### 3.4 Analýza píku (Peak Analysis)

### **Obsah:**

- 1. Úspěšné rutiny v analýze dat (Gadgets)
- 2. Prokládání křivkou (Curve Fitting)
- 3. Zpracování signálu (Signal Processing)
- 4. Analýza píků (Peak Analysis)
- 5. Manipulace s daty (Data Manipulation)
- 6. Šablony v analýze (Analysis Templates)
- 7. Zpracování výběru (Batch Processing)
- 8. Thema v analýze (Analysis Themes)

## 3.4.1 Nalezení píku

### A. Sbírání a značení píků

Analýza píku (Peak Analyzer) poskytuje několik metod k automatickému výběru píků. Uživatel může přidávat či mazat nebo upravovat píky ručně. Popisky lze přidat do středu píku poté, co jsou píky nalezeny nebo přidány, aby byla pozice píku zřetelně vyznačena.

#### Kroky:

1. Spusťte nový sešit a naimportujte File, Import, Import Wizard, klik na ..., a v knihovně \Samples\Spectroscopy\ HiddenPeak.dat, Add File(s), OK a uzavřete Finish.

2. Zvýrazněte druhý sloupec **B**(**Y**)a vytvořte graf **Plot**, **Line**, Line.

3. S aktivním grafem zvolte Analysis, Peaks and Baseline, **Peak Analyzer, Open dialog** a otevře se dialog **Peak Analyzer**.

4. Jste v prvním zeleném čtverečku Goal a zaškrtněte v řádku Goal řádek Finds Peaks. Poté klikněte na Next a přesunete se do zeleného čtverečku Baseline Mode.

5. Ve čtverečku **Baseline Mode** zadejte **None** do řádku **Baseline Mode**. Kliknutím na **Next** přejděte na zelený čtvereček Finds Peaks.

6. Na čtverečku Finds Peaks: a) Rozbalte uzel Peak Finding Settings. V řádku Method zadejte Local Maximum. Poté klikněte nahoře v uzlu Enable Auto Find na Find. Je detekováno pouze pět píků (vrcholů).

Defin	e a baseline, find and mark peak locations
Goal	🔘 Integrate Peaks
	🔘 Create Baseline
	🔘 Subtract Baseline
<	Find Peaks
	🔘 Fit Peaks



98

8.4

7.0 5.6

42 2.8 1.4

0.0

b) Změňte Method na 2nd
Derivative (search Hidden Peaks).
Znovu klikněte nahoře na Find. Tentokrát je detekováno 7 vrcholů.

c) Klikněte na **Finish** pro dokončení analýzy. Obdržíte tento konečný graf:



📕 PeakAnalyzerPreview

11.2

9.8

8.4

7.0

5.5 1.2

2.8

1.4

0.0

0.0

1.3



### 3.4.2 Integrace píku

Analýza píku (Peak Analyzer) integruje plochu pod píkem.

### Kroky:

1. Spust'te nový sešit a naimportujte **File, Import, Import Wizard**, klik na ..., a v knihovně soubor **\Samples\Spectroscopy\Peaks with Base.dat, Add File(s), OK, Finish**.

2. Zvýrazněte druhý sloupec **B**(**Y**), **Plot, Line, Line**.

3. V menu klikněte na Analysis přejděte na Peaks and Baselines a potom klikněte na Peak Analyzer, Open dialog.

4. Zatím je kurzor v prvním zeleném čtverečku **Goal.** V řádku **Goal** zaškrtněte řádek **Integrate Peaks.** Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý a pak zelený čtvereček **Baseline Mode**.

5. V zeleném čtverečku Baseline Mode dejte v Baseline Mode volbu Use Existing Dataset .
Klikněte na trojúhelníkové tlačítko vpravo v řádku Dataset a po kliknutí na Select Column vyberte v nabídce menu položku [PeakswithBase]''Peaks with Base,,3C,,Base". Kliknutím na Add a pak OK ukončete. Kliknutím na Next přejděte na žlutý čtvereček Baseline Treatment.
6. Zaškrtněte políčko Auto Subtract Baseline. Klikněte na žlutý čtvereček Integrate Peaks v horním panelu (nebo klikněte na tlačítko Next dvakrát, aby se přešlo na čtvereček Integrate Peaks). V náhledu grafu nyní vidíte dva číslované žluté obdélníky, představující dva píky nalezené ve výchozím nastavení grafu.

7. V řádku **Integration Window Width** zaškrtněte **Adjust on Preview Graph.** V náhledu grafu klikněte na obdélníček označený **1**. Na obou stranách okna žluté integrace se objeví zelený pár "klik (úchytů)". Přetažením těchto úchytů nastavte rozsah, pro který bude provedena integrace. Klikněte na obdélník označený **2** a stejně upravte integrační rozsah i pro druhý pík.

8. V okně Integrate Peaks zvolte všechny požadované veličiny k výpočtu v uzlu Quantities. Například, když chcete vypočítat těžiště píku pro každý pík, zvolte políčko Peak Centroid. Pokud třeba nechcete, aby výstup byl procentem oblasti, zrušte zaškrtnutí políčka Percent Area.

Až budete hotovi, klikněte na **Finish** a provede se analýza.

Výsledkem analýzy je pak nový list s názvem **Integration\_Result1** dle vzorového obrázku níže.



🗰 PeakswithBase - Peaks with Base.DAT											
	Index(>蝇	P0(Y) 🖨	P1(Y) 🖻	P2(Y)	P3(Y)🖻	P4()	P5(Y)	P6(Y) 🖨		•	
Comments	Integral R	Integral Re	Integral	Integral	Integral R	Integral	Integral R	Integral Res			
Long Name	Index	Area	Beginnin	Ending	FWHM	Center	Height	Centroid			
1	1	26.62295	77	119	13.16915	103	1.87906	102.12429			
2	2	-27.62137	249	293	13.28994	277	-1.9043	275.88972			
3										_	
4										*	
✓ ▶ Peaks with Base A Integration_Result1											

Pokud bylo zaškrtnuto políčko **Area** ve skupině **Quantities**, plocha píku dat se zobrazí ve sloupci **Area**.

### 3.4.3 Prokládání píku

**Peak Analyzer** je schopen prokládat i více píků křivkou včetně několika způsoby odečtení základní linie. Existují totiž různé způsoby, jak vytvořit základní linii pro naměřená spektra. Lze si vybrat několik kotevních bodů a pak umístit prokládací funkci. Proložení základní linií lze provést společně s proložením píků.

### A. Prokládání píků se základní linií

- Spusťte nový sešit a naimportujte File, Import, Import Wizard, klik na ..., a v knihovně soubor \Samples\Spectroscopy\Peaks on Exponential Baseline.dat, Add File(s), OK, Finish.
- 2. Zvýrazněte druhý sloupec v listu, Plot, Line, Line.
- 3. Vyberte Analysis, Peaks and Baselines, Peak Analyzer, Open dialog hlavního menu a otevřou se dvě poloviny dialogového okna Peak Analyzer.
- V zeleném čtverečku Goal na první stránce zaškrtněte Fit Peaks(Pro). Kliknutím na Next přejděte na Baseline Mode.
- 5. V žlutém čtverečku Baseline Mode zvolte v řádku Baseline Mode volbu User Defined. V uzlu Baseline Anchor Points kliknutím na Find by mělo být nalezeno osm kotevních bodů.



Kliknutím na tlačítko **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Create Baseline**.

6. V Create Baseline vyberte v řádku **Connect by** volbu **Fitting(Pro)**. V uzlu Fitting vyberte v řádku Function v roletce **ExpDec2**. Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček Baseline Treatment.

7. V zeleném čtverečku Baseline Treatment zaškrtněte okénko Fit Baseline With Peaks. Potom kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček Finds Peaks.

8. V zeleném čtverečku **Find Peaks** klikněte v řádku **Enable Auto Find** na okénko **Find** k vyhledávání píků. 2 píky by měly být nalezeny. Kliknutím na Next přejděte na žlutý čtvereček Fit Peaks.

9. V zeleném čtverečku **Fit Peaks** klikněte dole na posledním řádku na **Fit Control** a otevře se dialog **Peak Fit Parameters.** V dialogu **Peak Fit Parameters** se ujistěte, že oba typy píků jsou Gaussian. Klikněte na poslední ikonku před OK o názvu Fit Until Converge. Tím je proložení provedeno a klikněte na **OK** a zavřete dialogové okno.

11. Tím jste zpět na zeleném čtverečku **Fit Peaks** a klikněte na **Finish** k dokončení analýzy. Podívejte se na výsledky ve zdrojovém sešitu a v grafu.





### **B.** Proložení píků s přednastavenými parametry

V některých případech lze provést proložení píků s přednastavenými parametry píku. Například, můžete mít mnoho datových souborů s pevnými počty píků a středy těchto píků se přitom nemění od souboru k souboru. Zajímáte se hlavně o další parametry píků, například o jejich výšky. Použitím šablony funkce **Peak Analyzer** lze provést proložení píku s pevnými parametry píku.

#### Uložení šablony s pozicí píku a parametry píku

1. Spusťte nový sešit a naimportujte File, Import, Import Wizard, klik na ..., a v knihovně soubor Samples\Spectroscopy\ HiddenPeaks.dat, Add File(s), OK, Finish.

2. Zvýrazněte druhý sloupec B(Y), Plot, Line, Line a vyberte Analysis, Peaks and Baseline, Peak Analyzer, Open dialog.

3. Na prvním zeleném čtverečku **Goal** zaškrtněte v řádku **Goal** okénko **Fit Peaks(Pro)**. Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Baseline Mode**.

4. V zeleném čtverečku Baseline Mode vyberte v řádku Baseline Mode volbu None, dále na Next přejděte na žlutý čtvereček Find Peaks.
5. Na stránce Find Peaks:

a) Zrušte zaškrtnutí políčka **Enable Auto Find**, protože je třeba najít píky ručně. Klikněte na **Find** a na návěští **Peaks Info**.

b) V dialogu Peak Info klikněte na Add sedmkrát, abyste přidali 7 píků. Zadejte středy píků center a jejich výšky dle obrázku vpravo.
Klepnutím na tlačítko OK se vrátíte do Peak Analyzer.

c) Kliknutím na Next přejděte na žlutý čtvereček Fit Peaks.



6. V zeleném čtverečku **Fit Peaks:** 

a) Klikněte dole na **Fit Control** a otevře se dialog **Peak Fit Parameters.** 

b) V okně Peak Fit Parameters klikněte na 5. ikonku zleva Fix or Release All Peak Centers. Poté klikněte na poslední ikonku zleva Fit Until Converge. Tím je proložení křivkou provedeno, klikněte na OK se vraťte do dialogového okna Peak Analyzer.

c) Klikněte nahoře na prvním řádku na tlačítko pravostranného trojúhelníka napravo od **Dialog Theme** na horním panelu. Klikněte na **Save As**. Otevře se dialog **Theme Save As**.

d) V dialogu Theme Save As zadejte
MyFitting do okénka Theme Name.
Vyčistěte a zaškrtněte políčka dle obrázku
vpravo. Kliknutím na OK uložte Theme. To
by mělo přivést zpět do dialogu Peak
Analyzer.



e) Klikněte na Finish v Peak Analyzer k dokončení analýzy.

### C. Opakované použití motivu

1. Spusťte nový sešit a naimportujte File, Import, Import Wizard, klik na ..., a v knihovně soubor Samples\Spectroscopy\HiddenPeaks.dat, Add File(s), OK, Finish.

2. Zvýrazněte druhý sloupec **B**(**Y**), **Plot, Line, Line** a vyberte **Analysis, Peaks and Baseline, Peak Analyzer, Open dialog.** 

3. V zeleném čtverečku **Goal** okna **Peak Analyzer** klikněte na tlačítko pravostranného trojúhelníka na pravé straně dialogu. V nabídce zkráceně zvolte **MyFitting**.

4. Klikněte na **Next** a zkontrolujte, zda je nastavení v každém kroku správné. Všimněte si, že ve žlutém čtverečku **Find Peaks**, můžete vidět středy píků a jejich výšky, které jsou stejné jako minule.

5. Když se dostanete na poslední žlutý čtvereček, klikněte na **Fit Control** a otevře se dialog **Peak Fit Parameters**. Ujistěte se, že všechny středy píků jsou pevné a hodnoty jsou stejné jako minule. Klepnutím na **OK** se vrátíte do **Peak Analyzer**.

6. Klikněte na **Finish** pro dokončení analýzy. Podívejte se na výsledky, zda jsou stejné jako minulé výsledky.

# D. Nastavení pevného, sdíleného stavu nebo mezí pro více parametrů píku současně

V analýze píků je třeba často stanovit odhady parametrů nebo parametry sdílet mezi více píky anebo určit jejich meze. Pokud data vykazují několik píků, lze jednoduše provést tato nastavení pro každý vrchol. Pokud je ale dat mnoho, bylo by časově náročné nastavit vše jednotlivě. Aby byl tento proces účinnější, **Peak Analyzer** nabízí postup, jak nastavit opravu, stav sdílení nebo meze pro více parametrů píku současně. Více informací o těchto nastaveních lze nalézt v nápovědě.

#### Kroky:

1. Spusťte nový sešit a naimportujte File, Import, Import

Wizard, klik na ..., a v knihovně soubor Samples\ Spectroscopy\Positive & Negative Peaks.dat, Add File(s), OK, Finish. 2. Zvýrazněte druhý sloupec B(Y), Plot, Line, Line a vyberte Analysis, Peaks and Baseline, Peak Analyzer, Open Dialog otevře dialog Peak Analyzer. V prvním zeleném čtverečku Goal zaškrtněte v řádku Goal položku Fit Peaks(Pro). Stisknutím Next přejděte na další žlutý čtvereček Baseline Mode.

3. V zeleném čtverečku **Baseline Mode** v řádku **Baseline Mode** vyberte **Constant** a v uzlu **Constant** zvolte **Mean**. Poté klikněte na žlutý čtvereček **Fit Peaks** na horní mapě průvodce a přejděte na čtvereček **Fit Peaks**.

🔲 Peak Analyze	r 📃 🗆 🔀
Dialog Theme 🛛 🛛	►
Goal Baseline Baseline Ti Find Peaks Fit Peaks Finish	Mode reatment
	Prev Next Finish Cancel
pa_basemode	
Baseline Mode	Constant
🗆 🗆 Constant 🦳	
Y=	2.41368
	O Minimum
	Maximum
	Median

4. V zeleném čtverečku **Fit Peaks**:

a) Klikněte dole na posledním řádku na
Fit Control otevře se dialog Peak Fit
Parameters. V levém dolním rohu
dialogového okna nastavte funkci proložení
na Voigt.

b) Aktivujte záložku Parameters a poté vyberte 1 ve sloupci Share a řádku wG\_1.
Poté na něj klikněte pravou myší a vyberte příkaz Apply Same "Share" to All wG. Pak zjistíte, že všechny parametry s předponou wG jsou sdíleny ve stejné skupině.

c) Poté vyberte 2 ve sloupci Share a řádku wL\_1. Poté na něj klikněte pravou myší a vyberte příkaz Apply Same "Share" to All wL. Pak zjistíte, že všechny parametry s předponou wL jsou sdíleny ve stejné skupině. Poté, záložka Parameters by měla vypadat dle obrázku vpravo:

		ters					_	
A	Deserved as to Mal	Ľ						
Auto I	Parameter Initia	lization						
Parame	eters Bounds							Hide
NO.	Peak Type	Param	Meaning	Share	Fixed	Value	Error	Depe
0	Constant	уO	unknown	0	<b>~</b>	2.41368		
1	Voigt	xc1	center	0		30		
1	Voigt	A_1	area	0		690.72758		
1	Voigt	wG_1	Gaussian width	1	Applu S	ama "Shara" ta A	lure N	1
1	Voigt	wL1	Lorentzian width	0	Apply 5	anne Share to A "Lawa"		
2	Voigt	хс2	center	0	Clear 5	nare	-	_
2	Voigt	A_2	area	0		-309.8783		
2	Voigt	wG2	Gaussian width	0		5.29802		
2	Voigt	wL2	Lorentzian width	0		5.29802		
3	Voigt	хс_3	center	0		110		
3	Voigt	A_3	area	0		-1276.09849		
3	Voigt	wG_3	Gaussian width	0		5.29802		
3	Voigt	wL_3	Lorentzian width	0		5.29802		
4	Voigt	xc 4	center	0		170		
4	Voiat	A 4	area	0		481.05301		
4	Voiat	wG 4	Gaussian width	0		5.29802		
4	Voiat	wL 4	Lorentzian width	0		5.29802		
1				100				
/oigt	~	<u> </u>	☆ ^ / / / /	പിലി	$\chi^2$		OK	
_								
l Peak	c Fit Parame	eters						
l Peak	k Fit Parame	eters						
Auto I	<mark>k Fit Parame</mark> Parameter Initia	e <b>ters</b> Ilization						
Auto I Parame	<mark>k Fit Parame</mark> Parameter Initia eters Rounds	e <b>ters</b> Ilization						Hide.
Auto I Parame	<mark>k Fit Parame</mark> Parameter Initia eters <u>Bounds</u> Peak Tune	eters lization	Meaning	Share	Fived	Value	Error	Hide.
Auto I Parame NO.	k Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type	eters	Meaning	Share	Fixed	Value 2.41368	Error	Hide.
Auto I Parame NO. 0	k Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voiat	eters lization Param y0	Meaning unknown center	Share 0	Fixed	Value 2.41368 30	Error 	Hide.
Auto I Parame NO. 0 1	k Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt	lization Param y0 xc_1	Meaning unknown center	Share 0 0	Fixed	Value 2.41368 30 590.72759	Error 	Hide.
Auto I Parame NO. 0 1 1	k Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Voigt	Param y0 xc_1 A_1	Meaning unknown center area	Share 0 0 1	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29002	Error  	Hide.
Auto I Parame NO. 0 1 1 1	k Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Voigt Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wd_1	Meaning unknown center area Gaussian width	Share 0 0 1	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29002	Error   	Hide.
Auto I Parame NO. 0 1 1 1	k Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Voigt Voigt Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wG_1	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width	Share 0 0 1 1 2	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70	Error   	Hide.
Auto I Parame NO. 0 1 1 1 2 2	k Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wL_1 xc_2	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center	Share 0 0 1 2 0	Fixed	Value 2.41368 30 690,72758 5.29802 5.29802 70 200,2322	Error     	Hide.
Auto I Parame NO. 0 1 1 1 2 2 2	k Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt	Param           y0           xc_1           A_1           wG_1           wC_1           xc_2           A_2           wC_2	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width	Share 0 0 1 2 0 0	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70 -309.8783 5.29222	Error      	Hide.
Auto I Parame NO. 0 1 1 1 2 2 2 2	K Fit Parame Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wL_1 xc_2 A_2 wG_2 wG_2	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width	Share 0 0 1 2 0 0 0 1	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70 -309.8783 5.29802 5.29802	Error       	Hide.
Auto I Parame NO. 0 1 1 1 2 2 2 2 2	Fit Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Vo	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wC_1 xc_2 A_2 wG_2 wG_2 wL_2	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 2 2	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70 -309.8783 5.29802 5.29802	Error           	Hide.
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2 3	Fit Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Vo	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wL_1 xc_2 A_2 wG_2 wG_2 wL_2 xc_3	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 2 0	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70 -309.8783 5.29802 5.29802 110	Error             	Hide
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 2 2 2 2 2 3 3 3	k Fit Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wL_1 xc_2 A_2 wG_2 wG_2 wL_2 xc_3 A_3	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center area	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0		Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70 -309.8783 5.29802 5.29802 5.29802 110 -1276.09849	Error             	Hide
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 1 2 2 2 2 2 3 3 3 3 3	k Fit Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wC_1 xc_2 A_2 wG_2 wG_2 wC_2 xc_3 A_3 wG_3	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 1	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70 -309.8783 5.29802 5.29802 110 -1276.09849 5.29802	Error             	Hide
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 1 2 2 2 2 2 3 3 3 3 3 3 3	k Fit Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wG_1 wC_1 xc_2 A_2 wG_2 wG_2 wG_2 wC_2 xc_3 A_3 wG_3 wC_3	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 1 2	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70 -309.8783 5.29802 5.29802 110 -1276.09849 5.29802 5.29802 5.29802	Error             	Hide
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 1 1 2 2 2 2 2 3 3 3 3 3 3 4	k Fit Parameter Initia Parameter Initia ters Bounds Peak Type Constant Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wG_1 wC_1 xc_2 A_2 wG_2 wG_2 wG_2 wG_2 wG_3 wG_3 wL_3 xc_4	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width Lorentzian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width Lorentzian width	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0	Fixed	Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 5.29802 70 -309.8783 5.29802 5.29802 110 -1276.09849 5.29802 5.29802 170	Error             	Hide
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 3 3 3 3 3 3 4 4 4	k Fit Parameter Initia Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wG_1 wL_1 xc_2 A_2 wG_2 wG_2 wG_2 xc_3 A_3 wG_3 wL_3 xc_4 A_4	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center area	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 0		Value 2.41368 30 690.72758 5.29802 70 -309.8783 5.29802 5.29802 110 -1276.09849 5.29802 5.29802 170 481.05301	Error             	Hide.
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 3 3 3 3 3 3 4 4 4 4	k Fit Parameter Initia Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wG_1 wG_1 wG_1 wG_2 wG_2 wG_2 wG_2 wG_2 xc_3 A_3 wG_3 wG_3 wG_3 wG_3 wG_3 wG_4 A_4 wG_4	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 1		Value 2.41368 30 690,72758 5.29802 70 -309,8783 5.29802 5.29802 110 -1276,09849 5.29802 5.29802 170 481,05301 5.29802	Error             	Hide.
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 3 3 3 3 3 3 4 4 4 4 4	k Fit Parameter Initia Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt	Param           y0           xc_1           A_1           wG_1           xc_2           wG_2           wL_2           xc_3           A_3           wG_3           wL_3           xc_4           A_4           wG_4	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width center area Gaussian width center area Gaussian width	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0		Value 2.41368 30 690,72758 5.29802 5.29802 70 -309,8783 5.29802 5.29802 110 -1276,09849 5.29802 5.29802 5.29802 170 481,05301 5.29802 5.29802	Error             	Hide.
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 1 2 2 2 2 3 3 3 4 4 4 4 4 4 4	k Fit Parameter Initia Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Vo	Param y0 xc_1 A_1 wG_1 wG_1 wG_1 wG_1 wG_2 A_2 wG_2 wG_2 wG_2 wG_2 wG_2 xc_3 A_3 wG_3 wG_3 wG_3 wG_3 wG_3 wG_4 A_4 wG_4 wG_4 wL_4	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width center area Gaussian width	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2		Value 2.41368 30 690,72758 5.29802 5.29802 70 -309,8783 5.29802 5.29802 5.29802 5.29802 5.29802 5.29802 5.29802 170 481.05301 5.29802	Error             	Hide
Peak Auto I Parame NO. 0 1 1 1 1 2 2 2 2 3 3 3 4 4 4 4 4 4 4	k Fit Parameter Initia Parameter Initia eters Bounds Peak Type Constant Voigt Vo	Param         y0         xc_1         A_1         wG_1         xc_2         wG_2         wL_2         xc_3         A_3         wG_3         wL_3         xc_4         A_4         wG_4	Meaning unknown center area Gaussian width Lorentzian width center area Gaussian width center area Gaussian width center area Gaussian width center area Gaussian width center area	Share 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 1 2 0 0 0 1 1 2 0 0 0 0		Value 2.41368 30 690,72758 5.29802 5.29802 70 -309,8783 5.29802 5.29802 5.29802 5.29802 5.29802 5.29802 5.29802 170 481.05301 5.29802	Error             	Hide

d) Aktivujte záložku **Bounds**. Dvojklikem na buňku v prvním řádku s Gaussian Width a druhá < or <= sloupec. A zjistíte, že <= je uveden v této buňce (< se zobrazí, když dvoj-kliknete na buňku pro jednu více krát). Poté zadejte **Type 5** do sloupce horní hranice **Upper Bounds** ve stejném řádku.

e) Poté na něj klikněte pravou myší a vyberte příkaz Apply Same "Bounds" to All wG. Poté by měla záložka Bounds vypadat dle obrázku vpravo dole:

5. Klikněte na Fit Untill Converged. Jeli proložení křivkou provedeno, klikněte na **OK** a zavřete dialogové okno.

6. Zpět na stránku **Fit Peaks** a klikněte na **Finish** pro dokončení analýzy. Podívejte se na výsledky ve zdrojovém sešitu a zprávu grafu.

NO. 0	Meaning	Malua						5
0		Value	Lower Bounds	< or <=	Param	< or <=	Upper	E
	unknown	2.41368			уO			-
1	center	30			xc_1			
1	area	690.72758			A_1			
1 G.	aussian width 📋	5.29802	0	Apply Speed	"Pounda"	Eo Allui⊂		E
1 Lo	rentzian width	5.29802	0	Apply Same		co All WG	1	
2	center	70			as for All W		°	
2	area	-309.8783		Reset Bour	nds to Defa	ult		
2 G	aussian width	5.29802	0	CODY "LOW	er Bounds"	of all wG		5
2 Lo	rentzian width	5.29802	0	Pacte "Low	er Bounds"	to all wG		
3	center	110		Copy Whol	o Column			
3	area	-1276.09849		Copy who				
3 G.	aussian width	5.29802	0	Paste who	ie Column			5
3 Lo	rentzian width	5.29802	0	<	wL3			
4	center	170			хс4			
4	area	481.05301			A4			
4 G-	aussian width	5.29802	0	<	wG4	<=		5
4 Lo	rentzian width	5.29802	0	<	wL4			
							>	
				- 1 - 1 -	1			Ξ.
igt	🖌 🖄 🗸	a 🖚 🖄		ຄ] χ_   7	ь Ан	OK		<b>*</b>
								_
						(=		
<sup>2</sup> aramet	ers							×
	1     Gł       1     Lo       2     Gł       2     Gł       3     Gł       3     Gł       3     Lo       4     Gł       4     Lo       j     Gł	I       Gaussian width         1       Lorentzian width         2       center         2       area         2       Gaussian width         2       Lorentzian width         3       center         3       area         3       Gaussian width         4       center         4       area         4       Gaussian width         4       Lorentzian width         4       Lorentzian width         4       Lorentzian width	I       Gaussian width       5.29802         1       Lorentzian width       5.29802         2       center       70         2       area       -309.8783         2       Gaussian width       5.29802         2       Gaussian width       5.29802         2       Lorentzian width       5.29802         3       center       110         3       area       -1276.09849         3       Gaussian width       5.29802         3       Lorentzian width       5.29802         4       center       170         4       area       481.05301         4       Gaussian width       5.29802         4       Lorentzian width       5.29802         4       Lorentzian width       5.29802         4       Lorentzian width       5.29802         4       Lorentzian width       5.29802	I       Gaussian width       5.29802       0         1       Lorentzian width       5.29802       0         2       center       70          2       area       -309.8783          2       Gaussian width       5.29802       0         2       Gaussian width       5.29802       0         3       center       110          3       area       -1276.09849          3       Gaussian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0         4       center       170          4       area       481.05301          4       Gaussian width       5.29802       0         4       Lorentzian width       5.29802       0         4       Lorentzian width       5.29802       0         igt <td< th=""><th>1       Gaussian width       5.29802       0         1       Lorentzian width       5.29802       0         2       center       70          2       area       -309.8783          2       Gaussian width       5.29802       0         2       Gaussian width       5.29802       0         2       Lorentzian width       5.29802       0         3       center       110          3       area       -1276.09849          3       Gaussian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0       &lt;         4       center       170           4       area       481.05301           4       Gaussian width       5.29802       0       &lt;         4       Lorentzian width       5.29802       0       &lt;         igt                      igt                     igt</th><th>1       Gaussian width       5.29802       0         1       Lorentzian width       5.29802       0         2       center       70          2       area       -309.8783          2       Gaussian width       5.29802       0         2       Gaussian width       5.29802       0         2       Lorentzian width       5.29802       0         3       center       110          3       area       -1276.09849          3       Gaussian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0       &lt; wL_3         4       center       170        xc_4         4       area       481.05301        A_4         4       Gaussian width       5.29802       0       &lt; wG_4         4       Lorentzian width       5.29802       0       &lt; wG_4         4       Lorentzian width       5.29802       0       &lt; wG_4         4       Lorentzian width       5.29802       0       &lt; wL_4</th><th>1       Gaussian width       5,29802       0         1       Lorentzian width       5,29802       0         2       center       70          2       area       -309,8783          2       area       -309,8783          2       Gaussian width       5,29802       0         3       center       110          3       area       -1276,09849          3       Gaussian width       5,29802       0         3       center       110          3       area       -1276,09849          3       Lorentzian width       5,29802       0       &lt;       wL3         4       center       170        xc4          4       area       481,05301        A4          4       Lorentzian width       5,29802       0       &lt;       wL4          igt       Image: Ima</th><th>1       Gaussian width       5.29802       0         1       Lorentzian width       5.29802       0         2       center       70          2       area       -309,8783          2       area       -309,8783          2       area       -309,8783          2       Gaussian width       5.29802       0         3       center       110          3       area       -1276,09849          3       Gaussian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0         4       center       170          4       area       481,05301          4       Gaussian width       5.29802       0       &lt;       wL_4         igt</th></td<>	1       Gaussian width       5.29802       0         1       Lorentzian width       5.29802       0         2       center       70          2       area       -309.8783          2       Gaussian width       5.29802       0         2       Gaussian width       5.29802       0         2       Lorentzian width       5.29802       0         3       center       110          3       area       -1276.09849          3       Gaussian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0       <         4       center       170           4       area       481.05301           4       Gaussian width       5.29802       0       <         4       Lorentzian width       5.29802       0       <         igt                      igt                     igt	1       Gaussian width       5.29802       0         1       Lorentzian width       5.29802       0         2       center       70          2       area       -309.8783          2       Gaussian width       5.29802       0         2       Gaussian width       5.29802       0         2       Lorentzian width       5.29802       0         3       center       110          3       area       -1276.09849          3       Gaussian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0       < wL_3         4       center       170        xc_4         4       area       481.05301        A_4         4       Gaussian width       5.29802       0       < wG_4         4       Lorentzian width       5.29802       0       < wG_4         4       Lorentzian width       5.29802       0       < wG_4         4       Lorentzian width       5.29802       0       < wL_4	1       Gaussian width       5,29802       0         1       Lorentzian width       5,29802       0         2       center       70          2       area       -309,8783          2       area       -309,8783          2       Gaussian width       5,29802       0         3       center       110          3       area       -1276,09849          3       Gaussian width       5,29802       0         3       center       110          3       area       -1276,09849          3       Lorentzian width       5,29802       0       <       wL3         4       center       170        xc4          4       area       481,05301        A4          4       Lorentzian width       5,29802       0       <       wL4          igt       Image: Ima	1       Gaussian width       5.29802       0         1       Lorentzian width       5.29802       0         2       center       70          2       area       -309,8783          2       area       -309,8783          2       area       -309,8783          2       Gaussian width       5.29802       0         3       center       110          3       area       -1276,09849          3       Gaussian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0         3       Lorentzian width       5.29802       0         4       center       170          4       area       481,05301          4       Gaussian width       5.29802       0       <       wL_4         igt

🔲 Peak Fit Parameters

Param	eters Bounds						Hide		
NO.	Meaning	Value	Lower Bounds	< or <=	Param	< or <=	Upper Bounds		
0	unknown	2.41368			уO				
1	center	30			xc_1				
1	area	690.72758			A_1				
1	Gaussian width	5.29802	0	< <	wG_1	<=	5		
1	Lorentzian width	5.29802	0	<	wL_1				
2	center	70			хс2				
2	area	-309.8783			A_2				
2	Gaussian width	5.29802	0	<	wG2	<=	5		
2	Lorentzian width	5.29802	0	<	wL2				
3	center	110			хс3				
3	area	-1276.0984			A_3				
3	Gaussian width	5.29802	0	<	wG3	<=	5		
3	Lorentzian width	5.29802	0	<	wL3				
4	center	170			xc4				
4	area	481.05301			A4				
4	Gaussian width	5.29802	0	<	wG4	<=	5		
4	Lorentzian width	5.29802	0	<	wL4				
Voigt	<b>N</b>		<u>^                                    </u>	ற x	2 7. 7	H [	ок 💙		