

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
 - copiar 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.
 - **Aquest error es resol instal·lant la versió 3.6.4 del TopSpin.**
-  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 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-54-214.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...  
  
[...]  
  
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_20210826-1027.zip  
  
has been generated!
```

```
#####
```

Còpia dels fitxers de PROSOL

Copio els fitxers que hi ha a la carpeta `~topspin/conf/instr/spect/prosol` de la darrera instal·lació del TopSpin, la 3.6.1.

Còpia dels fitxers a les carpetes

"~topspin/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 3.6.1 instal·lada al maig perquè és la més recent, i la 3.5 per si de cas conté algun fitxer que no es va importar a la 3.6.1.

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`

Compilació dels programes AU

Executo les comandes `cplbruk all` per compilar els programes AU de Bruker, i `cpluser all` per compilar els de la carpeta `user`. També es pot fer servir la comanda `compileall` per compilar-los tots alhora.

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 `Edcstn` 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. *	Instal·lat al 1993
Contract Service No	—
System Type	Avance III 400 MHz SB - SeRMN, UAB
Console Part and Serial No	H03128OB / Var 0.00 & 0122 / ECL 01
Coil	BZH 161 40 70B
Dewar	D 105 52 1275
Shim System Offset *	769 mm from magnet top / 768 mm
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.

PROBLEMA - 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
(Original message = Command table does not exist
cmdtab_edte.prop)

=====
25 August 2021 15:13:17.353 +0200
Topspin Version = TopSpin 3.6.3 (of 2021-01-04 15:18:28), build 311
OS Name         = Linux 3.10.0-1160.25.1.el7.x86_64
JVM Version      = 1.8.0_202 (32 bit) Oracle Corporation
JVM Total memory = 235 MB
JVM Free  memory = 155 MB

Command table does not exist
```

```
cmdtab_edte.prop
java.lang.reflect.InvocationTargetException
    at sun.reflect.NativeMethodAccessorImpl.invoke0(Native Method)
    at
sun.reflect.NativeMethodAccessorImpl.invoke(NativeMethodAccessorImpl.java:62)
    at
sun.reflect.DelegatingMethodAccessorImpl.invoke(DelegatingMethodAccessorImpl.java:43)
    at java.lang.reflect.Method.invoke(Method.java:498)
    at
de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.executeMethod(CmdThreadImpl.java:652)
    at
de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.doJmethod(CmdThreadImpl.java:565)
    at de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.exec(CmdThreadImpl.java:514)
    at de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.run(CmdThreadImpl.java:494)
Caused by: de.bruker.nmr.mfw.base.CommandTableDoesNotExistsException:
Command table does not exist
cmdtab_edte.prop
    at de.bruker.nmr.mfw.base.Comint.<init>(Comint.java:91)
    at de.bruker.nmr.sc.vtu.ContPanel.<init>(ContPanel.java:81)
    at de.bruker.nmr.sc.vtu.Starter.createApplFrame(Starter.java:176)
    ... 8 more
```

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
```

Aquest error es resol instal·lant la versió 3.6.4 del TopSpin



4.1 Bug Fixes in TopSpin

- SKB-230: Fixed an error in edte stating that BVT units were not supported

TopSpin. Release Letter 3.6.4- User Manual Version 003. July 19, 2021.

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=1629971296

Last update: 2021/08/26 11:48

