

Úvodní poznámky: příkazový řádek  
úkon  
ikonka v menu

## 1. Vložit vzorek do stroje:

e nebo eject pustit vzduch (bez puštění vzduchu **NIKDY** nevkládat vzorek do stroje!!)  
i nebo insert vypnout vzduch (vsune vzorek do sondy)

## 2. Ladění

jexp1

natáhnout parametry pro ladění: gradshimm  
přepnout se do start: shim a natáhnout shimmy shims OK do tabulky

start: standard: vybrat rozpouštědlo  
najít lock find z0

lock zkontrolovat zapnutí locku lock on mělo by být automaticky nastaveno  
nastavit hodnotu power a gain dle rozpouštědla (v tabulce jsou orientační hodnoty)  
nutno hodnoty případně upravit tak, aby hodnota lock levelu byla cca 20-25 po  
roztočení vzorku

rozpouštědlo	CDCl <sub>3</sub>	CD <sub>3</sub> OD	benzen	D <sub>2</sub> O	DMSO	
power	32	20	20	20	20	
gain	40	40	40	40	40	

acquire: defaults – nastavit hodnoty relaxačního času a počtu scanů

	CDCl <sub>3</sub>	CD <sub>3</sub> OD	benzen	D <sub>2</sub> O	DMSO	
relax delay	3	3	3	3	3	
number of scans	8	2	2	2	2	

gradient shim: gradient autoshim on Z spustit ladění

Provádí se pět iterací. Když proběhne pátá, je třeba zkontrolovat, zda je vzorek naladěn nebo je třeba pokračovat v ladění. Hodnota chyby by měla být menší než 1. Kontrola v process: text output.

## 3. Měření vodíků

jexp2

natáhnout parametry pro protonový experiment

start: standard: vybrat rozpouštědlo

lock – upravit hodnoty power a gain

acquire: pustit experiment: acquire či go, po chvíli by se měl vzorek roztočit. Sledovat tři ikonky v levé dolní části obrazovky, teplota, spin a hodnota locku. Všechny by během experimentu měly být tyrkysově modré. (teplota = 25 °C (není-li nastaveno uživatelem jinak), spin = 20, lock = cca 20-25).

## Zpracování vodíkového spektra:

Pojmenovat vzorek `text('název vzorku')` nebo ve `start`: `standard`: do `comment` napsat název vzorku.

`wft` – zobrazí spektrum

`aph` – automatické zřazování spektra, pokud rozřazované, kliknou na menu řazování v pravé části obrazovky a ručně dofázovat

`rfr` – reference na signál rozpouštědla (kurzor nastavit přibližně na střed signálu, na který referujeme)

`nl rl(posun signálu p)` (např. `nl rl(77.00p)`) – reference na signál (kurzor nastavit přibližně na střed signálu, na který referujeme)

`dpr` – zobrazí posuny píků podle nastaveného `threshold`

`f` – zobrazí celé spektrum

`aa` – stopnutí experimentu

`vsadj` – nejvyšší signál zobrazí ideálně na výšku na obrazovce

## Integrace spektra:

- `vp=12` pod spektrem udělá místo pro výpis integračních hodnot

- kliknout na kolonku s integrálem, rozbílí se podnabídka a **zobrazí se integrační čára**

- `cz` příkaz na **spojitost integrační křivky**

- kliknout na poslední integrační kolonku – zřazování - **zřazovat integrační čáru** (*lze i po rozstříhání na jednotlivé integrály*)

- **rozstříhat integrační čáru na jednotlivé integrály** po kliknutí na integrační kolonku s nůžkami a stříhat levým tlačítkem myši

- `dpirn` – zobrazí hodnoty integrálů

- `ins=ins/původní hodnota*nová hodnota integrálu` – přepočítá hodnoty integrálů podle známé hodnoty

- `ds` zobrazí spektrum bez integračních hodnot

- `dpirn` – zobrazí nové hodnoty integrálů

*Ostatní úpravy spektra pomocí ikonky z menu v pravé části obrazovky.*

Ostatní užitečné příkazy:

`dc` na srovnání base line

`cdc` na srovnání base line

## Vytištění spektra:

`print` zodpovědět následující otázky a následně se vytiskne spektrum

nebo:

`process`: `plot`: 1.stránka: `plot spectrum`  
`plot spectrum scale`  
`parameters full`  
`plot integral`  
`integral value`  
`manual plot`

lze: `pap pl ppf pírn pscale page`

rozpisy: plot spectrum  
plot spectrum scale  
plot text  
manual plot  
lze: pl ppf pscale pltext page

**Uložit svá naměřená data.** Do adresáře .....

### **Vysvětlivky k obrázkovému menu v pravé části obrazovky:**

- 1.- vyznačení oblasti spektra, levý a pravý kurzor myši
- 2.- zobrazí celé spektrum
- 3.- **reset to full spectrum**
- 4.- zvětšení části spektra na celou obrazovku
- 5.- zpět na celé spektrum
- 6.- nastavení výšky píku
- 7.- integrály, rozbalí se podnabídka 8. a 9.
- 8.- rozstříhání integrálů k jednotlivým píkům
- 9.- zřazování integrálů
- 10.- stupnice spektra
- 11.- nastavení treshold (u protnutých signálů se zobrazí po dpf posun)
- 12.- zřazování spektra
- 13.- refresh
- 14.- zpět na nabídku mezi spektrem a fidem

### **4. Měření uhlíků.**

jexp3

**natáhnout parametry** pro uhlíkový experiment

**start:** standard: vybrat **rozpouštědlo**

**lock** – upravit hodnoty **power a gain**

**pustit experiment go** nebo **acquire**

### **Zpracování spektra:**

**text('název vzorku')** nebo ve **start:** **standard:** do **comment** napsat název vzorku

**wft** – zobrazí spektrum

**aph** – automatické zřazování spektra

**rfr** – zreferencování spektra na signál rozpouštědla

**nastavit treshhold**

### **Vytištění spektra:**

**print** zodpovědět následující otázky a následně se vytiskne spektrum

nebo:

**process:** **plot:** 1.stránka: plot spectrum  
plot spectrum scale  
parameters full  
manual plot

nebo: `pap pl ppf pscale page`  
rozpisy: `plot spectrum`  
`plot spectrum scale`  
`plot text`  
`manual plot`  
nebo: `pl ppf pscale page chybi mi text`

Vyndat vzorek ze stroje `eject` či `e` a vypnout vzduch `insert` nebo `i`.

## 5. Měření DEPTu

`jexp4`

natáhnout parametry pro experiment DEPT

`start: standard:` vybrat **rozpouštědlo**

`lock` – upravit hodnoty **power a gain**

nastavit čas experimentu `acquire: acquisition` upravit počet scanů ve scans: `requested` (*nutno nechat proběhnout celý experiment, kontrola času experimentu: `show time` nebo `time`*)

pustit experiment `go` nebo `acquire`

### Zpracování spektra:

`text('název vzorku')` nebo ve `start: standard:` do **comment** napsat název vzorku

`wft` – zobrazí spektrum

`aph` – automatické zřazování spektra

`nl rl(posun signálu p)` (*např. `nl rl(77.00p)`*) – reference na signál (kurzor nastavit přibližně na střed signálu, na který referujeme)

nastavit **treshold**

`adept` – přepočítá spektrum na tvar DEPTu

`dssa` – zobrazí jednotlivá spektra CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, CH a C

### Vytištění spektra:

`pldpt` – vytiskne DEPT spektrum

## 6. Měření fosforu.

`jexp5`

natáhnout parametry pro fosforový experiment

`start: standard:` vybrat **rozpouštědlo**

`lock` – upravit hodnoty **power a gain**

### Zpracování spektra:

`text('název vzorku')` nebo ve `start: standard:` do **comment** napsat název vzorku

`wft` – zobrazí spektrum

`aph` – automatické zřazování spektra

*spektrum nerefereujeme (spektrum je na pozadí referencováno vůči ....)*

## **7. Měření fluoru.**