

Anleitung NMRium

1. Öffnen des Programms

Öffnen Sie NMRium mit folgendem Link:

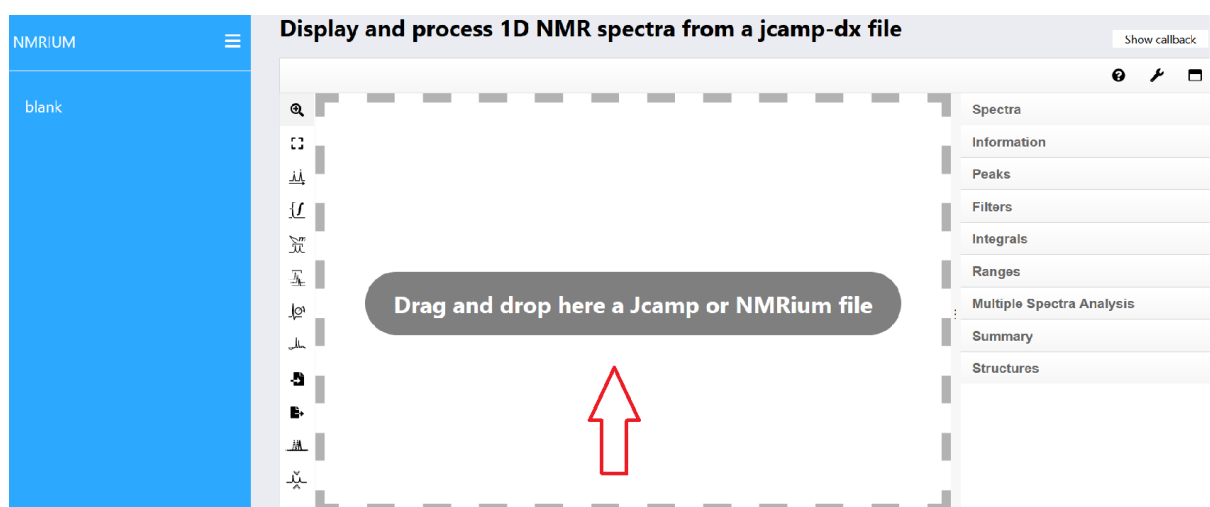
<https://www.nmrium.org/nmrium>

2. Öffnen von Spektren

Um Spektren zu öffnen, müssen Ihre Daten in einem der folgenden Dateiformate vorliegen:

- Jcamp DX (.dx, .jdx, .jcamp)
- Gezippter Ordner im Bruker-Format (Rohdaten oder prozessiert)
- Jeol (.jdf)
- NMRium-Format (.nmrium)

Ziehen Sie die Datei, die Sie öffnen wollen, in den grauen Kasten „Drag and drop here“ in der Mitte des Fensters. Sie können mehrere Dateien eines Moleküls gleichzeitig öffnen, indem Sie die Spektren entweder einzeln in den Displayer ziehen oder einen Zip-Ordner, der alle Spektren enthält, in das Feld ziehen. Auf diesem Weg können Sie auch mehrere Spektren auf einmal in der Bruker-Ordnerstruktur öffnen.



3. Auswahl der Spektren

Auf der rechten Seite des Displayers stehen Ihnen im aufklappbaren Accordeon-Menü verschiedene Bereiche zur Verfügung. Klicken Sie auf den Button „Spectra“. In dem sich öffnenden Feld werden die gemessenen Kerne (z. B. ^1H , ^{13}C , etc.) angezeigt. Klicken Sie den jeweiligen Kern an. Dort finden Sie die zum jeweiligen Kern zugehörigen Experimente. Um ein Experiment auszuwählen, klicken Sie die entsprechende Zeile an. Das Experiment erscheint in der Arbeitsfläche.



Hinweis zu Wobble-Kurven:

Sollte Ihr geöffneter Bruker-Ordner sogenannte „Wobble-Kurven“ enthalten, ist es für die weitere Bearbeitung empfehlenswert, diese aus der Liste löschen. Sie erkennen diese an der Bezeichnung „wobble“. Klicken Sie das entsprechende Spektrum mit der rechten Maustaste an. Im sich öffnenden Kontextmenü klicken Sie „delete“, um die Wobble-Kurve zu löschen.

Hinweis zur Änderung der Farbe eines Spektrums:

Sie können die Farbe des gezeigten Spektrums ändern, indem Sie in der Zeile für das Spektrum das Quadrat in der Farbe des Spektrums anklicken. Es öffnet sich ein Fenster, in dem Sie eine andere Farbe auswählen können. Bei 2D-Experimenten sind zusätzlich die Farben für die negativen und positiven Cross-Peaks wählbar.

4. Löschen von Spektren

Um einzelne Spektren zu löschen, klicken Sie im Accordeon-Menü auf der rechten Seite das entsprechende Spektrum mit der rechten Maustaste an. Im sich öffnenden

Kontextmenü klicken Sie „delete“ , um das Spektrum zu löschen. Um alle Spektren zu löschen, klicken Sie auf das Papierkorb-Symbol links oberhalb der aufgelisteten Spektren.

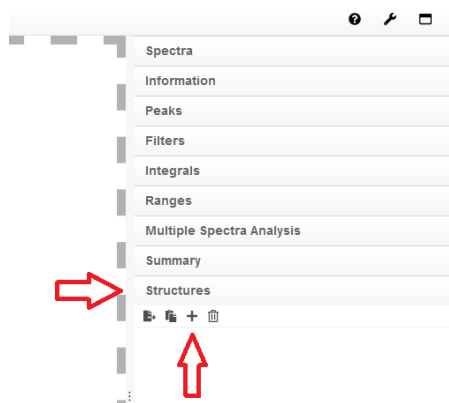
5. Vergrößern von Teilbereichen eines Spektrums

Um einen Ausschnitt eines Spektrums zu vergrößern, ziehen Sie über diesen mit der linken Maustaste. Sie können diesen Vorgang beliebig oft wiederholen. Durch einen Doppelklick an einer beliebigen Stelle im Spektrum wird der letzte Vergrößerungsschritt rückgängig gemacht, dieser Schritt ist ebenfalls mehrfach wiederholbar. Die Höhe der gezeigten Signale lässt sich mit Hilfe des Mausektrads vergrößern und verkleinern. Um das Spektrum in Originalgröße zu erhalten, klicken Sie in der Menüleiste auf der linken Seite des Spektrums auf den Button „Zoom-Out“.

6. Einfügen einer Molekülstruktur

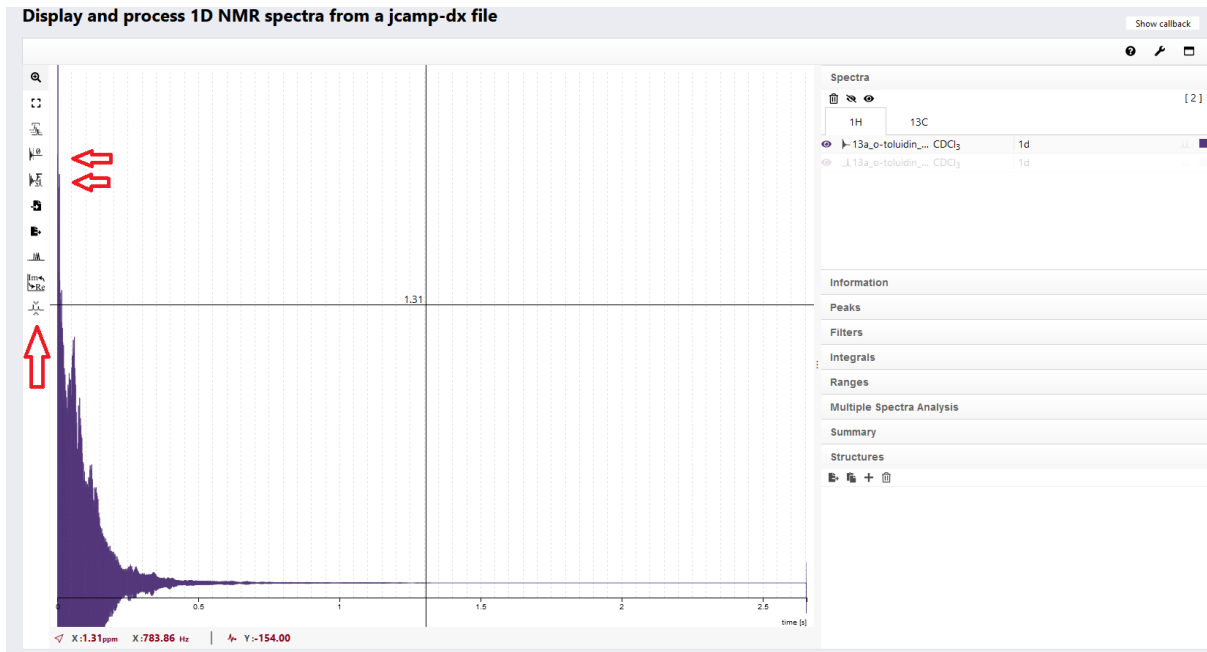
Es gibt zwei Möglichkeiten, eine Molekülstruktur in das Programm einzufügen:

- a) Molfile: Ziehen Sie das Mol-File in die Mitte des Spektrums. Es öffnet sich im Accordeon-Menü der Bereich „Structures“. Dort werden die eingefügte Molekülstruktur sowie das Molekulargewicht und die Summenformel angezeigt.
- b) Integrierter Struktureditor: Sie klicken auf das Menü „Structures“ auf der rechten Seite des Bildschirms und dann auf das Zeichen +. Es öffnet sich ein Fenster, in dem Sie Ihre Molekülstruktur selbst zeichnen können. Anschließend klicken Sie auf den Button „Save“. Im Feld „Structures“ erscheint die gezeichnete Molekülstruktur sowie das Molekulargewicht und die Summenformel



7. Prozessierung von Rohdaten (momentan nur 1D)

NMRium erlaubt auch die Fourier-Transformation (FT) der Rohdaten von eindimensionalen NMR-Spektren. Um einen FID zu prozessieren, öffnen Sie den zu bearbeitenden FID, indem Sie ihn in das Fenster "Drag and drop here" ziehen (Kapitel 2).



- a) Fourier-Transformation: Um den FID für die Fourier-Transformation vorzubereiten, klicken Sie das Symbol „Zero Filling“ links neben dem Spektrum an. Stellen Sie die gewünschten Werte für „Size“ (Zero filling) und „Line Broadening“ (exponentielle Window Function) ein und klicken Sie auf „Apply“. Anschließend führen Sie die Fourier-Transformation durch, indem Sie den Button „FFT-Filter“ links neben dem Spektrum anklicken.

Hinweis: Sollten Sie sich nicht sicher sein, welche Werte Sie einstellen müssen, so können Sie sich an folgenden Empfehlungen orientieren:
„Size“: Wählen Sie doppelt so viele Punkte wie im ursprünglichen FID.
„Line Broadening (LB)“: Geben Sie für ^1H -Spektren 0,3 Hz und für ^{13}C 1-3 Hz an.

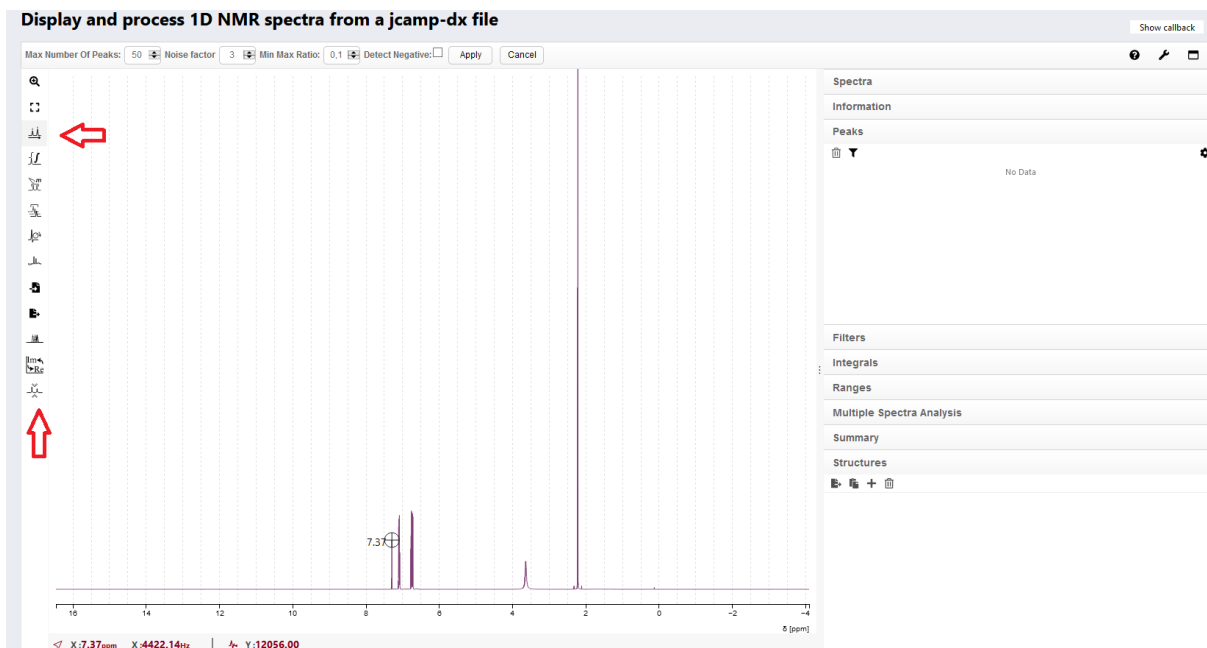
- b) Phasenkorrektur: Klicken Sie das Symbol „Phase correction“ links neben dem Spektrum an. Sie können zwischen manueller Phasenkorrektur und automatischer Phasenkorrektur wählen.
Automatische Phasenkorrektur: Klicken Sie den Button „Apply“ an, die Phase wird automatisch korrigiert.
Manuelle Phasenkorrektur: Sie können eine Phasenkorrektur nullter Ordnung und erster Ordnung durchführen.

Klicken Sie für die Phasenkorrektur nullter Ordnung auf den grünen Button „PH0“ oberhalb des Spektrums und halten Sie ihn gedrückt. Durch Bewegung der Maus nach links oder rechts können Sie die Phasenkorrektur durchführen, bis das Signal korrekt phasiert ist, und lassen den Button los. Durch Doppelklicken können Sie den Pivot Point (rote Linie) für die Phasenkorrektur erster Ordnung verschieben.

Die Phasenkorrektur erster Ordnung wird analog durchgeführt, indem Sie „PH1“ drücken. Dabei sollte das Augenmerk auf den Signalen liegen, die möglichst weit vom Signal unter dem Pivot Point entfernt sind. Durch Klicken des Buttons „Apply“ wird die Phasenkorrektur abgeschlossen.

8. Referenzierung

Klicken Sie den Button „Peaks Picking“ links vom Spektrum an. Suchen Sie Ihr Lösungsmittelsignal (bzw. das Referenzsignal). Wenn Sie es im Fadenkreuz sehen, drücken Sie die Shift-Taste und gleichzeitig die linke Maustaste. Der Wert des Signals wird Ihnen sowohl im Spektrum als auch auf der rechten Seite des Spektrums unter dem Button „Peaks“ in einer Liste angezeigt. Markieren Sie einen der beiden angezeigten Werte (im Spektrum Einfachklick mit der linken Maustaste, in der Liste Doppelklick mit der linken Maustaste) und geben Sie den korrekten Referenzwert ein.



9. Peak Picking

Klicken Sie auf den Button „Peaks Picking“. Sie können zwischen automatischen Peak Picking und manuellem Peak Picking wählen.

- a) Automatisches Peak Picking: Oberhalb des Spektrums erscheint eine Liste, in der Sie die maximale Anzahl an Peaks („Max Number Of Peaks“), den Rauschfaktor (Noise Factor) und das Minimum-Maximum-Verhältnis (Min Max Ration) angeben müssen. Anschließend drücken Sie auf „Apply“. Die chemische Verschiebung der Peaks wird sowohl im Spektrum als auch in einer Liste auf der rechten Seite des Spektrums unter dem Button „Peaks“ angezeigt.
- b) Manuelles Peak Picking: Gehen Sie auf ein ausgewähltes Signal. Wenn Sie es im Fadenkreuz sehen, drücken Sie die Shift-Taste und gleichzeitig die linke Maustaste. Der Wert des Signals wird Ihnen sowohl im Spektrum als auch auf der rechten Seite des Spektrums unter dem Button „Peaks“ in einer Liste angezeigt.

10. Löschen von Peaks

Wenn Sie eine einzelne Peaks löschen möchten, so suchen Sie das entsprechende Signal auf der rechten Seite des Spektrums in der Liste unter dem Button „Peaks“. Klicken Sie das Papierkorbsymbol ganz rechts in der Zeile an, der Peak wird gelöscht.

Wenn Sie alle Peaks löschen möchten, so klicken Sie den Papierkorb an, der sich oberhalb der Signalliste unter dem Button „Peaks“ befindet. Bestätigen Sie, dass Sie alle Peaks löschen möchten, indem Sie „Yes“ in dem sich öffnenden Fenster anklicken.

11. Einstellung der angezeigten Werte in der Liste „Peaks“

Sie können sich verschiedene Informationen in der Liste „Peaks“ anzeigen lassen. Öffnen Sie hierfür die Liste „Peaks“ auf der rechten Seite des Spektrums. Klicken Sie auf das Zahnrad oben rechts. Es werden Ihnen alle untersuchten Kerne angezeigt. Sie können sich pro Kern folgende Größen anzeigen lassen:

- Peaknummer (Peak Number)
- Peakindex (Peak Index)
- Chemische Verschiebung in ppm
- Chemische Verschiebung in Hz
- Peakbreite (Width)

- Intensität (Intensity)

Setzen Sie einen Haken an die Größen, die angezeigt werden sollen, beim jeweiligen Kern. Anschließend klicken Sie oben rechts auf den grünen Haken.

12. Integration

Klicken Sie den Button „Integral tool“ auf der linken Seite des Spektrums an. Wenn Sie ein Signal integrieren wollen, halten Sie die Shift-Taste gedrückt und fahren Sie mit der Maus über das Signal, während Sie die linke Maustaste gedrückt halten. Anschließend lassen Sie sowohl die Shift- als auch die linke Maustaste los. So verfahren Sie mit jedem Signal, das Sie integrieren wollen. Die Integrale werden Ihnen auf der rechten Seite des Spektrums unter dem Button „Integrals“ in einer Liste angezeigt.

Es ist voreingestellt, dass die relative Anzahl aller integrierten H-Atome 100 beträgt. Zum Ändern der Anzahl klicken Sie auf das Summensymbol oberhalb der Liste. Im sich öffnenden Fenster können Sie entweder die Anzahl der H-Atome manuell eingeben und anschließend auf „Set“ klicken oder die Anzahl der H-Atome, die durch die Summenformel vorgeben ist, übernehmen, indem Sie im unteren Bereich auf „Set“ klicken.


Set new Integrals Sum (Current: 100) ✖

Enter the new value Set

↑ **OR**

Select a molecule as reference!

1 / 1



C₇H₉N - 107.16

Set ←

New sum for H will be 9!

13. Löschen von Integralen

Wenn Sie ein einzelnes Integral löschen möchten, so suchen Sie das entsprechende Signal auf der rechten Seite des Spektrums in der Liste unter dem Button „Integrals“. Klicken Sie das Papierkorbsymbol ganz rechts in der Zeile an, das Integral wird gelöscht. Alternativ können Sie am unteren Rand des Spektrums auf den roten

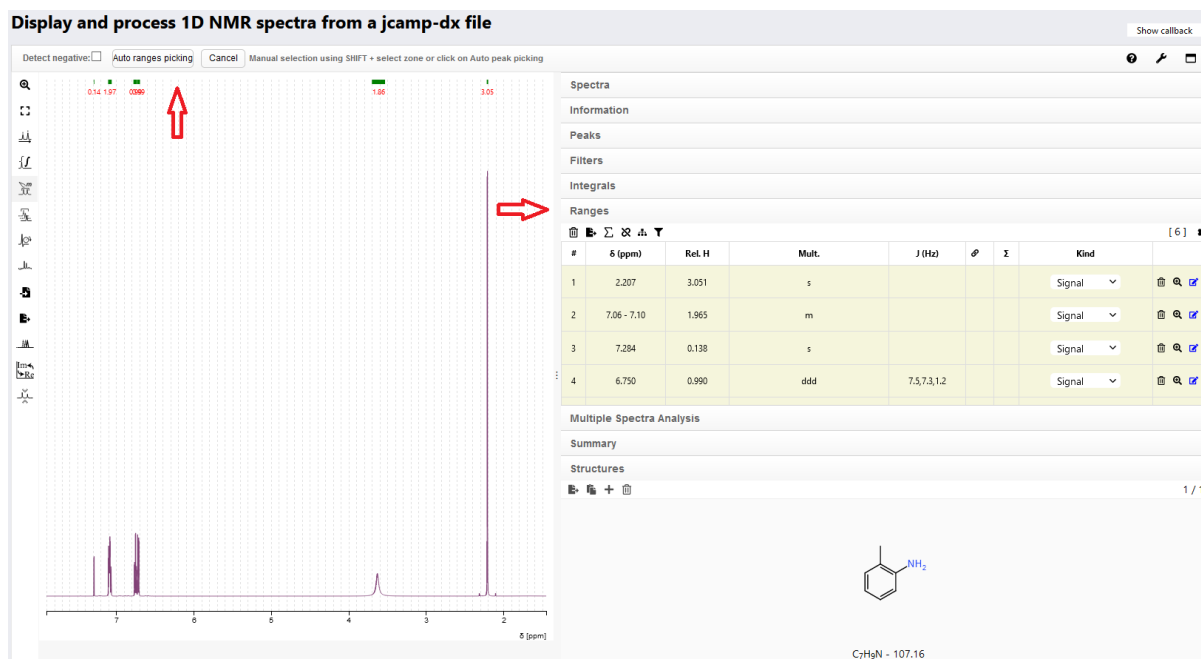
Kasten klicken, der zum jeweiligen Integral gehört. Das entsprechende Integral wird gelöscht.

Wenn Sie alle Integrale löschen möchten, so klicken Sie den Papierkorb an, der sich oberhalb der Signalliste unter dem Button „Integrals“ befindet. Bestätigen Sie, dass Sie alle Integrale löschen möchten, indem Sie „Yes“ in dem sich öffnenden Fenster anklicken.

14. Markierung von Zuordnungs-Bereichen und Bestimmung von Kopplungskonstanten

Klicken Sie auf den Button „Ranges Picking“ auf der linken Seite des Spektrums, um bestimmte Zuordnungs-Bereiche, zum Beispiel zur Bestimmung von Kopplungskonstanten, festzulegen. Sie haben die Möglichkeit, entweder manuell oder automatisch die Zuordnungs-Bereiche festzulegen:

- a) Automatische Festlegung von Zuordnungs-Bereichen: Oberhalb des Spektrums erscheint eine Liste. Klicken Sie auf den Button „Auto ranges picking“, die Zuordnungs-Bereiche werden automatisch bestimmt und sowohl im Spektrum als auch in einer Liste auf der rechten Seite des Spektrums unter dem Button „Ranges“ angezeigt. Es werden automatisch die dazugehörigen Kopplungskonstanten bestimmt.
- b) Manuelle Festlegung von Zuordnungs-Bereichen: Drücken Sie die Shift-Taste und fahren Sie mit der Maus über den Zuordnungs-Bereich, den Sie festlegen wollen. Der markierte Zuordnungs-Bereich wird sowohl im Spektrum als auch in einer Liste auf der rechten Seite des Spektrums unter dem Button „Ranges“ angezeigt. Es werden automatisch die dazugehörigen Kopplungskonstanten bestimmt.



15. Löschen von Zuordnungs-Bereichen

Wenn Sie einen einzelnen Zuordnungs-Bereich löschen möchten, so suchen Sie den entsprechende Zuordnungs-Bereich auf der rechten Seite des Spektrums in der Liste unter dem Button „Ranges“. Klicken Sie das Papierkorbsymbol ganz rechts in der Zeile an, der Zuordnungs-Bereich wird gelöscht.

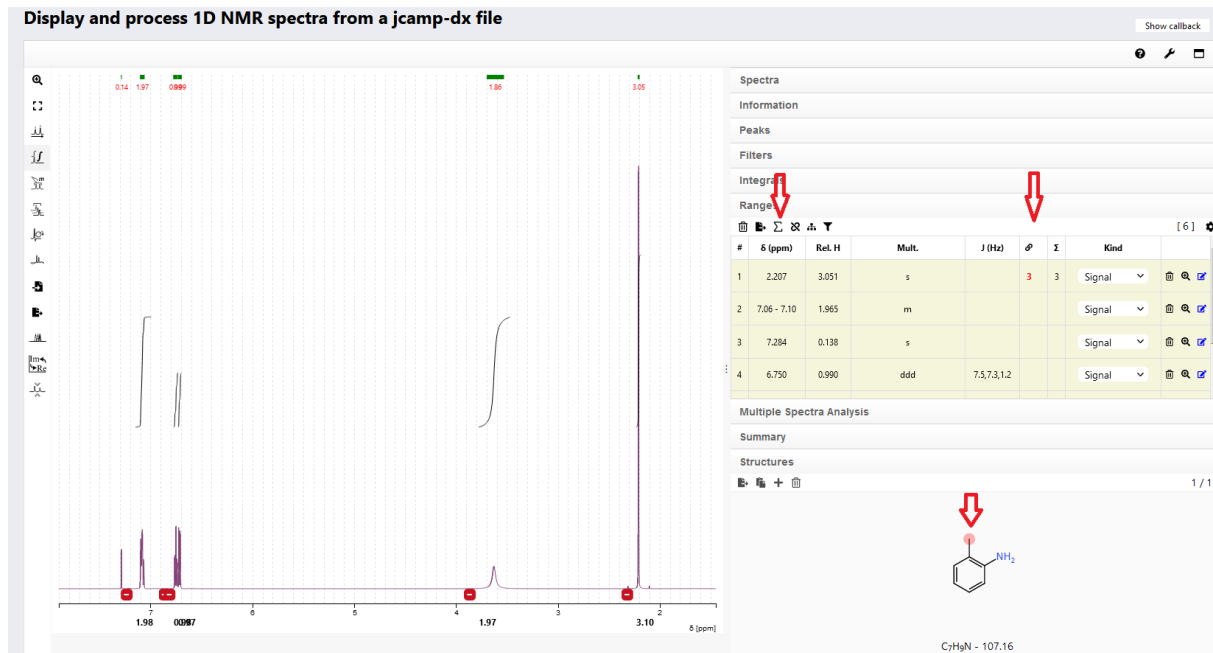
Wenn Sie alle Zuordnungs-Bereiche löschen möchten, so klicken Sie den Papierkorb an, der sich oberhalb der Signalliste unter dem Button „Ranges“ befindet. Bestätigen Sie, dass Sie alle Bereiche löschen möchten, indem Sie „Yes“ in dem sich öffnenden Fenster anklicken.

16. Zuordnung von Signalen

Um Signale zuordnen zu können, müssen Sie Zuordnungs-Bereiche festgelegt haben (Kapitel 14) und eine Molekülstruktur eingefügt haben (Kapitel 6). Öffnen Sie auf der rechten Seite die Menüs „Ranges“ und „Structures“. Geben Sie die korrekte Anzahl an relativen H-Atomen an, indem Sie das Summensymbol oberhalb der Liste „Ranges“ anklicken. Im sich öffnenden Fenster können Sie entweder die Anzahl der H-Atome manuell eingeben und anschließend auf „Set“ klicken oder die Anzahl der H-Atome, die durch die Summenformel vorgeben ist, übernehmen, indem Sie im unteren Bereich auf „Set“ klicken.

Klicken Sie in der Liste in der Zeile des Signals, das Sie zuordnen wollen, auf das Kästchen unter dem Verknüpfungssymbol. Es erscheint dort eine rote Null. Ordnen Sie anschließend das Signal zu, indem Sie in der Strukturformel auf die dazugehörigen Atome klicken. Verfahren Sie so mit allen weiteren Bereichen. Sie

können einem Bereich auch mehrere, unterschiedliche H-Atome zuordnen, indem Sie nacheinander alle H-Atome in der Strukturformel anklicken, die zum jeweiligen Signal gehören. Wenn man diastereotope H-Atome zuordnen möchte, dann klickt man bei gedrückter Shift-Taste die entsprechende das entsprechende H-Atom in der Struktur an. Dadurch werden beide diastereotopen H-Atome sichtbar.



17. Export von ausgewerteten Spektren

Um das ausgewertete Spektrum zu exportieren, klicken Sie auf den Button „Export“ links vom Spektrum. Es öffnet sich ein Feld, in dem Sie auswählen können, in welchem Format Sie Ihr Spektrum exportieren wollen. Sie haben folgende Möglichkeiten:

- svg-Datei (Klicken Sie „Export as SVG“ an)
- png-Datei (Klicken Sie „Export as PNG“ an)
- Bild (Klicken Sie „Copy image to Clipboard“ an)

Um das ausgewertete Spektrum mit allen hinterlegten Informationen zu speichern und später weiter bearbeiten zu können, klicken Sie „Save data“ an. Es wird eine nmrium-Datei erstellt.

Hinweis:

Eine nmrium-Datei ist eine komprimierte Textdatei, die alle Informationen der (teil-)ausgewerteten, gespeicherten Spektren enthält. Je nach Anzahl der

enthaltenen Spektren kann die Speicherung länger dauern, ebenso das Öffnen einer nmrium-Datei mit dem Displayer.