

Avance III 600 MHz - Instal·lació del Topspin

3.6.3

Instal·lo el TopSpin 3.6.3 a partir del fitxer d'instal·lació descarregat al maig i que es va fer servir per instal·lar el programa a l'antic disc dur.

```
$ sh ./topspin-3.6.3-linux.sh
Verifying archive integrity... All good.
Uncompressing TopSpin 3.6.3 100%
NOTE: using DISPLAY=:0.0
Please enter root password if prompted for it.
Password: *****
NOTE: using DISPLAY=:0.0
NOTE: using TCL_LIBRARY=/tmp/selfgz158608332/linux/tcl-8.6.9/lib/tcl8.6
NOTE: using TK_LIBRARY=/tmp/selfgz158608332/linux/tk-8.6.9/lib/tk8.6
NOTE: running /tmp/selfgz158608332/linux/tk-8.6.9/bin/wish8.6 -f
/tmp/selfgz158608332/xwinstall.d/swim/lib/xwinstall.tcl --
NOTE: using log file: /tmp/install.log
```

S'obre la finestra on es mostra el progrés de la instal·lació, i la finestra inicial de la instal·lació, on premo el botó **Next** per començar a instal·lar el TopSpin.

Selecciono que s'instal·lin tots els components,

- Install Bruker NMR Software
- Install GPL licensed GNU GCC 4.9.1 compiler (recommended)

i el directori on s'instal·larà el programa és,

- /opt/topspin3.6.3

Llavors trio que s'instal·li la versió completa del programa,

- Data processing, acquisition and automation
Installs Data Processing, Acquisition and Automation Components for Spectroscopy

i que la carpeta del TopSpin s'afegeixi al *global PATH*.

Al pas següent accepto que nmrsu sigui el *NMR Super User*, i que es crei el compte d'usuari (la contrasenya del compte és l'habitual). Després em demana la contrasenya per *NMR Administration* i assigno l'habitual.

Accepto les altres carpetes d'instal·lació proposades pel programa d'instal·lació,

- MICS: /opt/Bruker/MICS
- NMR-Data: /opt/topspin3.6.3/examdata



Caldrà comprovar aquests instruccions i completar-les si cal.

Configuració de l'espectròmetre

Al final de la instal·lació s'obre una finestra on posa que cal executar `cf` i després `expinstall` per completar la instal·lació.

Executo `cf`, trio crear un nou espectròmetre, i aprofito l'opció d'importar una configuració anterior per importar el fitxer creat a la instal·lació de maig (carpeta `/mnt/old-opt/topspin3.6.3/conf/instr/spect`). però quan provo a editar, em dona un error perquè no es pot connectar a la DRU ja que la xarxa de l'espectròmetre està caiguda.

Crec que la millor solució serà reiniciar l'ordinador i que configuri la xarxa correctament.

Després de reiniciar-ho el problema amb la xarxa externa persisteix, però la xarxa de l'espectròmetre està configurada. Tanmateix, quan engego el TopSpin no detecta l'IPSO, de forma que el reinici, i poc després ja el detecta i el TopSpin es posa en marxa.

Executo `cf` i trio la configuració d'espectròmetre importada **Avance III 600 (configured in spect)**, la carrega i vaig passant pàgines alhora que comprovo que no surti cap missatge d'error.

- Spectrometer Description
 - Description: Avance III 600 @SeRMN
- Spectrometer Data
 - 1H Spectrometer frequency: 600.130 MHz
- Security Options
 - Enable power check: option not checked
- Optional Standard Devices
 - Bruker Automatic Changer (BACS) connected to: tty01
 - Variable Temperature Unit connected to: 149.236.99.20
- Options for the Sample Changer
 - Sample lift controlled by: Sample Changer
 - Delay between insert of sample and next command: 10 s
 - Start experiment while sample changer in motion: option not checked

Es mostra un error perquè no detecta els amplificadors. Caldrà reiniciar-los i tornar a repetir `cf`. Per altra banda, com que el SampleCase està aturat, també surt el missatge d'error

BSMS Error:

SampleTransporter: Emergency button pressed.

malauradament per ara no el puc posar en marxa.

Després de reiniciar els amplificadors, aconsegueixo completar `cf` sense errors i el contingut del fitxer `uxnmr.info` és semblant al de la instal·lació feta al maig.

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

Permanent link:
https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z400_600_topspin363_1&rev=1629368679

Last update: **2021/08/19 12:24**

