

NMR data processing software

Delta

NMR Software

v5.0

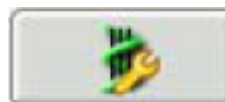


自动梯度匀场操作说明



自动梯度匀场

打开样品设置Interaction，如下图①，再点击按钮②



Spectrometer Control - Advanced Mode

Connection Tools Config Shims Samples

User: delta
Owner: delta

Sample: Doped Water (1)
Job: -
Method: -
Action: Idle
Collected: -
Time: -

Sample Control: Eject Interactive

No. Sample Name Solvent

1 Doped Water D20

Spinner
Current: 14[Hz]
Target: 15[Hz]
SPIN ON 15[Hz]

Temperature
Current: 24.9[dc]
Target: 25.0[dc]
TEMP OFF 25[dc]

Lock Control
Status: LOCK OFF
AUTOLOCK
Automatic Gradient Shimming

Gain: 17
Level: 190
Phase: 277.0[deg]
Offset: 4.72[ppm]

Receiver Gain: 50 Spin: 15[Hz]

Lock: 141 Temp: 24.9[dc] Helium: 50[%] Nitrogen: 75[%] Queue Length: 0

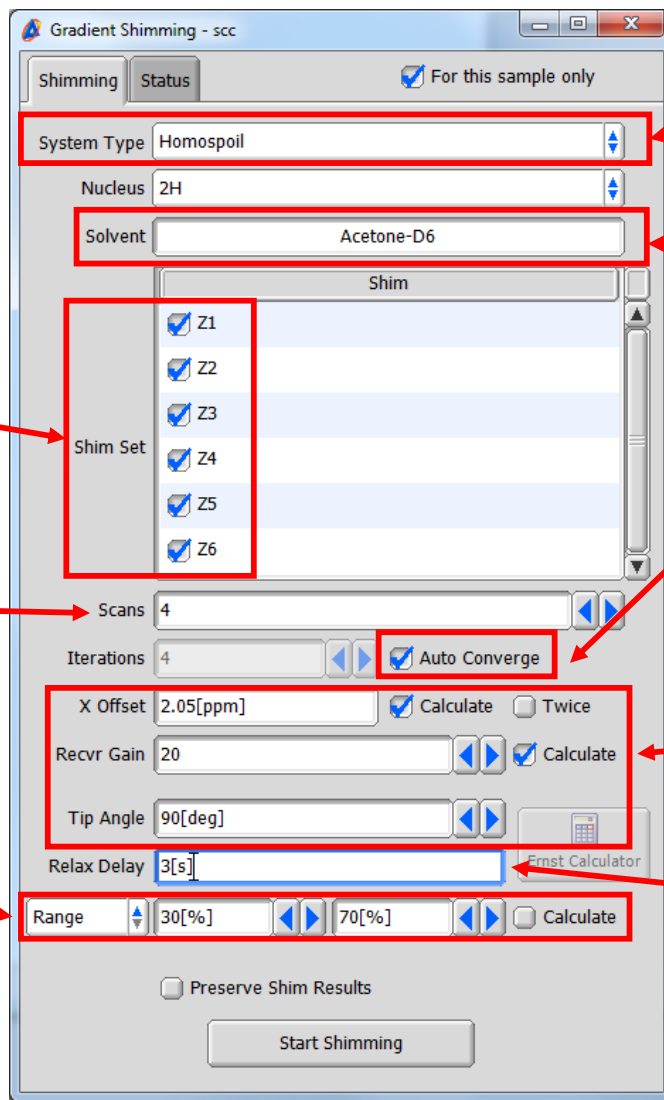
1. 参数设定

设置参数，开始匀场

默认Z1至Z4，如果想得到最高分辨率可全勾选

扫描次数一般采用2或4次即可

匀场范围一般设为30%~70%



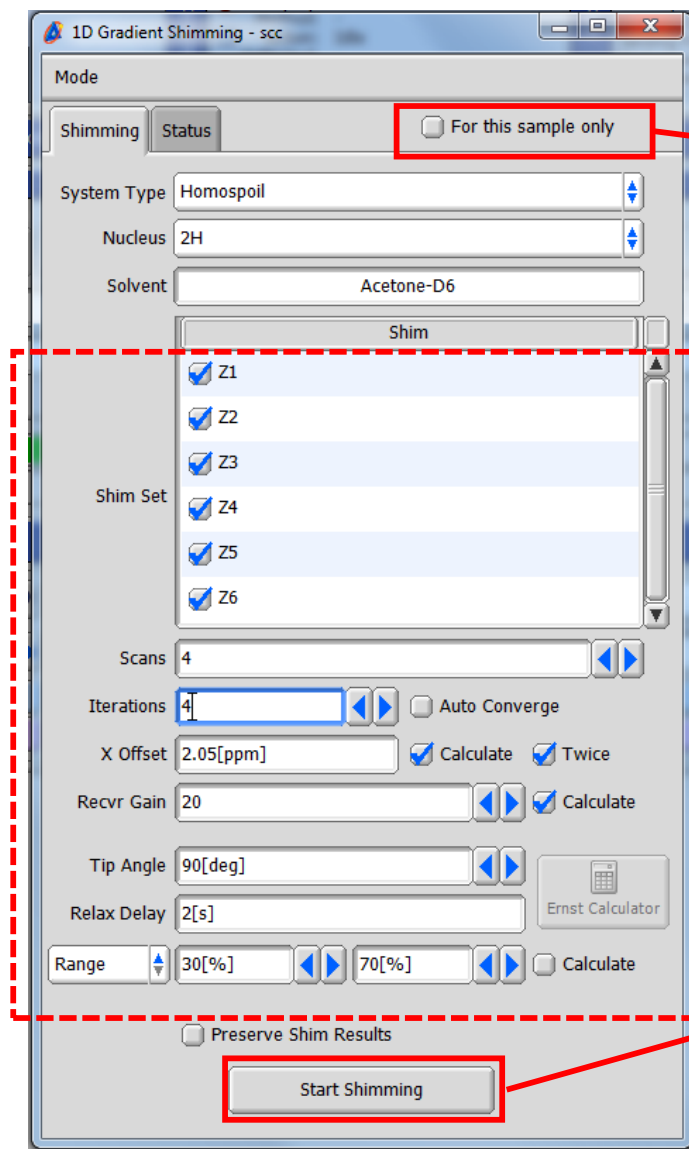
一般是自动选择 Homospoil 类型进行匀场
自动识别所选溶剂

匀场次数视匀场好坏而定，可先勾选自动计算，详述见下文

溶剂峰位置与增益值可自动计算，激发角用默认的90°

弛豫等待时间一般在2s及以上，视样品而定

将设置的参数保存为默认参数



去掉勾选，即表示所
设定参数为该溶剂匀
场默认参数

例如左侧参数为设定
好的匀场参数

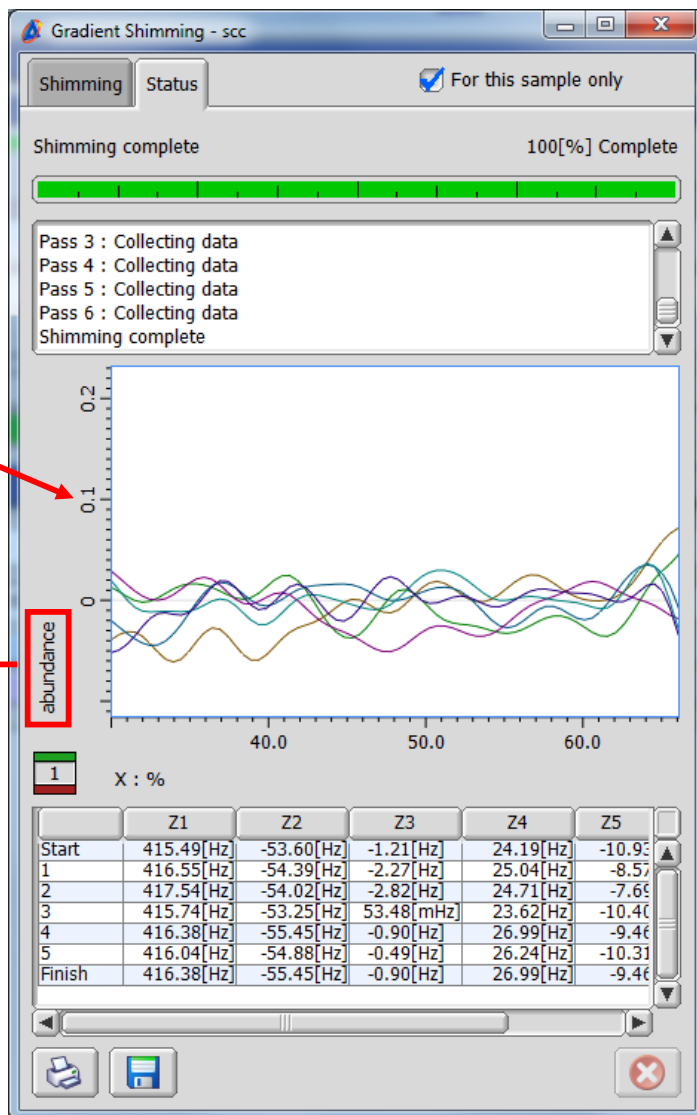
设置完成做一次匀场，下次
做相同溶剂的样品匀场时就
自动调取该默认设置，针对
每个样品匀场需勾选[For this
sample only]

2. 判断匀场好坏

匀场线越接近0，代表匀场越好，如下图所示

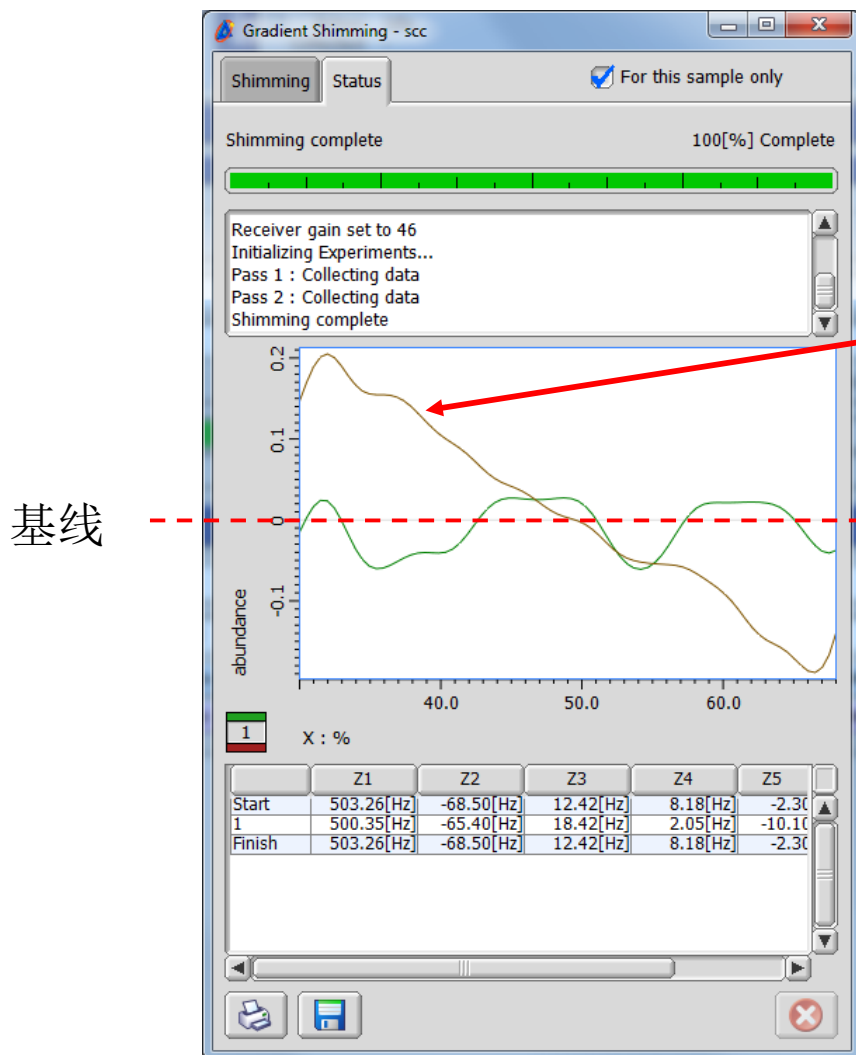
一般纵轴强度在0.1%
以内就表示匀场很好

请注意：纵轴默认单位为%，
由于窗口自动最大化，有时会
变成[thousands]即为 $\% \times 10^{-3}$



3. 匀场次数设置

匀场次数勾选为自动时，意为：下一次匀场值偏离基线的绝对值比上一次偏离的绝对值小则继续自动匀场，反之下一次的值偏离更远则匀场停止，采用上一次的匀场值。



如左图所示，可能在第二次匀场时，偏离的绝对值大于第一次的值，则匀场自动停止

此时采用初始的匀场值，但初始值并不理想，需增加匀场次数，继续匀场，可去掉Auto Converge,手动更改次数，例如改为4次或更多