Návod pro nastavení měření vzorků v programu Delta

Záložka "Samples"

<u>Vytvoření specifikací vzorku:</u> V záložce "Samples" klikněte na tlačítko *(horní levý roh)*. Vzorek pojmenujte (b0, b1,...). Dávejte pozor, kterému vzorku spravujete nastavení – upravovaný vzorek je vždy v zeleném poli. V sloupci "Solvent" vyberte ze seznamu použité rozpouštědlo. Do sloupce "Slot" vepište číslo z podavače, do kterého jste vložili vzorek (psáno na podavači vpravo dole). Pokud je vzorek již umístěn v podavači, zaškrtněnte pole "Verified".

Pro měření ¹H NMR nastavte pro vzorky následující parametry.

2. Parametry měření vzorku:

gradient shim	\checkmark
lock_state	AUTOLOCK
preparation	\checkmark
spin set	15 Hz
spin_state	SPIN ON
temp_state	TEMP ON
temp_set	27 [dC]
temp_delay	480 [s]

Pro přidání položky "temp_delay" klikněte na tlačítko "Add a new attribute" (malé zelené plus) a vyberte položku.

ĺ	4 - R Sample Control: 🛞 Load De Interactive																	
Į	No. Sample Name 🔺 Solvent						Slot		Kind		Shared	Verified	Error	Owner		Last Load		
1	7 30 = b6 D20 ♦						57 🖪	•	Liquids (Ø		delta	4	days ago		
		Attributes		- preparator	ai -	' T 🖤												
	- spin_set 🔻 15[Hz]															•		
	- spin_state V SPIN ON \$																	
				- temp_dela	ay	▼ 60[s]								•				
				 temp_set 		7 27[dC]							H					
				- temp_stat	te y	TEMP ON ¢									ų			

3. V záložce "Create a Job" napište název "LabNMR_proton" a stiskněte "Create a Job with this Sample".

Create a Job	Update Job(s)
inter a title for the new job:	
KK_ROESY	
Add the Job Id to the title:	
only if necessary always	Create a Job with this Sample

Nyní jste v záložce "Jobs"

- 4. Ve vámi vytvořené záložce "LabNMR_proton" klikněte na "Add Experiment". Ve vyskakovacím okně vyberte "Global" "basic" "proton.jxp".
- 5. V záložce "Header" zaškrtněte políčko "Autogain".

6. V záložce "Acquisition" nastavte parametry měření:

x_domain	Proton
x_offset	5.5 [ppm]
x_sweep	6 [ppm]
x_points	16384
scans	16
x_prescans	1
mod_return	1

- 7. Kliknutím na "Submit Job" spustíte měření.
- 8. Pro měření dalších protonových spekter se shodným nastavením stačí v záložce "Samples" kliknout na "Update Job(s)" a vyberete ze seznamu položku *LabNMR_proton*.