

Kurzanleitung zum Programm SpinWorks

Teil 1: 1D-NMR

Regensburg, August 2015

F. Kastner
Universität Regensburg
Fakultät für Chemie und Pharmazie
Zentrale Analytik NMR

Achtung: Die angepasste Installation für CIP-Pool und die Installation mit RZ-Anpassungen steht ab ca. September zur Verfügung ! Wenn Sie eine solche nutzen wollen müssen Sie im Moment noch auf die ebenfalls angebotene Version 3.1.8. ausweichen.

Vorbemerkung:

Autor des Programms ist Kirk Marat c/o Universität Manitoba, Kanada. Das Original-Programm ist unter "<http://home.cc.umanitoba.ca/~wolowiec/spinworks/index.html>" zu finden.

Eine Kurzanleitung für den 1D- und 2D-Teil des Programms befindet sich in F:\S\Spinworks\Doc\Docu_UR_Spinworks"Version" (Link unter: Start → Alle Programme → SpinWorks → Kurzanleitung Regensburg).

Die vollständige Original-Anleitung im PDF-Format ist innerhalb des Programms im Pulldown-Menü „Help“ abrufbar.

Installation von SpinWorks:

Die Software liegt lokal auf F:\S\Spinworks oder ist über den RZ-Softwarekatalog erhältlich:

Windows Vista und Win 7 und Win 8: File „\Setup\SpinWorks_RZ_Installer.exe“ herunterladen und lokal ausführen (nur lokale Installation mit RZ-Anpassung).

Sie können dann aus zwei Installationsarten auswählen:

Original Paket:

Lokale, vom Autor des Programms vorgesehene Installation: Laden Sie sich das ZIP-File herunter, entpacken dieses und führen Sie das File „Setup.exe“ aus.

RZ – Installation (Lokale Installation mit Anpassungen):

Bei der Installation wird ein eventuell vorhandenes Mapping von I:\ abgeprüft. Diese Laufwerksverknüpfung stellt bei Standardbedingungen innerhalb der Chemie das Messdatenverzeichnis der Zentralen Analytik zur Verfügung. Wenn eine bereits vorhandene Verknüpfung für I:\ festgestellt wird, wird nachgefragt ob das aktuelle Mapping beibehalten oder aktualisiert werden soll. Falls ein anderer Pfad als der vorgeschlagene beibehalten wird,

muss man „von Hand“ ins entsprechende Spektrenverzeichnis (siehe Unten) gehen.

Default Einstellungen überprüfen:

Starten Sie das Programm SpinWorks und überprüfen Sie dort im Pulldown-Menü „Options“ unter dem Punkt „Set Start-Up Options“ den Eintrag „Writeable Scratch Path“: Dieser sollte einem existierenden Ordner auf Ihrem Rechner bzw. Account entsprechen, in den temporäre Daten geschrieben werden können (z. B. c:\temp oder G:\Spinworks). Im Eintrag „Default Data Path:“ können Sie Ihren bevorzugten Spektrenordner angeben. Werden die Kontrollkästchen „Auto Save“ bzw. „Auto Load“ gesetzt, so werden die Spektren im Spinworksformat automatisch abgespeichert bzw. geladen. Um das ausführliche Original-Manual unter „Help“ nutzen zu können muss auch der Eintrag „External Modul Path“ überprüft werden. Dies ist vor Allem bei einer Originalinstallation nötig wenn bei der Installation der vorgeschlagene Pfadname geändert wurde oder wenn der Programmeordner nicht „Program Files“ heißt.

Verzeichnis für die NMR-Daten erstellen:

Bitte erstellen Sie auf Ihrem eigenen Rechner oder Account ein NMR-Verzeichnis. In dieses kopieren Sie dann Ihre Messdaten wie unten beschrieben. (Grund: Auf Laufwerk i:\ haben Sie nur Leserechte; SpinWorks speichert aber eigene Daten zurück)

Anmerkung:

Bitte kopieren Sie das entsprechende Verzeichnis immer komplett in Ihr Arbeitsverzeichnis.

Wo finde ich meine NMR-Daten:

Die Rohdaten befinden sich auf dem File Server Titan-Share4. Das dort befindliche Verzeichnis „\\Titan99\sharez\CHEMIE\ZA\messdat“ ist im Wirkungsbereich des Rechenzentrums für die Chemie bereits als Laufwerk i:\ gemappt. Auf dem Laufwerk i:\ müssen Sie nur noch ins Verzeichnis „nmrspec“ wechseln. Dieses ist wiederum in 5 Verzeichnisse (AVA300, AVA400, AVA400Stud, AVA600, AVA600Kryo) unterteilt. Die Namen bezeichnen die unterschiedlichen NMR-Spektrometer (auf den Spektren ersichtlich rechts oben, Zeile 4), an dem das Spektrum gemessen wurde. Innerhalb dieser wechseln Sie bitte in das Unterverzeichnis „data“. Hierin sind für die Studenten die Ordner der Praktikas freigegeben. In diesen finden Sie ein Verzeichnis namens „nmr“, das nun endlich die NMR-Daten enthält.

Welche Files werden benötigt:

AVA300: Hier sind die Rohdaten und Spektren in Verzeichnissen gespeichert, die dem Datum des Tages entsprechen, an dem die Probe vermessen wurde. In einem solchen Ordner werden also alle anfallenden Proben eines Tages gespeichert. Die Bezeichnungen der einzelnen Spektren stehen im Übersichtsspektrum rechts unter "Current Data Parameters",

wobei die sogenannte „EXPNO“ dem entsprechenden Unterverzeichnis entspricht, das Ihre Daten enthält.

Anmerkung:

Bitte kopieren Sie das entsprechende „Expno-Verzeichnis“ komplett auf Ihren eigenen Rechner.


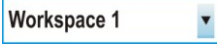

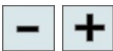




AVA400 und AVA600: Hier sind die Rohdaten eines Auftrages jeweils in einem eigenen Verzeichnis zu finden. Die Bezeichnungen der einzelnen Spektren stehen im Übersichtsspektrum rechts unter "Current Data Parameters".

AVA600Kryo: Wie im letzten Absatz beschrieben aber mit folgenden Besonderheiten: Das C13-Experiment ist mit einer „Linear Backprediction“ modifiziert. Die Originaldaten liegen dann auf einer höheren Exp.-Nr. + 1000 (z.B. 1002 statt 2). Das Protonen Experiment liegt ebenfalls nochmals konvertiert für 1D-WINNMR unter einer Tausendernummer (z.B. 1001). Eine entsprechende Bemerkung steht jeweils im Spektrumtitel.

AVA400Stud: Siehe unter AVA300 und AVA600Kryo.


Icons der Symbolleiste:




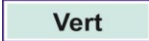













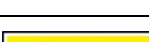

(Unterhalb den „Pull-down-Menüs“)

	Öffnet einen FID
	Schaltet zwischen verschiedenen Arbeitsräumen um, in denen andere Spektren liegen können.
	Schnellauswahl der verschiedenen Workspaces.
	Schaltet bei Bruker Datensätzen die Experimentnummer höher oder niedriger.
	Speichert das Spektrum im aktuellen Ordner im JCAMP-DX Format (wichtig für externe Projektionen im 2D-Teil)
	Speichert das aktuelle Spektrum als Windows-Metafile ab.
	Druckt das aktuelle Spektrum
	Zeigt die aktuellen Einstellungen für Phase und Windowfunctions. Diese werden dann mit dem Icon „Phase“ angewendet.

Icons des Button Panels:

(Am Bildschirm rechts)

	Spektrumamplitude größer bzw. kleiner, selber Effekt mit Mausrad.
---	---


H. Exp:  	Spreizen, Stauchen in horizontaler Richtung
 bzw. 	Ganzes Spektrum (vertikal) anzeigen
	Ganzes Spektrum (horizontal) anzeigen
	Vergrößert einen ausgewählten Bereich des Spektrums: Im Spektrum vorher mit der linken Maustaste einen Bereich auswählen.
 bzw. 	Zurück zum ganzen Spektrum bzw. der letzten Spreizung.
	Parameter editieren
	Führt die Fouriertransformation mit Windowfunctions und Phase aus.
	Korrigiert die Phase mit voreingestellten Werten, falls dies noch nicht via „Process-Icon“ eingestellt wurde.
	Korrigiert die Phase automatisch, falls diese noch nicht via „Process-Icon“ eingestellt wurde.
	Magnitudenspektrum
	Einstellen des untersten Wertes für Peak-Picking
	Phasenkorrektur manuell
	Integration
	Kalibrierung
	Punkte für die Basislinienkorrektur definieren
	Aufruf des Simulation Dialogs

Tipp: Um die mit der linken Maustaste erzeugten Markierungen (Fadenkreuze) zu entfernen, muss ein drittes Mal im Spektrumfenster geklickt werden.

Öffnen des FID's bzw. Spektrums:

Um mit dem Programm SpinWorks NMR-Daten zu bearbeiten muss immer vom File „fid“ ausgegangen werden!



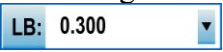


Wenn das vorliegende Spektrum noch nicht mit SpinWorks bearbeitet wurde:

Icon  oder Pulldown-Menü „File“ → Open. Jetzt zu den abgespeicherten NMR-Daten navigieren (z. B. May26-2007) → Ordner mit entsprechender EXPNO-Nummer → hier das

File „fid“ öffnen (Von den zwei auf dem Bildschirm erscheinenden FID's sollte man sich nicht irritieren lassen).

Wenn das vorliegende Spektrum bereits mit SpinWorks bearbeitet wurde und im Pulldown-Menü „Options“ → „Start-Up Options“ das Häkchen „Auto Load“ gesetzt ist: SpinWorks legt seine eigenen Files in dem Verzeichnis an, in dem sich der FID befindet. Dies sind 1D_real (Realteil des Spektrums), 1D_imag (Imaginärteil des Spektrums), 1D_par (Parameter) und 1D_int (Integrale). Falls also ein File Namens 1D_real vorhanden sein sollte erscheint dieses statt dem FID.

Fouriertransformation:

Wird automatisch mit dem Icon  ausgeführt. Dabei werden gleich die Werte aus den Steuerfenstern  +  +  +  übernommen.

Alternativ kann dies auch manuell im Pulldown-Menü „Processing“

- FT (nur Fouriertransformation)
- Window + FT (Fouriertransformation mit Windowfunctions)
- Window + FT + Phase (Fouriertransformation, Windowfunctions und Pasenkorrektur)

ausgeführt werden.

Anmerkung: Die voreingestellten Werte für „LB“ und „GB“ (Ausgangswerte für „EM“ bzw. „GM“), sowie Transform Size können übernommen werden. Man kann, muss aber nicht, die Spektrumqualität aber eventuell noch verbessern:

LB: Linienerbreiterungsfaktor in Hz; dient zur Verbesserung des Signal/Rauschverhältnisses.

Ausführung:

Unter Window Function muss "Lorentzian" angewählt sein; unter LB muss der gewünschte Faktor stehen.

Anmerkung:

Dieser Wert ist Standardmäßig auf 0.3 Hz für Standard-Protonen-Spektren gesetzt. Vernünftige Werte sind für ^1H 0.2 - 0.3 Hz, 0.5 - 1.0 Hz für ^{13}C , 1.0 - 2.0 Hz für ^{31}P und 1.0 Hz für ^{19}F . Wird der Wert zu hoch gewählt können kleine Kopplungen verschwinden!

GB: Gauss-Multiplikation des FID; dient zur Verbesserung der Spektralen Auflösung. Ausführung:

Unter Window Function muss "Lorentz tu Gauss" angewählt sein; unter LB muss ein negativer Faktor in Hz und unter GB ein Faktor zwischen 0 und 1 stehen.

Anmerkung:

Vernünftige Ausgangswerte sind hierbei für ^1H ein LB von -0.4 Hz und ein GB von 0,6. Diese Werte müssen jedoch für jedes Spektrum optimiert werden.


Zero-Filling:

Schaltfläche „Edit Parameters“ der geöffneten Popup Dialog Box → Parameter „Transform Size“


Dient zur Verbesserung der digitalen Auflösung, indem der FID mit Nullen aufgefüllt wird. Die Anzahl der Datenpunkte im Realteil des Spektrums wird vergrößert um Feinkopplungen besser sichtbar zu machen, sowie die Peakform zu optimieren (empfehlenswert: SI = 524288 (=512K)). Sinnvolle Werte sind für ^1H sind



SI = 32768 (=32K), SI = 65536 (=64K), SI = 131072 (=128K), SI = 262144 (=256K) und SI = 524288 (=512K).

Phase korrigieren:

Die Phase wurde in der Regel bereits mit dem Icon  eingestellt.

Wenn die Phase nachbearbeitet werden soll:


Das Icon  auswählen und in der Popup Dialog Box zuerst die Phase „Nullter Ordnung“ (PHC0) am bereits markierten höchstem Peak im Spektrum, dann die Phase „Erster Ordnung“ (PHC1) im Rest des Spektrums einstellen. Mit „Apply und Exit“ wird das Phasenmenü wieder verlassen.





Wenn die Werte für PHC0 und PHC1 nachträglich händisch unter  eingetragen werden diese mit dem Icon  gesetzt.

Das Programm bietet unter dem Icon  auch eine automatische Phasenkorrektur an.

***Anmerkung:** Eine korrekte Phase ist für eine genaue Integration Voraussetzung!*

Basislinie korrigieren:

Spinworks bietet eine automatische Basislinienkorrektur an. Dazu das komplette Spektrum mit dem Icon  anzeigen lassen und im Pulldown-Menü „Processing“ den Punkt „Fully Automatic Baseline Correction“ wählen. Sollte das Ergebnis unbefriedigend sein dann muss die Korrektur manuell durchgeführt werden:

Das komplette Spektrum mit dem Icon  anzeigen lassen und die Amplitude mit dem Icons   etwas vergrößern. Dann auf das Icon  klicken und mit dem Cursor (linke Maustaste) wenigstens sechs Punkte in der Basislinie über das ganze Spektrums verteilen, dann auf das rote „Return“ drücken um den Basislinien Punkte Modus zu verlassen. Im Pulldown-Menü „Processing“ den Punkt „Automatic Baseline (least squares)“ wählen um die Basislinienkorrektur auszuführen. Im selben Menue können die gesetzten Punkte auch wieder gelöscht werden.

***Anmerkung:** Eine Basislinienkorrektur muss immer durchgeführt werden, wenn integriert werden soll.*

Kalibrierung:

Zunächst das gewünschte Signal im Spektrum spreizen und die Spitze mit der linken Maustaste markieren, dann über die beim Anklicken des Icon **Calibrate** erscheinende Popup Dialog Box den gewünschten Wert unter „Ref. F2 (PPM)“ setzen. Die darüber hinaus unter dem Punkt „Ref. F2 to Solvent“ festsetzten Werte für ausgewählte Lösungsmittel sind vom Programm-Autor fest vorgegebene Werte!

***Anmerkung:** Im Normalfall ist das Spektrum bereits von der NMR-Abteilung auf einen internen bzw. externen Standard, wie z. B. Tetramethylsilan (TMS) bei ^1H und ^{13}C , richtig kalibriert.*


Integration:

Icon **Integrate**: Es erscheint eine Integral Dialogbox. Jetzt im Spektrum die Grenzen der zu integrierenden Bereiche mit jeweils der linken Maustaste auswählen. Zum Löschen eines Integralbereichs diesen mit der linken Maustaste markieren (einmal Klick) und in der Dialogbox „Delete Current“ anwählen. Alle Bereiche einfach mit „Delete All“ löschen. Korrektur von Bias und Slope: Um Diese Werte zu korrigieren müssen die Integrale jeweils einzeln markiert (Linksklick mit der Maus) werden, dann können mit den Schiebern die Werte für Bias (linke Seite des Integrals) und Slope (rechte Seite des Integrals) korrigiert werden. Die Empfindlichkeit der Schieber ist über „+“ und „-“ einstellbar. Wenn ein Bereich angewählt ist, kann dieser z. B. auf 3 Protonen gesetzt werden, indem der Wert eingegeben und mit „Calibrate“ ausgeführt wird. Mit Schaltfläche „List“ erhält man eine druckbare Liste der Integrale, mit „Read“ kann eine bestehende Liste eingelesen werden. Nach Beendigung des Integralmodus können unter dem Pulldown-Menü „View“ mit dem Kontrollhäkchen „Show Integrals“ die Integrale wieder ausgeblendet werden. Die Integral-Liste kann im Pulldown-Menü „Peaks and Integrals“ mit dem Befehl „List Integrals“ auch nachträglich angeschaut bzw. gedruckt werden.

Peak Picking:

Zuerst muss der unterste Erfassungswert mit dem Icon **PP Minimum** eingestellt werden. Alle Peaks über der Linie werden dann später gelistet. Der Dialog wird mit Druck auf das rote „Return“ verlassen. Eine Liste mit der chemischen Verschiebung der Peaks kann dann im Pulldown-Menü „Peaks and Integrals“ mit dem Befehl „Pick Peaks and append to List“ erzeugt werden. Die Liste kann mit dem Befehl „List Peaks“ im selben Menü angeschaut bzw. gedruckt werden, mit „Clear Peaklist“ kann die Liste auch gelöscht werden. Einzelne Peaks bzw. Bereiche werden gelöscht indem der Zielbereich gespreizt wird und dann mit „Clear Peaks in Region“ die Eliminierung durchgeführt wird. Achtung: Es werden dabei alle auf dem Bildschirm sichtbaren Werte gelöscht. Mit „Sign“ wird das Vorzeichen der zu erfassenden Peaks eingestellt. Unter „Units“ kann für die Bildschirmanzeige zwischen Herz und PPM gewählt werden. Nach Beendigung des Peak Picking Modus können unter dem Pulldown-Menü „View“ mit dem Kontrollhäkchen „Peaks and Match“ die Peak-Werte wieder ausgeblendet werden


Drucken bzw. Exportieren des Spektrums:


Das auf dem Bildschirm angezeigte Spektrum lässt sich dann mit dem Befehlen „Print“ bzw. „Print Preview“ im Pulldown-Menü „File“ bzw. über das Icon  mitsamt den Inset Boxen ausdrucken.

Wer möchte kann zusätzlich Ausschnitte des Spektrums mit zweimal links Klick der Maus markieren und mit „Copy to Inset Box“ im Pulldown-Menü „View“ in ein jeweils eigenes Fenster kopieren. Diese werden dann mit ausgedruckt.

Druckoptionen können unter Pulldown-Menü „Edit“ → „Plot Options and Parameters..“ Variiert werden.

Im Punkt „Edit“ → „Plot Title“ kann der Titel geändert werden.

Als weitere Möglichkeit kann das Spektrum im Pulldown-Menü „Edit“ als Metafile für andere Anwendungen gespeichert werden. Windows Metafile alternativ über Icon .

Ebenso besteht im Pulldown-Menü „File“ bzw. mit dem Icon  die Möglichkeit, die Daten im JCAMP-DX Format zu speichern. Dieses wird dann im selben Ordner, in dem sich auch der aktuelle FID befindet, als File „spectrum.dx“ abgelegt. Dieses wird z. B. bei ext. Projektionen in 2D-Spektren benötigt.




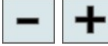



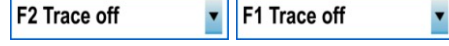
Teil 2: 2D-NMR

Welche Files werden benötigt:

Siehe 1D-Teil dieser Anleitung!






Icons der Symbolleiste:

(Unterhalb den „Pulldown-Menüs“)

	Öffnet einen FID
	Schaltet zwischen verschiedenen Arbeitsräumen um, in denen andere Spektren liegen können.
	Schnellauswahl der verschiedenen Workspaces.
	Schaltet bei Bruker Datensätzen die Experimentnummer höher oder niedriger.
	Speichert das prozessierte Spektrum
	Speichert das aktuelle Spektrum als Windows-Metafile ab.
	Druckt das aktuelle Spektrum
	Art der Projektionen

Icons des Button Panels:

(Am Bildschirm rechts)

Floor: 	Spektrumamplitude größer bzw. kleiner, selber Effekt mit Mausrad.
Range: 	Empfindlichkeit der Spektrumamplitude
Trace: 	Auswahl der „aktiven“ Spur.
1D Scale: 	Spuren bzw. Projektionen größer/kleiner; Mausrad funktioniert nur bei den Projektionen!
 bzw. 	Ganzes Spektrum (vertikal) anzeigen
	Ganzes Spektrum anzeigen
	Vergrößert einen ausgewählten Bereich des Spektrums: Im Spektrum vorher mit der linken Maustaste einen Bereich auswählen.


Last Exp. bzw. Last	Zurück zum ganzen Spektrum bzw. der letzten Spreizung.
2D Display / 1D Display bzw. 2D / 1D	Umschaltung 1D/2D
Pos only / Pos/Neg	Auswahl des Vorzeichens der Kreuzpeaks
Contour / Image	Art der Darstellung der Kreuzpeaks
Col / Label / Row	Umschaltung zwischen Reihen und Säulen
Clear	Blendet die Spuren aus wieder aus
Edit Pars	Parameter editieren
Proc. Both bzw. Proc.	Führt die Fouriertransformation mit Windowfunctions und Phase in F2 und F1 aus.
F2 Only	Wie vorher aber FT nur in F2-Richtung.
F1 Only	Wie vorher aber FT nur in F1-Richtung.
Apply Ph F2	Phase in F2 mit voreingestellten Werten, falls dies noch nicht via „Proc. Both-Icon“ eingestellt wurde.
Apply Ph F1	Phase in F1 mit voreingestellten Werten, falls dies noch nicht via „Proc. Both-Icon“ eingestellt wurde.
Magnitude	Magnitudenspektrum
Phase	Phasenkorrektur manuell
Integrate	Integration
Calibrate	Kalibrierung

Tipp: Um die mit der linken Maustaste erzeugten Markierungen (Fadenkreuze) zu entfernen, muss ein drittes Mal im Spektrumfenster geklickt werden.

Öffnen des FID's bzw. Spektrums:

Um mit dem Programm SpinWorks 2D NMR-Daten zu bearbeiten muss immer vom File „ser“ ausgegangen werden!

Wenn das vorliegende Spektrum noch nicht mit SpinWorks bearbeitet wurde:

Icon  oder Pulldown-Menü „File“ → Open. Jetzt zu den abgespeicherten NMR-Daten navigieren (z. B. May26-2007) → Ordner mit entsprechender EXPNO-Nummer → hier das

File „ser“ öffnen (Von den zwei auf dem Bildschirm erscheinenden FID's sollte man sich nicht irritieren lassen).

Wenn das vorliegende Spektrum bereits mit SpinWorks bearbeitet wurde und im Pulldown-Menü „Options“ → „Start-Up Options“ das Häkchen „Auto Load“ gesetzt ist erscheint gleich das 2D-Spektrum.

Fouriertransformation:

Mit dem Icon **Proc. Both** wird die Fouriertransformation in F2 und F1 ausgeführt. Alternativ wird mit den Icons **F2 Only** bzw. **F1 Only** nur in jeweils einer Richtung gerechnet. Die Parameter hierfür können in der Voreinstellung übernommen werden.

Anmerkung: Bei HMBC-Spektren handelt es sich um ein sogenanntes Magnitudenspektrum und man muss dieses zusätzlich noch mit dem Icon **Magnitude** berechnen lassen.

Phase korrigieren:

Waren Phasenwerte vorhanden, so wurden diese bereits im vorigen Schritt übernommen und eingestellt. Werden die Werte für PHC0/PHC1 jetzt händisch unter **Edit Pars** geändert so werden diese mit **Apply Ph F2** / **Apply Ph F1** angewendet.

Wenn die Phase nachbearbeitet werden soll:




Zuerst mit rechten Maustaste die gewünschten Spuren übers Spektrum verteilt auswählen und dann mit **Prv** bzw. **Nxt** diejenige Spur auswählen (gelb) in der die „nullte Ordnung“ eingestellt werden soll. Mit dem Icon **Phase** in den Phasenmodus springen und in der Popup Dialog Box zuerst die Phase „nullter Ordnung“ (PHC0), dann die Phase „erster Ordnung“ (PHC1) einstellen. Das Gleiche gilt auch für die Säulen (Umschalten mit dem Icon **Col** auf die Einstellung **Row**). Mit „Apply und Exit“ wird das Phasenmenü wieder verlassen.

Mit dem Icon **Clear** werden die ausgewählten Reihen bzw. Säulen vom Bildschirm entfernt.


Basislinie korrigieren:

Das komplette Spektrum mit dem Icon **Full** anzeigen lassen. Im Pulldown-Menü „Processing“ → „2D“ mit „Baseline Correct F2“ die Reihen, dann mit „Baseline Correct F1“ die Säulen korrigieren.

Projektionen:


Um sich im Spektrum besser zurecht zu finden kann man sich, soweit vorhanden, die externen Projektionen in F2 und F1-Richtung anzeigen lassen: Zuerst müssen die 1D-Spektren (in der Regel 1H und 13C) bearbeitet und mit dem Icon  im JDX Format abgespeichert sein, dann die Auswahlfenster  und  auf die Werte „F2 Trace ext.“ und „F1 Trace ext.“ stellen. Unter dem Pulldown-Menü „File“ → „Read F1 Trace“ bzw. „Read F2 Trace“ können hierzu die gewünschten Spektren im „dx“ Format (siehe 1D-Teil) ausgewählt werden.

Kalibrierung:

Zunächst den entsprechenden Kreuzpeak im Spektrum spreizen und mit der linken Maustaste markieren, dann über die beim Anklicken des Icon  erscheinende Popup Dialog Box den gewünschten Wert setzen.


Anmerkung: Im Normalfall ist das Spektrum bereits von der NMR-Abteilung richtig kalibriert.

Integration:

Icon : Es erscheint eine Integral Dialogbox. Jetzt im Spektrum die Grenzen der zu integrierenden Bereiche mit jeweils der linken Maustaste auswählen, in der Dialogbox ein Label (z. B. „1“) setzen und diesen dann mit dem Knopf „Integrate“ im „2D Integration and Label“ Bereich der Dialogbox integrieren, solange bis alle Integrale erstellt sind. Das erste Integral wird immer auf 1 gesetzt, eine weitere Kalibrierung ist nicht möglich. Zum Löschen eines Integralbereichs diesen mit der linken Maustaste markieren (einmal Klick) und in der Dialogbox „Delete Current“ anwählen. Alle Bereiche einfach mit „Delete All“ löschen. Mit Schaltfläche „List“ erhält man eine druckbare Liste der Integrale, mit „Read“ kann eine bestehende Liste eingelesen werden. Die Integral-Liste kann im Pulldown-Menü „Peaks and Integrals“ mit dem Befehl „List Integrals“ auch nachträglich angeschaut bzw. gedruckt werden.


Anmerkung: Leider lassen sich die auf dem Bildschirm sichtbaren Integralbereiche derzeit nicht mit dem 2D-Spektrum ausdrucken.

Drucken bzw. Exportieren des Spektrums:

Das auf dem Bildschirm angezeigte Spektrum lässt sich dann mit dem Befehlen „Print“ bzw. „Print Preview“ im Pulldown-Menü „File“ bzw. über das Icon  ausdrucken, leider derzeit ohne Inset Boxen.

Wer möchte kann Ausschnitte des Spektrums mit zweimal links Klick der Maus markieren und mit „Copy to Inset Box“ im Pulldown-Menü „View“ in ein jeweils eigenes Fenster kopieren.

Druckoptionen können unter Pulldown-Menü „Edit“ → „Plot Options and Parameters..“ Eingestellt werden.

Als weitere Möglichkeit kann das Spektrum im Pulldown-Menü „Edit“ als Metafile für andere Anwendungen gespeichert werden, alternativ über das Icon .