

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
- ! prosol
 - 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.
- ! Variable Temperature Unit (VTU) & EdTE
 - la comanda edte dona un error i la finestra de control de la VTU s'obre però no conté res.
- ! topshim
 - no es pot executar fins que es defineixin els pulsos de 2H al PROSOL

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 seleccio 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'espectòmetre. 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 information: checked
 - Display additional information: 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 surt 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 Edcstm per entrar la informació sobre el sistema i el client:

Customer Info	
Customer Name *	Servei de Ressonància 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 nmrssu nmrssu 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 nmrssu nmrssu 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 nmrssu nmrssu 44 Jun 7 2019 config  
drwxrwxrwx. 2 nmrssu nmrssu 6 Aug 23 13:47 corr  
-rw-rw-rw-. 1 1003 1003 345 Aug 21 2019 EdteLogSettings.txt  
drwxrwxrwx. 2 nmrssu nmrssu 6 Aug 23 13:47 hex  
drwxrwxrwx. 2 nmrssu nmrssu 6 Aug 23 13:47 record  
drwxrwxrwx. 2 nmrssu nmrssu 6 Aug 23 13:47 tcf
```

El corregeixo, però això no resol el problema,

```
# chown nmrssu:nmrssu  
/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 nmrssu nmrssu 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=1629896336

Last update: **2021/08/25 14:58**

