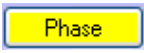
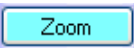
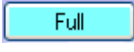




## Anleitung zum Prozessierung von Daten mit „SpinWorks“

1. Öffnen Sie „**SpinWorks**“ durch Klicken auf das Desktop-Icon oder durch Klicken auf das „*Start*“-Feld in Windows, und Auswahl von „SpinWorks“ unter der Rubrik „*Programme*“.
2. Sobald das Programmfenster offen ist auf „**file**“ (Hauptmenü-Zeile, oben links) klicken, und aus Liste „**open**“ anwählen. Im sich öffnenden Fenster einen FID wählen (Datei „**fid**“ aus entsprechendem Dateiordner, Beispiel für die Dateistruktur: „Spektren“/1/**fid**).
3. Spektrum laden durch Doppelklick auf „**fid**“-Datei.
4. FID wird durch Klicken auf „**Processing**“ (Hauptmenü-Zeile) und anschließend auf „**Window + ft**“ einer Fourier-Transformation mit exponentieller Fensterfunktion unterzogen.
5. Phasenkorrektur: Klick auf gelbes Icon () unten im rechten Frame-Menü [optional kann auch die „**Autophase**“-Option verwendet werden]. Im sich öffnenden Fenster wird per Maus mit Hilfe der Schieber zuerst eine Phasenkorrektur nullter Ordnung („**ph0**“) grob („**coarse**“) oder fein durchgeführt, bis von Programm automatisch gewähltes, größtes Signal (von Software mit grüner Linie markiert) korrekt phasiert ist. Dann Phasenkorrektur 1ter Ordnung mit den übrigen Signalen, indem mit der Maus der Grob-, bzw. Feinschieber für „**ph1**“ verschoben wird. Dabei sollte das Augenmerk auf Signalen liegen, die möglichst weit vom Hauptsignal entfernt sind. Durch Klicken auf „**Apply and exit**“ wird Phasenkorrektur beendet.
6. Spreizungen oder Ausschnitte aus Spektrum: Zunächst gewünschten Bereich im Spektrum mit zwei Linksklicks definieren (zwei rote Linien erscheinen). Durch Klick auf „“-Icon wird Bereich gespreizt. Durch Klick auf „“-Icon kann wieder gesamtes Spektrum eingeblendet werden. Höhe der gezeigten Signale kann kontinuierlich vergrößert oder reduziert werden, indem das Rad (Mitteltaste - wenn eingestellt) der Maus gedreht wird, bzw. durch Klick auf Plus- oder Minus-Taste in Hauptmenü-Zeile.
7. Referenzierung: Gewünschtes Signal im Spektrum wird mit Linksklick markiert (rote Linie erscheint) und anschließend unter der Hauptmenü-Option „**Peak Pick**“ der

Eintrag „**Calibrate**“ [oder -Icon rechts unten] angeklickt. Gewünschter Wert muss in Verschiebungsfeld eingetragen und Referenzierung durch Klick auf „**Ok**“ bestätigt werden.

8. Peak-Picking: Klick auf „**Peak Pick**“ im Hauptmenü und Wahl der Option „**Pick Peaks and append to list**“. Signal-Maxima werden automatisch gepickt. Fehlende „**Peaks**“ können durch Heruntersetzen des Picking-Thresholds mitgepickt werden: Dazu auf Rechteck am linken Ende der gestrichelten Threshold-Linie im Spektrum klicken und Level bis unter die Höhe des niedrigsten, zu pickenden Signals herunterziehen. Löschen der alten Peakliste mit „**Clear Peak List**“, dann erneut „**Pick Peaks ...**“ anwählen. Es kann (ebenfalls unter der „**Peak Pick**“-Option) zwischen Anzeige in Hz und ppm („**Peak Pick Unit**“) gewählt werden.
9. Integration: Icon (Frame-Menü rechts unten, ) durch Klicken aktivieren. Mit Maus durch zweimaligen Linksklick (zuerst links vom zu integrierenden Signal, dann rechts davon) jedes Einzelsignal wie gewünscht separat integrieren. Kalibrierung der Integralwerte durch Linksklick auf gewünschtes Integral (rote Linie erscheint), im Integrationsfenster wird im Feld „**Calibrate**“ der gewählte Wert eingesetzt und durch abschließenden Klick auf „**Close**“ bestätigt. Alle Integrale können außerdem als Liste erzeugt werden, wenn auf „**List**“ geklickt wird.
10. Prozessiertes Spektrum kann nun gespeichert werden: Auf Icon „**File**“ und anschließend „**Save**“ oder „**Save as**“ klicken. Zu „**copy-and-paste**“-Zwecken kann angezeigtes Spektrum durch Klick auf „**Edit**“ im Hauptmenü und Auswahl der Option „**Copy metafile to clipboard**“ [Win 32 API] kopiert und z.B. in eine Word-Datei eingefügt werden.
11. Vor dem Drucken kann das Spektrum durch Wählen von „**File**“ und dann „**Print Preview**“ angesehen werden. Ein Titel kann durch Klicken auf „**Edit**“ (Hauptmenü) und Anklicken von „**Plot title...**“ eingesetzt werden. Ploteinstellungen lassen sich unter „**Edit**“ und „**Plot options and parameters...**“ verändern. Durch Klicken auf „**File**“, „**Print**“ wird prozessiertes Spektrum ausgedruckt.