







Avance III 600 MHz - Configuració del TopSpin

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

-  edprobe
 - comprovar quina sonda s'ha reconegut, i copiar els fitxers de la sonda que no 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,

- TXI - PH TXI 600S3 H-C/N-D-05 Z BTO - Z8558 / 0038,
- TBI - PH TBI 600S3 H/C-BB-D-05 Z BTO - Z8618 / 0019

La primera (TXI) és la que està muntada i el TopSpin la detecta via PICS. Per configurar la segona sonda (TBI) copio els fitxers de configuració i comprovo que ja apareix a edprobe.

Els fitxers de configuració actuals són,

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

$ ls -l
total 32
-rw-rw-rw-. 1 sermnadmin sermnadmin 10111 Aug 19 14:02 Z8558_0038.par
-rw-rw-rw-. 1 sermnadmin sermnadmin 726 Aug 13 09:47 Z8558_0038.ph
-rw-rw-rw-. 1 sermnadmin sermnadmin 9719 Aug 12 11:42 Z8618_0019.par
-rw-rw-rw-. 1 sermnadmin sermnadmin 1153 Jul 1 2020 Z8618_0019.ph
```

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: 600.13
- 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 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 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/...

<=
=>
extract and backup
/opt/topspin3.6.3/conf/instr/servtool/bsmstool/boss/boss3_sb/
now extracting from dir
/opt/topspin3.6.3/conf/instr/servtool/bsmstool/boss/boss3_sb/...

<=
now extracting from dir
/opt/topspin3.6.3/conf/instr/servtool/bsmstool/boss/...

extract and backup /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/py/
=>
extract and backup /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/py/biotop/
=>
extract and backup /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/py/biotop/experiments/
[...]...
now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/plot/layouts/layouts.stack/...
now extracting from dir /opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/scl/...

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

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/exp/stan/nmr/lists/ ...
[...]
/opt/topspin3.6.3/db/quantref/
/opt/topspin3.6.3/classes/prop/ ...
[...]
/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/conf/instr/spect/hardware_list
/opt/topspin3.6.3/classes/prop/ ...
[...]
```

```
/opt/topspin3.6.3/conf/instr/ ...
[...]
/opt/topspin3.6.3/conf/topspin-users.prop
/opt/topspin3.6.3/exp/stan/nmr/lists/probeheads
/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...

Now writing zip file
/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/completeDirectories.zip2...

Now writing zip file
/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/nmr_backup_20210812-1054.zip...

#####

Backing up of NMR data was successful!
The backup file

/opt/topspin3.6.3/nmr_backup/nmr_backup_20210812-1054.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/user

- Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.5pl6
- **PENDENT** Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.6

exp/stan/nmr/par/user

- Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.5pl6
- **PENDENT** Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.6

exp/stan/nmr/py/user/

- Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.5pl6
- **PENDENT** Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.6

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

- Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.5pl6
- **PENDENT** Copio els fitxers de /mnt/old-opt/topspin/3.6

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 del MICS



- Configurar el MICS perquè s'executi automàticament cada cop que s'obre una sessió (login).
- Descarregar-se el fitxer BIS de l'imant o generar-lo si no existeix.
 - [MICS Support & Upgrades | Bruker](#) (cal login).

Les dades de l'imant són:

```
$ cat /opt/topspin3.6.3/conf/instr/spect/uxnmr.par
...
##$ConsolePnSn= <P/N H031280B - S/N 0082>
```

```
---  
##$MagnCoilPnSn= <BZH 286/600/70D>  
##$MagnDewarPnSn= <D 262/54-5051>  
...  
##$OrderNo= <PH000806>
```

però quan les entro al formulari per descarregar-me el fitxer BIS, em surt el missatge “BIS file for magnet no 286 / cryostat 5051 not found”, de forma que l'hauré de crear manualment.

Obro la pàgina ([Manually create BIS File \(old systems\)](#)), trio l'opció BZH system (4K only), i entro el número de l'imant (286) i del criostat (5051). Llavors apareix un avís en pantalla,

BIS file for magnet no 286 / cryostat 5051

Note:

manually creating a BIS file should be done for OLD systems only (e.g. no BIS available for download).

Do not attempt to use this function for systems with active cooling and/or liquefaction technology!

com que no se'ns aplica, premo el botó i a la pantalla següent es mostren els paràmetres de l'imant i del criostat. Comprovo que coincideixen amb els de la documentació impresa, i premo el botó .

Magnet	
Magnet BZH Number	286
Frequency	600 MHz
Cryobore	70 mm
Design Letter	D
Design Version	3
Cryostat	
Cryostat Serial	5051
Dewar Type	D262
RT Bore	54 mm
Helium	
He Total Volume	159 L
He Holdtime	130 days
He Boil-Off	40 mL/h
Nitrogen	
N2 Total Volume	172 L
N2 Holdtime	17 days
N2 Boil-Off	400 mL/h
N2 Vessel Height	1020 mm
Helium Sensor	
Part Number	HZ10362/ / 00
Min. Allowed Level	46 %
Min. Level Energizing	76%

Magnet	
Active Length	700 mm
He level graph	
Point1 Level	0 %
Point1 Volume	10 L
Point1 Level	37 %
Point1 Volume	20 L
Point1 Level	100 %
Point1 Volume	144 L
Helium Sensor (if present)	
Part Number	n.a
Min. Allowed Level	%
Active Length	mm

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_z400_600_topspin363_2&rev=1630316978

Last update: 2021/08/30 11:49

