Instal·lació de Topspin 2.1

El procés d'instal·lació del Topspin 2.1 ja està descrit amb detall per l'espectròmetre AvanceII+ 600, així doncs, aquestes instruccions seran molt més simples i esquemàtiques.

Preparació de TopSpin 2.1

Copio el contingut del DVD d'instal·lació del Topspin 2.1 al disc dur per tal de fer més ràpida la instal·lació,

```
[sermnadmin@cie-55-32 Topspin-2.1]$ md5sum ts21.iso
80f22b9cd6863054326612ca448c7b25  ts21.iso
```

A continuació, munto el fitxer ISO [1] com a superusuari,

```
# mount -t iso9660 -o loop .TopSpin-3.2.3.iso /mnt/iso/
# df -hl | grep iso
/home/sermnadmin/Downloads/Topspin-2.1/TopSpin-2.1.8.iso
                      2.7G  2.7G     0 100% /mnt/iso
```

Llavors executo el programa `autorun` per iniciar la instal·lació del Tospin, i marco les opcions,

- Install Bruker software including TopSpin 3.2 and CMC-assist 2.0
- Install GPL licensed GNU GCC 4.5.3 compiler (recommended)

que s'instal·laran a */opt/topspin3.2*

Com a *setup type* trio

- *Customized* per triar quins mòduls s'instal·len, i a la pantalla següent trio
  - TOPSPIN
  - ICON-NMR Automation
  - NMR-SIM
  - NMR-GUIDE
  - NMR-Data
  - NMR-GLP
- descarto la instal·lació del gestor de llicències FLEXLM perquè ja es va instal·lar amb el Topspin-3

A la pantalla següent em demana si vull importar la configuració d'un dels espectròmetres disponibles a */opt/topspin3.2* i trio que s'importi la configuració de *spect* definida a la v. 3.2.

Quan em pregunta si vull actualitzar el contingut de la variable global *PATH* a la nova instal·lació de Topspin. Com que per ara es farà servir aquesta versió del Topspin, faig una còpia de seguretat del

fitxer actual (*/etc/profile.d/topspin.sh* i */etc/profiled.d/topspin.csh*) i després trio l'opció d'actualitzar el *PATH*.

Com a *NMR Super User* trio *nmrsu*, que ja es va crear en instal·lar el Topspin-3.2, i llavors entro la constrasenya habitual pel compte d'administrador del Topspin.

Llavors comença la instal·lació dels diferents mòduls i finalitza pocs minuts després sense cap missatge d'error. El fitxer que conté el registre de la instal·lació es pot consultar a */opt/topspin2.1/install.log*.

Configuració del Topspin 2.1

<note important> Comentar breument la configuració del programa un cop connectat a la consola, i afegir alguna captura de pantalla </note>

Aquestes són les tasques realitzades,

- executar `ha` i verificar els mòduls detectats
- `cf` funciona correctament i el fitxer de configuració final (afegir-ho!) coincideix amb el del Topspin 2.1 de l'ordinador vell
- `expinstall`
- `edhead`, `edprosol`, i la resta de comandes no donen cap problema. Cal importar a mà els *parameter sets* i altres fitxers de configuració que no s'hagin transferit.
- `cplbruk all` per compilar tots els programes AU de Bruker.
- `cpluser all` per compilar tots els programes AU de la carpeta *user*.

2016-01-28 - Cortab dels nuclis

Es fa la calibració (Cortab) dels següents nuclis:

- 1H, 2H, 6Li, 7Li, 11B, 13C, 15N, 19F
- 23Na, 27Al, 29Si, 31P, 39K, 67Zn, 71Ga, 77Se, 79Br, 87Rb, 95Mo
- 103Rh, 111Cd, 113Cd, 119Sn, 127I, 195Pt, 199Hg, 207Pb.

[1)]

Instruccions a http://www.tecmint.com/how-to-mount-and-unmount-an-iso-image-in-linux/

From:
https://sermn.uab.cat/wiki/ - **SeRMN Wiki**

Permanent link:
https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_xw4400_400wb_topspin21&rev=1454066460

Last update: **2016/01/29 12:21**