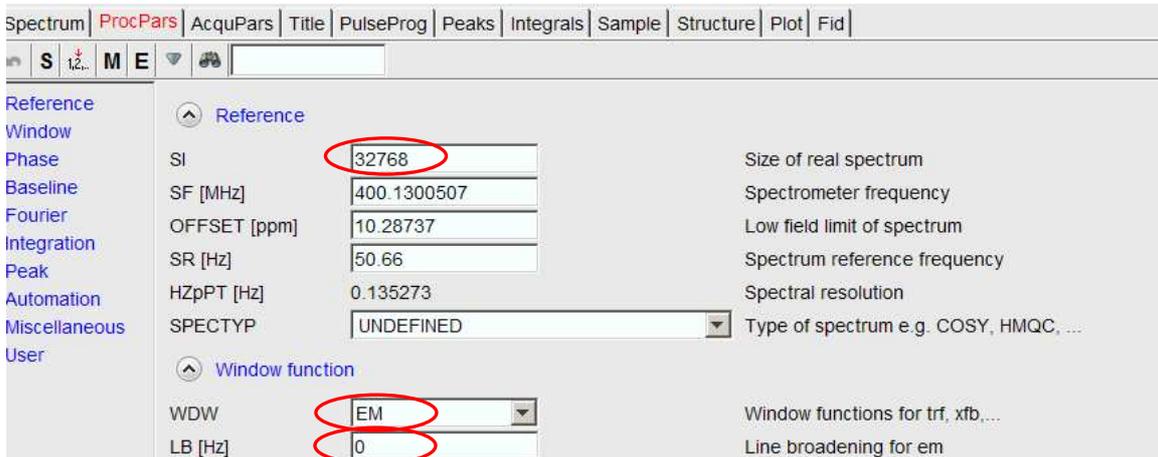


# Prozessieren von 1D-NMR-Spektren mittels TopSpin:

1. Datensatz öffnen
2. Unter „ProcPars“ SI auf denselben Wert wie TD unter „AcquPars“ setzen (Zero-Filling)



Für WDW EM (Exponential Multiplication) und für LB [Hz] (Line-Broadening) folgenden Wert wählen (ausprobieren, was besser aussieht):

für  $^1\text{H}$ :  $0 \text{ Hz} \leq \text{LB} \leq 0.5 \text{ Hz}$

für  $^{13}\text{C}$ :  $1 \text{ Hz} \leq \text{LB} \leq 5 \text{ Hz}$

Größere LB-Werte bedeuten ein besseres S/N-Verhältnis, aber schlechtere Auflösung. Wenn also Kopplungskonstanten bestimmt werden sollen, lieber kleinere Werte wählen.

3. In der Eingabezeile unten „ef“ (Exponentielle Multiplikation & Fourier Transformation) eingeben und <Enter> drücken.
4. In dieselbe Zeile „apk“ (Automatische Phasenkorrektur) eingeben und <Enter> drücken. Eigentlich sollte die Phase jetzt stimmen.

Falls nicht, die Phasenkorrektur manuell durchführen:

 anklicken und über  **0 1 R** die Phasenkorrektur nullter und erster Ordnung durchführen:

Dazu mit der rechten Maustaste das stärkste Signal im Spektrum anklicken und mit „Set

Pivot“ den Schwerpunkt auf dieses Signal setzen.

Nun auf die 0 linksklicken und die Maustaste gedrückt halten. Durch vertikales Bewegen der Maus das Schwerpunktsignal phasenkorrigieren.

Anschließend über die 1 auf die gleiche Weise die restlichen Signale angleichen.

Falls man sich verfahren hat, läßt sich der Vorgang mit R zurücksetzen.

Mit  den Vorgang speichern und diesen Modus verlassen.

5. In der Eingabzeile „abs“ eingeben, um die automatische Basislinienkorrektur durchzuführen.
6. Zum Integrieren  und dann im Spektrenfenster  drücken (wird dann grün → ) und mit dem Cursor die zu integrierenden Bereiche auswählen. Nochmaliges Drücken von  (wird dann wieder zu ) erlaubt das Vergrößern von Bereichen im Spektrum zum leichteren Integrieren.

Vorhandene Integrale lassen sich durch Anklicken mit der rechten Maustaste und Wählen von „Delete Current Integral“ löschen. Will man alle Integrale löschen, macht man das am einfachsten über  (wählt alle Integrale aus) und dann  (löscht alle ausgewählten Integrale)

Zum Schluß ein bekanntes Integral durch anklicken mit der rechten Maustaste und wählen von „Calibrate Current Integral“ auf die Anzahl der Protonen setzen.

Nun die Arbeit über  speichern und fertig.

7. Zum Referenzieren auf  klicken und ein Signal mit bekannter chemischer Verschiebung durch Linksklick wählen. Im sich öffnenden Fenster die chemische Verschiebung dieses Signals eingeben und mit <Enter> oder OK bestätigen.

**FERTIG!!!**