

ACD-NMR-Processor / Kurzanleitung

1D-Spektren

1. Datei laden: Im Verzeichnis fid-Datei (oder JCAMP.dx) öffnen
2. Interactive FT „Shortcut“ öffnen
3. unter „Initial – Final“ bei Final die Punktezahl auf > 16k erhöhen
4. Bei „Window Function“ auf User schalten
em mit lb=1-2 für z.B. 13 C (verbessert das S/R auf Kosten der Auflösung)
Sg.Sin mit lb=0.3 und Tm=2-3 für z.B. 1 H (verbessert die Aufl. auf Kosten des S/R)
5. Phasenkorrektur zunächst mit „Auto Simple“
falls notwendig zusätzlich mit „Mouse Phasing“ mit linker und rechter Maustaste
6. Basislinienkorrektur mit Auto „BL Opt.“
7. Weiter mit optional „Baseline“ und/oder „Peak Picking“
8. „Integration“ und „Reference“

Wichtige „Shortcuts“: rechte Maustaste für „zoom“, ESC für das Gesamtspektrum, Mausrad für Intensitäten.

2D-Spektren

1. Datei laden: Im Hauptverzeichnis ser-Datei öffnen ► Rohdaten werden angezeigt
2. Full FT „Shortcut“ öffnen
hier können Transformationsparameter geändert werden – im Normalfall sind keine Änderungen notwendig!
3. Über das Menü View/Spectrum Parameters lässt sich die Art des Experimentes und damit das Pulsprogramm der Messung erkennen (z.B. COSY, HSQC.....)
4. Bei phasensensitiven Experimenten (COSY-DQF, HSQC, NOESY) ► über das Menü Process/Phase Correction/Auto die 2D-Phase optimieren
Bei Experimenten mit Magnitudenkalkulation (COSY, HMBC) ist das nicht notwendig
5. Shortcut Reference öffnen und das Spektrum in beiden Achsen kalibrieren.
Die Daten sind den 1D-Spektren zu entnehmen – hier wählt man geeignete Signale aus, bestimmt deren Verschiebung und kalibriert dann das 2D-Spektrum.

Auch hier gelten die gleichen Shortcuts wie rechte Maustaste für „zoom“, ESC für das Gesamtspektrum, Mausrad für Intensitäten.