

# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

Topspin 4.1.0, Copyright © Bruker

Mario Wolf

erstellt von Mario Wolf, im November 2020

## Inhaltsverzeichnis

Allgemeines .....	3
Bearbeitung von 1D-Spektren .....	6
Datei öffnen .....	6
Prozessieren .....	6
Phasieren .....	7
Basislinienkorrektur .....	8
Kalibrieren .....	8
Integrale setzen .....	9
Peak Picking .....	11
Drucken / Einbinden in Office-Programme .....	13
Bearbeitung von 2D-Spektren .....	14
Allgemeines .....	15
Prozessieren .....	15
Ansichten .....	15
Kalibrieren .....	16
1D-Spuren .....	15
Phasieren .....	20
Drucken / Einbinden in Office-Programme .....	24
Anhang .....	24

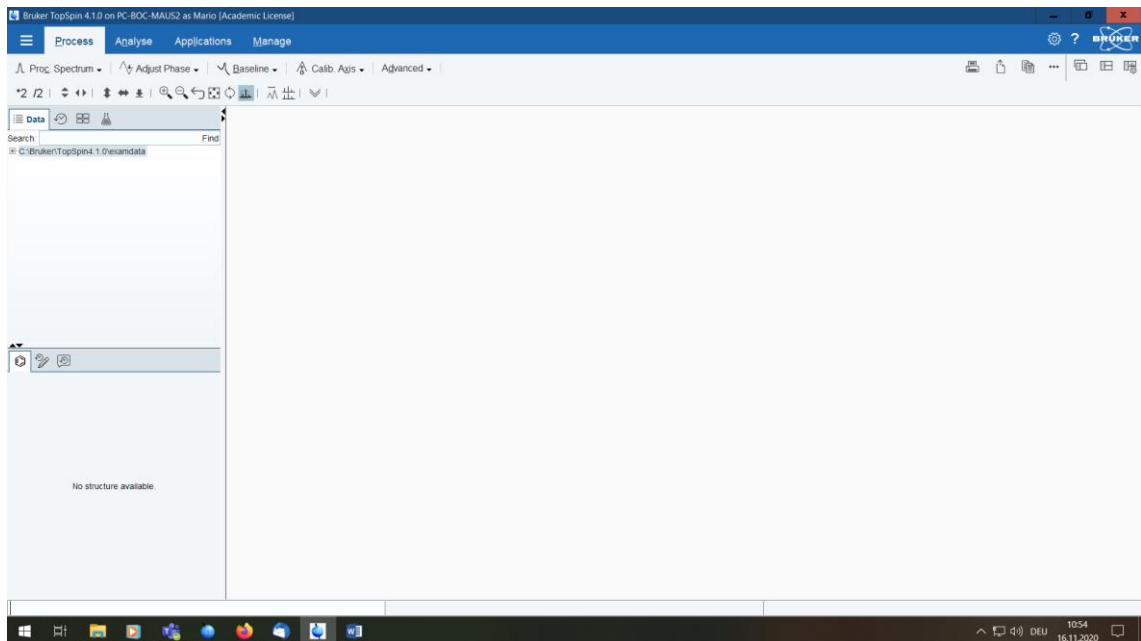
# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

## Allgemeines

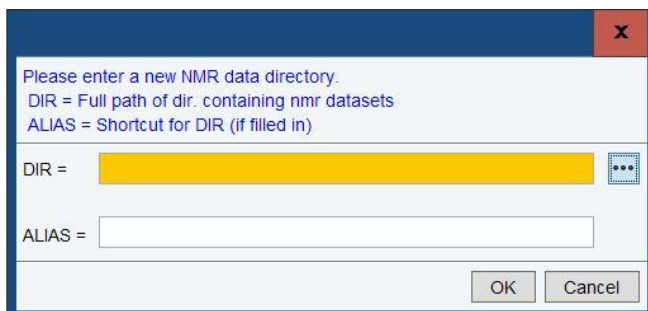
Diese Anleitung wurde für die Programmversion 4.1.0 erstellt und erprobt. Beschrieben wird jeweils eine mögliche Methode um die Spektren zu bearbeiten.

- Verzeichnis für die NMR-Daten auf dem eigenen Rechner erstellen – falls sich die Dateien auf einer CD/Netzwerklaufwerk befinden, müssen diese auch auf den Rechner kopiert werden.
- Messdaten in das Verzeichnis auf dem eigenen Rechner kopieren  
**Grund:** auf Laufwerk Z:\ nur Leserechte; TopSpin speichert aber eigene Daten zurück
- Bitte das komplette Verzeichnis (Ab Probenname) auf den eigenen Rechner kopieren!  
z.B. unter „D:\nmr600\username\“ oder „D:\nmr500\username\“.

Dazu auf Startseite im linken Bereich die rechte Maustaste drücken um im Menü „Add New Data Dir“ auswählen.

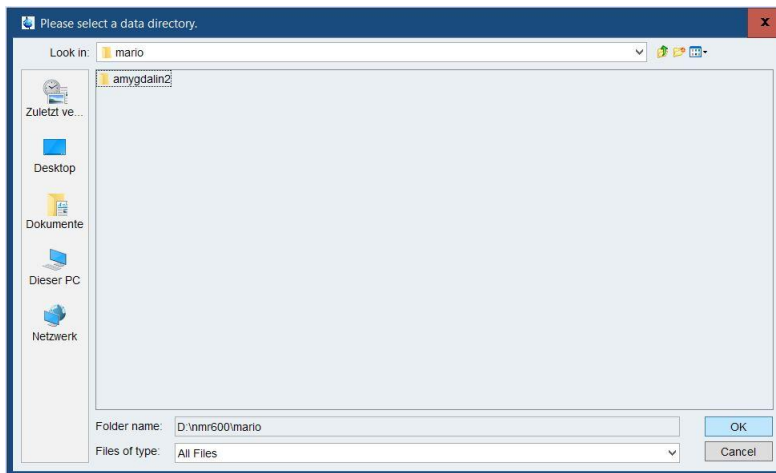


Dann erscheint folgendes Fenster:

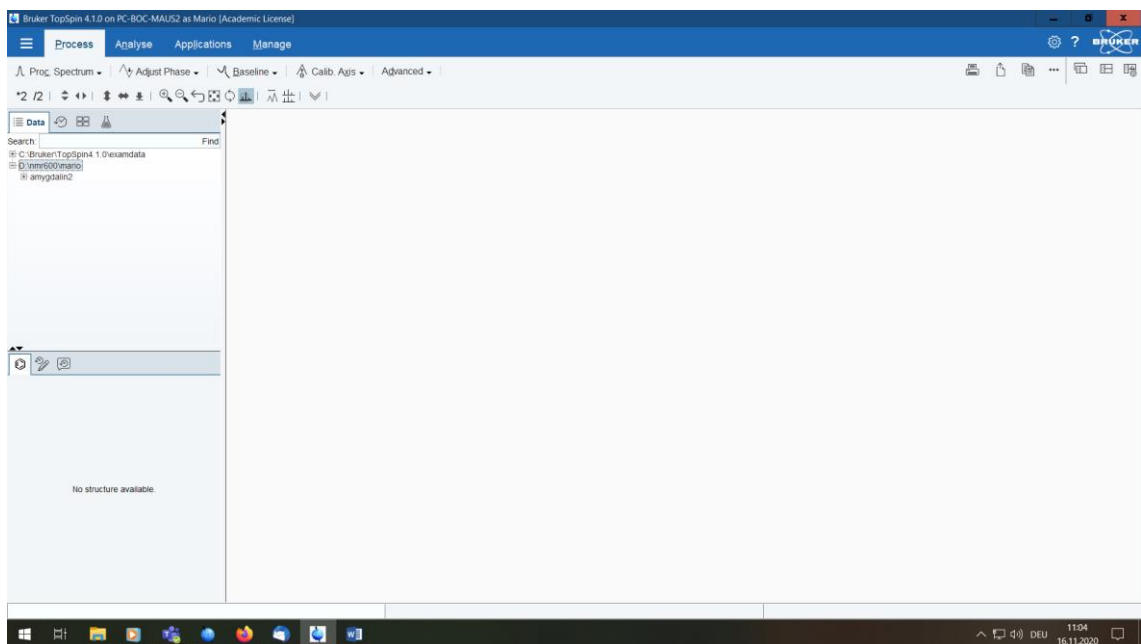


## Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

Nun auf die graue Schaltfläche [...] drücken und dann das Datei-Verzeichnis auswählen:



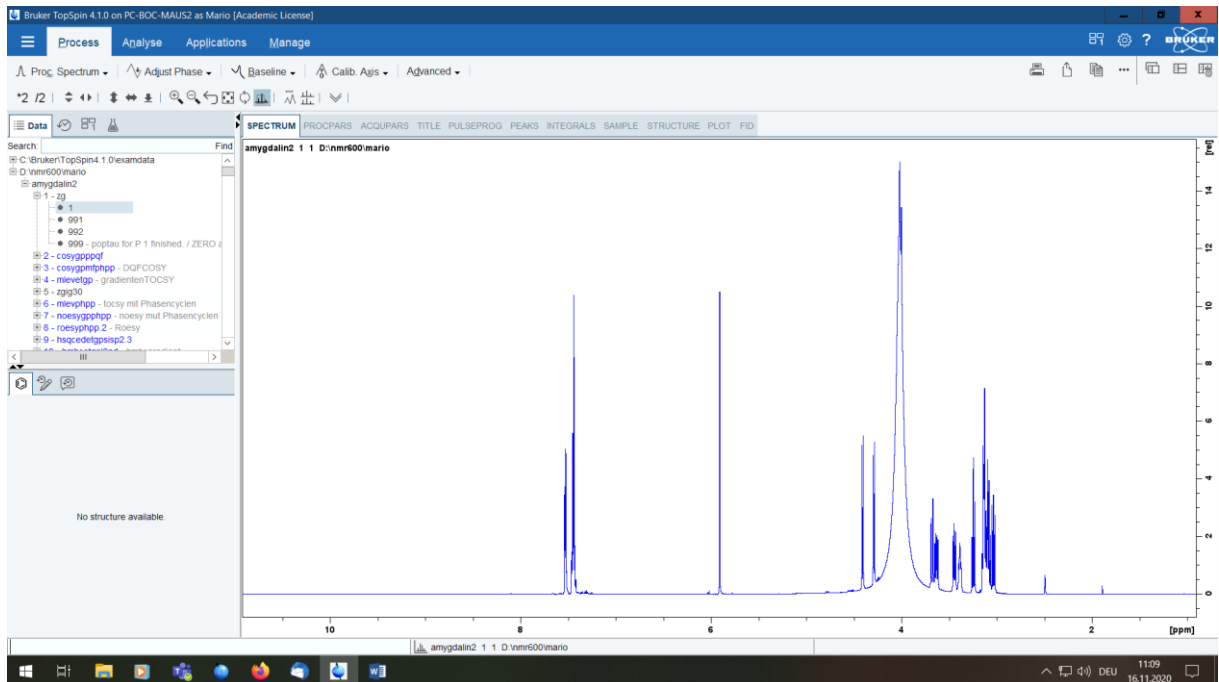
Danach die OK-Taste drücken:



- TopSpin 4.1.0 ist nur für akademische Zwecke kostenlos.
- Neueste Version kann nach Registrierung heruntergeladen werden bei <https://www.bruker.com/service/support-upgrades/software-downloads/nmr.html>

# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

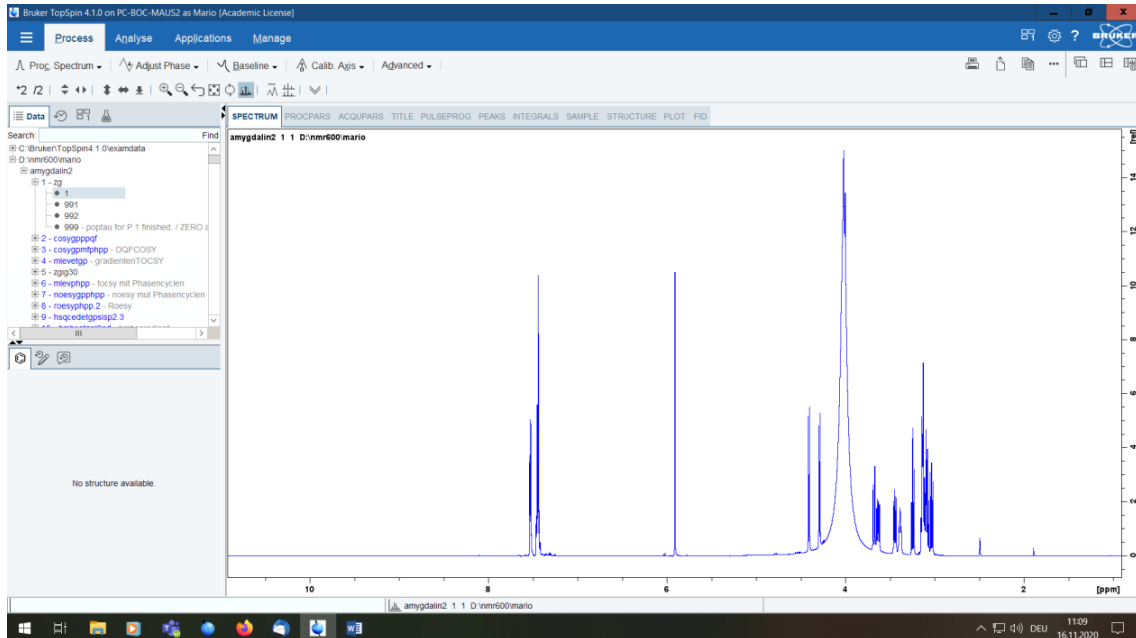
Startseite mit ausgewähltem Spektrum:



## Bearbeitung von 1D-Spektren

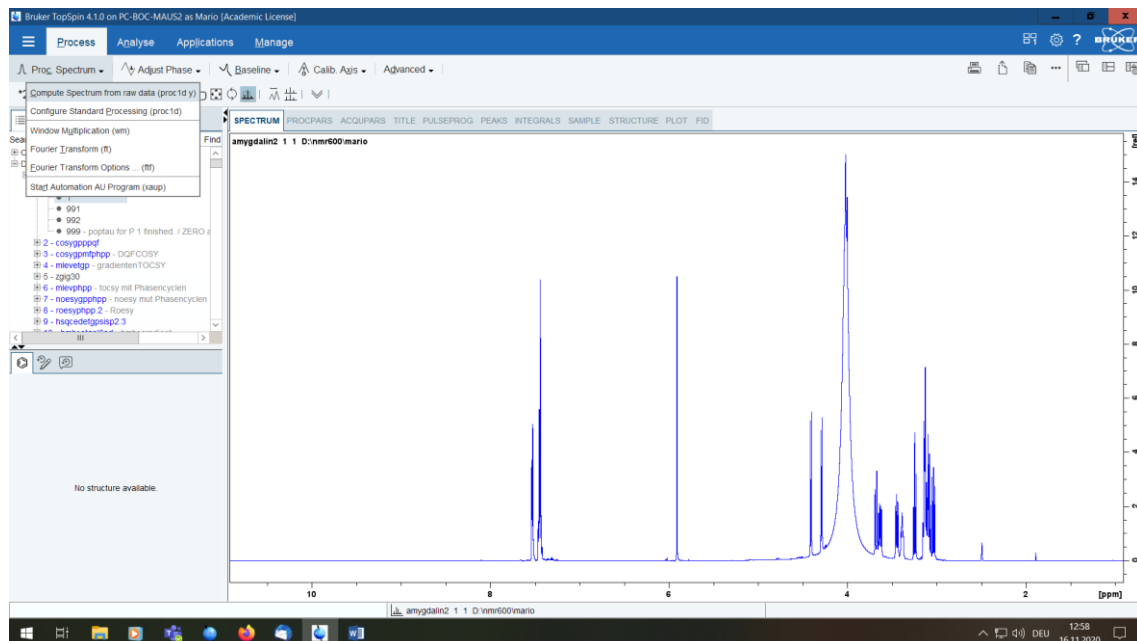
### Datei öffnen

Im linken Bereich das 1D-Spektrum auswählen:



### Prozessieren

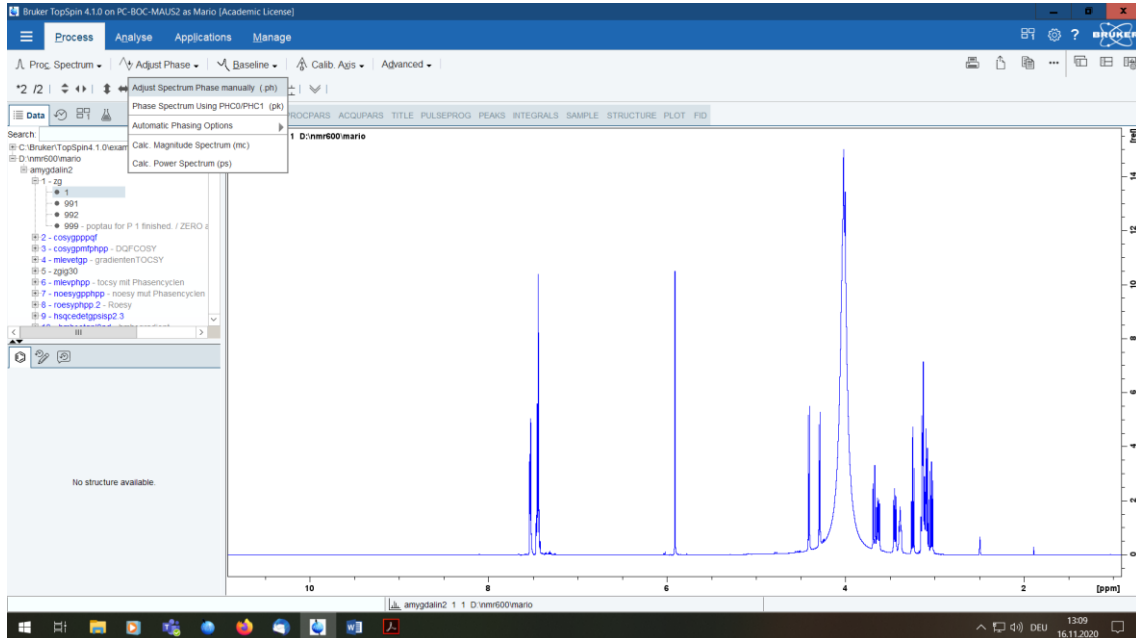
: Die Anzeige erfolgt dann automatisch oder nach Betätigen der Schaltfläche „Proc Spectrum“ bzw. Eingabe von „efp“ und „apk“ in der Befehlszeile.



# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

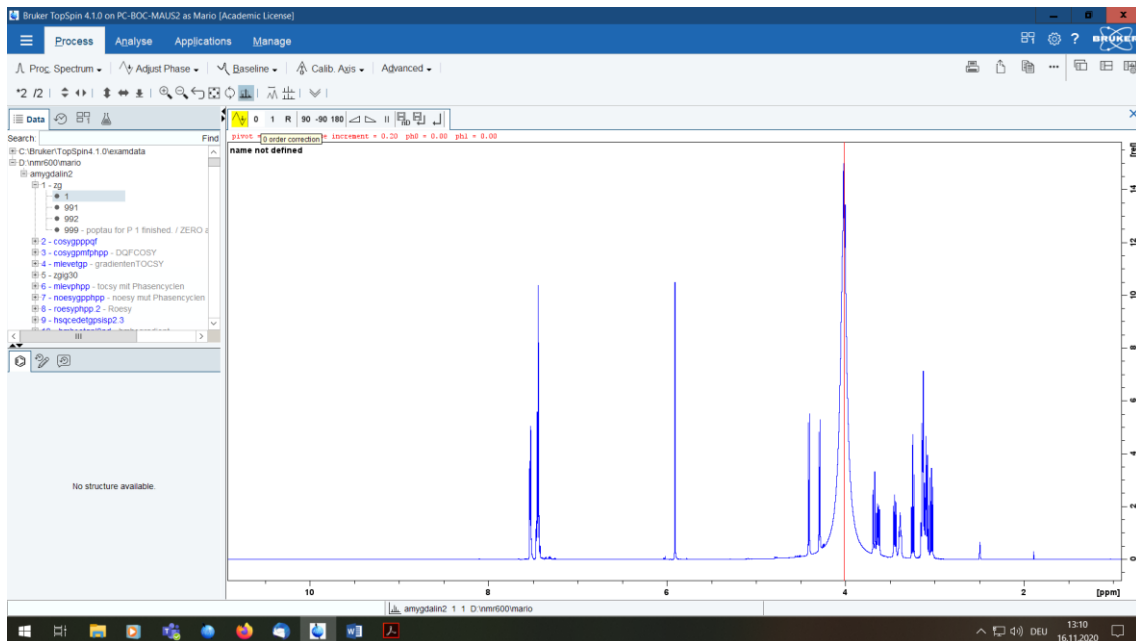
## Phasieren

Über die Schaltfläche „Adjust Phase“ -> „Automatic Phasing Options“ und die entsprechende Option (Standard: 1. Option) oder die Befehlszeile mit „apk“.



Manuelles Phasieren über:

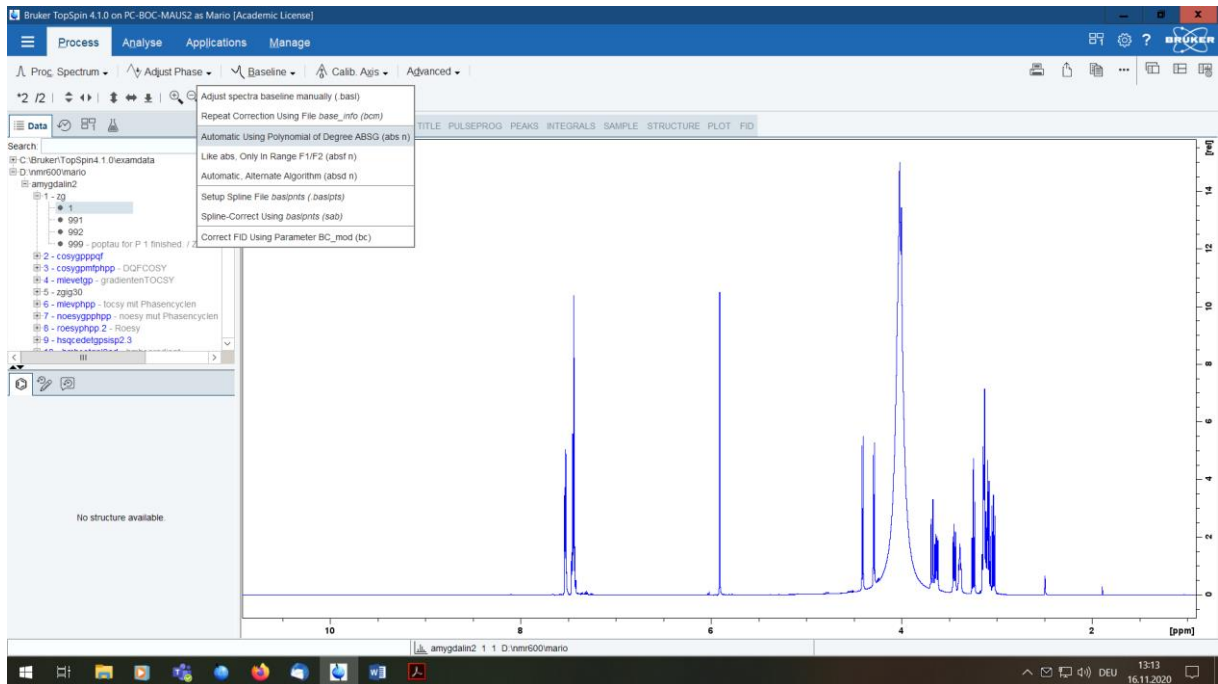
Dabei mit der linken Maustaste auf die „0“ für 0. Ordnung bzw. auf die „1“ für 1. Ordnung klicken und die Maus nach oben oder unten bewegen. Dabei die linke Maustaste gedrückt lassen.



# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

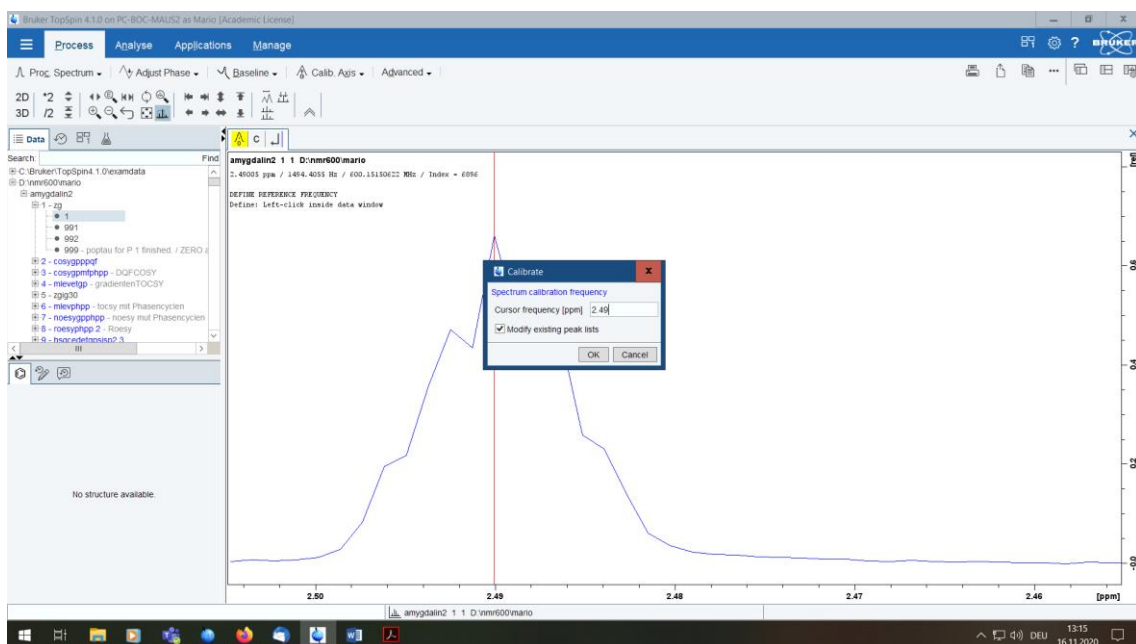
## Basislinienkorrektur

Mit Befehl „abs“ in der Befehlszeile oder im Menü über „Baseline“ und die entsprechende Option.



## Kalibrieren

Über Menü „Calib. Axis“ oder Befehl „cal“.

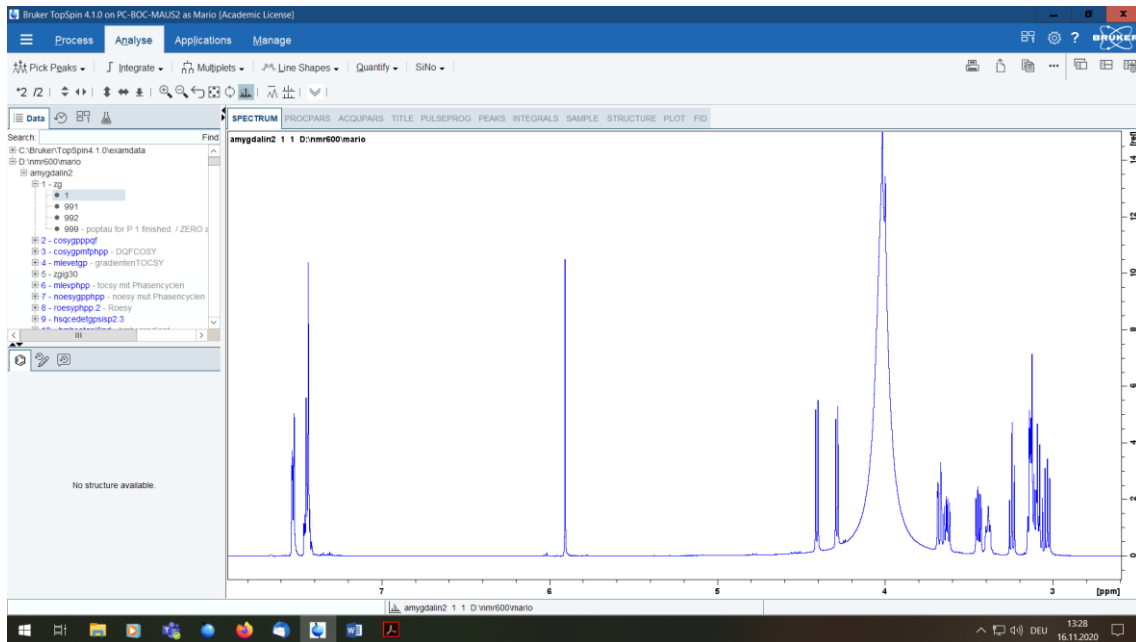




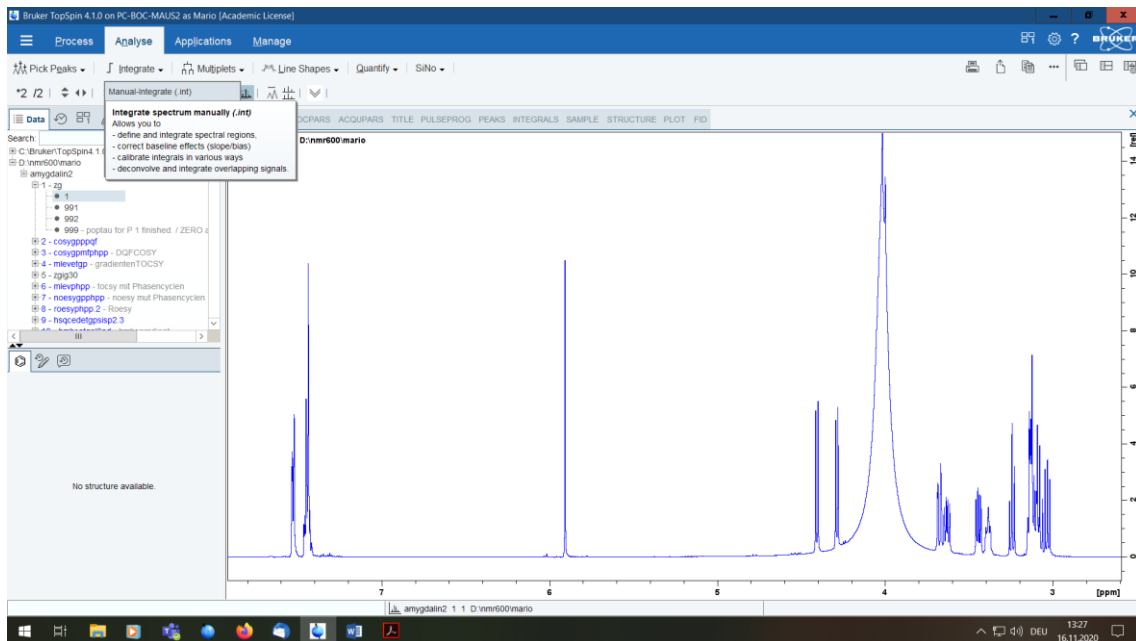
# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

## Integrale setzen

Mit dem Mauscursor den Bereich für das Integrieren auswählen:

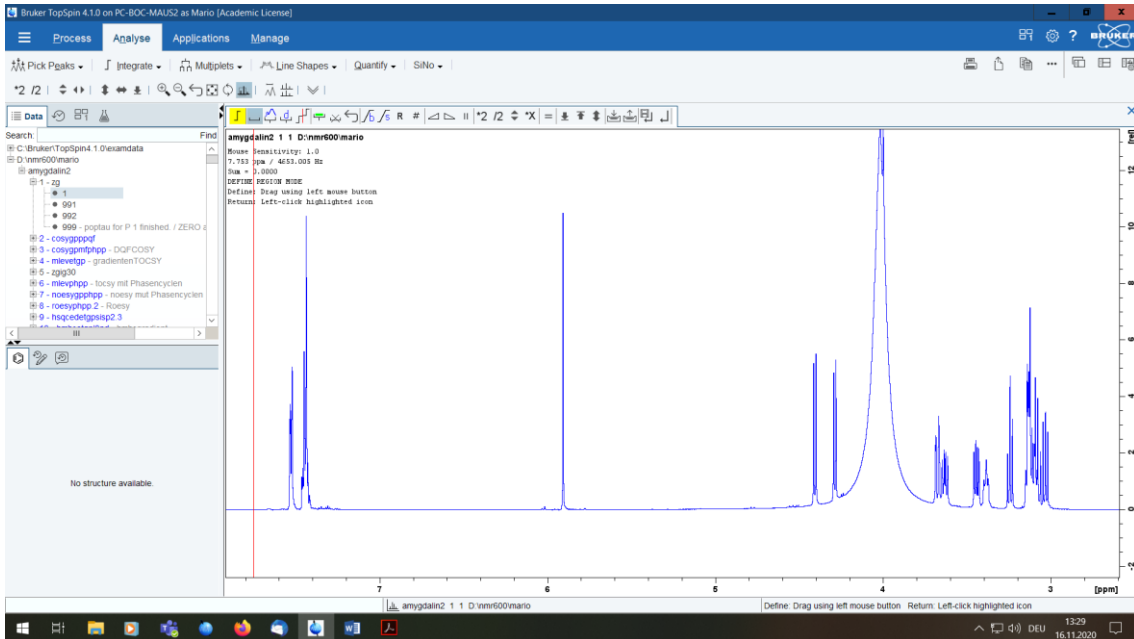


Dann manuelles Integrieren auswählen:

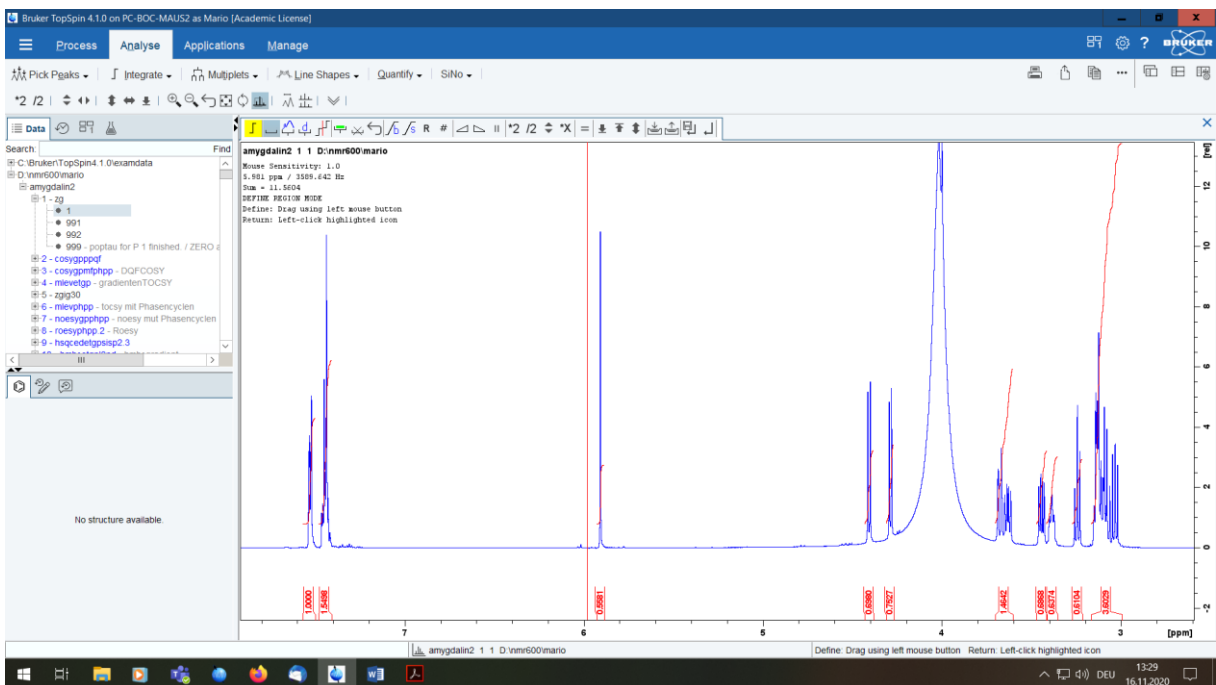


# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

Jetzt kann mit dem Setzen der Integrale begonnen werden:



Dazu mit der linken Maustaste den Anfangsbereich anklicken und gedrückt halten und die Maus zum Ende des zu markierenden Bereichs ziehen. Loslassen und der Bereich wird markiert.

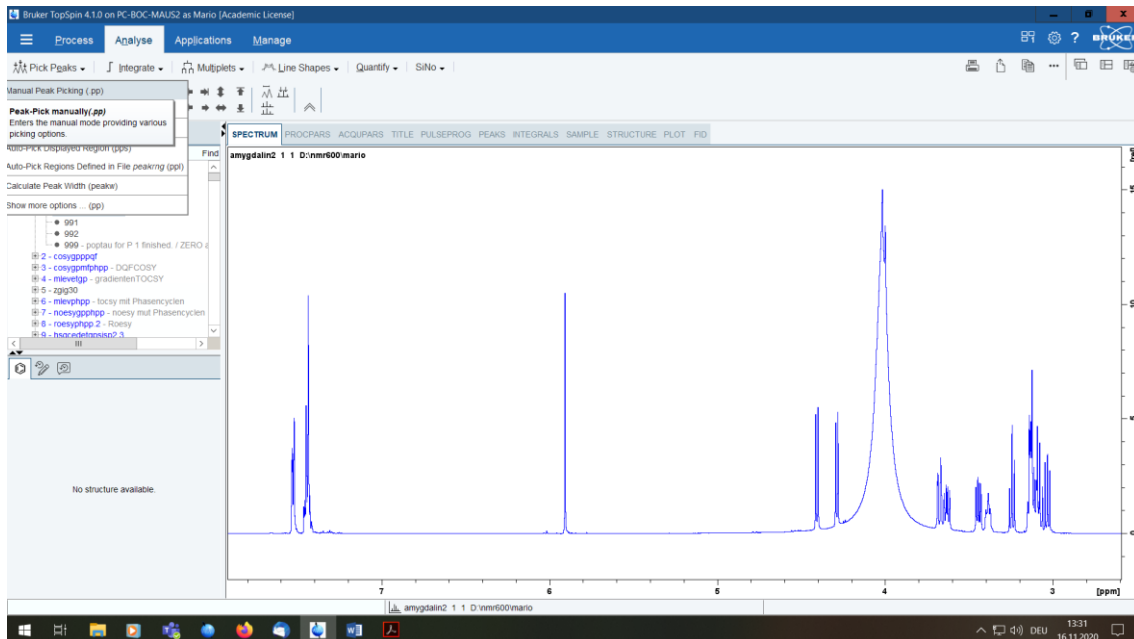


Speichern der Integrale über das Diskettensymbol mit der Return-Taste oder den Befehl „sret“.

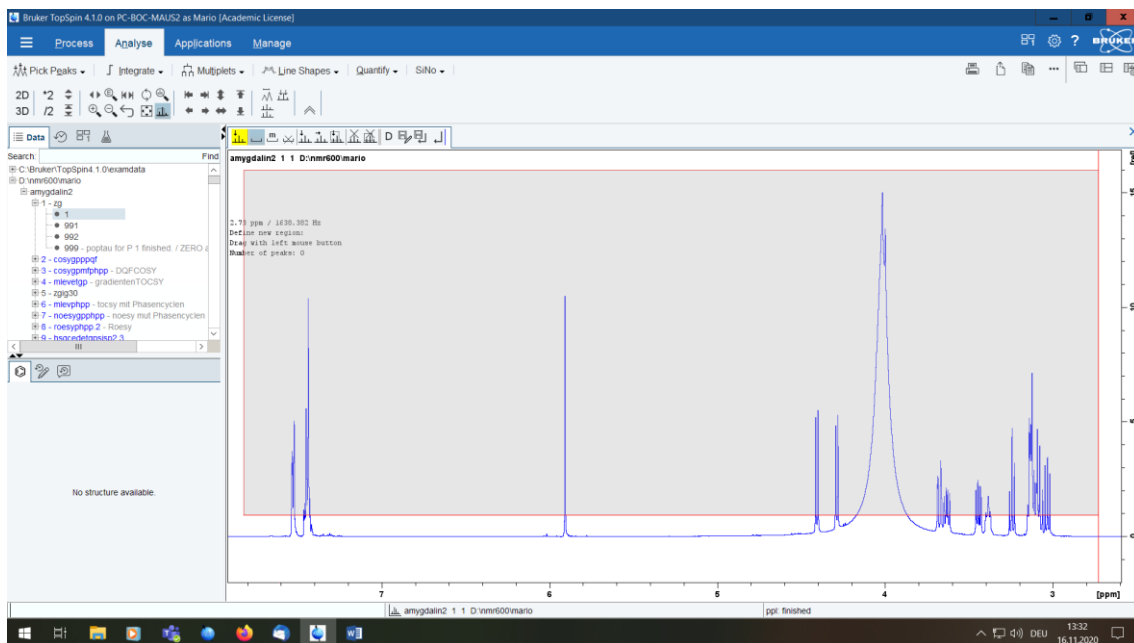
# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

## Peak Picking

Über Menü „Pick Peaks“ und manuelles (empfohlen) oder automatisches Peak Picking auswählen.

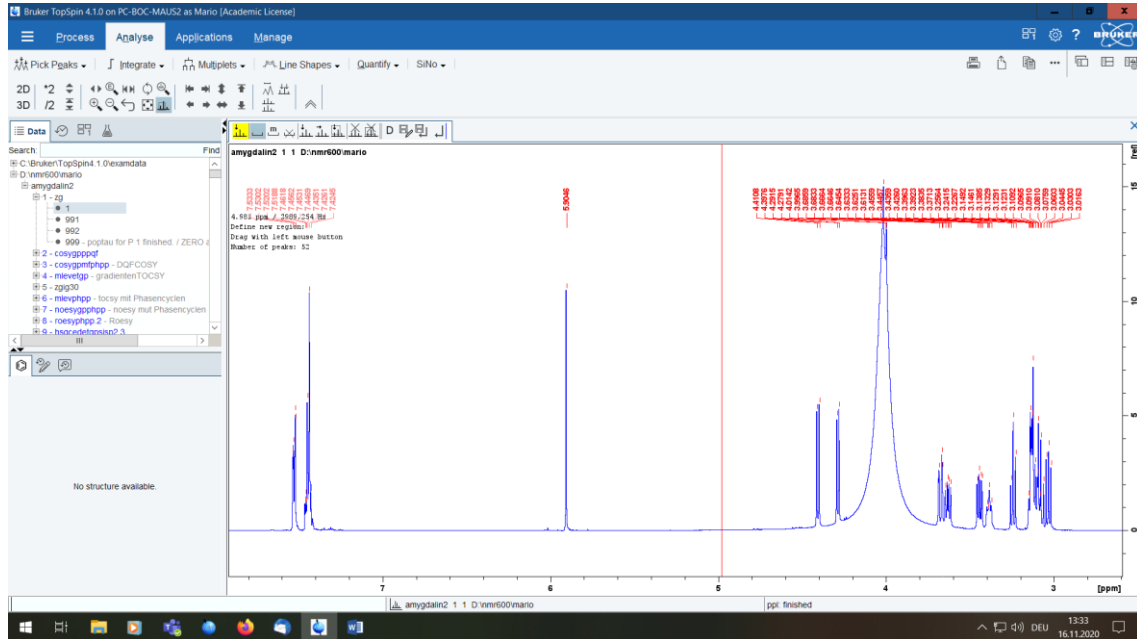


Dazu den ausgewählten „Peak Picking“-Bereich mit der Maus markieren (graues Rechteck): Über Linksklick mit der Maustaste und Maustaste gedrückt halten. Über Ziehen der Maus die Größe des ausgewählten Bereichs anpassen.



Wenn der ausgewählte Bereich richtig gesetzt ist: Maustaste loslassen.

# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

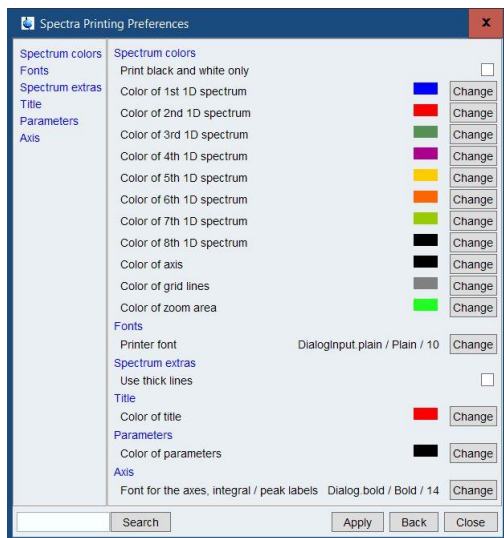
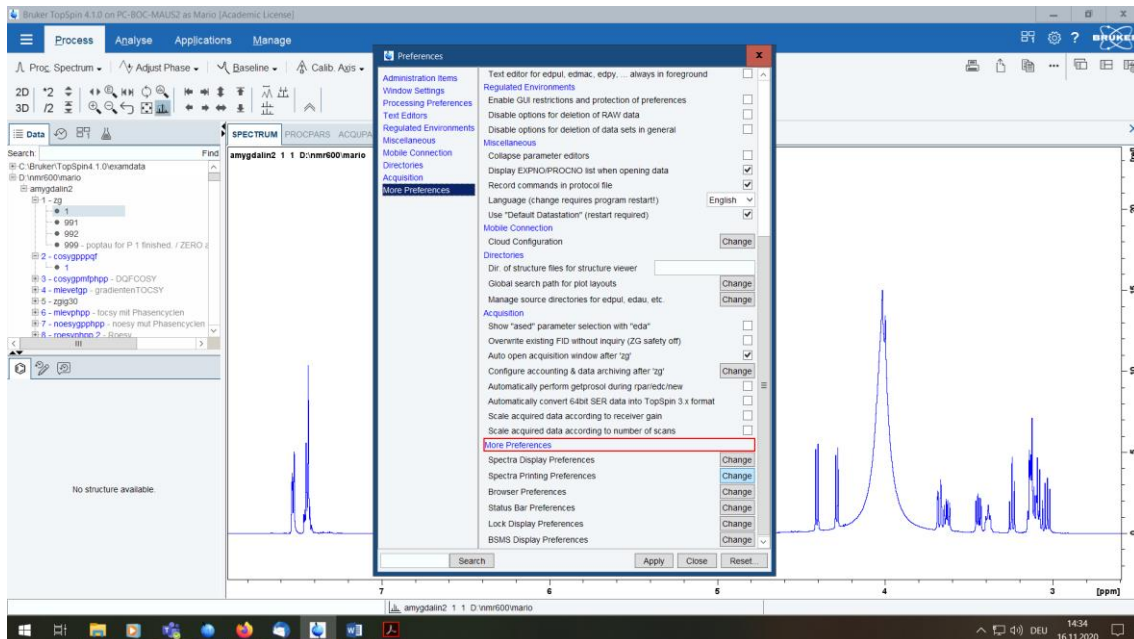


Speichern der Peaks mit dem Diskettensymbol mit der Return-Taste oder den Befehl „sret“.

# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

## Drucken / Einbinden in Office-Programme

### Menüleiste Symbol für „Setup Preferences“



Über das Export-Symbol können auch PDF- oder Grafikdateien (PNG, JPG, TIFF, BMP) erstellt werden.

### Einbinden in Office-Programme:

Über Kopiersymbol in Menüleiste und die entsprechende Paste-Funktion im Office-Programm.

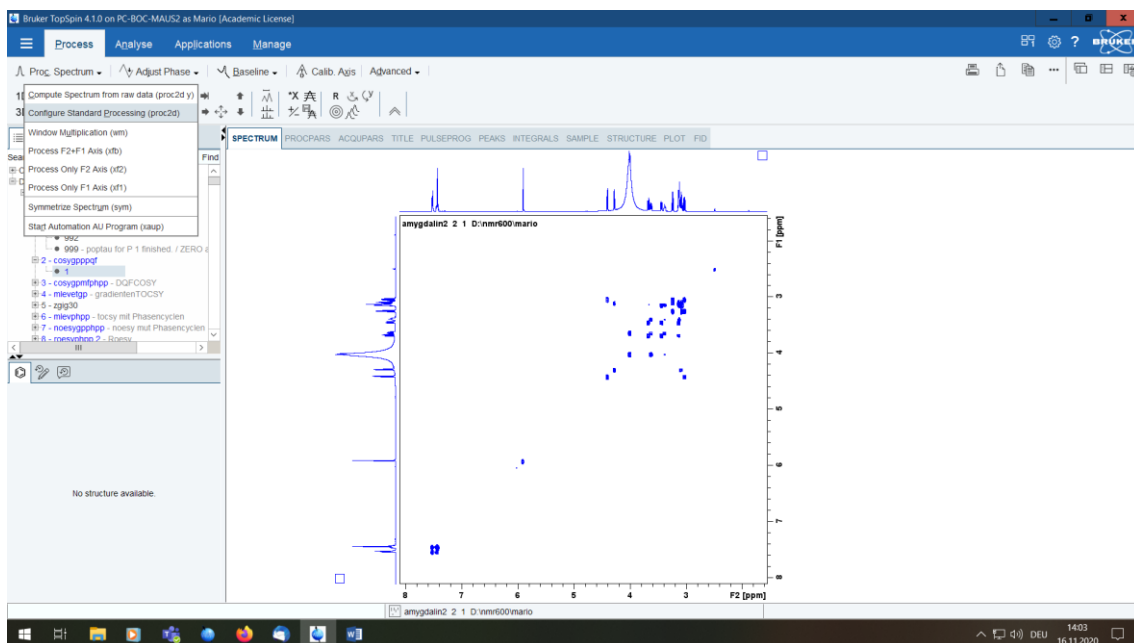
## Bearbeitung von 2D-Spektren

### Allgemeines

Es ist ratsam, zuerst die 1D-Spektren zu bearbeiten. Das Öffnen der Dateien funktioniert auf die gleiche Art und Weise wie bei den 1D-Spektren.

### Prozessieren

Automatisch über Menü „Process“ -> „Proc. Spectrum“ oder über den Befehl „xfb“. Bei Magnitude-Spektren anschließend noch den Befehl „xf2m“ für die Magnitude-Kalkulation eingeben.



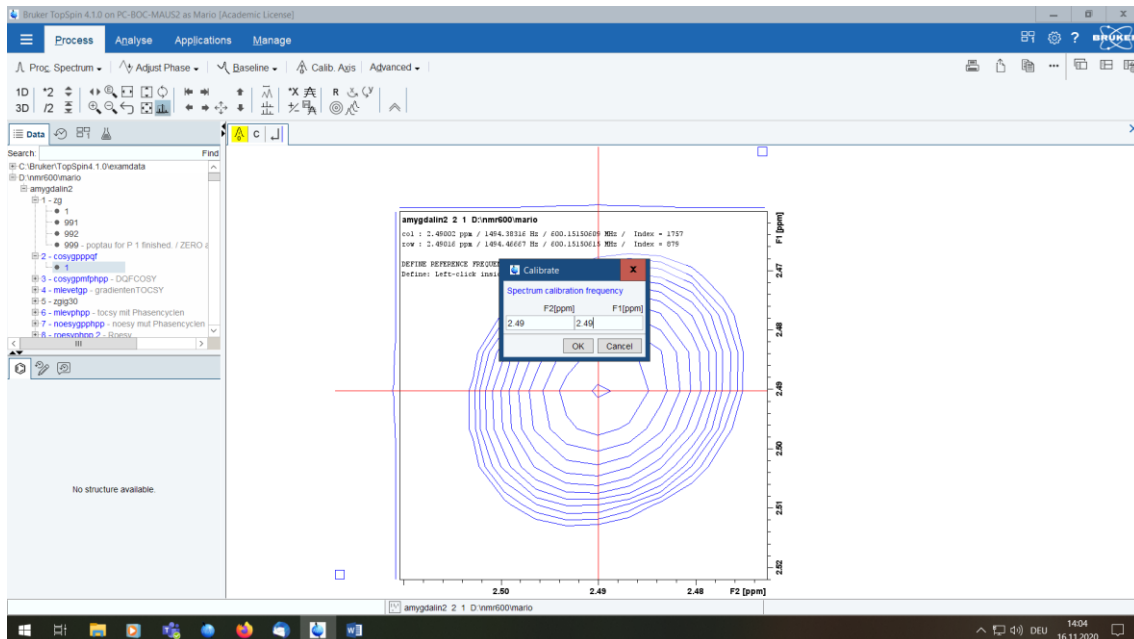
### Ansichten

In Topspin gibt es als Ansicht den Contour-Mode (Befehl „co“, Standard) und den Oblique Mode („st“). Über das Drehen des Mauseisens kann die Darstellung optimiert werden (Höhenlinien), oder über Nutzung der Schaltflächen „\*2“ oder „/2“.

# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

## Kalibrieren

Über Menü „Process“ -> „Calib. Axis“ (vorher Bereich vergrößern):

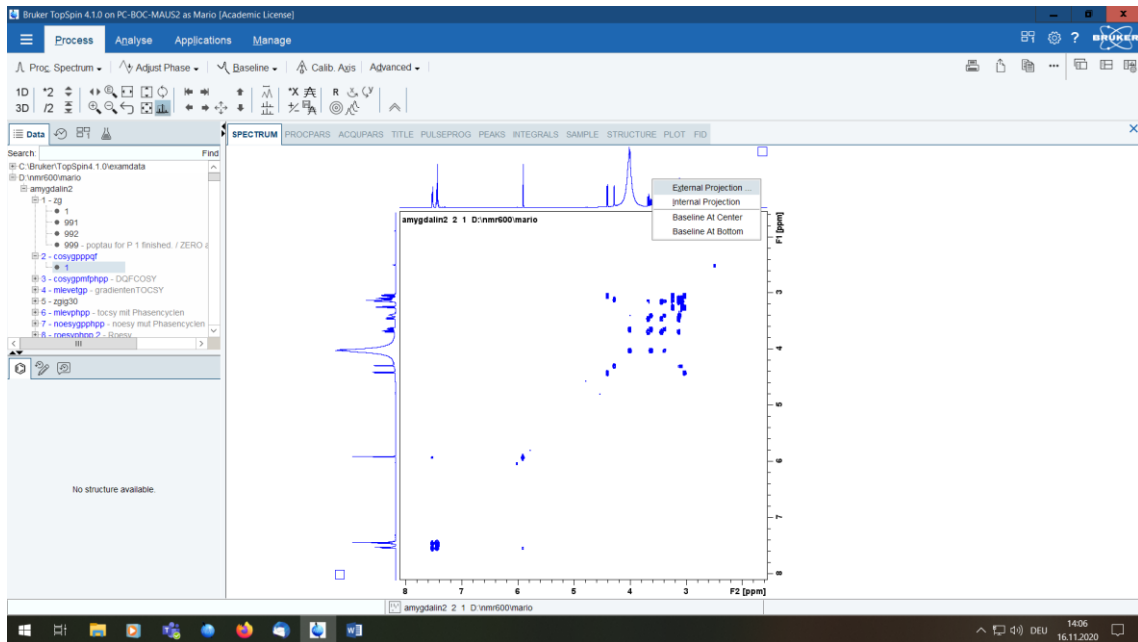


OK-Taste drücken und Bereich wieder verkleinern.

# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

## 1D-Spuren

Mit der Rechten Maustaste in den Tracebereich klicken.



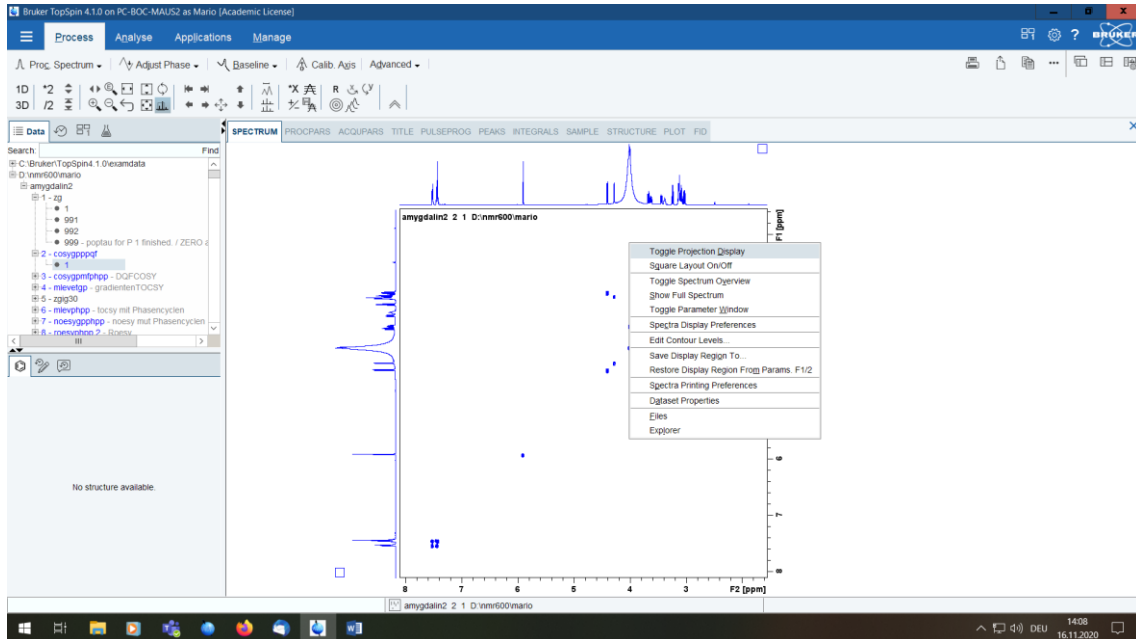
Nach Auswahl von externer Projektion: 1D-Spektrum für 1D-Trace festlegen:

The screenshot shows the 'Data set for F2 projection' dialog box. The 'Options' section has two radio buttons: 'Display data in same window' (selected) and 'Display data in new window'. Below the options, there are four input fields: 'NAME = amygdalin2', 'EXPNO = 1', 'PROCNO = 1', and 'DIR = D:\nmr600\mario'. At the bottom, there are five buttons: 'OK', 'Cancel', 'Browse', 'Find...', and 'Help'.

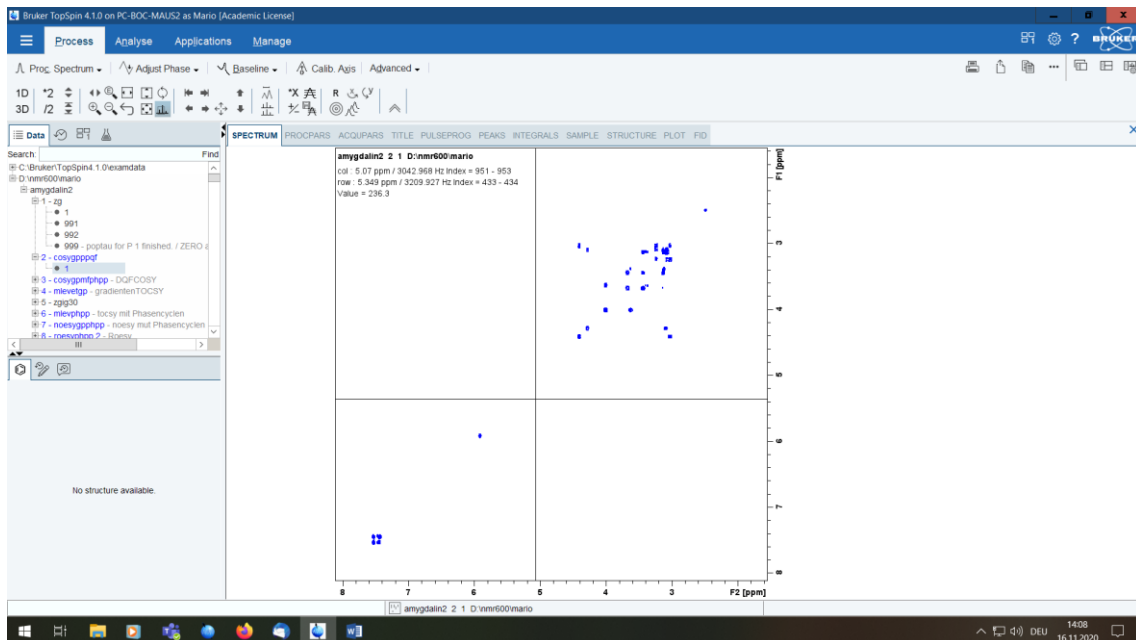


# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

1D-Trace ein- und ausschalten über Auswahlmü nach Drücken der rechten Maustaste:

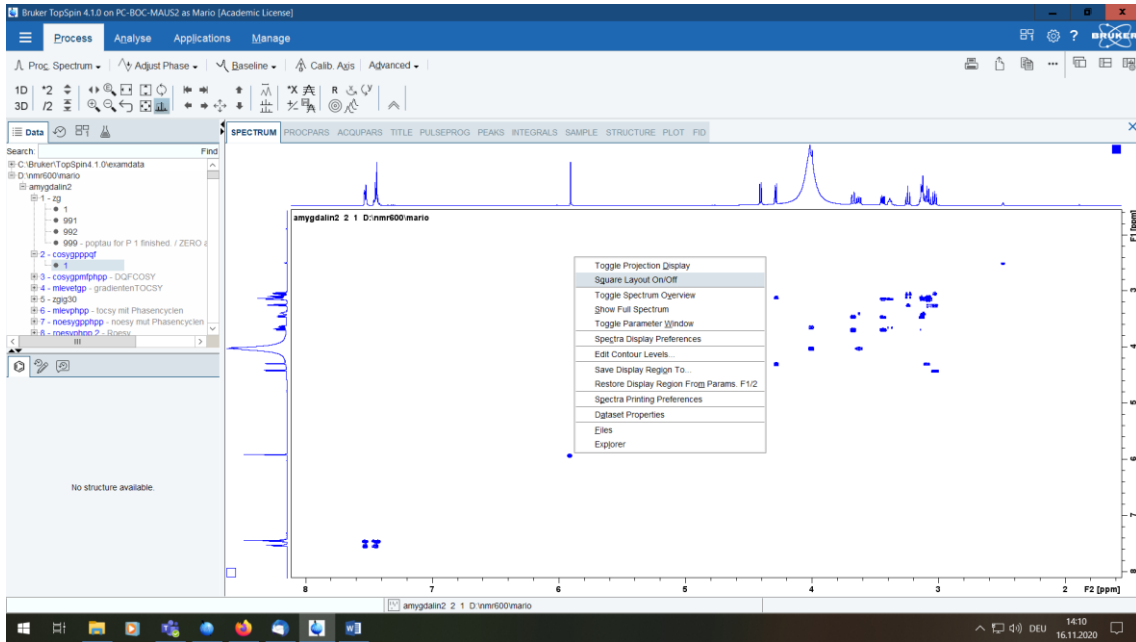


Spektrum ohne 1D-Traces:

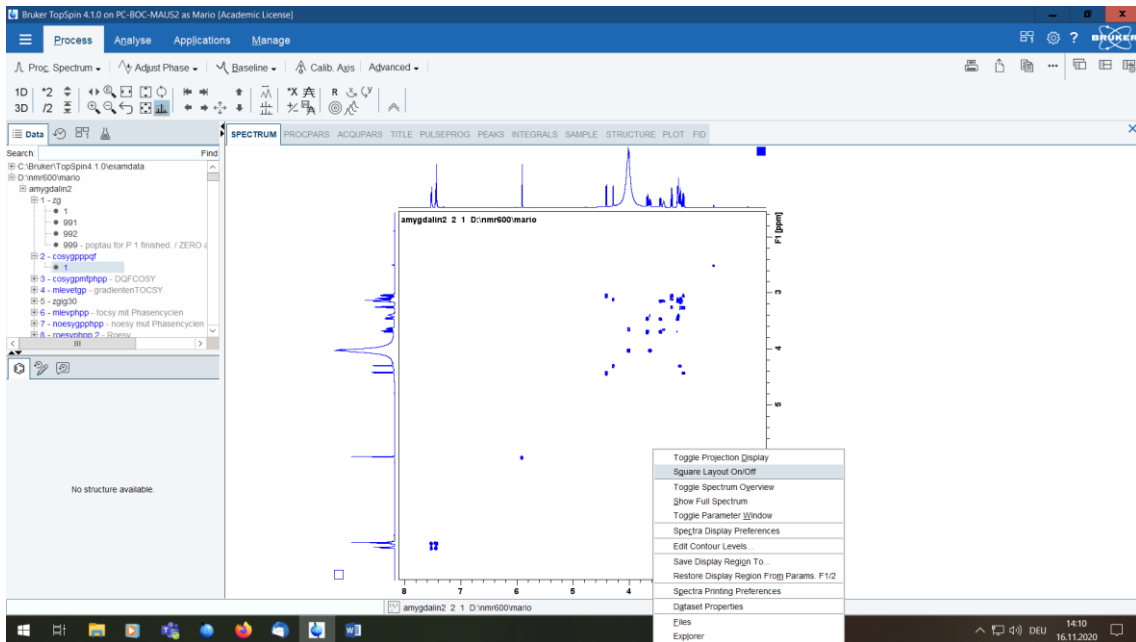


# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

Spektrum mit „Square Layout off“: (Auswahl über Klick mit rechter Maustaste):



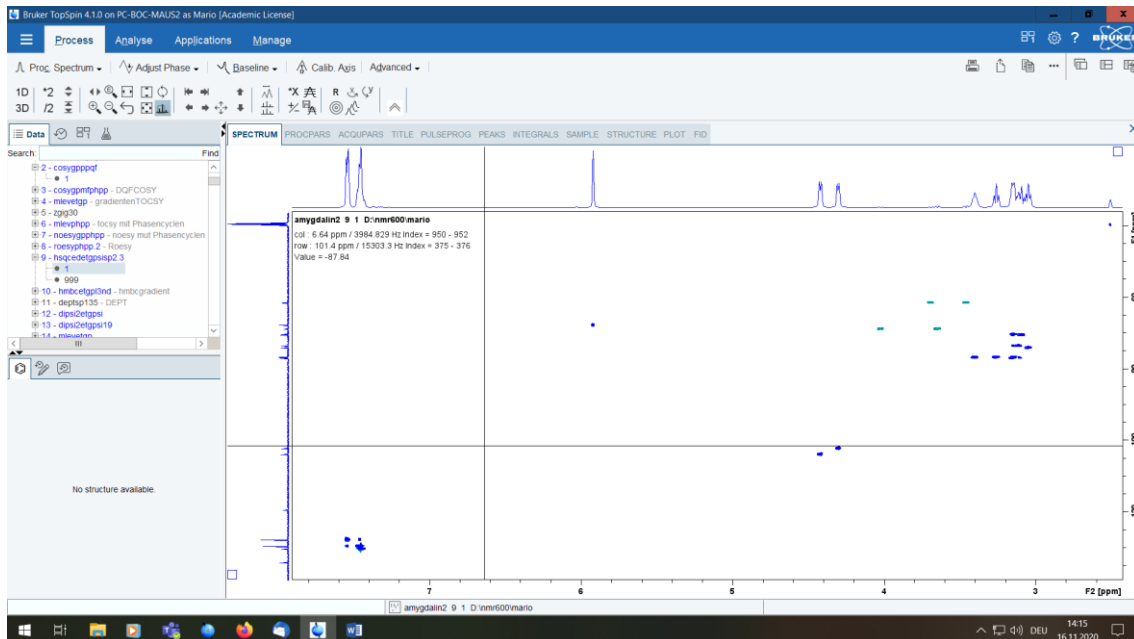
Spektrum mit „Square Layout on“: (Auswahl über Klick mit rechter Maustaste):



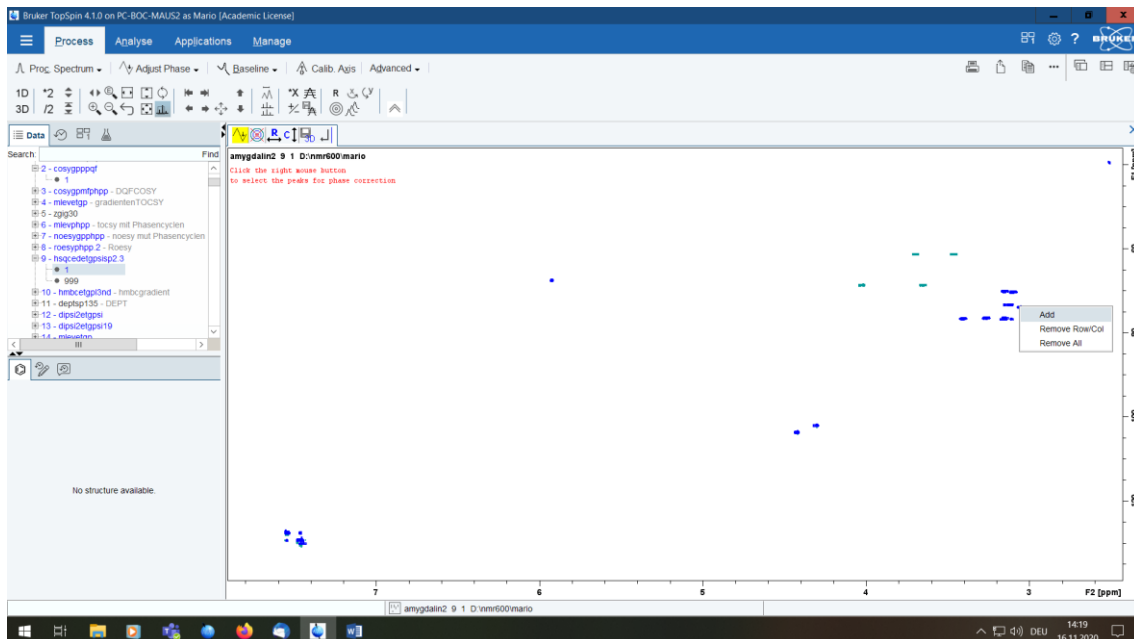
# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

## Phasieren

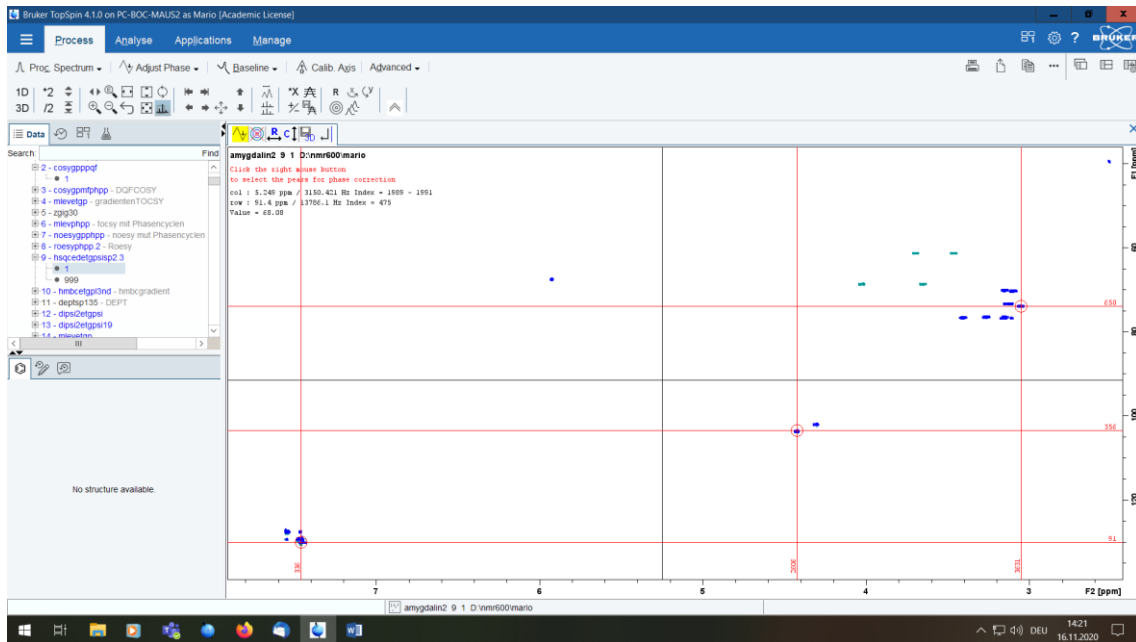
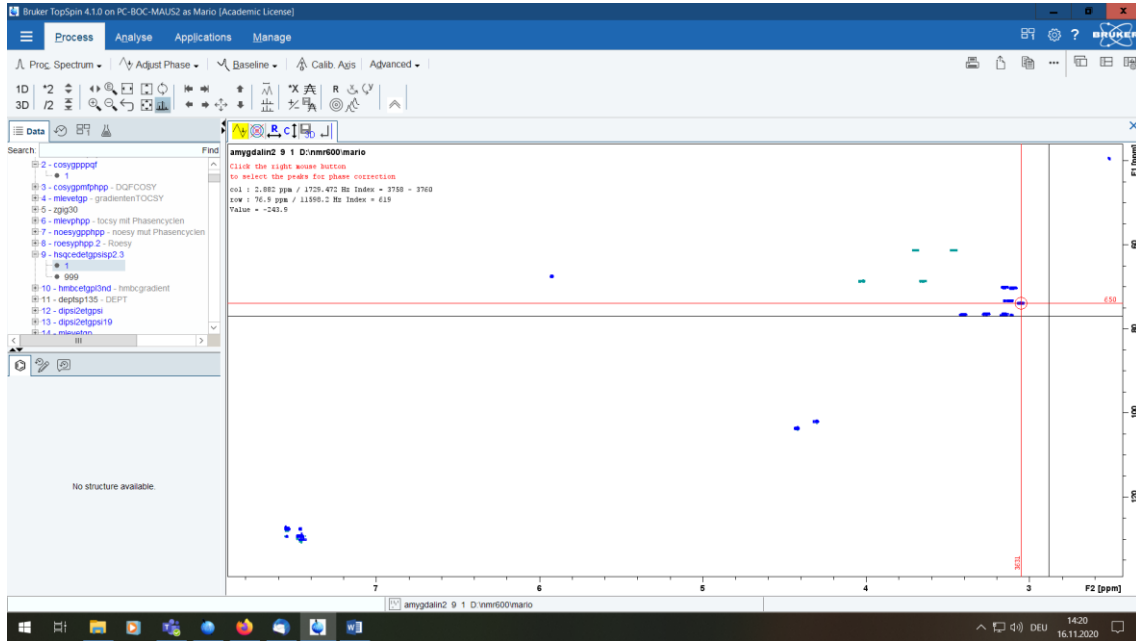
Über Menü „Process“ -> „Adjust Phase“:



Dann mindestens 2 oder 3 Peaks für die Phasierung auswählen (Klick mit rechter Maustaste und im Popup-Menü „Add“ auswählen) Schaltfläche „R“ für Row oder „C“ wie Column:

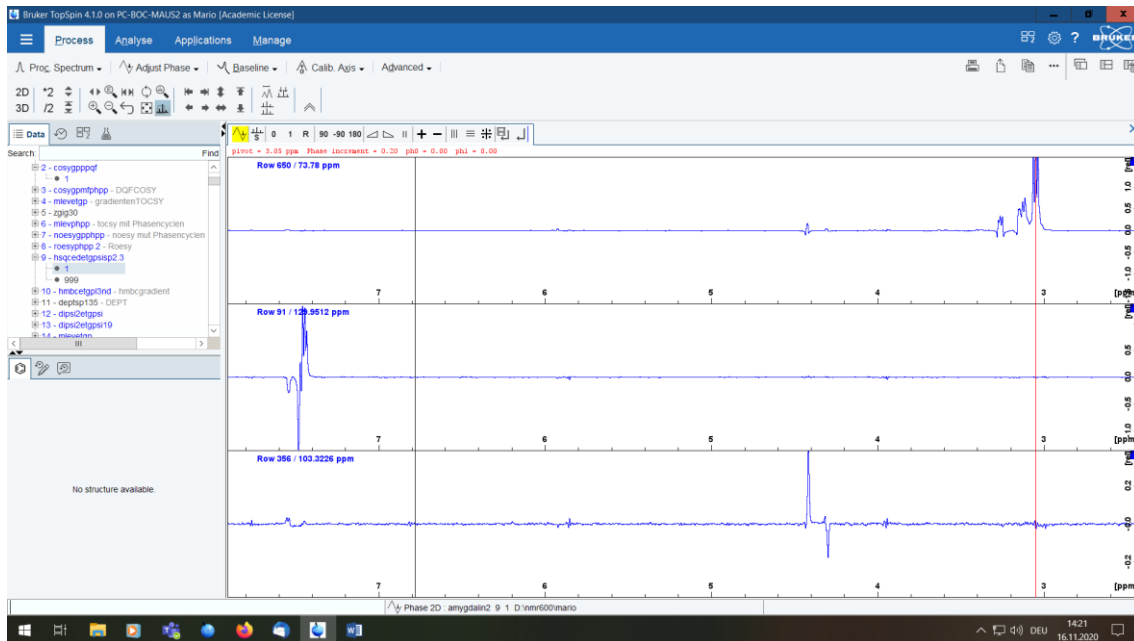


# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0



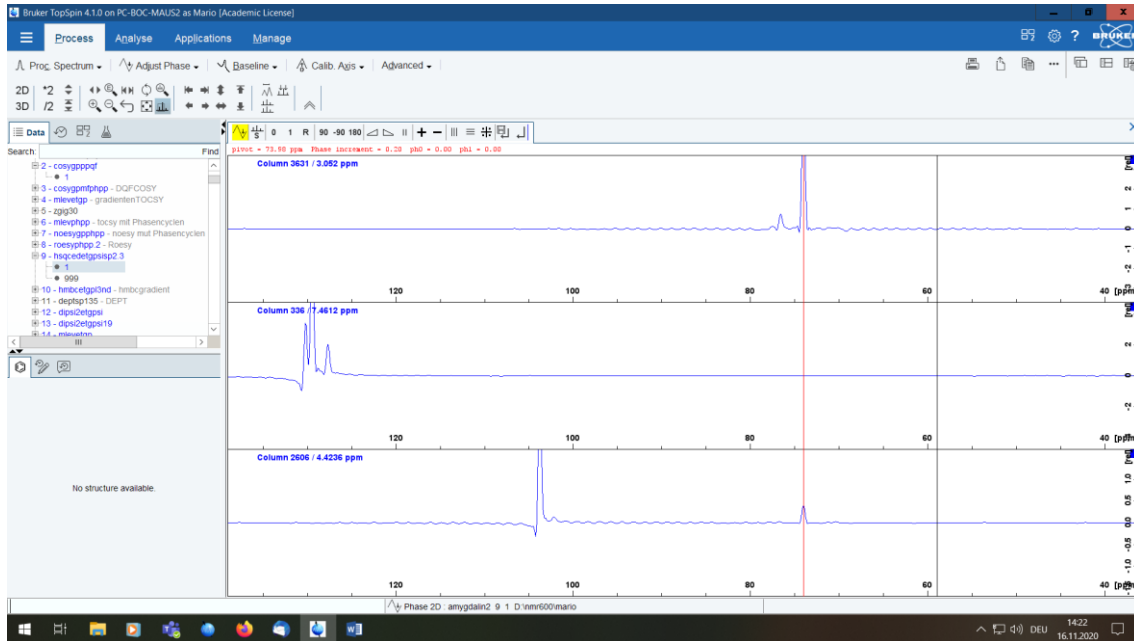
# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

Phasierungsanzeige für „Row“: Phasieren mit „0“ und „1“:



Danach mit Diskettensymbol speichern.

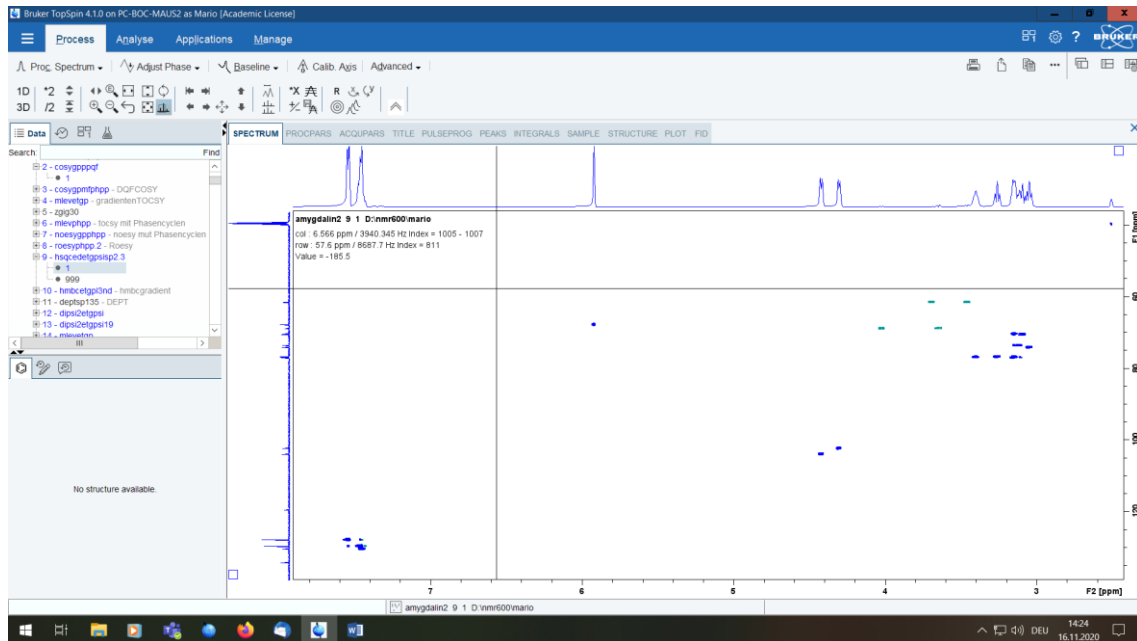
Phasierungsanzeige für Column: Phasieren mit „0“ und „1“.



Danach mit Diskettensymbol speichern.

# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

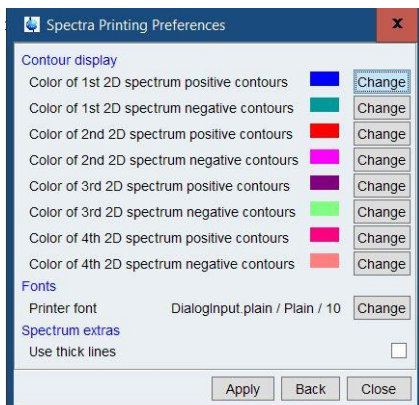
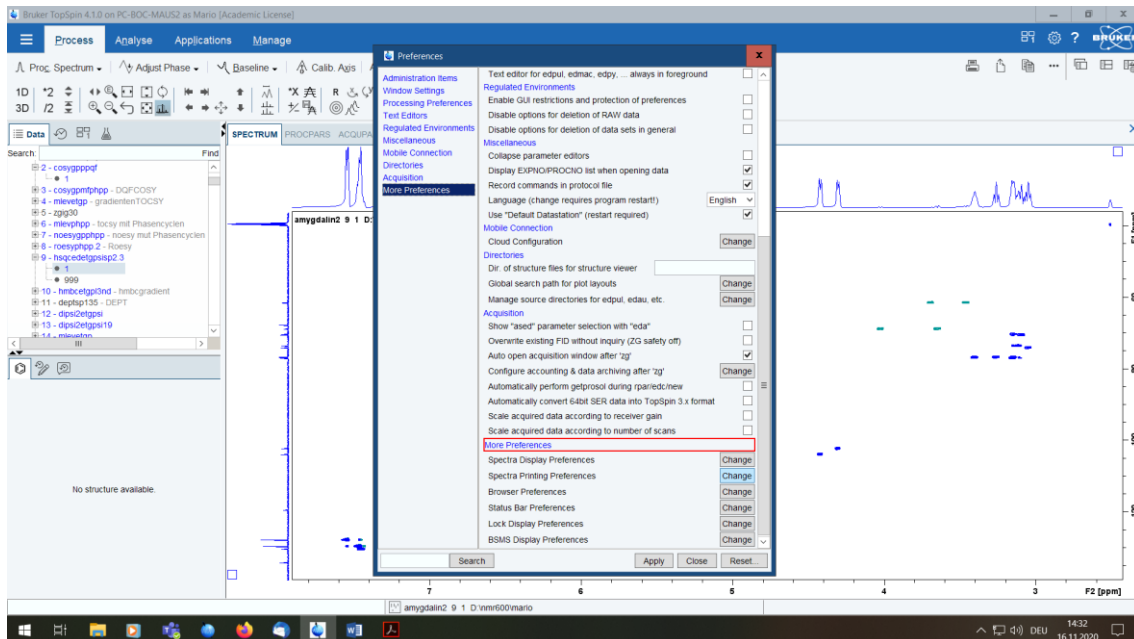
Dann ist die Phasierung abgeschlossen:



# Anleitung zur NMR-Auswertung mit TopSpin 4.1.0

## Drucken / Einbinden in Office-Programme

Über Symbol „Setup Preferences“ (blaue Leiste, 2. von links):



Über das Export-Symbol können auch PDF- oder Grafikdateien (PNG, JPG, TIFF, BMP) erstellt werden.

**Einbinden in Office-Programme:**

Über Kopiersymbol in Menüleiste und die entsprechende Paste-Funktion im Office-Programm.

**Anhang**