之右邊界)。
- **Minimum intensity MI (rel)**：自動標定 peak 的最低高度
- **Maximum intensity MAXI (rel)**：自動標定 peak 的最高高度
- **Detection sensitivity PC**：peak 標定的靈敏度，其輸入需為 > 0 之數值，數值越大靈敏度越低，即越不易標定到 peak。
- **Peak overlapping factor AZFW [ppm]**：peak 間的最小距離。
- **Destination PROCNO for fitted data**：將重疊峰拆解結果存入一個 PROCNO。

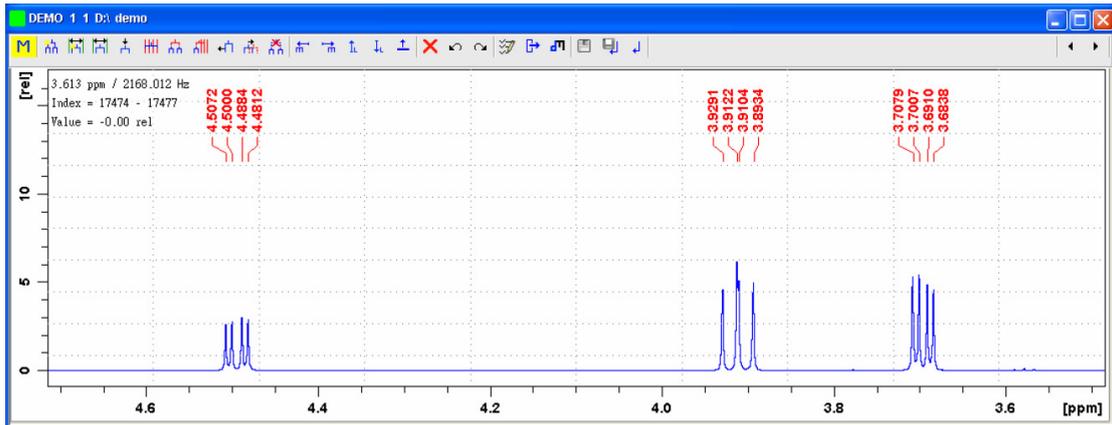
8-3. 偶合常數分析 (Multiplet Analysis)

此功能可進行偶合常數的計算，並可依據偶合常數尋找 peak 間的關連性，亦可將其結果輸出為論文格式，更詳細的說明與步驟，請參考"Structure Analysis Tools" (由主功能表 → "Help" → Manuals 中選取)。由主功能表選擇"Analysis" → "Structure Analysis" → "Multiplet Guide"或鍵入"**managuide**"指令，會出現偶合常數分析小幫手之視窗：



1. **Peak Picking**：進行 peak 標定，亦可於進入小幫手前先做 peak 標定，而於小幫手中跳過此步驟。

2. **Enter Analysis**：進入偶合常數的計算模式，亦可鍵入"mana"指令進入此模式：

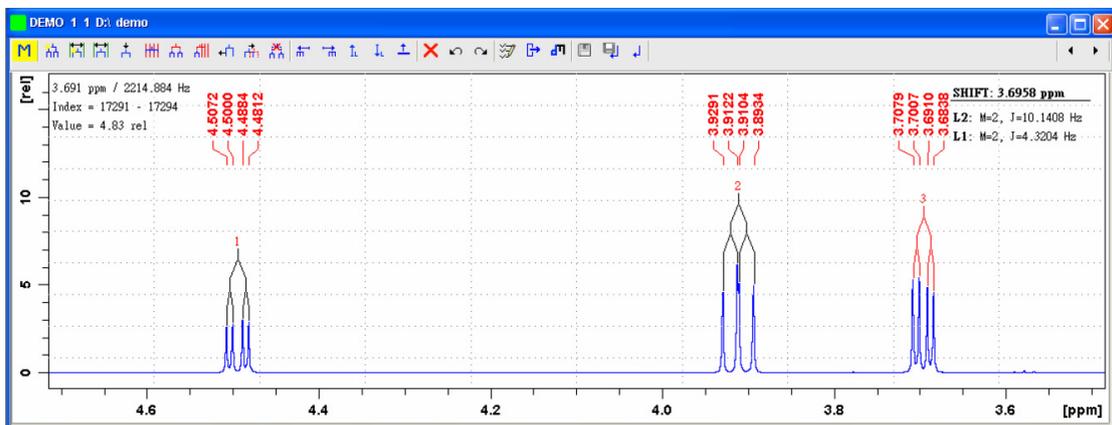


3. **Define Multiplets**：定義分裂模式

3.1 **Automatic Definition**：自動定義分裂模式

- **Whole spectrum**：將目前所顯示之光譜範圍內之 peak 自動進行分裂模式定義，等同於  按鍵之功能。
- **Region**：壓住滑鼠左鍵進行拖曳選取範圍後，自動定義分裂模式，等同於  按鍵之功能。

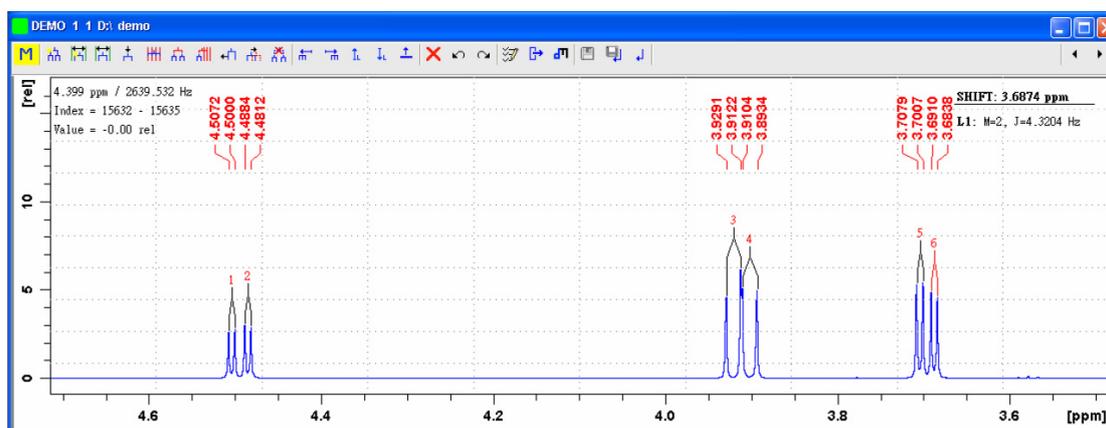
定義完成後之範例如下：



3.2 Manual Definition：手動定義分裂模式

- **By region**：壓住滑鼠左鍵進行拖曳選取範圍後，會將範圍內具 peak 標定之 peak 定義為同一個分裂模式，等同於  按鍵之功能。
- **Manually**：手動定義分裂模式，以滑鼠左鍵點出每個 peak 的位置，再按滑鼠右鍵出現選單，選擇"Define Multiplet"，會將選取之 peak 定義為同一個分裂模式，等同於  按鍵之功能 ^{註六}。
- **Free Grid**：以等距格線定義分裂模式，先按滑鼠右鍵出現選單，選擇 peak 分裂之數量，再將游標移至 peak 群中最中間按滑鼠左鍵，移動滑鼠即會出現與設定之 peak 分裂數量相等的等距格線，並將每個格線的位置調至每個 peak 的峰頂，再按一次左鍵即完成定義，等同於  按鍵之功能。

定義完成後之範例如下：



※註六：關於此方法更詳細的說明，請參考"1D and 2D Step-by-Step-Advanced" (由主功能表 → "Help" → Manuals 中選取)。

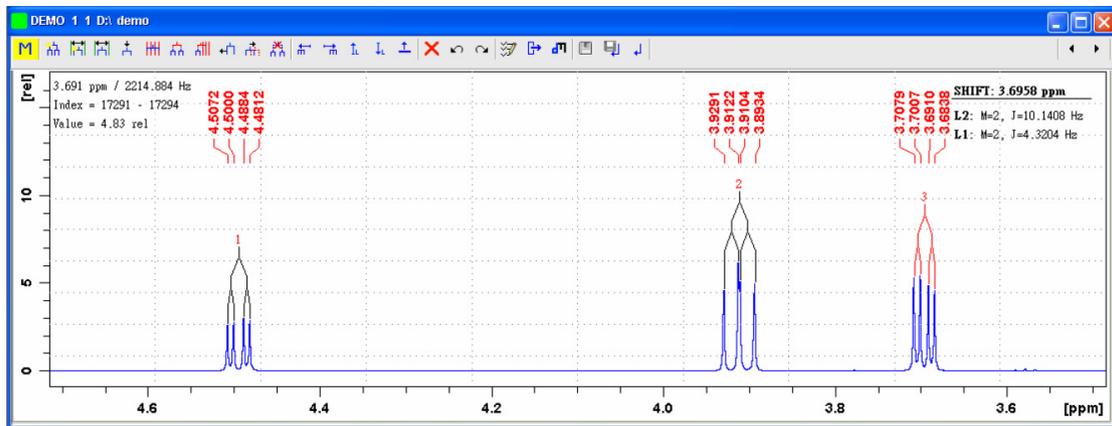
4. Multilevel Multiplets：合併偶合分裂模式

- **Couple Existing Multiplets**：將已存在的偶合分裂再合併成一個偶合分裂叢集，將欲合併的偶合分裂以滑鼠左鍵選取，選取之分裂

線會呈現紅色，再按滑鼠右鍵選"Define Multiplet"，即可將所選取的偶合分裂進行合併，等同於  按鍵之功能。

- **Coupled Grid**：以等距格線合併已存在的偶合分裂成一個叢集。
先以滑鼠左鍵選取其中一個偶合分裂標示，再點選此按鈕，則會出現與此偶合分裂相同分裂數的格線，將其放置於另一個偶合分裂對齊再按左鍵即可，而按滑鼠右鍵可選擇分裂的數目，等同於  按鍵之功能。

合併完成後之範例如下：



工具列按鍵

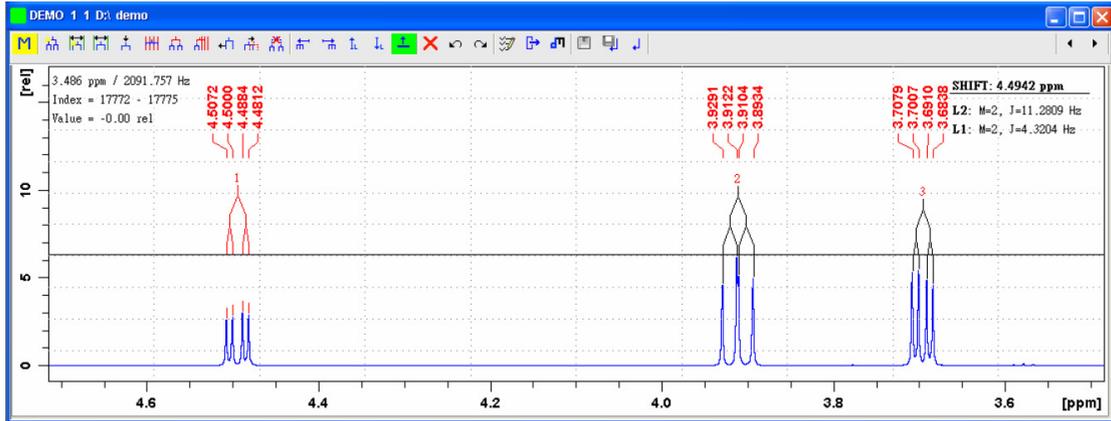
-  將偶合分裂中定義的位置，即指在 peak 上方的標示，單一標示做左右移動，再點選此按鍵則離開移動模式
-  將偶合分裂中定義的位置，即指在 peak 上方的標示，整組標示做左右移動，再點選此按鍵則離開移動模式
-  刪除已合併的偶合分裂叢集標示
-  選擇減少編號之偶合分裂
-  選擇增加編號之偶合分裂
-  選擇偶合分裂叢集的上一個階層標示



選擇偶合分裂叢集的下一個階層標示



調整偶合分裂標示的水平高度，先以滑鼠左鍵選取其中一個偶合分裂標示，再點選此按鈕，移動橫線至新的水平高度，壓下滑鼠左鍵即可移動標示。再點選此按鈕則離開移動模式，其結果如下圖所示：



刪除所選擇的偶合分裂



取消最後一次的動作



重做最後一次的動作



調整定義偶合分裂的參數值，會出現如下視窗：

(1) Manual multiplet creation

此欄參數影響 、 與  之功能，一般不需做更改。

(2) Automatic multiplet creation

此欄參數影響  與  之功能，藉由參數之更改，可提高自動定義分裂模式之準確度。

● Coupling tolerance

偶合常數之寬容值，設定在多少百分比內，程式自動認定為相同之偶合常數而進行搜尋與關連。如一偶合常數為 10 Hz，而將此參數設定為 5%，則 9.5 ~ 10.5 Hz 之偶合常數都將認定為相同。

● Intensity tolerance

peak 強度之寬容值，設定相距在多少百分比內的 peak 強度，程式自動認定為相同之分裂群組。如一 peak 強度為 10，而將此參數設定為 30%，則強度 7 ~ 13 之 peak 都可被認定為相同之分裂群組。

● Maximal coupling

設定光譜中最大之偶合常數。

● Maximal Multiplicity

設定光譜中最多之 peak 分裂數目。

● Create singlets

開啟或關閉標定單一峰(singlet peak)之功能。

(3) Display options

變更顯示樣式之參數

● Labels Vertical

將標示之數字以水平或垂直方向顯示。

● Multiplet Ticks

顯示標示於定義分裂之 peak 上。

● Multiplet tree form

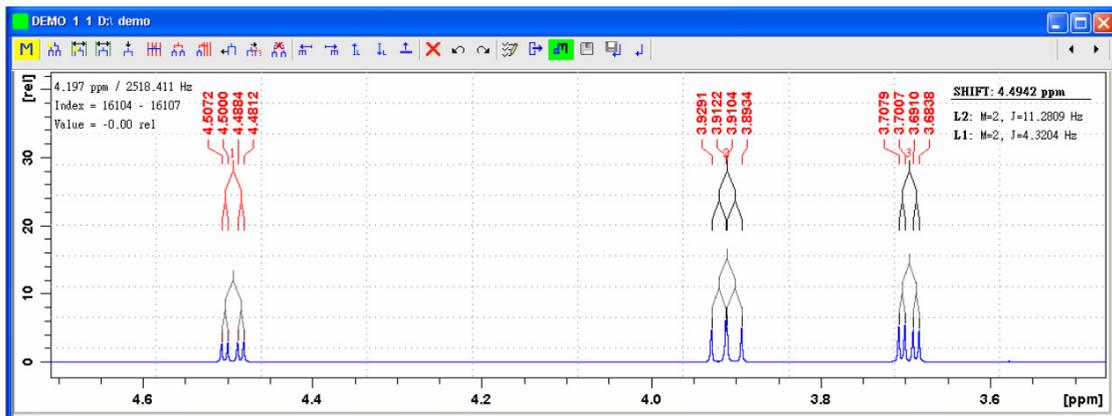
選擇標示的形式，可選擇斜線之樹狀模式(Diagonal tree)或直角之樹狀模式(Square tree)。



檢視報告，並可利用偶合常數尋找 peak 間之關連性，亦可將關連性顯示成論文格式，有 JMR (Journal of Magnetic Resonance)與 JPF (Japanese Patent Format)格式可選擇



若使用過"Daisy"程式進行光譜模擬，按下此鍵則會於光譜上方顯示模擬的分裂結果提供比對，再點選此按鍵則離開此比對模式，範例如下：



儲存偶合常數分析結果



儲存偶合常數分析結果並離開此模式



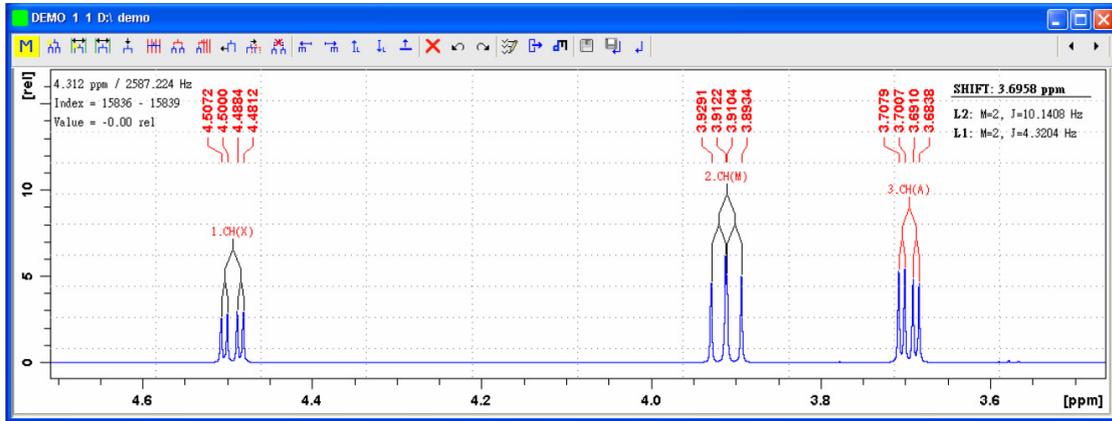
不儲存並離開此模式

5. Define Identifiers：定義分裂標示的編碼，依下述步驟進行編碼

(1) 以滑鼠左鍵選取欲定義編碼之分裂標示

(2) 壓滑鼠右鍵選取選單中之"Designate Multiplet Identifier"

- (3) 於出現之對話框的"Identifier"欄位中填入新的編碼，編碼可為數字或英文，編碼完成後之範例如下：

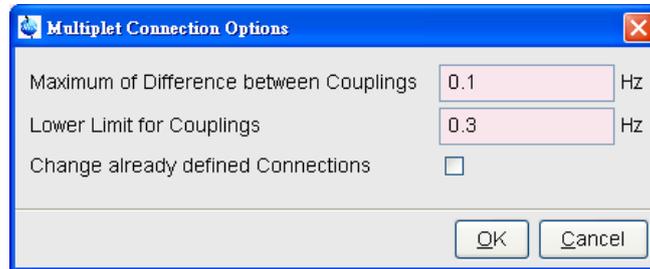


6. Connect：依據偶合常數尋找分裂間的關連性。

6.1 自動搜尋關連性

(1) 按下  功能鍵

(2) 按下 "Find Connections" 之按鍵，會出現參數設定對話框：



- **Maximum of Difference between Couplings**

設定關連間最大的偶合常數誤差值，如設定為 0.1 Hz，則程式僅會將 9.9 ~ 10.1 Hz 的偶合常數設為有關連。

- **Lower Limit for Couplings**

設定最低的偶合常數，低於此設定之數值之偶合常數，則程式將不會進行關連搜尋。

- **Change already defined Connections**

是否要覆蓋原有定義的關連性。

(3) 按下 **OK** 後，則自動進行偶合常數關連性的搜尋，並將結果顯示

於報告中。

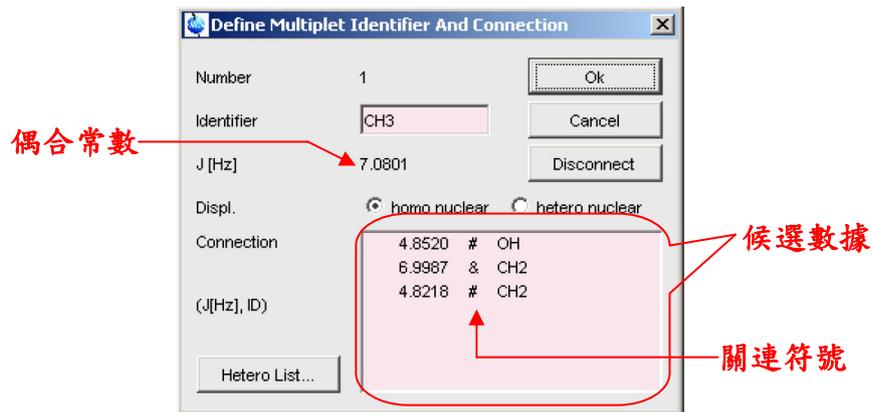
6.2 手動建立關連性

6.2.1 以光譜手動建立關連性

- (1) 以滑鼠左鍵於光譜中選擇一個欲關連的分裂顯示，若其具多層分裂顯示(為一個分裂叢集)，需使用  或  功能鍵選取。
- (2) 按下滑鼠右鍵選擇"Designate Multiplet" (若之前已有關連定義，需先選擇"Disconnect Multiplets")。
- (3) 再以滑鼠左鍵於光譜中選擇另一個欲關連的分裂顯示，若其具多層分裂顯示(為一個分裂叢集)，需使用  或  功能鍵選取。
- (4) 按下滑鼠右鍵選擇"Connect Multiplets"，即可於報告中顯示關連性。

6.2.2 以偶合常數數據手動建立關連性

- (1) 按下  功能鍵。
- (2) 以滑鼠左鍵雙擊一個欲關連的分裂數據，可出現如下視窗：



- (3) 在候選數據中以滑鼠左鍵雙擊另一個欲關連的分裂數據，即可即可於報告中顯示關連性。

[附註] 關連符號說明

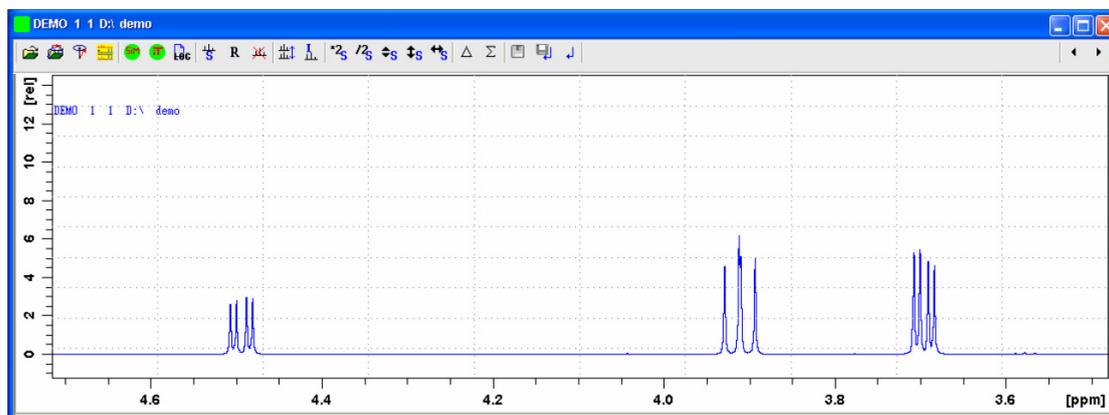
- # : 已具關連，與目前選擇之分裂數據不屬相同叢集

- ! : 已具關連，與目前選擇之分裂數據屬於相同叢集
- & : 已具關連，與目前選擇之分裂數據關連
- > : 不具關連，與目前選擇之分裂數據最接近

7. Report : 等同於  按鍵之功能。

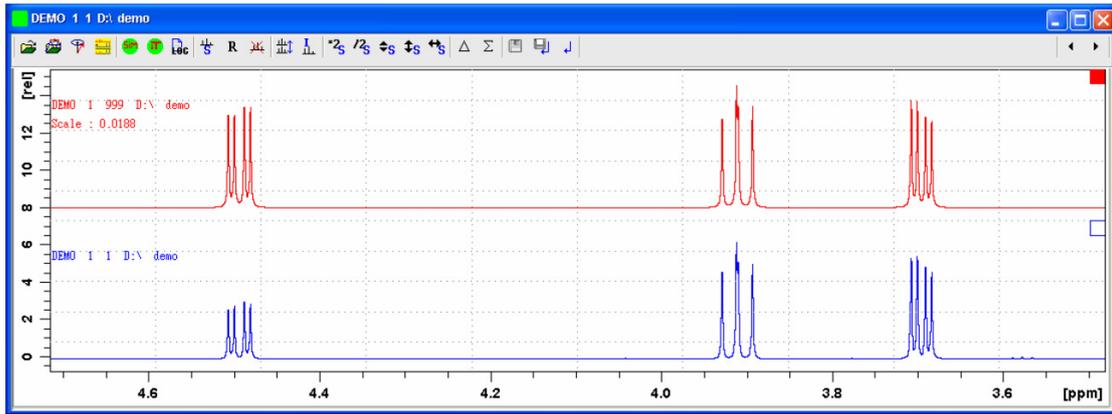
8-4. Daisy 光譜模擬程式

此功能可將進行偶合常數計算的結果模擬出 1D 光譜，便於進行比對，亦可使用輸入的方式，進行 1D 光譜之模擬。以下介紹經由偶合常數分析後之光譜模擬，更詳細的說明與步驟，請參考"Daisy" (由主功能表 → "Help" → "Manuals"中選取)。由主功能表選擇"Analysis" → "Structure Analysis" → "1D Spectrum Simulation"或鍵入"daisy"指令，即可進入 Daisy 光譜模擬程式，其介面如下：



於完成偶合常數分析後，可依下述步驟進行光譜模擬：

1. 按下  功能鍵，輸入已完成偶合常數分析的檔案路徑。
2. 按下  功能鍵，執行光譜模擬，模擬後的光譜儲存於內定之檔案路徑中(PROCNO = 999)，且自行進行疊圖顯示，如下圖所示：



其中下層光譜(藍色)為原有之光譜；上層光譜(紅色)為模擬之光譜。

工具列按鍵



開啟自旋系統(spin system)檔案，可開啟四種檔案格式：

- Daisy 程式之檔案(*.mgs)
- NMR-SIM 程式之檔案(*.ham)
- ACD 光譜預測程式之檔案
- Perch 光譜預測程式之檔案



由 TOPSPIN 的檔案中開啟偶合常數分析結果



建立或修改自旋系統



進階參數輸入或修改



進行光譜之模擬(simulation)



進行光譜之迴圈計算(iteration)

第九章 常用指令 (Frequently Command)

➤ A

- **abs** : 同時做基線修正與圖譜積分
abs n : 僅做基線修正不做自動積分(1D)
- **abs1** : 進行 F1 軸的基線修正(2D)
- **abs2** : 進行 F2 軸的基線修正(2D)
- **abs2D** : 連續進行 F2 與 F1 軸的基線修正(2D)^{註七}
- **acqu** : 將視窗顯示在訊號收集模式(僅在訊號收集過程中才可執行)
- **apk** : 執行自動相位校正的動作
- **aqguide** : 開啟實驗設定小幫手
- **ased** : 列出執行實驗時所需的重要參數並允許修改之
- **at** : 設定一指令於某一時間開始執行, 設定之指令數目會顯示在狀態列中"Spooler"的"delaved"
- **atma** : 自動對 ATM 探頭進行共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching)調整
- **atmm** : 於電腦螢幕上對 ATM 探頭進行共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching)調整

➤ B

- **bsmsdisp** : 開啟 BSMS 控制視窗

➤ C

- **cf** : 將電腦與 NMR 主機間做組態重建(需 NMR super user 密碼)
- **copy** : 將目前的光譜複製到 Windows 的剪貼簿

- **cmdindex**：開啟指令說明與查詢視窗

➤ D

- **daisy**：執行 Daisy 光譜模擬程式(1D)
- **daisyguide**：執行 Daisy 光譜模擬程式小幫手(1D)
- **dcon**：執行重疊峰拆解(deconvolution)程式
- **del**：以檔案名稱(NAME)為選擇方式刪除檔案
- **del2d**：刪除檔案中光譜處理的檔案(不會刪除 FID) (2D, 3D)
- **delmac**：刪除巨集(macro)檔案
- **delp**：刪除檔案中光譜處理的檔案(不會刪除 FID) (nD)
- **delsh**：刪除勻場檔案(shim files)
- **dir**：以實驗名稱(NAME)為選擇方式列出檔案
- **docs**：列出 TOPSPIN 中所有手冊
- **dpa**：顯示已執行過實驗的收訊參數檔內容
- **dpp**：顯示已執行過實驗的數據處理參數檔內容

➤ E

- **eda**：編輯收訊參數檔
- **edasp**：設定偵測核種與硬體線路的聯接方式
- **edc**：編輯並可開啟一個新的檔案目錄
- **edc2**：指定一起進入 TOPSPIN-plot 繪圖的檔案目錄
- **edcpul**：顯示目前實驗的脈衝程式
- **edhead**：顯示並可選擇探頭的資料表
- **edlev**：編輯等高線圈層數與圈數(2D, 3D)
- **edmac**：編輯一個巨集指令
- **edp**：編輯一個訊號處理參數檔

- **edprosol**：定義各種不同探頭在不同的溶劑下對於各原子核種的脈衝強度與脈衝時間(需 NMR super user 密碼)
- **edpul**：顯示所有實驗的脈衝程式
- **edte**：顯示並可設定控溫器的溫度
- **edti**：編輯一個實驗的標題
- **ef**：套用EM視窗函數並進行傅立葉轉換(1D)
- **efp**：套用 EM 視窗函數並進行傅立葉轉換及相位校正的動作(1D)
- **ej**：將樣品從磁鐵中取出
- **exit**：關閉 TOPSPIN
- **expl**：開啟 Windows 的檔案資料夾，並顯示在目前光譜的 PROCNO 之檔案位置
- **expl top**：開啟 Windows 的檔案資料夾，並顯示在 TOPSPIN 程式之檔案位置
- **expl home**：開啟 Windows 的檔案資料夾，並顯示在"Documents and Settings\使用者名稱"之檔案位置
- **expl +資料夾完整路徑**：開啟 Windows 的檔案資料夾，並顯示在所指定之檔案位置
- **exportfile**：將光譜輸出成圖形檔
- **expt**：計算目前實驗所需時間

➤ F

- **fid**：開啟 FID 的顯示視窗
- **fp**：進行傅立葉轉換及相位校正的動作(1D)
- **ft**：進行傅立葉轉換(1D)
- **ft3d**：進行 F3、F2 與 F1 軸的傅立葉轉換(3D)

- **fromzip**：開啟以 zip 格式壓縮的 NMR 檔案

➤ G

- **getprosol**：將"edprosol"內所輸入的參數值讀取至目前的收訊參數檔內
- **gf**：套用 GM 視窗函數並進行傅立葉轉換(1D)
- **gfp**：套用 GM 視窗函數並進行傅立葉轉換及相位校正的動作(1D)
- **ghelp**：開啟"NMR Guide"程式
- **go**：將先前由"halt"所暫停的一維實驗予以繼續執行
- **gradshim**：開啟磁場梯度勻場(gradient shimming)控制視窗
- **gradshimau**：執行磁場梯度勻場(需先做 automation 之設定)^{註七}
- **gs**：開始進行實驗並可調整參數，調整參數後之結果會立即顯示

➤ H

- **halt**：暫停實驗的執行並會將目前已收集的訊號儲存於硬碟
- **help**：開啟指令說明對話框
- **help+指令**：出現此指令的詳細說明

➤ I

- **iconnmr**：開啟 ICONNMR 程式
- **iexpno**：創造一個新的檔案，其實驗序號(EXPNO)自動加一^{註七}
- **ii**：連繫軟體與硬體的設定
- **ij**：將樣品放入磁鐵中

➤ K

- **kill**：刪除不欲繼續執行的程式

➤ L

- **lock**：選擇樣品內氬溶劑的種類並執行氬鎖定
- **lockdisp**：開啟氬鎖定視窗
- **loopadj**：於已執行氬鎖定狀況下，自動調整氬鎖定的參數^{註七}

➤ M

- **mana**：執行偶合常數分析程式(1D)
- **managuide**：執行偶合常數分析程式小幫手(1D)
- **multiexpt**：依序計算多個相同檔名且 EXPNO 相連的實驗時間^{註七}
- **multizg**：依序進行多個相同檔名且 EXPNO 相連的實驗^{註七}

➤ N

- **new**：編輯並可開啟一個新的檔案目錄，等同於"edc"指令
- **nmrsim**：啟動 NMR-SIM 電腦模擬應用軟體
- **ns**：設定實驗掃瞄的次數

➤ O

- **open**：開啟已經存在的實驗設定檔

➤ P

- **paropt**：對某一實驗參數作漸進式的調整^{註七}
- **prguide**：開啟光譜處理小幫手
- **print**：開啟列印選項對話框
- **proj**：開啟投影圖功能對話框(2D, 3D)
- **pulsecal**：進行實驗找出樣品 ^1H 的 90° 脈衝參數^{註七}

➤ Q

- **qu**：將指令進行佇列等候執行，佇列之指令數目會顯示在狀態列中"Spooler"的"queued"

➤ R

- **r12**：從 3D 實驗資料中讀取 F1-F2 平面至 2D 實驗資料中(3D)
- **r13**：從 3D 實驗資料中讀取 F1-F3 平面至 2D 實驗資料中(3D)
- **r23**：從 3D 實驗資料中讀取 F2-F3 平面至 2D 實驗資料中(3D)
- **re**：讀取某實驗名稱或 EXPNO 的光譜資料
- **rel**：列出此實驗名稱下之 EXPNO 與 PROCNO 的光譜資料
- **rep**：讀取此 EXPNO 下之 PROCNO 的光譜資料
- **rga**：自動調整"接收器增益值"(receiver gain, RG 值)
- **ro**：啟動樣品旋轉
- **rpar**：讀取已儲存的實驗參數設定檔
- **rsc**：從 2D 光譜讀取某一縱軸(column)的光譜至 1D (2D)
- **rser**：從 2D 光譜讀取某一橫軸(raw)的 FID 至 1D (2D)
- **rsh**：讀取已儲存的勻場檔案(shim file)

➤ S

- **search**：尋找或開啟電腦中的 NMR 資料
- **set**：設定使用者界面的外觀
- **setres**：設定使用者界面的外觀，等同於"set"指令
- **setti**：編輯一個實驗的標題，等同於"edti"指令
- **sino**：測量訊雜比(signal-to-noise ratio)
- **smail**：將目前顯示之光譜製成 zip 格式之壓縮檔並寄出

- **stop**：停止實驗的執行但不會將目前已收集的訊號儲存於硬碟
- **sub1**：將 2D 光譜減去某一縱軸(column)的 1D 光譜(2D)
- **sub2**：將 2D 光譜減去某一橫軸(row)的 1D 光譜(2D)
- **sym**：將具有對稱性的同核 2D 光譜進行對稱化，適用於 magnitude (脈衝程式具"qf"者)之光譜
- **syma**：將具有對稱性的同核 2D 光譜進行對稱化，適用於 phase sensitive (脈衝程式具"ph"或"et"者)之光譜

➤ I

- **tabs1**：進行 F1 軸的基線修正(3D)
- **tabs2**：進行 F2 軸的基線修正(3D)
- **tabs3**：進行 F3 軸的基線修正(3D)
- **tf1**：進行 F1 軸的傅立葉轉換(3D)
- **tf2**：進行 F2 軸的傅立葉轉換(3D)
- **tf3**：進行 F3 軸的傅立葉轉換(3D)
- **tht1**：進行 F1 軸的希爾伯特(Hilbert)轉換(3D)
- **tht2**：進行 F2 軸的希爾伯特(Hilbert)轉換(3D)
- **tht3**：進行 F3 軸的希爾伯特(Hilbert)轉換(3D)
- **topguide**：開啟光譜收集與處理工具程式
- **topshim**：開啟自動勻場功能程式
- **tozip**：將目前顯示之光譜製成 zip 格式之壓縮檔
- **tr**：將目前剛執行到某一掃瞄次數的 FID 內容予以複製並取出
tr+數字：將累積至設定數字掃瞄次數的 FID 內容予以複製並取出

➤ V

- **vconv**：將 Varian NMR 的檔案轉換成 TOPSPIN 可讀取之格式

- **vish**：查閱已儲存的勻場檔案(shim file)

➤ **W**

- **wobb**：進行共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching)調整
- **wpar**：儲存實驗參數設定檔
- **wrpa**：將目前 EXPNO 中的所有檔案複製到另一個 EXPNO
- **wsh**：將目前的勻場值(shim values)存成一個檔案

➤ **X**

- **xaua**：執行在"AUNM"中設定之 AU 程式
- **xfb**：進行傅立葉轉換(2D)
- **xwp**：將目前光譜置入 TOPSPIN Plot Editor 程式編輯

➤ **Z**

- **zg**：進行實驗

※註七：此為 AU 程式之執行指令，第一次執行此類指令，電腦會先進行指令編譯(compile)的動作。

[附註] 更詳細之指令，請參考 TOPSPIN 中之"Command Index" (由主功能表 → "Help"中選取)