



Inhalt

- Verbindung mit Samba-Server
- Kopieren der Dateien
- SpinWorks Grundlegendes
- SpinWorks 1D-Spektren
- SpinWorks 2D-Spektren





Verbindung zum Samba-Server

Internet Internet Explorer	Eigene Dateien
E-Mail Microsoft Office Outlook	Eigene Bilder
Rechner	Eigene Musik
Microsoft Office Word 2007	💭 Arbeitsplatz
Adobe Acrobat X Pro phonostar-Player Secure Shell Client ChemDraw Ultra 12.0 Microsoft Office Excel 2003 Datenträgerbereinigung	den Systemsteuerung Programmzugriff und -standards Drucker und Faxgeräte Hilfe und Support Suchen T Ausführen
Alle Programme 🕨	

Start

2.

Arbeitsplatz aufrufen



Verbindung zum Samba-Server

Arbeitsplatz	and the second division of the second divisio				-1012
Datel Bearbeiten Ansicht Favorite	en Extras 7				2
🕞 anul - 📄 - 🎓 🔎 9. Adresse 🕎 Arbeitsplatz	Netzlaufwerk verbinden Netzlaufwerk trennen Synchronisieren			-0-	Vechseln zu
	Ordneroptionen	Тур	Gesankgröße	Freier Speicher Kommentare	1
Systemaufgaben	Auf diesem Computer gespeichert	e Dateien			
 Systeminformationen anzeigen Software Eine Einstellung ändern 	Gemeinsame Dokumente Dateien von Sabine Dateien von Tina	Dateiordner Dateiordner Dateiordner			
Andore the to	Festplatten				
Netzwerkungebung Eigene Dateien Gemeinsame Dokumente	- Lokaler Datenkrager (C-) Volume (D-) Geräte mit Wechselmedien	Lokaler Datenträger Lokaler Datenträger	48,8 GB 184 GB	11,1 68 78,2 68	
5ystemsteuerung	DVD-RW-Laufwerk (Ei)	CD-Laufwerk Wechseldatenträger			
Details	* Wechseldatenträger (G:)	Wechseklatenträger			
Arbeitsplatz Systemordner	Wechseldatenträger (I:)	Wechseldatenträger			
	Netzlaufwerke				
	WEB.DE SmartDrive (W:)	Netdauwerk Nichtverbundenes Netdau	7,00 GB	623 MB	

Netzlaufwerk verbinden...



z. B. bei Windows XP



Verbindung zum Samba-Server



z. B. Windows Vista

Netzlaufwerk zuordnen...

stimmen Sie der	Laufwerkbuchstaben für die \	/erbindung und den Ordn	er, mit dem die Verbindung
rgestellt werden	soll:		
dner:			
Beispiel:	\\Server\Freigabe		Durchsdenen
Verbi	ndung bei Anmeldung wiederl	nerstellen	
Verbind	ing unter <u>anderem Benutzerna</u>	<u>men</u> herstellen	
Verbind	ng mit einer Website herstelle	n, auf der Sie Dokumente	und Bilder speichern können
Verbinde Verbinde	ing unter <u>anderem Benutzerna</u> ing mit einer Website herstelle	<u>men</u> herstellen n, auf der Sie Dokumente	und Bilder speichern k



Verbindung zum Samba-Server

Arbeitaplatz	and the second				_ [0] ×
Ide Seateren weite Forme	Extra 1				27
🕒 aand is 🕤 k 🍞 🔎 Su	chen 🜔 Ordner 💷 -				
Adresse 🖳 Arbeitsplatz				-	Wechsein zu
	Name	Тур	Gesambgröße	Freier Speicher Kommentare	
Systemaufgaben	Auf diesem Computer gespeicherte	Dateien			
Systeminformationen anzeigen	Gemeinsame Dokumente	Dateiordner			
5oftware	Dateien von Sabine	Dateiordner			
Ene Einstellung ändem	Dateien von Tina	Dateiordher			
	Festplatten				
Andere Drte	2	Cabala Silanahanni	10.00		
Netzwerkungebung	Lokaler Datentrager (C1)	Lokaler Datentrager	48,8 GB	11,1 GB	
Elgene Dateien	- Frontie (bi)	Lokaler Listerki ager	104 60	70,2 30	
Gemeinsame Dokumente	Geräte mit Wechselmedien				
3 Systemsteuerung	DVD-RW-Laufwerk (E:)	CD-Laufwerk			
	Wechseidatenträger (F:)	Wechseldatenträger			
Details	🖈 🐨 Wechseldatenträger (G:)	Wechseldatenträger			
Arhot solata	Wechseldatenträger (Ht)	Wechseldatenträgen			
Systemordner	Wechseldatenträger (1:)	Wechseldatenträger			
	Netzlaufwerke				
	WEB.DE SmartDrive (W)	Netzlaufwerk	7,00 GB	623 MB	
	Sauto2 auf "afs" (X:)	Nichtverbundenes Netzlau	14.1		
		Windows emoglide. Il friesgaphenen Network Zoweiser mes Ladwei Somer Se uber Seiter und der Otten, mit de werden still Ladwerke 22 Ordner: [Moo-flum Beistell (Seiter) Verbindung ubei Am Verbindung ubei Am	nien, de Verbindung enkordnet her zusde enkordnet her zusde enkordnet zusden für enkordnet zusden für mit de Verbindung he wit verbindung he wit verbindung he wit verbindung he wit verbindung her wit ver	nit-einen nit-einen n. Garth de Vebruhung gestett Durck Hen herstellen mit Nätzechen	
2 Oscilla)					
containtat.				Bugener Computer	

- Laufwerk Z:
- Ordner: <u>\\boc-funny\nmrdaten</u> oder <u>\\144.41.32.113\nmrdaten</u>
- Fertig stellen

Verbindung zum Samba-Server



- Benutzername *nmrsamba*
- Kennwort: bekannt
- ok

Anmerkung:

Der Zugangsrechte zum Samba-Server sind ausschließlich über die IP-Adresse gesteuert. Die IP-Adressen werden von Jürgen in den Samba-Server eingepflegt. D.h., die Daten können nur von der Uni aus heruntergeladen werden.

Kopieren der Dateien

- Verzeichnis f
 ür die NMR-Daten erstellen
- Messdaten in das Verzeichnis auf dem eigenen Rechner kopieren
- Grund: Auf Laufwerk Z:\ nur Leserechte; SpinWorks speichert aber eigene Daten zurück
- Bitte das komplette fid-Verzeichnis auf den eigenen Rechner kopieren! Warum wird später noch deutlich.



- SpinWorks kostenloses NMR-Programm
 Einzige Vorraussetzung: Bei Veröffentlichungen muss angegeben werden: SpinWorks 3.1.8, Copyright © 2011, Kirk Marat, University of Manitoba
- Neueste Version 3.1.8 kann heruntergeladen werden: <u>http://home.cc.umanitoba.ca/~wolowiec/spinworks/index.html</u> oder ftp-Server:
 - ftp://davinci.chem.umanitoba.ca/pub/marat/SpinWorks/
 - -> die neueste Version SpinWorks_3.1.8_beta4.zip verwenden!



💠 SpinWorks 3	8.1.8 beta	4 (2011	1/09/29)	1.0	100	10.9	A 2			<u> </u>	1000	1	
File Edit	View	ROI	Options	Spin System	Simulation	Processing	Peak Pick	Help	<u>Menuleist</u>	te		-	
: 🧉 Workspa	ace 1	-	- +		No Phasing	▼ Lore	entz	- LB: 0,000	GF: 0,000	0			
													Expt:
													Sim: - +
													Fuli
													Zoom
													Edit Pars Process
													Apply Ph AutoPhase Magnitude PP Min.
													Phase Integrate Calibrate
vertical sca	le = 0.00	000											BL Point Simulate
PPM	9.0			8.0	7.0		6.0	5.0	4.0	3.0	2.0	1.0	
Ready									Mi	ouse: (set cursor,	zoom, pick nearest (peak)	at







SpinWorks – Grundlegendes



Menuleiste *Options – Data Format* wie angeben einrichten



SpinWorks – Grundlegendes



hier ein Verzeichnis angeben, in dem die Spektren abgespeichert wurden.

hier kann die Schriftgröße eingestellt werden.

Bei *Processed Data* kann *Auto Load* angekreuzt werden. Wenn der File bereits bearbeitet wurde, wird der gespeicherte Datensatz geladen (*manchmal* O, *das hat sich mir noch nicht erschlossen*).



SpinWorks – Grundlegendes

SpinWorks 3.1.8 be Select an NMR da	ta 4 (2011/09/29) D:\Users\Sa ta set (fid file) to open	bine\Documents	\NMR\SpinWorks_In	stSkript\Spektren\tina
⊙ √ √ × s	pektren 🕨 tina0280_1h_500.f	id 🔶	Suchen	Q
🔄 Organisieren 👻	🔠 Ansichten 🔻 📑 Ne	uer Ordner		0
Name	Änderungsdatum	Тур	Größe	Markierun
fid	29.09.2011 15:13	Datei	129 K	3
log	29.09.2011 15:13	Datei	1 KI	3
procpar	29.09.2011 15:13	Datei	26 KI	3
			11	
4 Elen	nente			
C)ateiname:		Officer	Akhmahan
			Öffnen	Abbrechen

unbearbeitetes Spektrum

🦉 Organisieren 🔻 🏢 Ansichten 💌 🌃 Neuer Ordner								
lame	Änderungsdatum	Тур	Größe	Markierun				
spectrum.dx	13.10.2011 11:11	JCAMP-DX File	499 KB					
1D_imag	13.10.2011 11:08	Datei	256 KB					
1D_par	13.10.2011 11:08	Datei	1 KB					
1D_real	13.10.2011 11:08	Datei	256 KB					
peaks.txt	13.10.2011 10:58	Textdokument	1 KB					
1D_integ	13.10.2011 10:58	Datei	1 KB					
fid	29.09.2011 15:12	Datei	129 KB					
log	29.09.2011 15:12	Datei	1 KB					
procpar	29.09.2011 15:12	Datei	26 KB					
text	29.09.2011 15:12	Datei	1 KB					
10 Elem	ente							

ein bereits in SpinWorks bearbeitetes Spektrum



23

Q

2

Markierun...

SpinWorks – Datei öffnen



Abbrechen



SpinWorks 3.1.8 beta 4 (2011/09/29) D:\Users\Sabine\Documents\NMR\SpinWorks_	nstSkript\Spektren\tina0277_1h_500.fid\			
File Edit View ROI Options Spin System Simulation Processing	Peak Pick Help			
🚰 Workspace 1 🔹 🗐 🔛 No Phasing 🔹 Lorentz	▼ LB: 1.500 GF: 0.000	0		
tin=0.277				Expt: - +
Gossypetin				Sim: - +
1H OBSERVE				Dia dui Pre Net
Time = 0.604355 Sec.				BIOCK:
				H. Exp:
λ				Full
				Zoom
				Last Exp.
al de la companya de				
The Production of the Hard Control of the Product o				Edit Pars
				Process
. In the first state of the sta				
and the second				
1. b) ^{1,0} "				
window"	Funktion			Apply Ph
,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,	I UTIKLIOTI			AutoPhase
				Magnitude
)			PP Min.
				Phase
				Calibrate
The state of the s				BL Point
				imag
معالية مستقامه معالم من المعالية المعالية والمعالية من المعالية معالية منافعة المعالية المعالية المعالية من عن				real
vertical scale = 2.0888				
Sec 0.2 0.4 0.6	0.8 1.0	1.2 1.4	1.6 1.8	2.0
(۲.
2andr	File Onened	"-2nul" & conc. Mourou (ant ouron	zoom nick nearest neak)	
(cauy		sepur o scans mouse: (set cursor,	200m, pick nearest peak)	

SpinWorks – Prozessieren

Edit – Processing Parameters



Für ¹H-Spektren gilt:

Window Function : Sinus squared

Sine Shift: 90 deg.

Size: 32k oder 64k

Für ¹³C-Spektren gilt:

Window Function : Lorentz (expon.)

LB: *1.0*

Size: 32k oder 64k



SpinWorks – Prozessieren





SpinWorks – Prozessieren





SpinWorks – Phasieren



SpinWorks – Phasieren

Phase

- Wenn die Autophasierung nicht optimal ist -> manuell
- Spektrum groß ziehen (Mausrad)







SpinWorks – Phasieren



SpinWorks – Kalibrierung

- Referenzpeak vergrößern
 - Iinke MT Zentrum markieren
 - Wert eintragen
 - Calibrate





SpinWorks – ¹H-Spektren – Integrale

💠 SpinWorks 3.1.8 beta 4 (2011/09/29) D:\Users\	Sabine\Documents\NMR\SpinWorks_InstSkript\Spektr	ren\tina0277_1h_500.fid\		
File Edit View ROI Options Spin Sy	vstem Simulation Processing Peak Pick Hel	IP 500 GE: 0.000		
tina0277;Gossypetin;1H OBSERVE;	Integration Dialog			Expt:
shift = 7.9404 pprn inten. = -16.148 frequency = 499.9381961 MHz	Calibrate 1.0000 *2 /2 Delete Current List All Read 2D Integration and Label Integrate			Block: Frv Nat H. Exp: Solution Full Zoom Last Exp
	Label: Close			Edit Pars Process
L lf			r	Apply Ph AutoPhase Magnitude PP Min.
1.000 1.jp=4		1,1872	1.9-11	Phase Integrate Calibrate BL Points Simulate
vertical scale = 0.1117 PPM 7.8	7.6 7.4	7.2 7.0 6.8	6.6 6.4 6.2	
Ready	auto. baseline correction complete	Block 1 "s2pul" 8 scans	Mouse: (set cursor, zoom, pick nearest peak)	4

- Bereiche größer ziehen –
- auf der linken Spektrumseite beginnen
- Integrate
- mit der linken Maustaste auf der linken Seite des Peaks klicken
- mit der linken Maustaste auf der rechten Seite des Peaks klicken
- zum nächsten Peak gehen, bis alle Integrale gesetzt sind.
- Close.



SpinWorks – ¹H-Spektren – Integrale

Integration Dial	pg							
Calibrate	1.00000	*2 /2						
Delete								
Current	List							
AI	Read							
2D Integration and Label								
Int	Integrate							
Label:	Close							

- Ferner gibt es die Möglichkeit, Integrale zu löschen oder zu kalibrieren.
 - Integrale löschen: Delete All
 - Bestimmte Integrale löschen: gewünschtes Integral markieren – Delete Current
 - Integral kalibrieren: gewünschtes Integral markieren – Wert eintragen – Calibrate
 - Integral-Liste anzeigen: List



SpinWorks – ¹H-Spektren - Kopplungskonstanten



- Wie im VNMR-Programm ist möglich, Kopplungskonstanten abzulesen.
- mit linker Maustaste auf Peak klicken (rote Linie), dann mit der grünen Linie auf einen weiteren gehen und oben links die Kopplungskonstante (delta) ablesen.



SpinWorks – Peak Picking

Edit View ROJ O	otions Spin System Simula	tion Processing	Peak Pick Help	auzza_th_sousidi					
forkspace 2 •	🖬 🖏 🎒 🔢 No Phasing	Sine Squared	- LB: 0.000	GF: 0.000	6				_
278									Expt:
BSERVE									Sim:
7.3601 ppm inten	= -19.987								Block:
ncy = 499.9379055	MHz								n exp.
									C.
									0
							N		(
M									
							M		
AN C									
							11		
- marked herein							we there		
al scale = 0.1530									
8.30 8.	20 8.10 8.00	7.90 7.0	30 7.70	7,60 7,50	7.40 7.30	7.20 7.10 7	.00 6.90	6.80 6.70	6,60

PP Min.

- ins Spektrum klicken
- rosa Linie erscheint, mit der linken Maustaste kann die Höhe eingestellt werden

Return

 Menuleiste Peak Pick – Peak Pick and Append to List.

SpinWorks – Peak Picking

- Weitere Menupunkte:
 - *Clear Peak List*: löscht die komplette Peakliste
 - Clear Peaks in Region: Bereich auswählen (z. B. Lösungsmittel- oder Wasserpeak) → diese Peaks werden aus der Peakliste gelöscht.
 - List: zeigt die Peakliste an, diese wird als peaks.text im Spektrum-Ordner gespeichert und kann dann z. B. in Word eingefügt werden.
 - Units: hier kann man auswählen, ob das Peak Picking in Hz oder ppm angezeigt werden.

SpinWorks – Drucken

Plot Objects and Param	ietera	
Plot Objects		
Ante	Plot Width (cm):	28.00
Frame	Plot Height (cm):	15.00
Grd		
V integrals	Axia Font Height (mm):	3.0
V Parameters	Integral Font Height (mm):	2.7
Peak Labels	Parameter Font Height (mm):	2.7
Simulated	Poak Label Fort Height (mm):	27
Spectrum	Title Font Height (mm):	4.0
V Tele	Spectrum Pen Width (mm):	0.200
	1D Trace Offset in 2D (cm)	0.50
	Spectrum Colour	Select
	Simulated Colour:	Select
2D Parameters on A	Right Auto Colour	Select
2D Contours in Cold	tur Integral Colour:	Select
1		
	Louise L	OF
	Cancel	UK

- folgende Optionen markieren:
 - Axis
 - Integrals
 - Parameters
 - Peak Labels
 - Spectrum
 - Title
- Ok
- Drucker auswählen

SpinWorks – Drucken

SpinWorks 3: tina0277;Gossypetin;1H OBSERVE;





SpinWorks – Einbinden in Office-Programme

Plot Objects		
J Auto	Plot Width (cm)	28.00
Frame	Plot Height (cm).	15.00
Grid	Ann Fred Manual America	35
V Integrals	Adds Fors Height (mm)	2.7
Parametera	Parameter Fort Haint (mm)	2.7
Smuleted	Peak Label Fort Height (mm):	2.7
Spectrum	Title Fort Height (mm):	4,0
Title	Spectrum Pen Width (mm)	0.350
	1D Trace Offset in 2D (cm)	0.50
	Spectrum Colour	Select
	Smulted Colour	Select
2D Parameters on F	Right Axes Colour;	Select
20 Contours in Cold	ur Integral Colour:	Select

- folgende Optionen markieren:
 - Axis
 - Integrals
 - Peak Labels
 - Spectrum
- Spektrum Pen Width (mm): hier kann man ein wenig experimentieren → 0.3 oder 0.35 ist ok
- Menuleiste Edit
- Copy MetaFile to Clipboard (Win 32 API format) oder Ctrl-C
- dann in Word oder Powerpoint Ctrl-V.



SpinWorks – Einbinden in Office-Programme



erstellt von S. Mika

SpinWorks – Speichern

- Menuleiste File
- Save (JCAMP DX) oder Ctrl-S (Strg-S)

Spi	nWorks	3.1.8 be	ta 4 (20	11/09/29)	D:\Users\Sab	ine
le	Edit	View	ROI	Options	Spin Syste	m
	Open				Strg+O	h
	Read F1	Trace				
	Read F2	Trace				
	Save (JC	CAMP D	()		Strg+S	
	Save As	(JCAN	1P DX)			
	Save Di	splayed (Columr	ns (JCAMP I	DX)	
	Save Di	splayed l	Rows (J	CAMP DX)		
	Save Pr	ocessed	Data (S	pinWorks F	ormat)	
	Read Pr	ocessed	Data (S	pinWorks F	ormat)	
	Delete S	SpinWorl	cs Proc	essed Data		
	Save Sp	in Syster	n As			
	Read Sp	oin Syste	m File			
	Save As	signed T	ransitio	ons As		
	Read As	ssigned 1	Fransiti	ons		
	Dump >	(Y Points	s to File			
	Read Si	mpson F	ID			
	Read Si	mpson S	pectru	m		
	Print				Strg+P	
	Print Pr	eview				
	Page Se	tup				
	Recent	Data Set	s			
	Exit					-



Homepage

 Wir haben übrigens auch eine Seite auf unserer Homepage, auf der Wissenswertes, Formulare und natürlich auch diese Anleitung zu finden sind:

https://bioorganische-chemie.uni-hohenheim.de/nmr







SpinWorks – 2D-Spektren

SpinWorks 3.1.	.8 beta 4 (2011/09/29)									- 0 X
File Edit Vi	iew ROI Options	Spin System Simulation	Processing Peak	Pick Help						
📔 Workspace	4 🔹 🚽 🔢 🛱	a 🎒 🔢 No Phasing	 Sine Squared 	- LB: 0.000	GF: 0.000	0				
										Events E
New Worksp	bace									
										Sim:
										Block: Prv Nat
										H. Exp: 🔀 🛇
										Full
										Zoom
										Last Exp.
				SpinWorks	3					Edit Pare
				1.4						Luitais
					This appears to 2D data	. Switch to 2D mode?				Process
					-					
						Ja Nein				Apply Ph
										AutoPhase
										Magnitude
										PP Min.
					1					Phase
					1					Integrate
										Calibrate
										BL Point
										Simulate
vertical scale	e = 0.1861									
PPM	9.0	8.0	7.0	6.0	5.0	4.0	3.0	2.0	1.0	10
4										
Opening Data Est						Plack 1 undefined 9	. Mourow least mouro	norm nick parter	and a	
opening Data Set			- W			BIOCK 1 Undernied 8 scan	s mouse: (set cursor	, zoon, pick nearest pe	Dr.	

erstellt von S. Mika

SpinWorks – 2D-Spektren













SpinWorks – 2D-Spektren – Edit Processing Parameters

Edit Processing Parameters			
F2 (Detection) F1 (Evolution)		
-			Window Function
Size:	2048		Sine
Freq. of 0 PPM:	299.8100611	MHz.	LB: 10.000 Hz: CT: 0.0000
First Point Corr.:	0.5000		Sine Shift: 0.0
FID Bias Correction:		_	
Reverse:			Solvent Filter
Detection Mode:	Simultaneous	•	No Filter Points: 19
Group Delay:			Note: A larger number of points creates a
Left Shift Points:	0		narrower filter
Circular Left Shift Points:	0		Special Cases
Peak Pick Minimum:	0.100		Virtual Spectrometer Freq.: 299.811318 MHz.
Peak Pick Sensitivity:	0.020		
Baseline Poly. Degree:	5		
			Automatic Baseline
			Filter Width: 2 Lambda: 500000.00
			Threshold: 1500.000
			Linear Prediction
Phasing			LP Off Coef: 16
None 👻			Input: 64 Pred: 0
Zero: 21.55	First: -16	.13	Cutoff: 0.0010
1			u-
			Cancal
		_	Cancer



F1 (Evolution)





SpinWorks – 2D-Spektren – Processing Parameter

		F2 (Detection)				F1 (Evol	ution)			
		Detect. Mode	Size	Win. Func.	Sine Shift	Reverse	Detec. Mode	Size	Wind. Func.	Sine Shift
300	gCOSY	Simultaneous	2048	Sine	0		COSY/HMBC	512	Sine	0
	DQFCOSY	Simultaneous	2048	Sine Square	90		States	1024	Sine Square	90
	gHMBC	Simultaneous	2048	Sine	0		COSY/HMBC	1024	Sine	0
	gHSQC	Simultaneous	2048	Sine Square	90	х	Echo-Antiecho	512 / 1024	Sine Square	90
500	gCOSY	Simultaneous	2048	Sine Square				512		
	DQFCOSY	Simultaneous	2048	Sine Square	90	х	States	1024	Sine Square	90
	tocsy	Simultaneous	2048	Sine Square	90	х	States	1024	Sine Square	90
	roesy	Simultaneous	2048	Sine Square	90	х	States	1024	Sine Square	90
	ghsqcad	Simultaneous	2048	Sine Square	90		Echo-Antiecho	1024	Sine Square	90
	ghmbcad	Simultaneous	2048	Sine Square	0		Funktioniert noch nicht richtig			



SpinWorks – 2D-Spektren







Image

erstellt von S. Mika



SpinWorks – 2D-Spektren – Kalibrieren





F2 (ppm):	7.26
F1 (ppm):	7.26

Calibrate Spectru	m
F2 (ppm):	7.047290
F1 (ppm):	115.437858
Cancel	ОК









- Menuleiste File Read F1 Trace – entsprechendes Spektrum laden, für F2 Trace entsprechend wiederholen.
- F1 → ¹³C, F2 → ¹H bei CH-Korrelationen, bei HH-Korrelationen zweimal das Protonenspektrum einfügen.

Spectrum.dx Anderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Deteiname: spectrum.dx	- ocicera s	DX file for F1 trace	-		The same		-	<u> </u>
Organisieren Image: Ansichten Neuer Ordner Name Änderungs Typ Größe Markierun Indig Inog Inog Inog procpar Image: spectrum.dx Image: spectrum.dx Image: spectrum.dx text Image: spectrum.dx Image: spectrum.dx Image: spectrum.dx Spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 Deteiname: spectrum.dx Image: spectrum.dx Image: spectrum.dx Image: spectrum.dx	90-	🃕 « Spektren 🕨	cm00578_	1h_300.fid)-	4 ∳ Su	chen	-
Name Änderungs Typ Größe Markierun fid procpar text spectrum.dx Anderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Deteiname: spectrum.dx	🐚 Organis	ieren 👻 🏭 Ansie	hten 🔻	Neuer O	dner			(
fid iog procpar spectrum.dx text iog spectrum.dx iog JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Dateiname: spectrum.dx	Vame	Änderungs T	/p	Größe	Markie	erun		_
procpar text spectrum.dx Anderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Dateiname: spectrum.dx	fid			log				
spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Dateiname: spectrum.dx	_ procpar		\subseteq	e spectr	um.dx			
spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Dateiname: spectrum.dx								
spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Dateiname: spectrum.dx								
spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37								
spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37								
Spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37								
spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37								
spectrum.dx Änderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Dateiname: spectrum.dx								
spectrum.dx Anderungsdatum: 19.10.2011 14:37 JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37 Dateiname: spectrum.dx								
JCAMP-DX File Größe: 499 KB Erstelldatum: 19.10.2011 14:37								
Erstelldatum: 19.10.2011 14:37		spectrum.dx Ä	nderungsda	atum: 19.10.2	011 14:37	_		
Dateiname: spectrum.dx	Ó	spectrum.dx Ä JCAMP-DX File	nderungsda G	atum: 19.10.2 Größe: 499 KB	011 14:37			_
	Ø	spectrum.dx Ä	nderungsda G Erstellda	atum: 19.10.2 Größe: 499 KB atum: 19.10.2	011 14:37 011 14:37			
	Ø	spectrum.dx Äi JCAMP-DX File	nderungsda G Erstellda	atum: 19.10.2 Größe: 499 KB atum: 19.10.2	011 14:37 011 14:37			











SpinWorks – 2D-Spektren - Phasieren





SpinWorks – 2D-Spektren - ghsqctocsy



SpinWorks – 2D-Spektren

Plot Objects	Constant of the	16.00	
V Axis	Plot Width (cm):	16.00	
Frame	Plot Height (cm):	16.00	
Grid	an a	25	
Integrals	Axis Font Height (mm):	3.0	
Parameters	Integral Font Height (mm):	2.7	
Peak Labels	Parameter Font Height (mm):	2.7	
Simulated	Peak Label Font Height (mm):	2.7	
Spectrum	Title Font Height (mm):	4.0	
✓ Title	Spectrum Pen Width (mm):	0.300	
	1D Trace Offset in 2D (cm):	0.50	
	Crasters Colum	Select	
	Spectrum Colour:	Colort	
	Simulated Colour:	Select	
7 2D Parameters on R	ight Axis Colour:	Select	
2D Contours in Colo	ur Integral Colour:	Se lect	
	Cancel	OK	

- folgende Optionen markieren:
 - Axis
 - Frame
 - Parameters
 - Spectrum
 - Title
- OK
- Drucker auswählen

hier kann man die Größe einstellen – für
HH-Cosy könnte man gleiche Größen, für
CH-Korr. über die ganze Seite (26 cm Breite)

Für HH-Cosy kann man die Parameter rechts neben das Spektrum drucken lassen



SpinWorks – 2D-Spektren – Drucken



number of scans: 32





t von S. Mika



SpinWorks – 2D-Spektren – Exportieren

Plot Objects and Param	ieters	
Plot Objects		
Axis	Plot Width (cm):	15.00
Frame	Plot Height (cm):	15.00
Grid	6	25
Integrals	Axis Font Height (mm):	3.5
Parameters	Integral Font Height (mm):	2.7
Peak Labels	Parameter Font Height (mm):	2.7
Simulated	Peak Label Font Height (mm):	2.7
Spectrum	Title Font Height (mm):	4.0
litle	Spectrum Pen Width (mm):	0.350
	1D Trace Offset in 2D (cm):	0.50
	Spectrum Colour:	Select
	Simulated Colour:	Select
2D Parameters on F	Right Axis Colour:	Select
2D Contours in Cold	bur Integral Colour:	Select
	Cancel	OK

- folgende Optionen markieren:
 - Axis
 - Frame
 - Spectrum
- Spektrum Pen Width (mm): hier kann man ein wenig experimentieren \rightarrow 0.3 oder 0.35 ist ok
- Menuleiste Edit
- Copy MetaFile to Clipboard (Win 32 API format) oder Ctrl-C
- dann in Word oder Powerpoint Ctrl-V.

Das Ganze kann man auch in Farbe drucken oder exportieren



SpinWorks – 2D-Spektren – Exportieren









erstellt von S. Mika





erstellt von S. Mika