

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

Configuració dels paràmetres del client i sistema



Comprovar i/o completar les dades

Un cop completada la configuració del TopSpin amb la comanda `cf`, a la finestra de *Additional Setups - Important* executo la comanda `Edcst m` per entrar la informació sobre el sistema i el client:

Customer Info	
Customer Name *	Servei de Resonància Magnètica Nuclear
Operator Name	—
Company *	Universitat Autònoma de Barcelona
Address	Edifici C, Campus de Bellaterra s/n
Postal Code	08193
City *	Cerdanyola del Vallès
Country *	Catalunya (Spain)
Phone Contact Customer *	+34 93 581 2291
Mobile	—
Fax	—
E-Mail *	s.rmn@uab.cat

Bruker Info	
Engineer *	Òscar Benítez
Office *	Bruker Española, S.A.
Central Hotline Phone *	+34 686 944 920
Central Hotline E-Mail *	oscar.benitez@bruker.com
System Info	
Order No. *	
Contract Service No	—
System Type	Avance III 400 MHz SB - SeRMN, UAB
Console Part and Serial No	
Coil	BZH 161 40 70B
Dewar	D 105 52 1275
Shim System Offset *	
Shim System Angle	—
CryoProbe Order No.	—
Location	Servei de Ressonància Magnètica Nuclear
Register No.	

* Required Fields

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.

TopShim





Quan provo d'executar la comanda topshim dona un error perquè els pulsos de 2H no estan definits al PROSOL.

Unitat de temperatura (VTU)

Provo d'obrir amb la comanda edte la finestra de control de la Unitat de temperatura (VUT) i em dona un error,

```
Command table does not exist
cmdtab_edte.prop
```

i la finestra que s'obre no conté res. Comprovo que hi ha un fitxer amb aquest nom

```
# ls -l /opt/topspin3.6.3/classes/prop/cmdtab_edte.prop
-rw-rw-rw-. 1 nmrsu nmrsu 2427 Jan  4  2021
/opt/topspin3.6.3/classes/prop/cmdtab_edte.prop
```

Comprovo els permisos dels fitxers a /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/eurotherm i trobo que el fitxer EdteLogSettings.txt té permisos incorrectes,

```
# ls -ld /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/eurotherm/
drwxrwxrwx. 7 nmrsu nmrsu 95 Aug 25 11:08
/opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/eurotherm/

# ls -l /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/eurotherm/
total 4
drwxrwxrwx. 2 nmrsu nmrsu  44 Jun  7  2019 config
drwxrwxrwx. 2 nmrsu nmrsu   6 Aug 23 13:47 corr
-rw-rw-rw-. 1 1003 1003 345 Aug 21  2019 EdteLogSettings.txt
drwxrwxrwx. 2 nmrsu nmrsu   6 Aug 23 13:47 hex
drwxrwxrwx. 2 nmrsu nmrsu   6 Aug 23 13:47 record
drwxrwxrwx. 2 nmrsu nmrsu   6 Aug 23 13:47 tcf
```

El corregeixo, però això no resol el problema,

```
# chown nmrsu:nmrsu
/opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/eurotherm/EdteLogSettings.txt

# ls -l /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/eurotherm/EdteLogSettings.txt
-rw-rw-rw-. 1 nmrsu nmrsu 345 Aug 21  2019
/opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/eurotherm/EdteLogSettings.txt
```


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=1629889048

Last update: **2021/08/25 12:57**

