

# Instal·lació de Topspin 2.1



El procés d'instal·lació del Topspin 2.1 ja està descrit amb detall per [l'espectròmetre Avancell+ 600](#), així doncs, aquestes instruccions seran molt més simples i esquemàtiques.

## Preparació de TopSpin 2.1

Copio el contingut del DVD d'instal·lació del Topspin 2.1 al disc dur per tal de fer més ràpida la instal·lació,

```
[sermnadmin@cie-55-32 Topspin-2.1]$ md5sum ts21.iso  
80f22b9cd6863054326612ca448c7b25  ts21.iso
```

A continuació, munto el fitxer ISO <sup>1)</sup> com a superusuari,

```
# mount -t iso9660 -o loop .TopSpin-3.2.3.iso /mnt/iso/  
# df -hl | grep iso  
/home/sermnadmin/Downloads/Topspin-2.1/TopSpin-2.1.8.iso  
2.7G 2.7G 0 100% /mnt/iso
```

Llavors executo el programa autorun per iniciar la instal·lació del Topspin, i marco les opcions,

- Install Bruker software including TopSpin 3.2 and CMC-assist 2.0
- Install GPL licensed GNU GCC 4.5.3 compiler (recommended)

que s'instal·laran a */opt/topspin3.2*

Com a *setup type trio*

- *Customized* per triar quins mòduls s'instal·len, i a la pantalla següent trio
  - TOPSPIN
  - ICON-NMR Automation
  - NMR-SIM
  - NMR-GUIDE
  - NMR-Data
  - NMR-GLP
- descarto la instal·lació del gestor de llicències FLEXLM perquè ja es va instal·lar amb el Topspin-3

A la pantalla següent em demana si vull importar la configuració d'un dels espectròmetres disponibles a */opt/topspin3.2* i trio que s'importi la configuració de *spect* definida a la v. 3.2.

Quan em pregunta si vull actualitzar el contingut de la variable global *PATH* a la nova instal·lació de Topspin. Com que per ara es farà servir aquesta versió del Topspin, faig una còpia de seguretat del fitxer actual (*/etc/profile.d/topspin.sh* i */etc/profile.d/topspin.csh*) i després trio l'opció d'actualitzar el

PATH.

Com a *NMR Super User* trio *nmrsu*, que ja es va crear en instal·lar el Topspin-3.2, i llavors entro la constrasenya habitual pel compte d'administrador del Topspin.

Llavors comença la instal·lació dels diferents mòduls i finalitza pocs minuts després sense cap missatge d'error. El fitxer que conté el registre de la instal·lació es pot consultar a */opt/topspin2.1/install.log*.

## Configuració del Topspin 2.1



Comentar breument la configuració del programa un cop connectat a la consola, i afegir alguna captura de pantalla

Aquestes són les tasques realitzades,

- executar ha i verificar els mòduls detectats
- cf funciona correctament i el fitxer de configuració final (**afegir-ho!**) coincideix amb el del Topspin 2.1 de l'ordinador vell
- expinstall
- edhead, edprosol, i la resta de comandes no donen cap problema. Cal importar a mà els *parameter sets* i altres fitxers de configuració que no s'hagin transferit.
- cplbruk all per compilar tots els programes AU de Bruker.
- cpluser all per compilar tots els programes AU de la carpeta *user*.

## 2016-01-28 - Cortab dels nuclis

Es fa la calibració (Cortab) dels següents nuclis:

- $^1\text{H}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^6\text{Li}$ ,  $^7\text{Li}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$
- $^{23}\text{Na}$ ,  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{39}\text{K}$ ,  $^{67}\text{Zn}$ ,  $^{71}\text{Ga}$ ,  $^{77}\text{Se}$ ,  $^{79}\text{Br}$ ,  $^{87}\text{Rb}$ ,  $^{95}\text{Mo}$
- $^{103}\text{Rh}$ ,  $^{111}\text{Cd}$ ,  $^{113}\text{Cd}$ ,  $^{119}\text{Sn}$ ,  $^{127}\text{I}$ ,  $^{195}\text{Pt}$ ,  $^{199}\text{Hg}$ ,  $^{207}\text{Pb}$ .

<sup>1)</sup>  
Instruccions a <http://www.tecmint.com/how-to-mount-and-unmount-an-iso-image-in-linux/>

From:

<https://sermn.uab.cat/wiki/> - **SeRMN Wiki**

Permanent link:

[https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp\\_xw4400\\_400wb\\_topspin21](https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_xw4400_400wb_topspin21)

Last update: **2020/07/09 12:38**

