Delta 软件中的去卷积功能

Delta 软件中可对重叠的峰使用 Lorentzian、Gaussian 线形或两者结合的线形方式 进行拟合。详细操作如下:

①使用 Delta 数据处理器(Processor)或书写板(Data Slate)打开谱图; ②标峰:对需要拟合的峰进行标定;

③如果有重叠峰无法标定的,可以同时按住 Shift, 解除自动识别功能, 在任意位置标峰④;



⑤点击选择工具,选中需要拟合的峰;



⑥点开右侧 K 目录工具按钮,选择拟合方式。



⑦拟合谱图如下图所示



⑧查看具体的拟合峰的相关信息可点击上方 Analyze→Peak Spreadsheet 查看。

Analyze Tools Actions	, [🙆 Spread S	heet										-		×
Curve Analysis		Edit Cell											8		5
Kinetics Analysis		X	X Fold	Class	Normal	Integral	Intensity	Slope	Offset	G/L Mix	Protons	Molarity	X Diam/J	Colo	
J-Coupling Analysis		[ppm]						[abn/ppm]				[mmol/L]	[ppm]		
			L	L	L	L	L	[L]	L	L	L	Ĺ	L		
Quantitative Analysis		7.379	0	AD	0.330	3.325	0.382	29.838m	-2.825m	0.000	1	0.330	3.545m) e
CONT		7.370	0	AD	0.189	1.898	0.354	29.838m	-3.098m	0.000	1	0.189	2.180m	- 6	i i i
CKAFT		7.363	0	AD	0.362	3.646	0.634	29.838m	-3.309m	0.000	1	0.362	2.347m		
Peak Spreadsheet	\longrightarrow	1000	, in the second s	~~~	0.002	51010	01001	251050111	51565111	0.000		0.002	210 17 11		Gra
Peak Listing Tool															3
Lineshape Tool															
DEPT/INEPT Analysis														- 11	
Signal to Noise Calculator														- 11	
Transfer Integral Tool														V	i .
HBA Tool		sample_Proto	on-1-7.jdf	<u> </u>											





⑩如果需要增加某个峰进行拟合,可点击标峰按钮,继续标峰,标完后再点开 K 工具中选择 拟合方式 (同步骤⑥),即可完成。



如果需要将拟合峰删除, 或者隐藏拟合的单个峰或加和谱, 可长按鼠标右键 Options→Peaks 进行设置。



• 优化拟合结果

可通过修改峰位置、峰强度、半峰宽及 Gauss/Lorentz 线形比例优化拟合的结果。 ①选择需要修改的值,在 Edit Cell 栏 ② 中输入新的数值,按 Enter 键实时查看拟合结果。 ③修改后,长按鼠标右键,勾选 Hold,即可锁定修改后的值;

