

Avance III 400 MHz SB - Configuració del TopSpin

Aquesta és la llista de tasques de configuració a fer per completar la instal·lació i configuració del TopSpin:

-  edprobe
 - copiar els fitxers de configuració de les sondes i seleccionar la sonda TBI que està muntada
-  expinstall
 - copiar els parameter sets ~/par/user
-  edprosol
 - comprovar si es poden importar els valors de la darrera instal·lació.
-  pulse programs
 - copiar els fitxers de la darrera instal·lació.
-  pulse shapes
 - copiar els fitxers de la darrera instal·lació.
-  **PENDENT** iconnmr
 - importar/copiar els fitxers de la darrera instal·lació.

Edprobe

Les dues sondes disponibles per aquest espectròmetre són,

Nickname	Probe ID	Description
1H+BB+Fluor - ATMA	Z104450 / 0188	PA BBO 400S1 BBF-H-D-05 Z
OLD 1H+BBI (19F-109Ag)	Z8202 / 0003	5 mm BBI-1H/D Z-GRD Z8202/0003
4 mm HRMAS 1H/13C/31P	B3748 / 0321	4 mm HRMAS 1H/13C/31P-2H Z-GRD B3748/0321

La segona (OLD 1H+BBI) és la que està muntada però el TopSpin no la detecta perquè no té PICS. Per configurar-les, copio els fitxers de configuració de l'anterior instal·lació i comprovo que apareixen a edprobe. Llavors selecciono la sonda OLD 1H+BBI com a sonda actual (Set as current), i comprovo i guardo la configuració de les connexions (Edit RF Connections).

Els fitxers de configuració actuals són,

```
# pwd
/opt/topspin3.6.3/conf/instr/probeheads

# ls -l
total 48
-rw-rw-rw-. 1 nmrsu nmrsu 9584 Aug 25 09:53 B3748_0321.par
-rw-rw-rw-. 1 nmrsu nmrsu  15 Mar  2 2020 curprobe
-rw-rw-rw-. 1 nmrsu nmrsu 3061 Mar  2 2020 Z104450_0188.bb
-rw-rw-rw-. 1 nmrsu nmrsu 9854 Aug 25 09:51 Z104450_0188.par
-rw-rw-rw-. 1 nmrsu nmrsu 1314 Mar  2 2020 Z104450_0188.ph
```

```
-rw-rw-rw-. 1 nmrsu nmrsu 9585 Aug 25 09:56 Z8202_0003.par
```

Expinstall

Executo la comanda `expinstall` per copiar i configurar els *parameter sets* a les especificacions de l'espectròmetre. Les opcions triades són:

- Select the type of acquisition: High Resolution Systems
- Available spectrometer or datastation configurations
 - Select the configuration you want to use: spect
- Select the items you want to install
 - Install Pulse Programs
 - Install Bruker AU Programs
 - [unchecked] ~~Recompile All User AU Programs~~
 - Install Library CPD Programs
 - Install Library Gradient Files
 - Install Library Shape Files
 - Convert Standard Parameter Sets
 - Install Standard Scaling Region Files
 - Install Bruker Python Programs
- Select the basic frequency of your spectrometer
 - Basic Frequency: 400.13
- Select the pre-scan delay DE
 - Default pre-scan-delay (us): 6.5
- Select the plotter paper format
 - Paper format: A4 / Letter

Còpies de seguretat automàtiques

Fixers de configuració del TopSpin

Configuro i activo l'opció de crear còpies de seguretat automàtiques de la configuració del TopSpin amb les següents opcions:

- SAVE INSTALLATION FILES
 - Location of backup file: /opt/topspin3.6.3/nmr_backup * Installation to be saved (TopSpin home): /opt/topspin3.6.3
 - Spectrometer configuration (e.g. spect): spect
 - Display default informaiton: checked
 - Display additional informaiton: unchecked
- Execute "Save installation specific files" periodically: [Automatic Backup]

Deixo les opcions per defecte i es crea el cron-job que periòdicament farà una còpia dels fitxers de configuració.

Quan surto es compila el programa AU nmr-save i es crea la primera còpia de seguretat.

El contingut de les còpies de seguretat es pot veure al fitxer de registre

```
retrieving path to diskless (may take some time)...
found /usr/diskless
prepare backup: Copy /usr/diskless/prog/logfiles to
/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/tmp_backup_dir/logfiles
extract and backup /opt/topspin3.6.3/conf/instr/servtool/bsmstool/boss/
=>
extract and backup /opt/topspin3.6.3/conf/instr/servtool/bsmstool/boss/wb/
now extracting from dir
/opt/topspin3.6.3/conf/instr/servtool/bsmstool/boss/wb/...
[...].
Every file of the following directories will be saved:

/opt/topspin3.6.3/QTP/
/opt/topspin3.6.3/conf/global/
/opt/topspin3.6.3/conf/instr/...
[...]
/opt/topspin3.6.3/db/user/
/opt/topspin3.6.3/data/final/nmr/protocolfiles/

Additionally the following files will be saved (if existing):

/opt/topspin3.6.3/conf/instr/spect/uxnmr.par
/opt/topspin3.6.3/conf/instr/spect/uxnmr.info
[...]
/opt/topspin3.6.3/prog/server/export.conf

-----

start to generate back-up copy...

Now writing zip file
/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/completeDirectories.zip1...
[...]
Backing up of NMR data was successful!
The backup file

/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/nmr_backup_20210824-1726.zip

has been generated!

#####
```

Fixers dels usuaris



Configuro l'opció de crear còpies de seguretat automàtiques de la configuració del TopSpin amb les següents opcions:

- SAVE USER FILES
 - Location of backup file: /opt/topspin3.6.3/nmr_backup
 - Overwrite existing backup file unchecked
 - Display default information: checked
 - Display additional information: unchecked
- Execute Save user files periodically:

premo el botó **[Automatic Backup]** i s'obre una nova finestra amb els paràmetres de la tasca automàtica. Deixo les opcions per defecte i es crea el cron-job que periòdicament farà una còpia dels fitxers de configuració.

Quan surto es compila el programa AU nmr-save i es crea la primera còpia de seguretat.

El contingut de les còpies de seguretat es pot veure al fitxer de registre

```
retrieving path to diskless (may take some time)...  
found /usr/diskless
```

```
Every non-Bruker file in /home/sermnadmin/.topspin-cie-56-18.uab.cat/ will  
be saved:
```

```
Every non-Bruker file in /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/au/src/ will be  
saved:
```

```
now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/au/src/...
```

```
Now writing zip file  
/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/extractedDirectories.zip1...
```

```
Every non-Bruker file in /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/base_info/  
will be saved:
```

```
now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/base_info/...
```

```
[...]
```

```
Every non-Bruker file in /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/vd/ will be  
saved:
```

```
now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/vd/...
```

```
Every non-Bruker file in /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/vp/ will be  
saved:
```

```
now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/vp/...
```

Every non-Bruker file in /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/vt/ will be saved:

now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/vt/...

Every non-Bruker file in /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/wave/ will be saved:

now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/wave/...

Now writing zip file

/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/extractedDirectories.zip7...

Every non-Bruker file in /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/par/ will be saved:

now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/par/...

Now writing zip file

/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/extractedDirectories.zip8...

Every non-Bruker file in /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/py/ will be saved:

now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/py/...

Now writing zip file

/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/extractedDirectories.zip9...

Now writing zip file

/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/nmr_backup_sermnadmin_20210812-1137.zip...

#####

Backing up of NMR data was successful!

The backup file

/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/nmr_backup_sermnadmin_20210812-1137.zip

has been generated!

#####

Còpia dels fitxers a les carpetes "exp/stan/nmr/*/user/"

Copio els fitxers que hi ha a les carpetes exp/stan/nmr/*/user/ de les dues darreres instal·lacions del TopSpin, la 3.5 perquè és la que més s'ha fet servir, i la 3.6 instal·lada al maig per si hi hagués

algun fitxer nou.

exp/stan/nmr/au/src/user

- Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.6.1
- **PENDENT** Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.5pl6

exp/stan/nmr/par/user

- Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.6.1
- **PENDENT** Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.5pl6

exp/stan/nmr/py/user/

- Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.6.1
- **PENDENT** Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.5pl6

exp/stan/nmr/lists/ (multiples carpetes)

- Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.6.1
- **PENDENT** Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.5pl6

Finestra de la BSMS Tool

Obro la finestra de la BSMS Tool sense problemes, la configuro perquè es mostri com finestra externa

- Config / External checked

i la moc a la seva ubicació final al monitor secundari. Llavors mesuro el nivell d'heli actual i comprovo que la BSMS Tool funciona.

Finestra del senyal de lock

Obro la finestra "LOCK Signal Display" sense problemes. Ja està configurada com finestra externa, o sigui que només l'he de moure a la seva ubicació al monitor secundari.

Lectura del fitxer de shims

Executo la comanda rsh per carregar un dels fitxers de shims més actuals. s'obre la finestra per seleccionar el fitxer a carregar, trio un i el TopSpin el llegeix sense problemes.

PENDENT: Configuració de l'IconNMR



Documentar la configuració de l'IconNMR.

PENDENT: Instal·lació del gestor de llicències CodeMeter



Instal·lar el CodeMeter i preguntar a Bruker quin cost tindria aconseguir una llicència per l'espectròmetre.

From:

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

Permanent link:

https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z230_400sb_topspin363_2&rev=1629880499

Last update: **2021/08/25 10:34**

