

NMR-Probenvorbereitung Messen am Autosampler Bearbeitung mit MNova

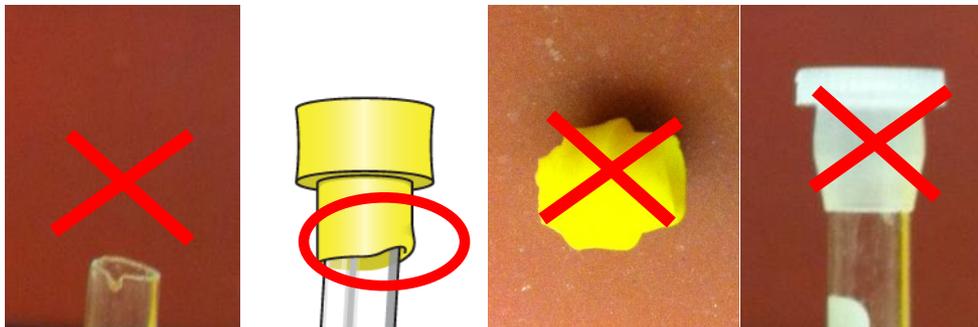
M. John
OC-Grundpraktikum 23.04.2015



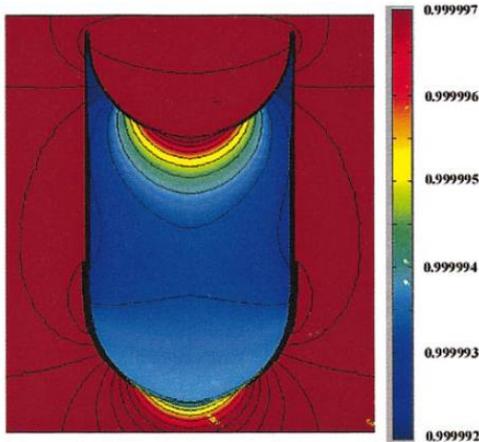
Röhrchen



- OD = 5 mm, ID = 4.2 mm
- Länge = 18 - 24 cm
- runder Boden, glatter Rand (Glasbläser!)
- Röhrchen / Kappen müssen vollständig sauber sein (Aceton / Pfeifenreiniger)
- Trocknen durch Druckluft / liegend im Trockenschrank
- Kappe muss eng anliegen und fest sitzen
- gebrauchte Röhrchen / Kappen sind in der NMR-Abteilung vorrätig



Füllhöhe



- 4 – 5 cm (550 – 700 μL)
- LöMi sparsam verwenden
- keine Luftblasen
- keine Feststoffe / 2-Phasengemische (durch Watte filtrieren, Lösungsversuche)
- Substanz in Schnappd'glas einwiegen und mit 600 μL LöMi in Röhrchen spülen
- nur deuterierte LöMi
- weniger gebräuchliche LöMi sind in der NMR-Abteilung vorrätig

Substanzmenge

Substanzmenge [mg]	Volumen [μL]	Tropfen aus Past´pipette	Verhältnis Subst./LöMi	Bemerkung
0.2	0.2 (+ 699.8)	0.01	1:3499	Minimum ^1H NMR LöMi-Signal stark
2	2 (+ 698)	0.1	1:349	Minimum COSY/HSQC Signale LöMi \approx Subst.
20	20 (+ 680)	1	1:34	Min. ^{13}C , max ^1H LöMi-Signal schwach
200	200 (+ 500)	10	1:2.5	Signalverschiebung durch intermol. WW
600	600 (+ 100 LöMi)	30	6:1	starke Verbreiterung durch intermol. WW

resolution_4h.5.1.1r
0.01 drops

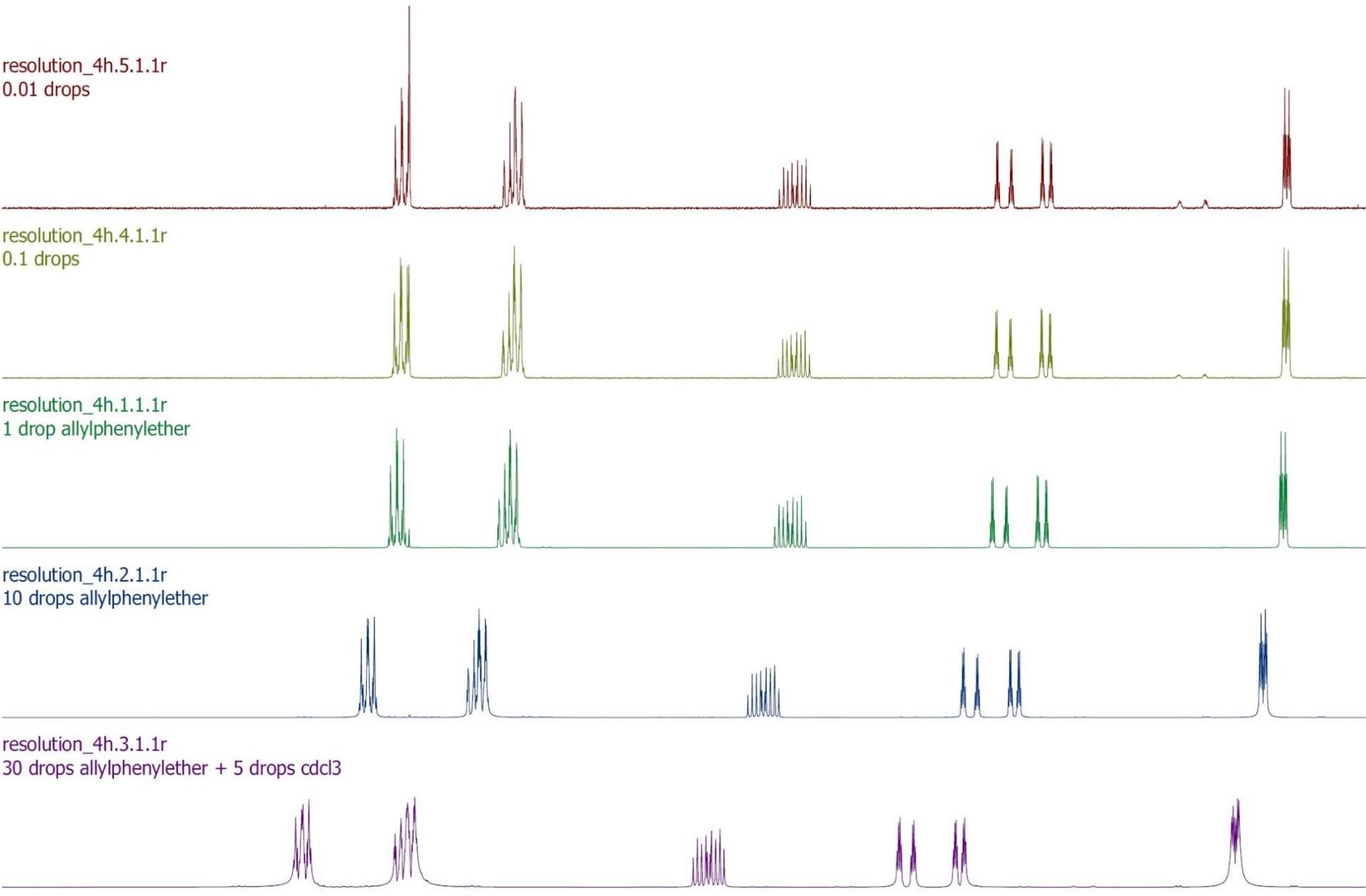
resolution_4h.4.1.1r
0.1 drops

resolution_4h.1.1.1r
1 drop allyphenylether

resolution_4h.2.1.1r
10 drops allyphenylether

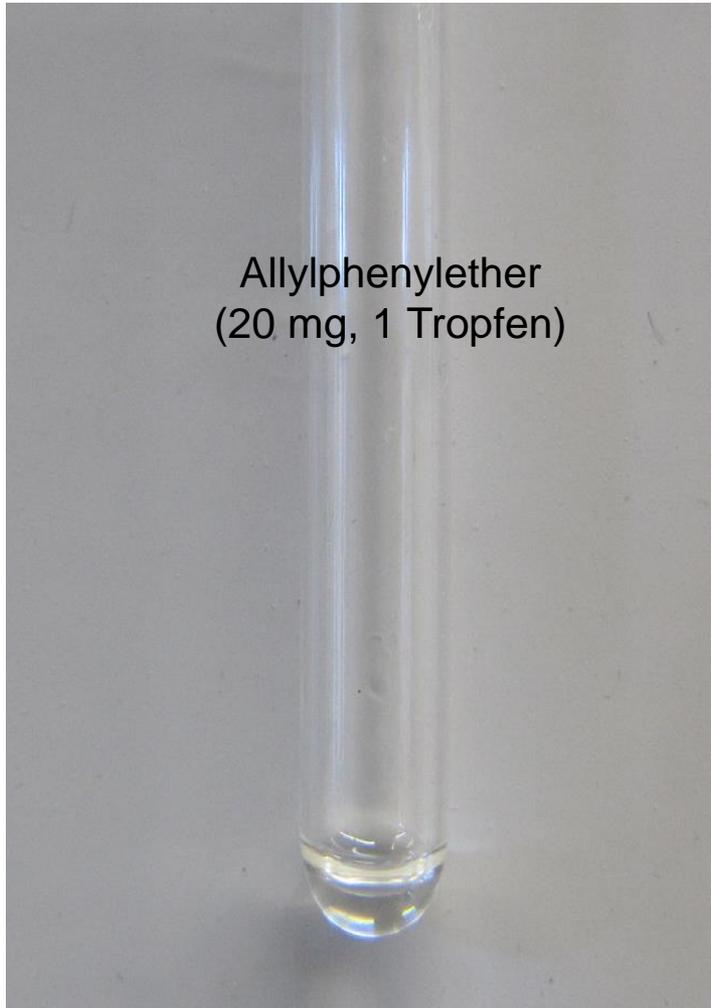
resolution_4h.3.1.1r
30 drops allyphenylether + 5 drops cdcl3

8.5 8.4 8.3 8.2 8.1 8.0 7.9 7.8 7.7 7.6 7.5 7.4 7.3 7.2 7.1 7.0 6.9 6.8 6.7 6.6 6.5 6.4 6.3 6.2 6.1 6.0 5.9 5.8 5.7 5.6 5.5 5.4 5.3 5.2 5.1 5.0 4.9 4.8 4.7 4.6 4.5 4.4
f1 (ppm)



Flüssigkeit vs. Feststoff

Allylphenylether
(20 mg, 1 Tropfen)



Aminohydroxybenzoesäure
(20 mg)





Etiketten



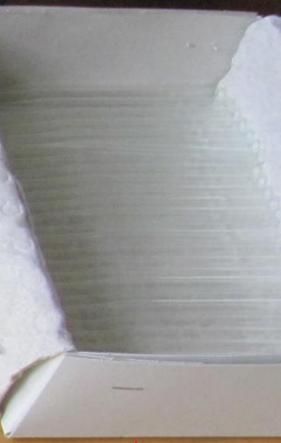
Watte

LöMi

Bitte für NMR-Messungen beachten:
 Füllhöhe beachten \varnothing : 40 – 50 mm
 Substanzmenge: 1-H: 10 – 20 mg
 13-C: ≥ 20 mg

Korrekte Beschriftung
 Kein Feststoff im Röhrchen (evtl. vorher durch Watte filtrieren)
 Keine defekten Röhrchen benutzen
 Röhrchen von außen sauber?
 Deckel richtig aufsetzen (keine durchsichtigen Deckel!)
 Für CDCl₃ saubere Pasteur-Pipetten benutzen

Schappdeckelgläser



Pasteur-pipetten



Etikett



- blaue Etiketten verwenden
- sorgfältig abtrennen (kein Überstand)
- lesbar beschriften (Name, Probennummer, Datum)
- Etikett max. 2 x verwenden
- bei Knappheit in der NMR-Abteilung nachfragen
- notfalls Röhrchen beschriften
- keine Aufkleber / selbst gebastelten Etiketten
- defekte / unbeschriftete Röhrchen werden entfernt!

**Direktlinks:**[Grundlegende Techniken](#)[Fortgeschrittene Techniken](#)[Spezielle Techniken](#)[NMR Spektroskopie](#)

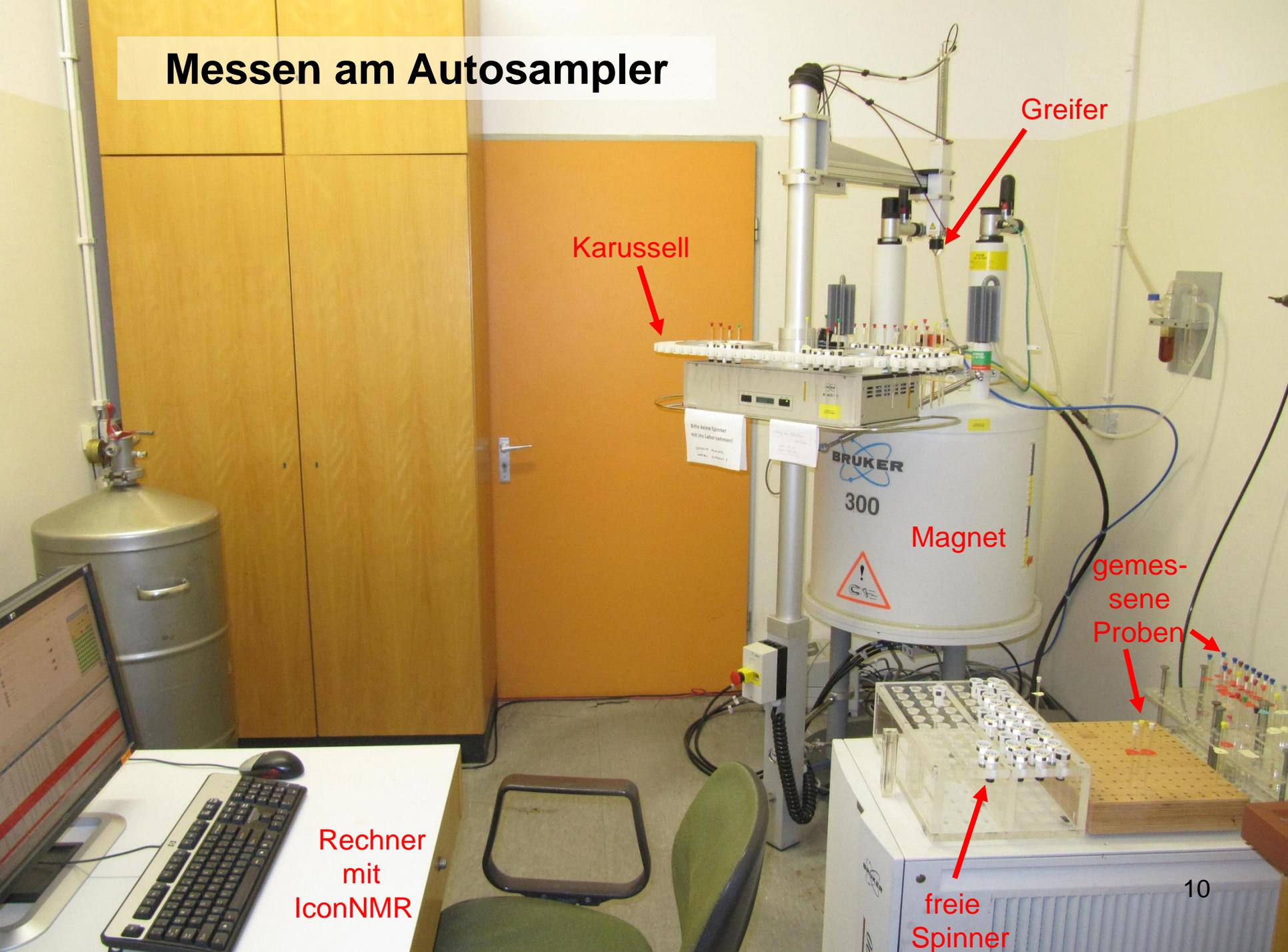
- ▶ [Kapitel 1: Vorbereitung und Befüllen der Probenröhrchen](#)
- ▶ [Kapitel 2: Aufbau eines NMR-Spektrometers](#)
- ▶ [Kapitel 3: Theorie zur NMR-Spektroskopie](#)
- ▶ [Kapitel 4: Autosampler](#)
- ▶ [Kapitel 5: Bearbeiten der Spektren mit MestReNova](#)
- ▶ [Kapitel 6: Bearbeiten der Spektren mit TopSpin](#)

NMR Spektroskopie

Hier werden grundlegende Arbeitstechniken und die Theorie der NMR-Spektroskopie vermittelt. Die Videos thematisieren ebenfalls fortgeschrittene Techniken, wie zum Beispiel das Arbeiten unter Schutzgas. Um einen Bogen zwischen Theorie und Praxis zu spannen, werden zusätzlich spannende Einblicke in das Innenleben der Magnete gewährt.

- ▶ [Kapitel 1: Vorbereitung und Befüllen der Probenröhrchen](#)
- ▶ [Kapitel 2: Aufbau eines NMR-Spektrometers](#)
- ▶ [Kapitel 3: Theorie zur NMR-Spektroskopie](#)
- ▶ [Kapitel 4: Autosampler](#)
- ▶ [Kapitel 5: Bearbeiten der Spektren mit MestReNova](#)
- ▶ [Kapitel 6: Bearbeiten der Spektren mit TopSpin](#)

Messen am Autosampler



Karussell

Greifer

BRUKER
300

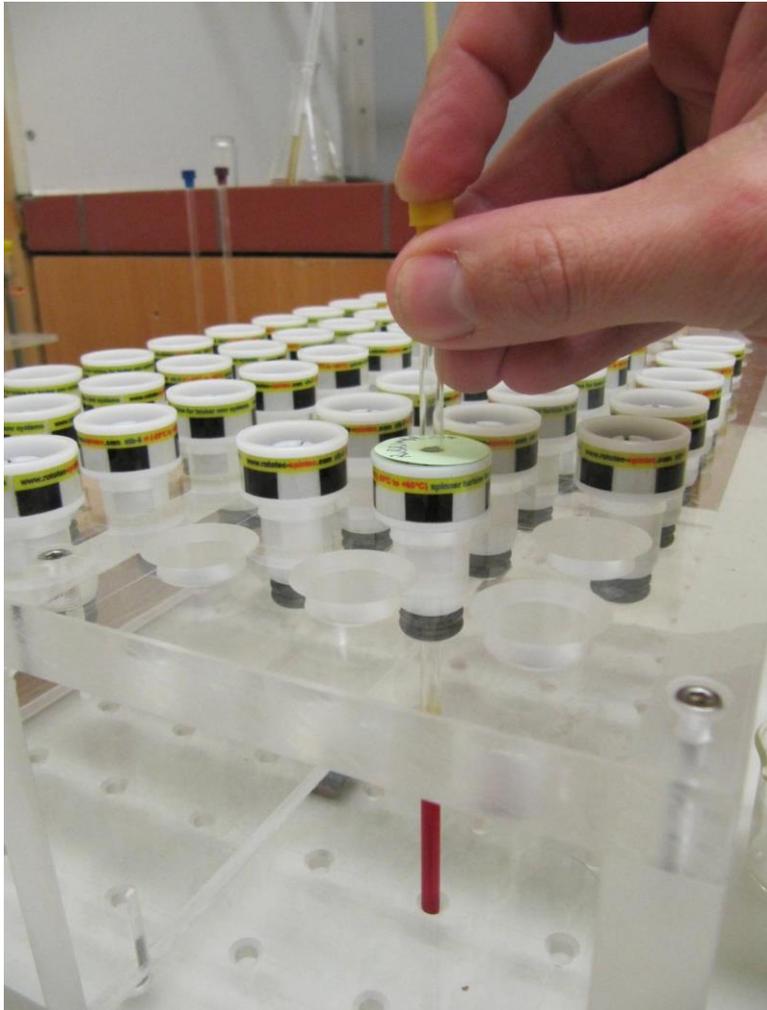
Magnet

gemesene
Proben

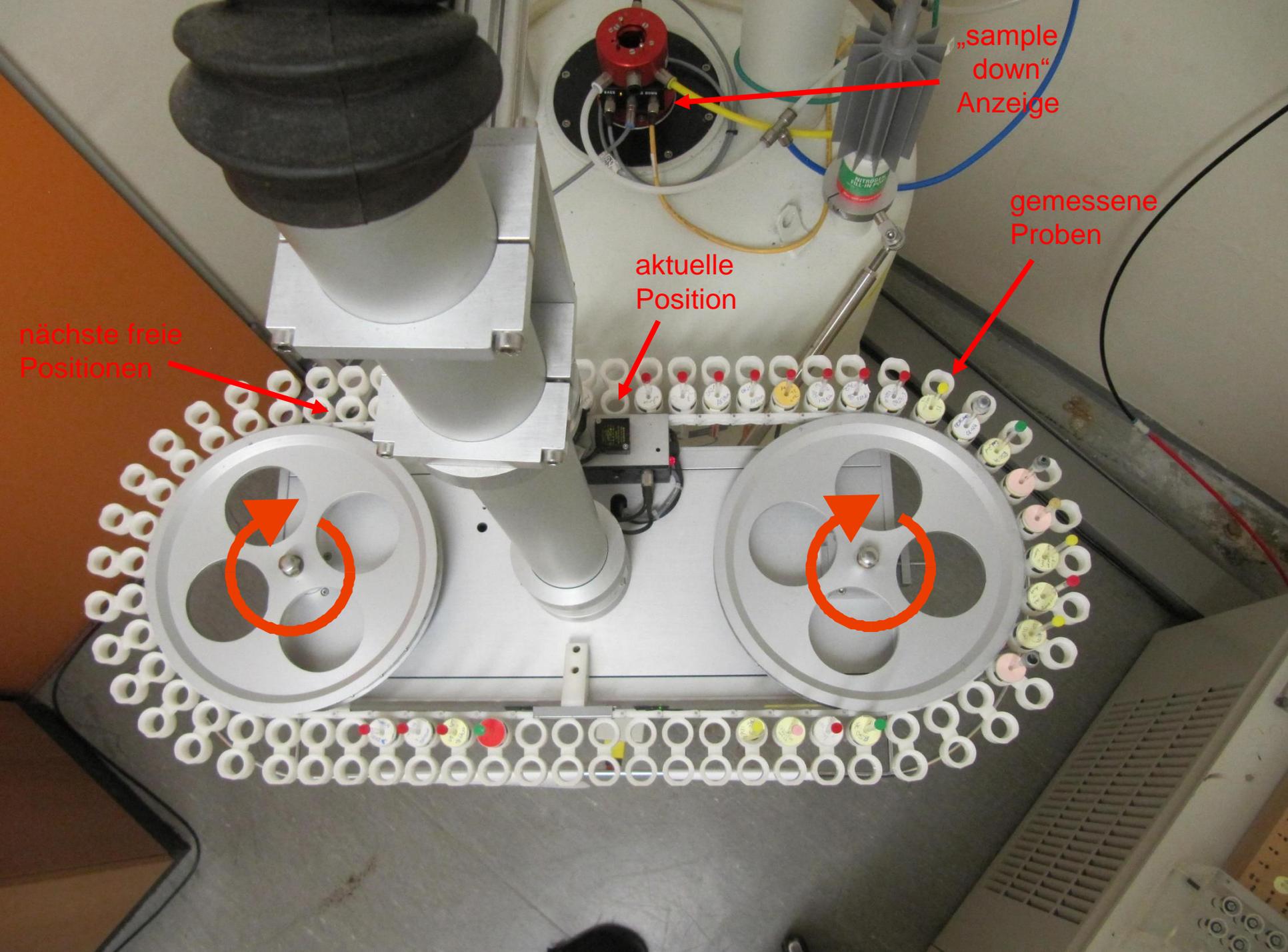
Rechner
mit
IconNMR

freie
Spinner

Spinner



- Röhrrchen aussen abwischen
- weisse Spinner verwenden
- Röhrrchen mit leichtem Druck ganz durchschieben
- Spinner möglichst nicht anfassen und Kontakt mit LöMi unbedingt vermeiden!
- Etikett muss flach aufliegen und darf nicht überstehen
- Röhrrchen unten erneut abwischen und in nächste freie Position im Karussell stellen
- Spinner nicht aus Messraum entfernen!
- defekte oder kontaminierte Spinner in die NMR-Abteilung geben



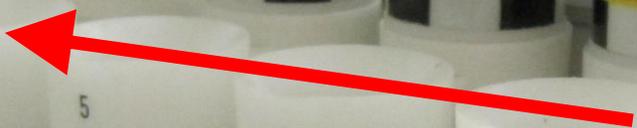
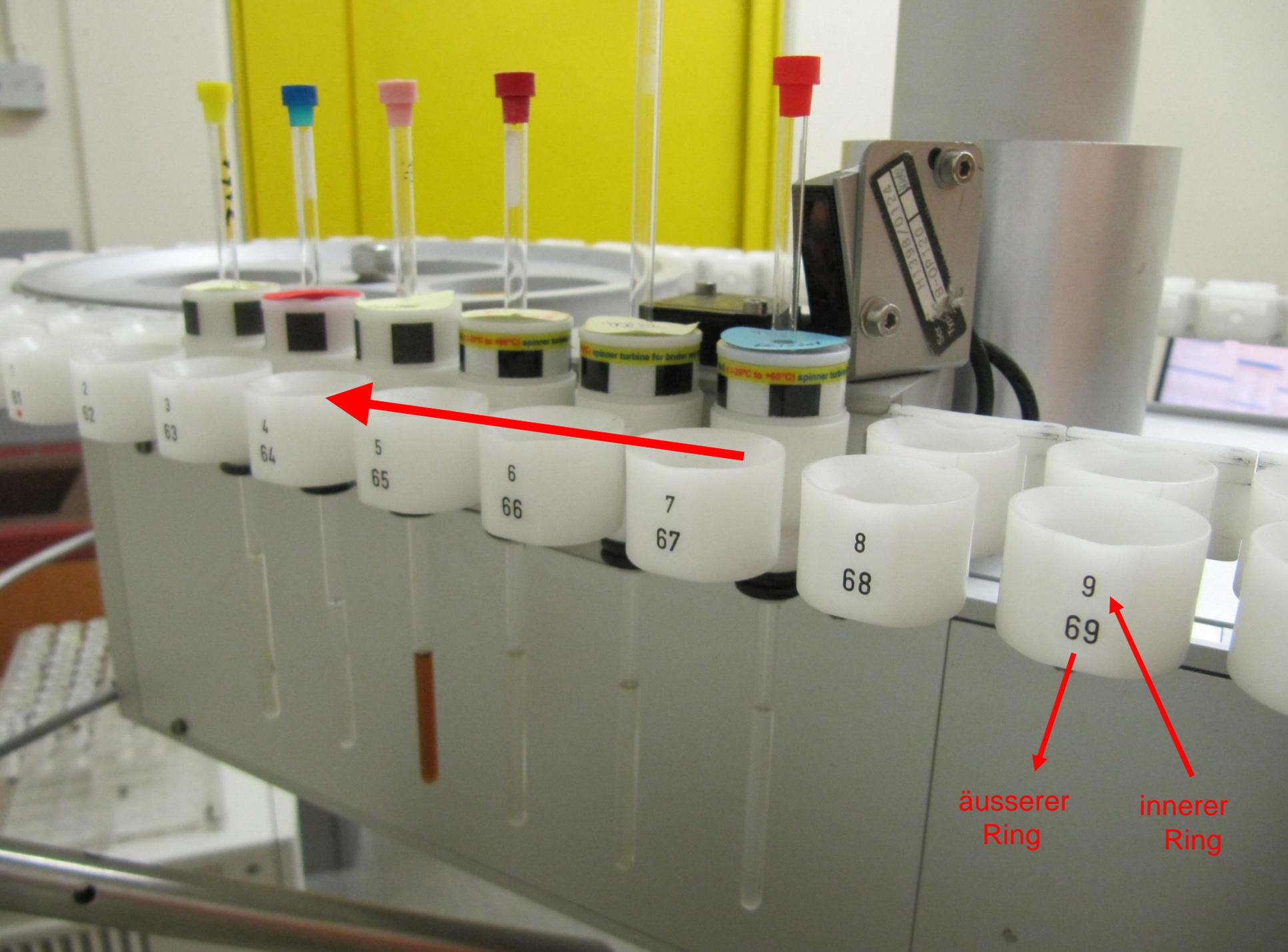
„sample down“
Anzeige

aktuelle
Position

gemessene
Proben

nächste freie
Positionen





äusserer Ring

innerer Ring

Holder	Type	Status	Name	No.	Solvent	Experiment	Par	Title / Orig	Pri	Time	User
1	1	Finished	Cattaneo300	687	D2O	1H-LONG				00:14:03	meyer
2	1	Automation Locked				1H				00:01:04	meyer
3	1	1H				1H				00:01:04	meyer
						31P{1H}		IDK 043 after destillation in acetone-d6		00:00:43	stalke
						13C{1H}		IDK 043 after destillation in acetone-d6		00:14:08	stalke
4	1	Finished				1H-LONG				00:14:03	siewert
		Finished	nestke300H	623	CDC13	1H-LONG				00:14:03	meyer
		Finished	bruckner300h	552	Acetone	1H-LONG				00:01:04	meyer
6	1	Running	Struwe 300H	12	CDC13	1H				00:01:04	meyer
7		Available									
8		Available									
9		Available									
10		Available									

Automation Locked

To unlock the automation window click on the change user button at the right hand side of the Automation Setup window.

ICON-NMR: Identify User

Help on logging in

User ID	User's Full Name
acf	AC-Synthesepraktikum
ackermann	Ak Ackermann
breder	Ak Breder
buback	Ak Buback
clever	Ak Clever
diederichsen	Ak Diederichsen
ghadwal	Ak Ghadwal
kat	Katalyse-Praktikum
kat2	Katalysepraktikum
koszinowski	Ak Koszinowski
meyer	Ak Meyer
mmc	MMC Praktikum
nmrservice	AC NMRservice
nmrsu	NMR SuperUser
oca	OC-Analysenkurs
ocf	OCF-Praktikum
ocg	OC-Praktikum
ocla	OC Lehramt
roesky	Ak Roesky
schneider	Ak Schneider
siewert	Ak Siewert
stalke	Ak Stalke
SUPPORT_388945a0	CN=Microsoft Corporation
tietze	Ak Tietze
vana	Ak Vana

User ID:

OK Lock Icon-NMR

Apr22-2015-0740-nmrservice ...

Preceding Experiments

#	Date	Holder	Name	No.	Experiment	Load	ATM	Rotat
8	2015-04-22 10:49:56	6	Struwe 300H	12	1H	✓	✓	✓
7	2015-04-22 10:31:04	5	bruckner300h	552	1H-LONG	✓	✓	✓
6	2015-04-22 10:12:58	4	nestke300H	623	1H-LONG	✓	✓	✓
5	2015-04-22 09:19:09	3	koehne300c	113	13C{1H}	✓	✓	✓
4	2015-04-22 09:16:43	3	koehne300p	113	31P{1H}	✓	✓	✓
3	2015-04-22 09:11:07	3	koehne300h	113	1H	✓	✓	✓
2	2015-04-22 09:06:02	2	schwarz	291	1H	✓	✓	✓
1	2015-04-22 08:47:48	1	Cattaneo300	687	1H-LONG	✓	✓	✓

Title / Orig	Remarks
S7 vor Saeule	
45L1 in acetone	
SENE140	
DK 043 after destillation in acetone-d6	sref: no peak found default calibration done
DK 043 after destillation in acetone-d6	
DK 043 after destillation in acetone-d6	
352	

Passwort: „proton“

Processing started

Holder	Type	Status	Name	No.	Solvent	Experiment	Par	Title / Orig	Pri	Time	User
1	1	Finished	Cattaneo300	687	D2O	1H-LONG				00:14:03	meyer
2	1	Finished	schwarz	291	CDC13	1H		3352		00:01:04	meyer
3	3	Finished	koehne300h	113	Acetone	1H		IDK 043 after distillation in acetone-d6		00:01:04	stalke
		Finished	koehne300p	113	Acetone	31P{1H}		IDK 043 after distillation in acetone-d6		00:00:43	stalke
		Finished	koehne300c	113	Acetone			IDK 043 after distillation in acetone-d6		00:14:08	stalke
4	1	Finished	nestke300H	623	CDC13	1H-LONG		SENE140		00:14:03	siewert
5		Finished	bruckner300h	552	Acetone	1H-LONG		H5L1 in aceton		00:14:03	meyer
6		Finished	Struwe 300H	12	CDC13	1H		J57 vor Saeule		00:01:04	meyer
7	1	Available	mjohn300h	128	CDC13	ch					ocg
8		Available									
9		Available									

LöMi

Name „300h“ **Probennummer** **Experiment**

Submit Cancel Edit

Preceding Experiments

#	Date	Holder	Name	No.	Experiment	Load
8	2015-04-22 10:49:56	6	Struwe 300H	12	1H	✓
7	2015-04-22 10:31:04	6	bruckner300h	552	1H-LONG	✓
6	2015-04-22 10:12:58	4	nestke300H	623	1H-LONG	✓
5	2015-04-22 09:19:09	3	koehne300c	113	13C{1H}	✓
4	2015-04-22 09:16:43	3	koehne300p	113	31P{1H}	✓
3	2015-04-22 09:11:07	3	koehne300h	113	1H	✓
2	2015-04-22 09:06:32	2	schwarz	291	1H	✓
1	2015-04-22 08:47:48	1	Cattaneo300	687	1H-LONG	✓

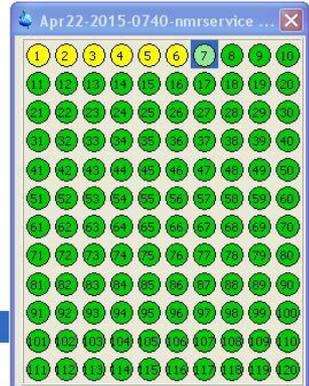
n 1H standard 1H
 n 1H-LONG LONG long 1H
 n 1H-PARA PARA 1H for paramagnetic compounds
 n 1H-CPMG CPMG - CPMG - relaxation filterfor polymer su
 n COSY standard 1H COSY
 n COSY-PARA PARA - COY for paramagnetic compounds
 n NOESY standard 1H NOESY
 n 7Li{1H} standard 7Li 1H decoupling
 n 11B{1H} standard 11B 1H decoupling
 n 11B standard 11B no 1H decoupling
 n 13C{1H} standard 13C 1H decoupling
 n 13C{1H}-LONG LONG - long 13C 1H decoupling
 n 13C-dept90 dept90 - 13C with multiplicity editing: CH only
 n 13C-dept135 dept135 - 13C with multiplicity editing: CH, CH3
 n 13C-HSQC HSQC - standa d 13C-HSQC

stillation in acetone-d6 sref: no peak found default calibration done
 stillation in acetone-d6
 stillation in acetone-d6

Change User

Search Preceding include previous runs

Busy until: No Jobs! Day Experiments: 00:00 Night Experiments: 00:00 User: ocg



File Run Holder View Find Parameters Options Tools Help

Processing started

Holder	Type	Status	Name	No.	Solvent	Experiment	Par	Title / Orig	Pri	Time	User
1	1	Finished	Cattaneo300	687	D2O	1H-LONG				00:14:03	meyer
2	1	Finished	schwarz	291	CDC13	1H		3352		00:01:04	meyer
3	3	Finished	koehne300h	113	Acetone	1H		IDK 043 after destillation in acetone-d6		00:01:04	stalke
		Finished	koehne300p	113	Acetone	31P{1H}		IDK 043 after destillation in acetone-d6		00:00:43	stalke
		Finished	koehne300c	113	Acetone	1H		IDK 043 after destillation in acetone-d6		00:14:08	stalke
4	1	Finished	nestke300H	623	CDC13	1H-LONG		SENE140		00:14:03	siewert
5		Finished	bruckner300h	552	Acetone	1H-LONG		H5L1 in aceton		00:14:03	meyer
6		Finished	Struwe_300H	12	CDC13	1H		JS7 vor Saeule		00:01:04	meyer
7	1	Available	mjohn300h	128	CDC13	ch N 1H				00:01:04	ocg
8		Available									
9		Available									

LöMi (points to Name) **Titel** (points to Title field)

Name „300h“ (points to Name) **Probennummer** (points to No.) **Experiment** (points to Experiment) **Priorität** (points to Pri)

allylphenylether

Set Title Set & Copy Title

#	Date	Holder	Name	No.	Experiment	Load	Acq	Rotat	Lock	Acq	Proc	User	Disk	Title / Orig	Remarks
8	2015-04-22 10:49:56	6	Struwe 300H	12	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	JS7 vor Saeule	
7	2015-04-22 10:31:04	6	bruckner300h	552	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	H5L1 in aceton	
6	2015-04-22 10:12:58	4	nestke300H	623	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	siewert	C:\Bruker\TOPSPIN	SENE140	
5	2015-04-22 09:19:09	3	koehne300c	113	13C{1H}	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	sref: no peak found default calibration done
4	2015-04-22 09:16:43	3	koehne300p	113	31P{1H}	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	
3	2015-04-22 09:11:07	3	koehne300h	113	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	
2	2015-04-22 09:06:52	2	schwarz	291	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	3352	
1	2015-04-22 08:47:48	1	Cattaneo300	687	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN		

Change User

Search Preceding include previous runs

Busy until: No Jobs! Day Experiments: 00:00 Night Experiments: 00:00 User: ocg

File Run Holder View Find Parameters Options Tools Help

Processing started

Holder	Type	Status	Name	No.	Solvent	Experiment	Par	Title / Orig	Pri	Time	User
4	1	Finished	koehne300c	113	Acetone	13C{1H}		IDK 043 after destillation in acetone-d6		00:14:08	stalke
5	1	Finished	nestke300H	623	CDC13	1H-LONG		SENE140		00:14:03	siewert
6	1	Finished	bruckner300h	552	Acetone	1H-LONG		HSL1 in acetone		00:14:03	meyer
7	1	Finished	Struwe_300H	12	CDC13	1H		JS7 vor Saeule		00:01:04	meyer
7	2	Available	mjohn300h	128	CDC13	ch N 1H		allylphenylether		00:01:04	ocg
7	2	Available	mjohn300h	129	CDC13	ch		allylphenylether			ocg
8		Available									
9		Available									
10		Available									
11		Available									
12		Available									
13		Available									
14		Available									
15		Available									
16		Available									
17		Available									

Submit Cancel Edit Delete Add 1 Copy 1

weiteres Experiment

Apr22-2015-0740-nmrservice ...

#	Date	Holder	Name	No.	Experiment	Load	ATM	Rotation	Lock	Shim	Acq	Proc	User	Disk	Title / Orig	Remarks
8	2015-04-22 10:49:56	6	Struwe 300H	12	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	JS7 vor Saeule	
7	2015-04-22 10:31:04	5	bruckner300h	552	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	HSL1 in acetone	
6	2015-04-22 10:12:58	4	nestke300H	623	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	siewert	C:\Bruker\TOPSPIN	SENE140	
5	2015-04-22 09:19:09	3	koehne300c	113	13C{1H}	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	sref: no peak found default calibration done
4	2015-04-22 09:16:43	3	koehne300p	113	31P{1H}	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	
3	2015-04-22 09:11:07	3	koehne300h	113	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	
2	2015-04-22 09:06:02	2	schwarz	291	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	3352	
1	2015-04-22 08:47:48	1	Caltaneo300	687	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN		

Search Preceding include previous runs

Busy until: No Jobs! Day Experiments: 00:00 Night Experiments: 00:00 User: ocg

Name "300h" für 1H ☀️ (8 – 18 Uhr)

Name "300c" für ¹³C

Name "300cosy" für COSY

Name "300hsqc" für HSQC





Holder	Type	Status	Name	No.	Solvent	Experiment	Par	Title / Orig	Pri	Time	User
4	1	Finished	koehne300c	113	Acetone	13C{1H}	IDK 043 after destillation in acetone-d6	IDK 043 after destillation in acetone-d6	00:14:08	stalke	
5	1	Finished	nestke300H	623	CDC13	1H-LONG	SENE140	SENE140	00:14:03	siewert	
6	1	Finished	bruckner300h	552	Acetone	1H-LONG	H5L1 in acetone	H5L1 in acetone	00:14:03	meyer	
7	1	Finished	Struwe_300H	12	CDC13	1H	JS7 vor Saeule	JS7 vor Saeule	00:01:04	meyer	
7	2	Running	mjohn300h	128	CDC13	1H	allylphenylether	allylphenylether	00:01:04	ocg	
7	2	Queued	mjohn300c	128	CDC13	13C{1H}	allylphenylether	allylphenylether	00:14:08	ocg	
8		Available									
9		Available									
10		Available									
11		Available									
12		Available									
13		Available									
14		Available									
15		Available									
16		Available									
17		Available									

Probe nur in Ausnahmefällen vorzeitig entnehmen!



Change User



Preceding Experiments

#	Date	Holder	Name	No.	Experiment	Load	ATM	Rotation	Lock	Shim	Acq	Proc	User	Disk	Title / Orig	Remarks
9	2015-04-22 11:15:28	7	mjohn300h	128	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	ocg	C:\Bruker\TOPSPIN	allylphenylether	
8	2015-04-22 10:49:56	6	Struwe_300H	12	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	JS7 vor Saeule	
7	2015-04-22 10:31:04	5	bruckner300h	552	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	H5L1 in acetone	
6	2015-04-22 10:12:58	4	nestke300H	623	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	siewert	C:\Bruker\TOPSPIN	SENE140	
5	2015-04-22 09:19:09	3	koehne300c	113	13C{1H}	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	sref: no peak found default calibration done
4	2015-04-22 09:16:43	3	koehne300p	113	31P{1H}	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	
3	2015-04-22 09:11:07	3	koehne300h	113	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	stalke	C:\Bruker\TOPSPIN	IDK 043 after destillation in acetone-d6	
2	2015-04-22 09:06:02	2	schwarz	291	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN	3352	
1	2015-04-22 08:47:48	1	Cattaneo300	687	1H-LONG	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	meyer	C:\Bruker\TOPSPIN		

Probenkopfabstimmung (ATM)
Einschalten Rotation
Lock auf ²H-Signal des LöMi
Shimming (*B*₀-Homogenität)

} 3-4 min

¹H 1 min
¹³C 30 min
COSY 5 min
HSQC 15 min



1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

AKVana
AKVana
2

128

AKVana
AKVana

Prolinasta

P2-Q2

4-12.6-dmethyl
dual

4-12.6-dmethyl
amino acid
CPM's
1H
dual

SR-124

SR-124

Prolinasta

P2-Q2

Klopsch

4-12.6-dmethyl
dual

4-12.6-dmethyl
amino acid
CPM's
1H
dual

SR-124

Prolinasta

P2-Q2

Klopsch

4-12.6-dmethyl
dual

4-12.6-dmethyl
amino acid
CPM's
1H
dual

SR-124

Prolinasta

P2-Q2

Klopsch

4-12.6-dmethyl
dual

4-12.6-dmethyl
amino acid
CPM's
1H
dual

SR-124

Prolinasta

P2-Q2

Klopsch

4-12.6-dmethyl
dual

4-12.6-dmethyl
amino acid
CPM's
1H
dual

SR-124

Prolinasta

P2-Q2

Klopsch

4-12.6-dmethyl
dual



Automation - Running - Busy until : Wed 14:53 - Day Experiments : 00:02 - Night Experiments : 01:26

> Help
 > Logoff

 Logged in as
 ocg

 Instrument Name
 58F8D407B10249C: spect

Holder	Type	Status	Name	No.	Solvent	Experiment	Par	Title / Orig	Pri	Time	User
1	1	Completed									
1	1	Completed	Cattaneo300	687	D2O	1H-LONG				00:14:03	meyer
2	1	Completed									
2	1	Completed	schwarz	291	CDC13	1H		3352		00:01:04	meyer
3	3	Completed									
3	3	Completed	koehne300h	113	Acetone	1H		@ IDK 043 after destillation in ...		00:01:04	stalke
3	3	Completed	koehne300p	113	Acetone	31P{1H}		@ IDK 043 after destillation in ...		00:00:43	stalke
3	3	Completed	koehne300c	113	Acetone	13C{1H}		@ IDK 043 after destillation in ...		00:14:08	stalke
4	1	Completed									
4	1	Completed	nestke300H	623	CDC13	1H-LONG		SENE140		00:14:03	siewert
5	1	Completed									
5	1	Completed	bruckner300h	552	Acetone	1H-LONG		H5L1 in acetone		00:14:03	meyer
6	1	Completed									
6	1	Completed	Struwe 300H	12	CDC13	1H		JS7 vor Saeule		00:01:04	meyer
7	1	Completed									
7	1	Completed	mjohn300h	128	CDC13	1H		allylphenylether		00:01:04	ocg
8	1	Completed									
8	1	Completed	nestke300H	624	CDC13	1H		SENE104 30 min		00:01:04	siewert

Date	Time	Holder Name	No.	Experiment	Load	ATM	Rotation	Lock	Shim	Acq	Proc	User	Title	Remarks
2015-04-22	14:43:17	22 jwagner	230	1H								vana	Jw4-mg-5	
2015-04-22	14:12:25	10 apae300hmhc	7	13C-HMBC	✓	✓			✓	✓		stalke	AP004, 7, Tol, 298K, HMBC, Si-S-Ph	
2015-04-22	13:53:31	10 apae300c	7	13C{1H}	✓	✓	✓	✓	✓	✓		stalke	AP004, 7, Tol, 298K, 13C, Si-S-Ph	
2015-04-22	13:48:02	20 MWM	125	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓		siewert	Pyrazoligand in MeOD/D2O	sref: no peak found defa
2015-04-22	13:42:53	19 DRohleder	18	1H	✓	✓	✗	✓	✓	✓		vana	SC RAFT Star 21April 2teFraktion	ro: Spinning still pendin peak found default calib
2015-04-22	13:37:38	18 JKretsch1H	156	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓		stalke	JK034 Kontrollmessung in Tol.	
2015-04-22	13:25:41	10 apae300cosy	7	COSY	✓	✓	✓	✓	✓	✓		stalke	AP004, 7, Tol, 298K, COSY, Si-S-Ph	
2015-04-22	13:21:07	17 lennart_r	3	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓		vana	Feststoff Polymerfaellung, anschliessend Loesung in Dioxan	sref: no peak found defa
2015-04-22	13:16:26	16 DRohleder	17	1H	✓	✓	✓	✓	✓	✓		vana	SC RAFT Star 21April	sref: no peak found defa

Bearbeitung mit MNova



Open

« nmr » mjohn300h » 128 » 128 durchsuchen

Organisieren Neuer Ordner

Name	Änderungsdatum	Typ
pdata	22.04.2015 11:15	Dateiordner
acqu	22.04.2015 11:19	Datei
acqus	22.04.2015 11:19	Datei
audita	22.04.2015 11:19	Textdokume
fid	22.04.2015 11:19	Datei
format.temp	22.04.2015 11:18	TEMP-Datei
prosc	16.07.2009 04:23	Datei
pulse	22.04.2015 11:18	Datei
scon2	22.04.2015 11:18	Datei
shimvalues	22.04.2015 11:19	Datei
nmr.par	17.03.2015 07:20	PAR-Datei

Desktop
Downloads
Zuletzt besucht

Bibliotheken
Bilder
Dokumente
Musik
Videos

Computer
Lokaler Datenträger
KINGSTON (E:)
spektren-ocg (\\...)
spektren-ocf (\\...)
oca (\\10.76.64.1)

Dateiname: beietete Spektren All Files (*.*)

Öffnen Abbrechen

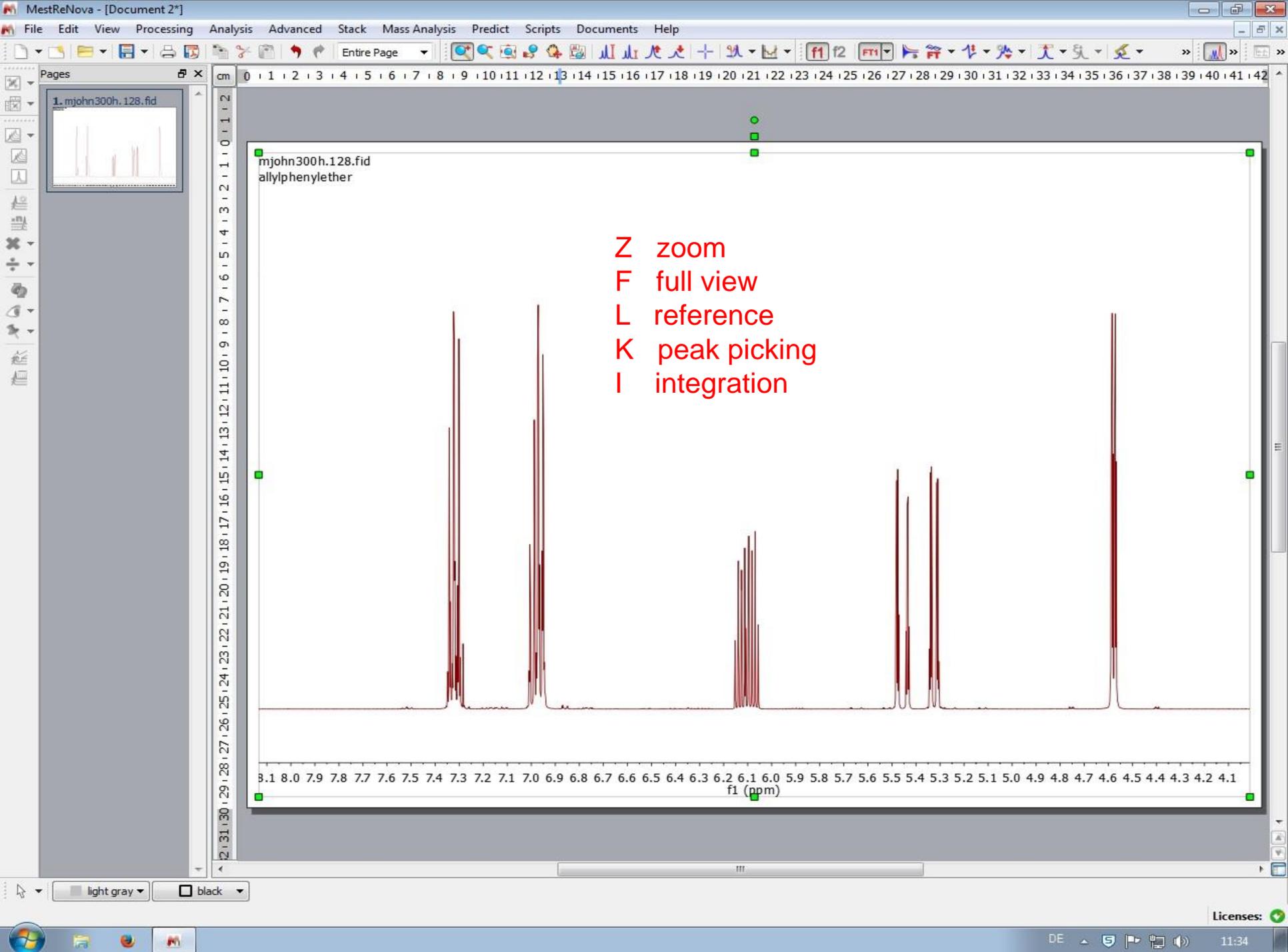
Document 1

f1 f2 FID

Page Notes

light gray black

B X₂ A black Arial 12



mjohn300h.128.fid
allylphenylether

Z zoom
F full view
L reference
K peak picking
I integration

8.1 8.0 7.9 7.8 7.7 7.6 7.5 7.4 7.3 7.2 7.1 7.0 6.9 6.8 6.7 6.6 6.5 6.4 6.3 6.2 6.1 6.0 5.9 5.8 5.7 5.6 5.5 5.4 5.3 5.2 5.1 5.0 4.9 4.8 4.7 4.6 4.5 4.4 4.3 4.2 4.1
f1 (ppm)



Institut für Organische und Biomolekulare Chemie

Institut Studium Forschungsgruppen Service-Abteilungen Sicherheit Vorträge Aktuelles Nützliche Links

Aktuelle Seite: ▶ Startseite ▶ Service-Abteilungen ▶ NMR-Abteilung ▶ MNova Aa+ Aa- Suche | English



Leitung
Dr. Michael John
Tel. +49-(0)551-39 4139
Fax +49-(0)551-39 96 60
mjohn@gwdg.de

Postanschrift:
Institut für Organische und Biomolekulare Chemie
Tammannstrasse 2
37077 Göttingen

Zur Bearbeitung von NMR-Spektren im Praktikum, in den Abteilungen, oder auch auf dem eigenen Laptop zuhause besitzt die Fakultät für Chemie eine Campuslizenz für das Programm MNova (Mestrelab Research).

Vorteile

- Lesen von Bruker/Varian Daten ohne sichtbaren Unterschied für den Benutzer
- die Prozessierung erfolgt automatisch mit den Parametern des Originaldatensatzes
- schnelles und intuitives Skalieren, Dehnen, Ausschneiden
- Ausdrucken der Bildschirmansicht 1:1 ohne externen Plot-Editor

Installation

- Webseite <http://mestrelab.com/software/mnova/download/>
- entsprechendes Betriebssystem (Windows, Mac, Linux) auswählen
- die Setup-Datei temporär speichern und das Programm installieren

Aktivierung der Lizenz

- Lizenzdatei *Uni Goettingen ULTD_NMR.lic* organisieren (im Verzeichnis *info* auf dem Autosampler-Datenserver, im StudIP, bei den AK Administratoren oder per email an mjohn@gwdg.de)
- Lizenzdatei ins Verzeichnis *(C:/Programme)/Mestrelab Research S.L/MestReNova/licenses* kopieren
- der Rechner muss im GöNet (vpn, eduroam, GoeMobile) online sein
- MNova starten, der Rechner meldet sich automatisch beim Server an und aktiviert die Lizenz
- die Lizenz ist vorerst 90 Tage gültig (auch offline), danach kontaktiert der Rechner automatisch den Lizenzserver und erneuert die Lizenz

Anleitung und Beispiele

- das komplette Manual kann unter <http://mestrelab.com/software/mnova/manuals/> heruntergeladen werden
- unter *(C:/Programme)/Mestrelab Research S.L/MestReNova/examples/datasets* liegen ¹H, ¹³C und HSQC Spektren von Chinin in CDCl₃

Fragen? mjohn@gwdg.de
Viel Spass!