

安装核磁数据处理软件

前言

后面“核磁共振谱写分析”的实验，你将会亲自操作核磁谱仪，并且获得核磁数据。而这些数据需要用专门的核磁数据处理软件才能够进行谱图变换，寻峰，谱峰积分等等操作。厦大化院目前有9台核磁谱仪，其中8台是Bruker核磁谱仪，1台是中科牛津谱仪。有8台谱仪是完全开放，其中7台是液体核磁（3台400MHz核磁，2台500MHz核磁，1台600MHz核磁，1台850MHz核磁），还有1台固体400MHz核磁。除了中科牛津谱仪，其他所有数据都是Bruker核磁谱仪数据格式，当然中科牛津数据也可以转换为Bruker数据格式。所以后面我们主要是说明Bruker数据格式的处理。

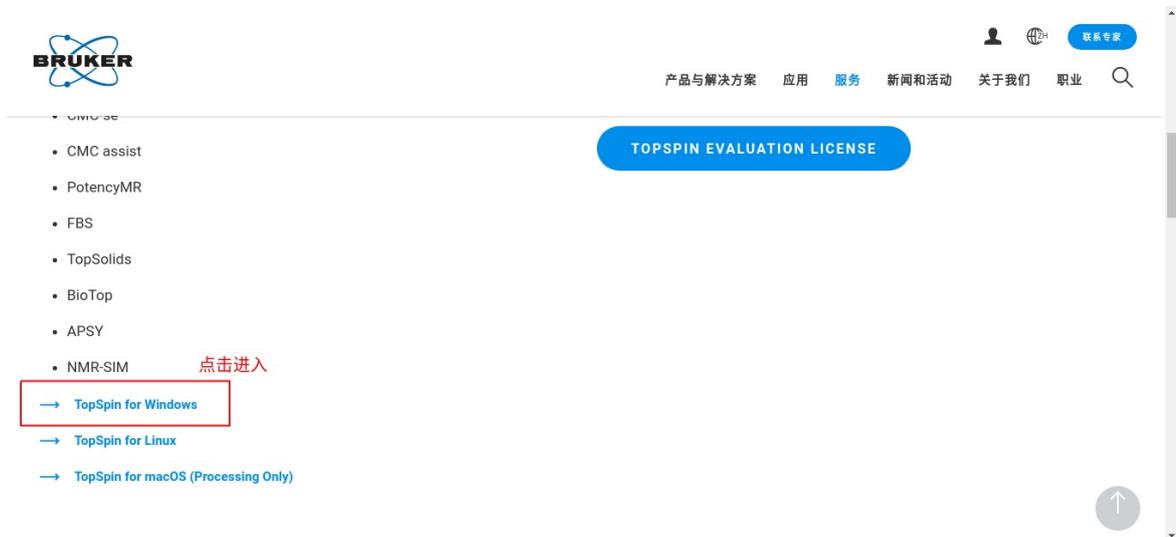
核磁处理软件列表

以下列出目前用得比较多的核磁数据处理软件，其中我们主要是推荐Bruker公司的**Topspin 3.x**版本。

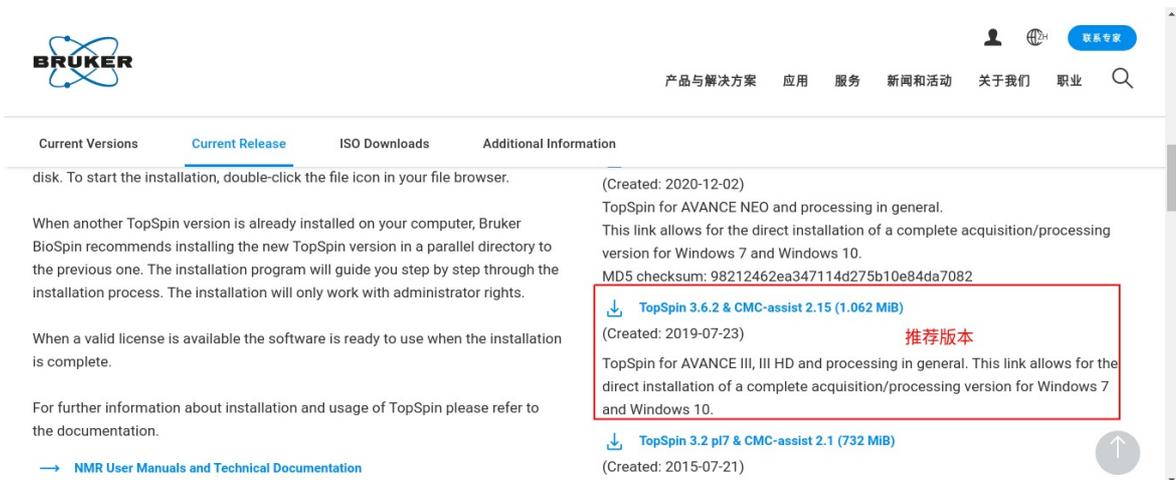
- **Topspin** 目前有提供学术免费版本。我建议学术注册账号，下载该软件进行安装（后面我会详细列出具体安装操作）。
- **MNOVA** 该软件具有较好的出图效果，可以绘制更加漂亮的谱图；但是并没有免费版本，有30天试用版本。
- **ACDNMR** 也是不错的谱图处理软件，不仅有NMR也可以处理MS和IR等。但是也是商业软件，有60天试用版本。
- **NMRPipe**， **matNMR** 完全开源免费版本，但是安装操作比较麻烦，出图效果不是很好。如果你会试用Python，也可以尝试用库 **nmrglue** 读取原始数据进行谱图变换，然后用 **matplotlib** 等出图。

Topspin 安装

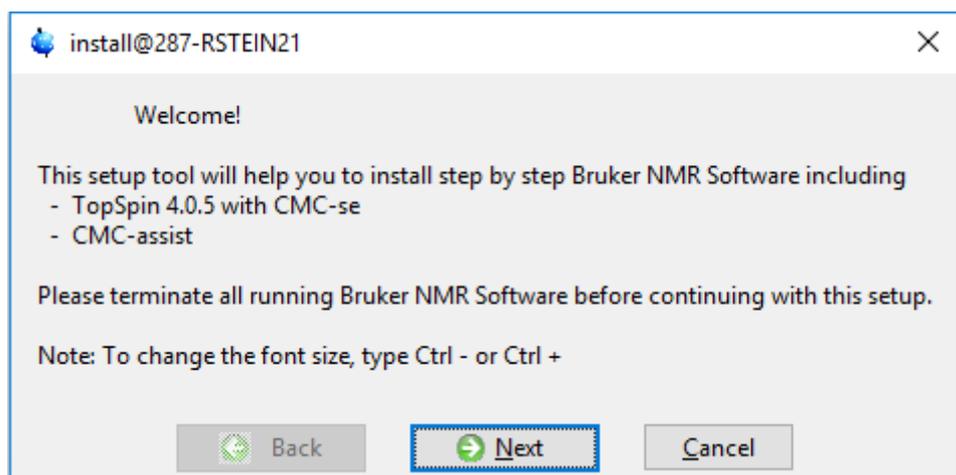
1. 打开布鲁克官网页面，注册并登录(注意要用xmu.edu.cn结尾的邮箱，并且最好用校园网登录，要不然可能出现审核不通过)

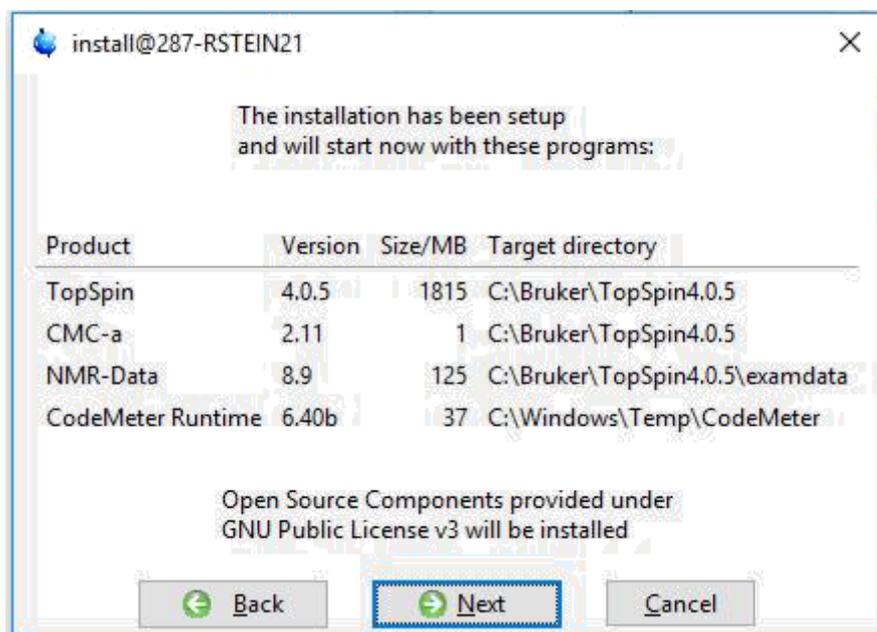
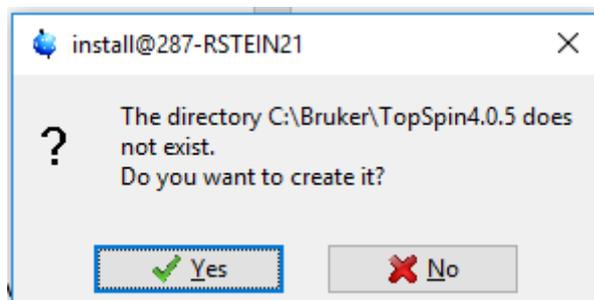
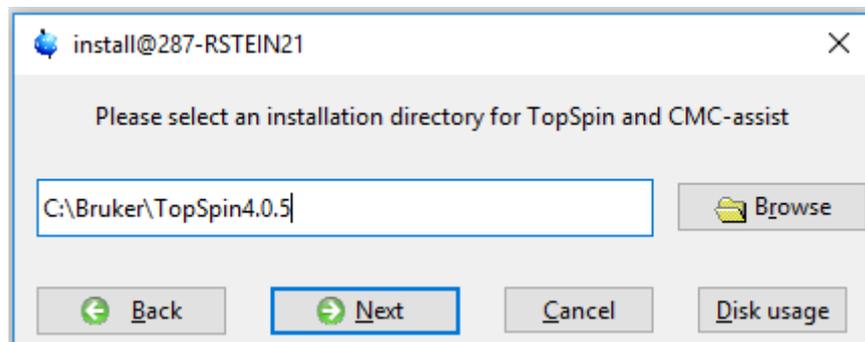
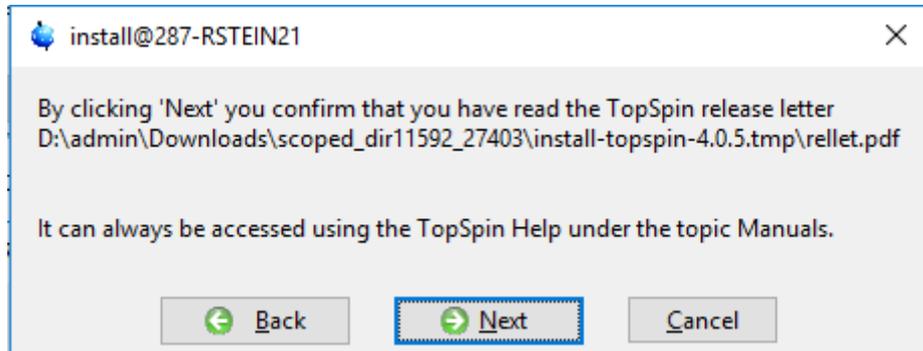
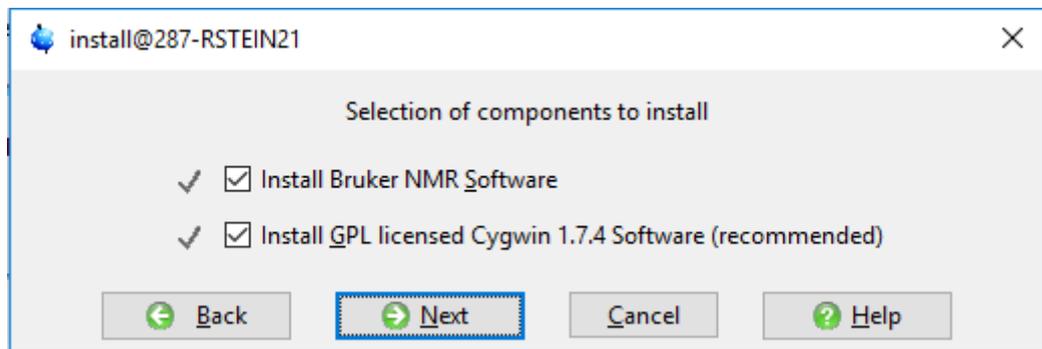


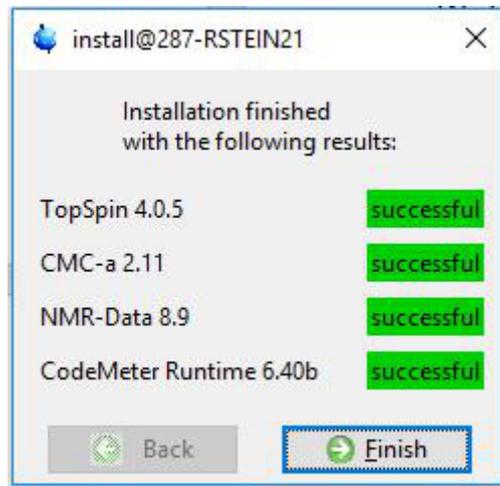
2. 找到合适的版本进行下载（推荐下载3.6.2版本，你也可以用最新版本4.x以上版本）



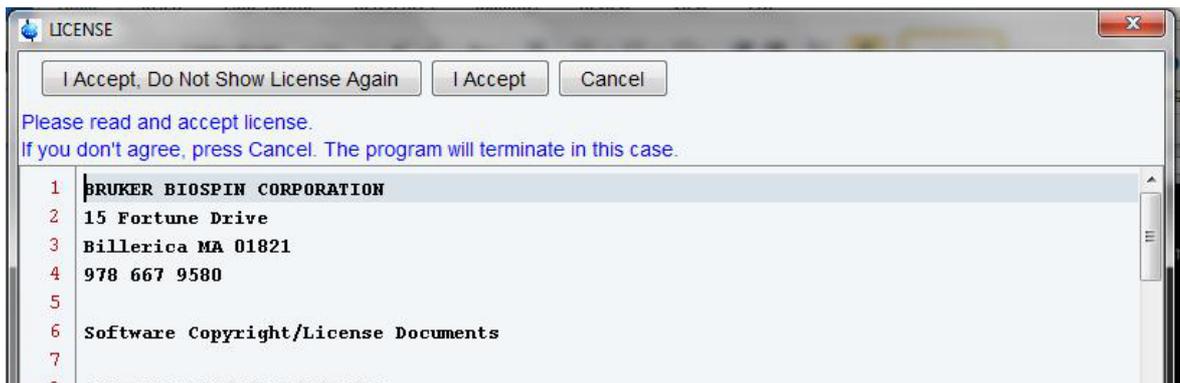
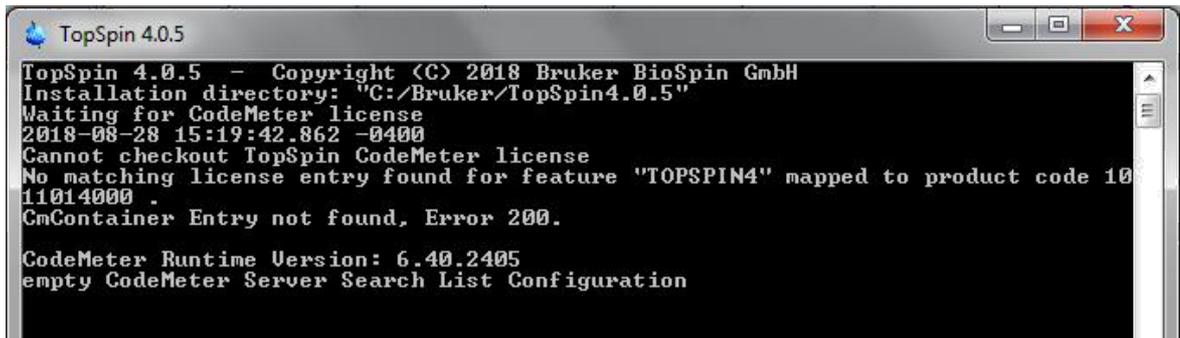
3. 下载到本地双击打开，按照提示安装，一直next，直到全部完成，显示Finish。

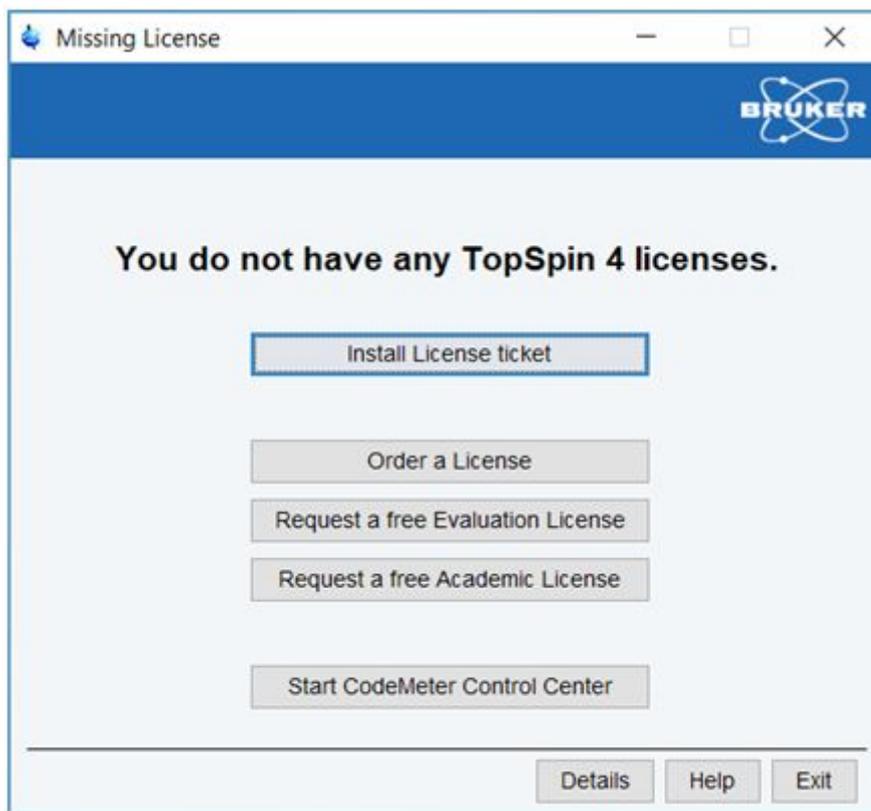






4. 打开安装好的软件，显示如下：





点击“Request a free Academic License”

5. 登录刚才注册的网页，然后产生一个学术版本的License。

NMR Software & Downloads

TopSpin

TopSpin is available for Windows, Linux and macOS and includes following products:

- IconNMR
- SmartDriveNMR
- CMC-q
- CMC-se
- CMC assist
- DotanceMP



Generate License Code

TopSpin processing software is free for academia and government institutions. And you can get an Evaluation license for the full Bruker Suite here (requires login).

TOPSPIN ACADEMIA LICENSE

TOPSPIN EVALUATION LICENSE

联系专家

产品与解决方案 应用 服务 新闻和活动 关于我们 职业

Disclaimer

Access to Academia licenses is restricted to academic customers. By using this web page for license requests you confirm that you are employed by or studying at an academic- or governmental institution and that you use the software exclusively in this context. Your request and the license generation will be logged. If you do not agree with this, please do not continue.

In the next step a personal ticket code will be generated for you. With this ticket code you can activate the Academia license on a compatible computer of your choice and use the software:

REQUEST ACADEMIA LICENSE

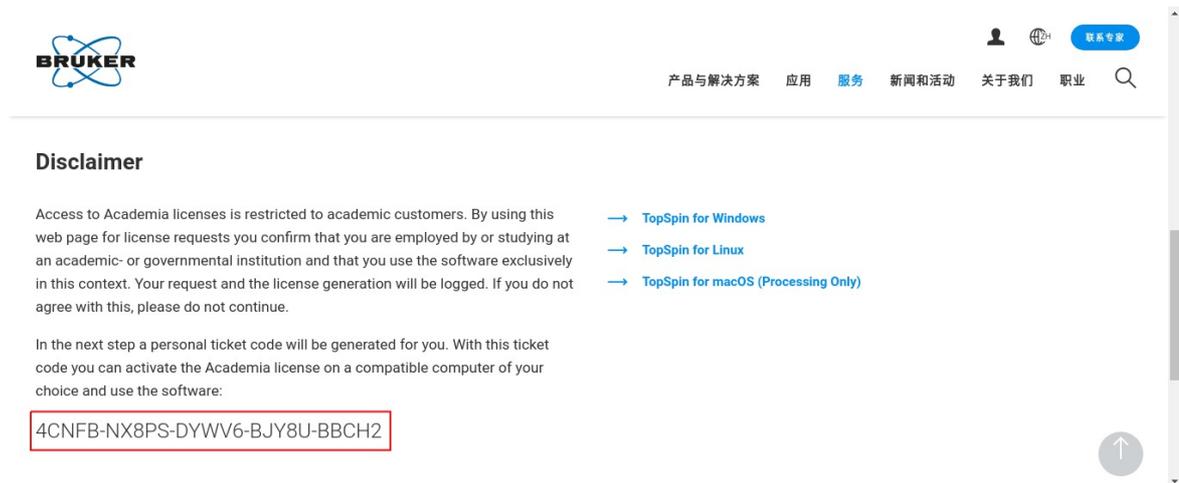
→ [TopSpin for Windows](#)

→ [TopSpin for Linux](#)

→ [TopSpin for macOS \(Processing Only\)](#)

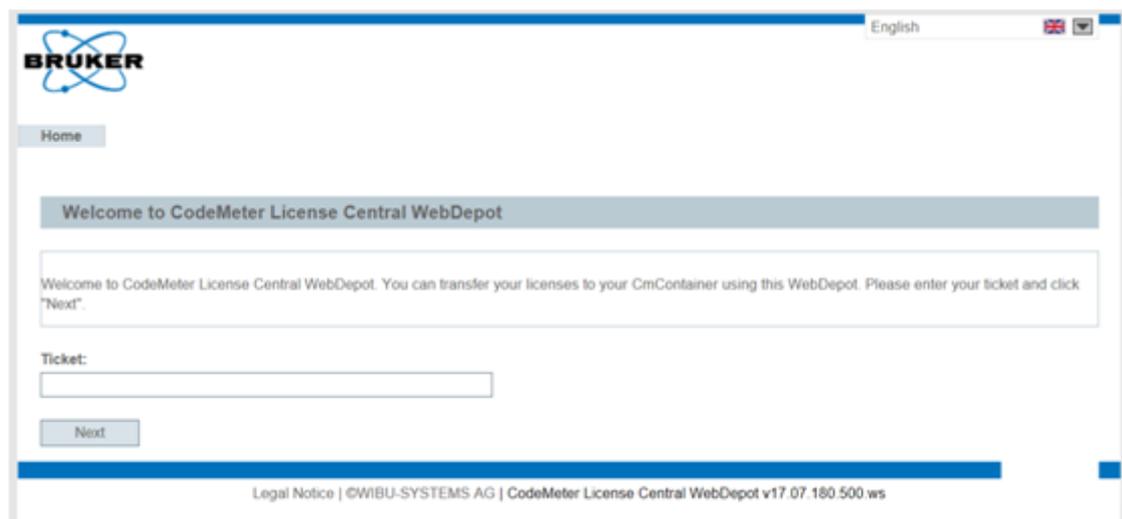
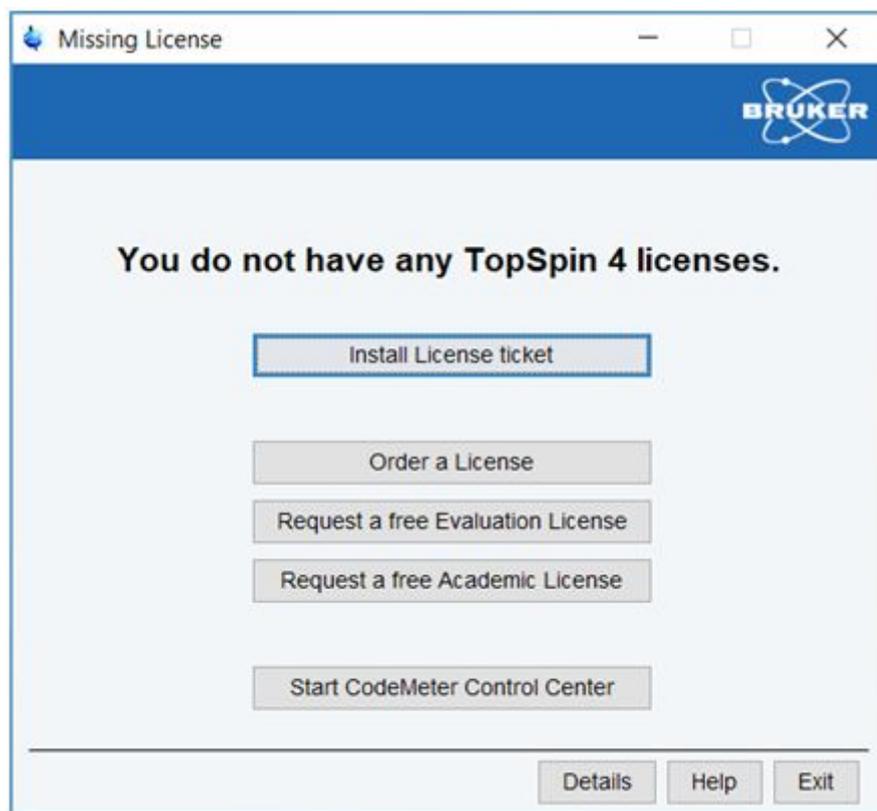


点击红框所示，生成如下图所示代码：

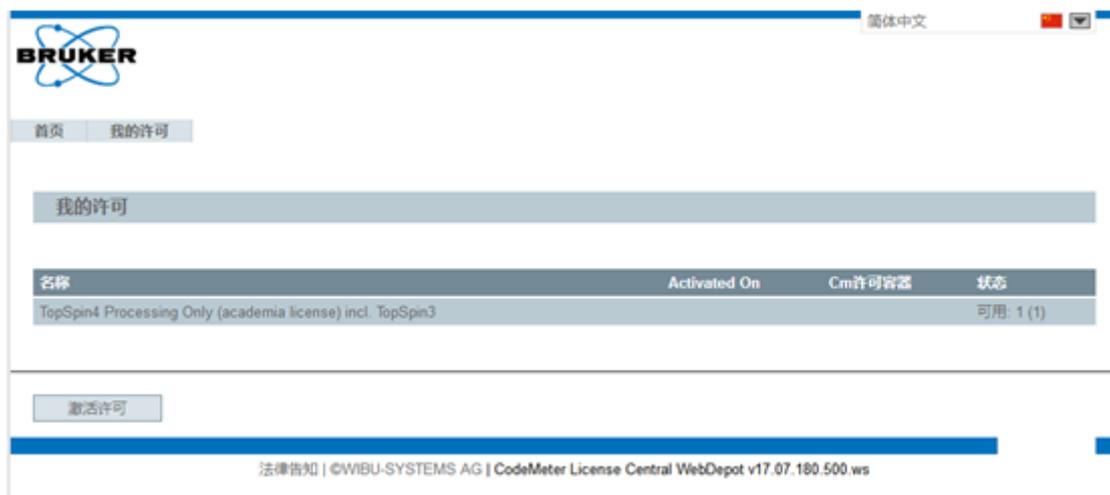


The screenshot shows the Bruker website's disclaimer page. The Bruker logo is in the top left. The navigation menu includes: 产品与解决方案, 应用, 服务, 新闻和活动, 关于我们, 职业, and a search icon. A blue button labeled "联系我们" is in the top right. The main content area has a "Disclaimer" section with the following text: "Access to Academia licenses is restricted to academic customers. By using this web page for license requests you confirm that you are employed by or studying at an academic- or governmental institution and that you use the software exclusively in this context. Your request and the license generation will be logged. If you do not agree with this, please do not continue." Below this text are three links: "→ TopSpin for Windows", "→ TopSpin for Linux", and "→ TopSpin for macOS (Processing Only)". Further down, it says: "In the next step a personal ticket code will be generated for you. With this ticket code you can activate the Academia license on a compatible computer of your choice and use the software:". A red box highlights the license ticket code: "4CNFB-NX8PS-DYWV6-BJY8U-BBCH2". A vertical scrollbar is on the right side.

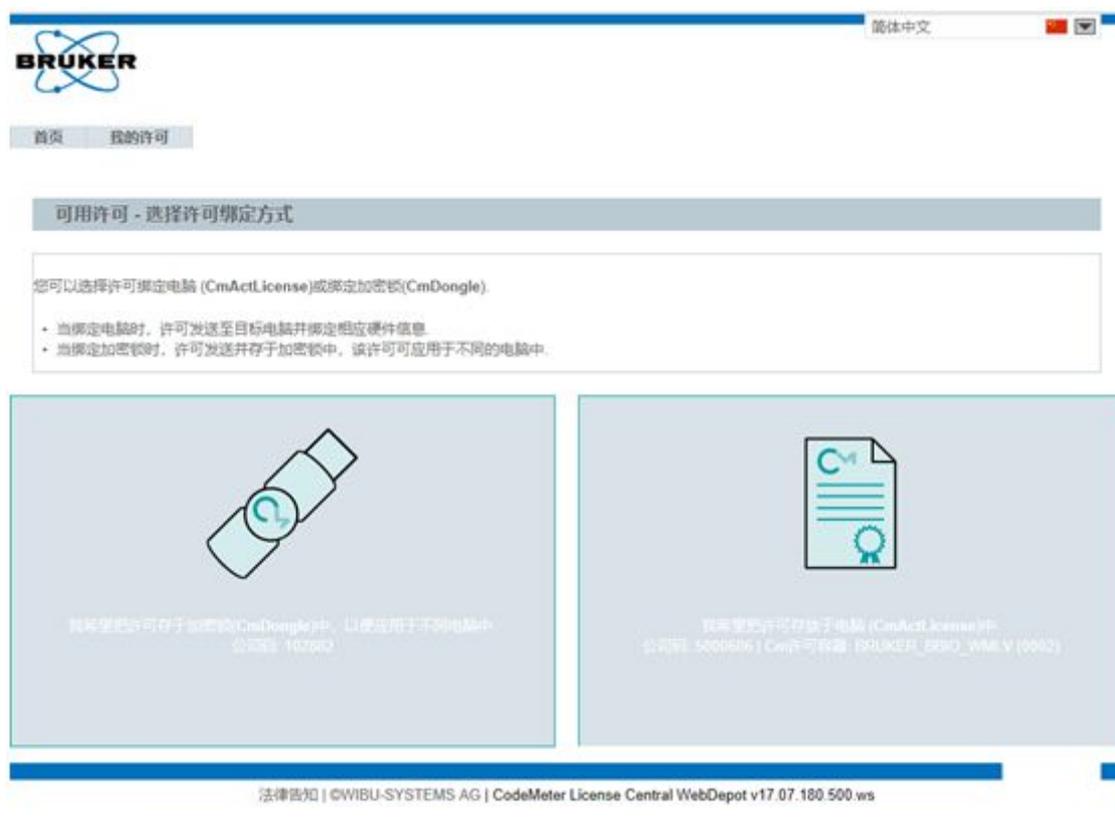
将该代码复制后回到topspin软件打开的界面里面的“Install License ticket”。



考入刚才那个代码，点击Next，出现如下所示界面：



点击激活许可后出现如下界面,选择绑定方式为存于当前电脑并激活:





可用许可

激活许可:

1. 请选择您想要激活的许可。
2. 请选择本地Cm许可容器用于存放许可。
3. 点击“现在激活您所选择的许可”。

名称	Activated On	Cm许可容器	状态
<input checked="" type="checkbox"/> TopSpin4 Processing Only (academia license) incl. TopSpin3			可用

选择Cm许可容器

32767-30145 (BRUKER_BBIO_WMLV)

现在激活所选择的许可

离线许可发送

- 选择绑定方式
- 我的许可

在线许可发送

!
 请等待! 选择的许可已被传送. 此过程需等待几分钟. 在此过程中请勿移除Cm许可容器或刷新页面.



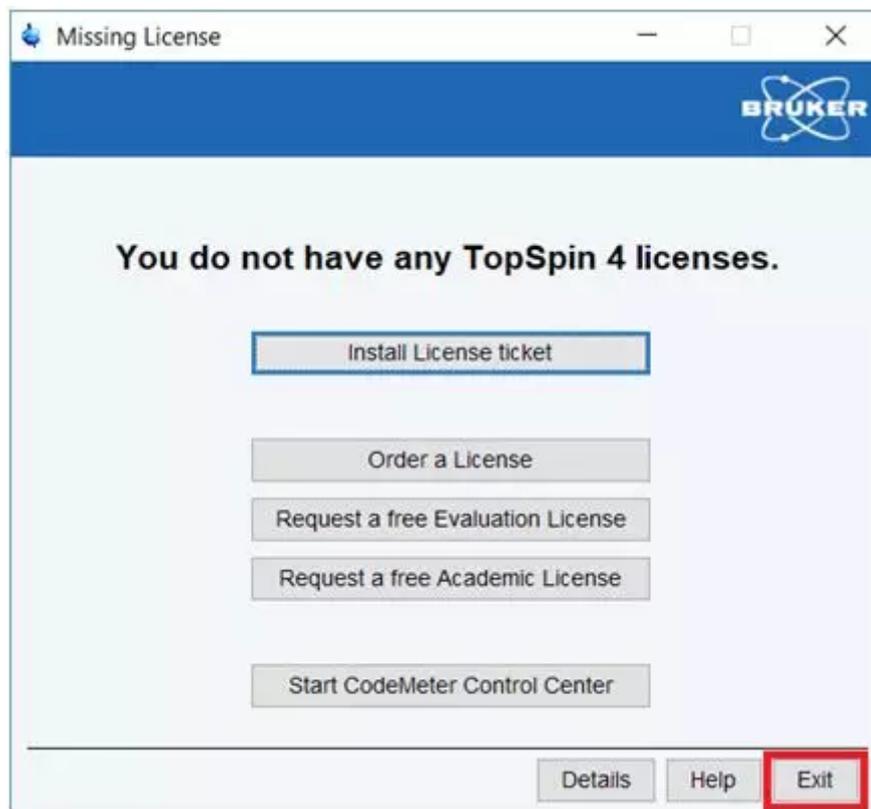
正在许可发送.
 正在创建许可请求文件.
 正在下载许可更新文件.

在线许可发送

正在许可发送.
 正在创建许可请求文件.
 正在下载许可更新文件.
 正在导入许可更新文件.
 正在创建收据文件.
 正在上传收据文件.

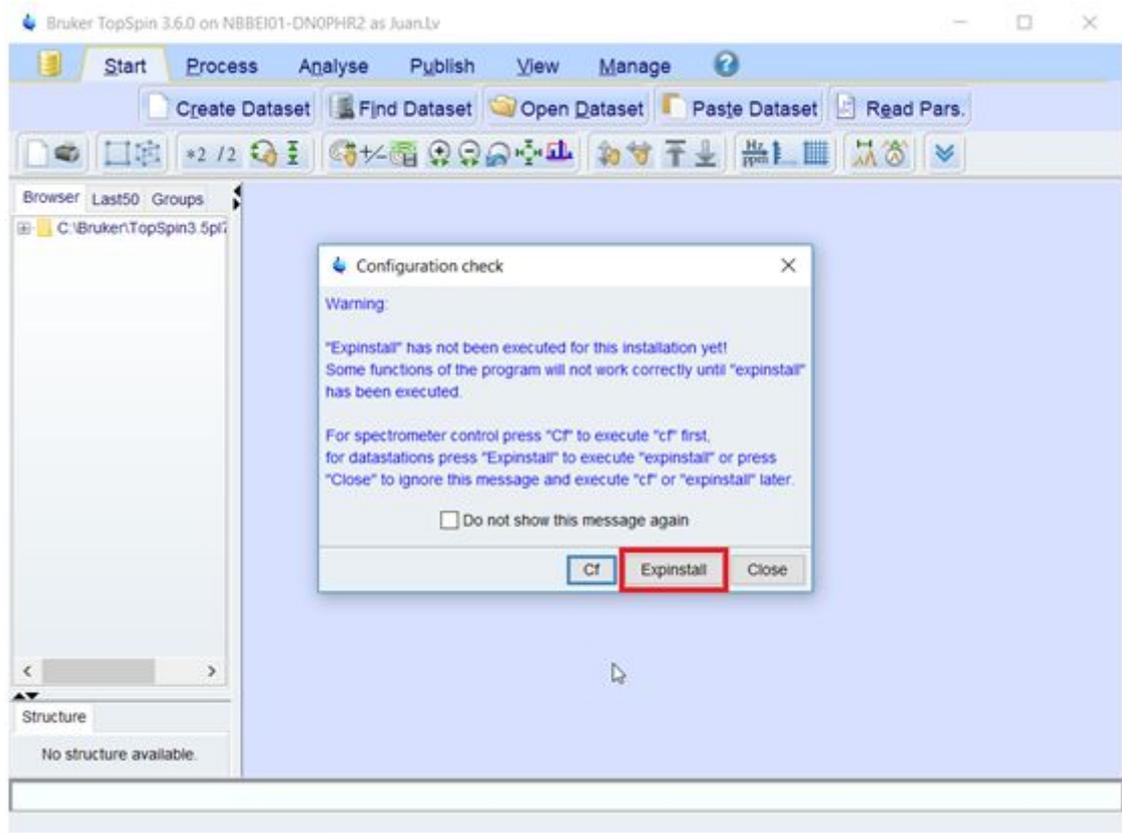
许可成功发送

Ok



6. 重新打开软件，点击I Accept, Do Not Show License Again后点击 Expinstall安装实验模板等信息（或是在命令行输入expinstall安装）。注意输入的密码为安装软件时的密码。安装完毕点击close即可





注脚：很多内容拷贝于布鲁克磁共振微博