# 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
  - $\circ\,$  comprover 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 copnfigurations
  - 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 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/...
<=
=>
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/ ...
[...]
```

2025/08/28 00:37

3/10

```
/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

5/10 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:

### 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**

Comprovo que MICS ha creat els fitxers mics.sh i mics.csh dins /etc/profile.d per tal que el programa s'executi automàticament cada cop que un usuari obri una sessió.

Caldrà afegir/completar les següents dades:



- cryoshims actuals
- cryoshims anterior
- registre de lectures anteriors de LHE
- registre de recàrregues de LHE
- registre de recàrregues de LIN

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 <u>Continue</u> 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 <u>Continue</u>.

Llavors s'obre un nou formulari amb un avís,

BIS Parameter Definition

This form must be used for NMR magnets only.

```
Please do this very carefully.
Parameters should be entered based on magnet manual and type label. Entering wrong data might result in erroneous indications and/or false alarms in system monitoring.
```

Després de llegir l'avís, empleno el formulari amb les dades tècniques que manquen,

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%	
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	
Nitrogen Sensor (if present)		
Part Number	n.a	
Min. Allowed Level	%	
Active Length	mm	

i premo el botó <u>Continue</u> per continuar. L'aplicació, després de comprovar les dades entrades, indica que són correctes i que ja es pot generar el fitxer BIS ("all fields are valid. Please check again before creating the BIS file").

Premo el botó Create BIS i es genera i em descarrego el fitxer 286\_5051.dat que hauré d'importar al MICS.

Instal·lo i configuro la darrera versió del MICS (2.09i, juny de 2021), i importo el fitxer BIS de l'imant. Quan finalitza la instal·lació, el programa conté la major part de les dades de l'imant.

### **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=1630330991

Last update: 2021/08/30 15:43

