



Anleitung zum Prozessierung von Daten mit dem „NMR-Displayer“

1. Starten Sie den „NMR-Displayer“ in einem Webbrowser (bevorzugt Firefox oder Chrome) über den Link <https://cheminfo.github.io/nmr-displayer>.
2. Sobald das Programm geladen wurde können Spektren im Format jcamp.dx (IUPAC) oder von Bruker/TopSpin (immer als .zip-Datei) per drag&drop in das gestrichelt markierte Feld **“Drag and drop here...”** gezogen werden. Es können ein Spektrum oder mehrere gleichzeitig, bzw. nacheinander auf das Feld gezogen werden. Das Feld **“blank”** setzt das Feld zurück und löscht alle Daten.
3. Wenn mehrere Spektren vorhanden sind kann das zu bearbeitende Experiment rechts im Accordeon-Menü in der Option **“Spectra”** gewählt werden (der farbige Balken am rechten Ende  muss markiert sein).
4. Handelt es sich um einen FID, so wird er durch Klicken auf das **“Zero Filling”**-Symbol () links neben dem Spektrum (Size sollte doppelt so viele Punkte betragen wie der FID, Line Broadening für ^1H 0,3 Hz, für ^{13}C 3 Hz betragen). Anschließende Fourier-Transformation durch Klicken auf **“FFT-Filter”** () erzeugt eine Fourier-Transformation mit exponentieller Fensterfunktion.
5. Phasenkorrektur: Klick auf das **“Phase Correction”**-Icon () . Im aktiven Fenster wird per Mausklick (links) zuerst das Signal für die Phasenkorrektur nullter Ordnung markiert (rote Linie) und dann die Korrektur (**“PH0”**) durch Klicken und horizontales Ziehen des grünen Icons erzielt, bis das gewählte Signal korrekt phasiert ist. Phasenkorrektur erster Ordnung mit den übrigen Signalen, indem mit der Maus das entsprechende grüne Icon für **“PH1”** auf gleiche Art genutzt wird. Dabei sollte das Augenmerk auf Signalen liegen, die möglichst weit vom Hauptsignal entfernt sind. Durch Klicken auf **“Apply”** wird Phasenkorrektur beendet [optional kann auch die **“Automatic”**-Option verwendet werden].
6. Spreizungen oder Ausschnitte aus Spektrum: Zunächst das **“Zoom”**-Icon aktivieren () , dann gewünschten Bereich im Spektrum mit Linksklicks definieren. Durch Doppelklick oder Klick auf das **“Zoom out”**-Icon () wird Zoom stufenweise entfernt. Die Höhe der gezeigten Signale kann kontinuierlich vergrößert oder reduziert werden, indem das Maus-Rad (Mitteltaste) gedreht wird.

7. Referenzierung: Aktivierung der „**Peak Picking**“-Funktion (). Gewünschtes Signal im Spektrum wird mit Linksklick markiert, nachdem das Fadenkreuz darüber positioniert () und anschließend der angegebene Verschiebungs-Wert (nach Daraufklicken) interaktiv auf die gewünschte Verschiebung geändert wurde.
8. Peak-Picking: Manuell wie unter der Referenzierung beschrieben [automatisch durch Klick auf „**Apply**“. Zuvor sollten die Werte in den Feldern für maximale Anzahl von Peaks, Signal-Rausch-Verhältnis (noise factor) und min/max ratio überprüft werden]. Überzählige „Peaks“ können durch Positionierung des Cursors auf dem Peak-Label und anschließenden Klick auf das rote Stop-Symbol () gelöscht werden. Alternativ können Signale auch im Accordeon-Menü aus der „**Peaks**“-Tabelle gelöscht werden.
9. Ranges-Picking: Aktivierung der „**Ranges Picking**“-Funktion (). Damit lassen sich auch überlappende Bereiche (z.B. von Multipletts) für die spätere Zuordnung erfassen. Die Bereiche werden nach Pressen der „**Shift**“-Taste und Linksklick über dem Spektralbereich aufgezogen.
10. Integration: Signale können nach Klick auf das „**Integral Tool**“-Icon () integriert werden. Nach Pressen der „**Shift**“-Taste und Linksklick werden die Signale wie beim Ranges-Picking markiert. Die Gesamtzahl der Integrale kann im Accordion-Menü kalibriert werden ().
11. Das prozessierte Spektrum kann nun gespeichert/exportiert werden: Klicken auf Icon „**Export**“ () ermöglicht verschiedene Formate, die copy-paste-Option ist auch durch die Tastenkombination möglich. Es wird dabei stets der angezeigte Spektrenausschnitt gespeichert.
12. Struktureditor: Im Accordion-Menü können unter der Option „**Structures**“ zu einem Spektrensatz auch Strukturen geladen/gezeichnet werden. Dies geht per drag&drop (.mol files), bzw. durch Klick auf das + Symbol (Editor wird geöffnet).