

TESLA spectrometer v.3.1 – программа для проведения измерений на спектрометре ЯМР типа TESLA BS 587A, сохранения и обработки результатов.

Назначение и функции.

Программа “TESLA spectrometer” v.3.1 предназначена для проведения экспериментов на спектрометре ядерного магнитного резонанса TESLA BS 587A, доработанным для связи с компьютером типа IBM PC, отображения и сохранения результатов измерений, обработки и вывода результатов в формате, пригодном для последующей обработки с помощью программ NUTS (<http://www.acornnmr.com/nuts.htm>), Origin (<http://www.originlab.com/www/products/origin/index.asp>), Excel или других. Программа выполняет следующие функции:

1. Позволяет вводить и сохранять наборы параметров для управления узлами спектрометра: синтезаторами частот, передатчиком, приемником.
2. Позволяет вводить и сохранять импульсные последовательности для проведения измерений вместе с сопутствующими параметрами: количеством отсчетов при регистрации спадов, шагом точек по времени, таймаутом ожидания АЦП, параметрами циклов.
3. Управляет передачей набора параметров и импульсной последовательности в спектрометр через последовательный порт компьютера, запуском процедуры измерения и получением данных от АЦП через канал прямого доступа к памяти (DMA). Размер регистрируемого спада – до 32768 квадратурных точек.
4. Позволяет проводить усреднение результатов измерений по заданному числу запусков с возможностью управления процессом накопления.
5. Передает управляющие коды узлу спектрометра, задающему значения импульсного градиента магнитного поля, а также блоку управления температурой образца.
6. Позволяет проводить автоматические серийные измерения по введенной программе с возможностью выбора для каждого замера набора параметров, импульсной последовательности, значений температуры и градиента, что позволяет проводить измерения двумерных спектров ЯМР, а также коэффициентов самодиффузии.
7. Результаты измерения отображаются в виде графиков спада свободной индукции как в декартовых квадратурных координатах с выводом действительной и мнимой части, так и в полярных координатах с выводом амплитуды и фазы.
8. Осуществляет преобразование Фурье для результатов измерения и отображает графики комплексного ЯМР-спектра образца как в декартовых, так и в полярных координатах.
9. Сохранение введенных наборов параметров, импульсных последовательностей, программ автоматических измерений, а также результатов измерений осуществляется в единой базе данных, что позволяет впоследствии для любого сохраненного спада или спектра полностью восстановить условия измерения.
10. Позволяет создавать любое количество баз данных, например для разных типов экспериментов, разных образцов и т.п. и выбирать текущую базу в процессе работы.
11. При сохранении наборов параметров, последовательностей, программ автоматических измерений им можно присваивать достаточно длинные описания, что позволяет легче ориентироваться в них при дальнейшем использовании.
12. Для сохранения результатов измерений в базе данных создается структура эксперимента с собственным описанием, которое может содержать, например, название образца и тип эксперимента, после чего в этой структуре могут сохраняться

как спады, так и спектры с сопутствующими значениями температуры, градиента, а также ссылками на наборы параметров и последовательности. Количество таких структур в базе данных не ограничено, что позволяет легче ориентироваться в результатах измерений.

13. Для каждого отображаемого графика результатов измерения могут выполняться настройки отображения данных для получения наиболее подробной информации о различных частях спада или спектра: масштабирование и сдвиг как по горизонтали, так и по вертикали с помощью элементов управления масштабом и полос скроллинга или с помощью выбора окон, выбор линейного или логарифмического масштаба с возможностью изменения нижней границы масштабирования, выбор режимов отображения комплексных массивов: отображение любого из 2 массивов, обоих массивов, диаграммы зависимости между массивами (первый массив по X, а второй по Y).
14. Предлагает набор функций для редактирования отображаемых на графиках данных: графическая коррекция с помощью мыши, удаление смещения хвоста, добавление константы к массиву, умножение на константу, обнуление данных в выбранном диапазоне, вырезание данных в выбранном диапазоне, коррекция фазы комплексного массива с привязкой в узлах и линейной интерполяцией между узлами. Отредактированные данные могут быть сохранены или преобразованы, так же, как и исходные.
15. Позволяет создавать в каждой форме отображения графиков макрос, содержащий набор команд для повторяющейся обработки регистрируемых или загружаемых массивов данных.
16. Выводит в формах графиков положение указателя мыши в физических координатах графика, а также индекс точки массивов, что позволяет снимать с графиков численные значения параметров спадов или спектров. При работе со спектром позволяет вычислять значения интеграла массива по выбранному диапазону, а также определять значения и положения максимумов линий спектра.
17. Для дальнейшей обработки данных результаты измерений в виде спадов или спектров могут быть выведены в файлы одномерного формата программы NUTS v 4.54. Набор спадов, полученный при проведении автоматических измерений по программе, может быть выведен в файл двумерного формата этой программы с заполнением массива параметров времени значениями изменяемого параметра эксперимента, что позволяет с помощью программы NUTS вычислять времена релаксации компонент спектра.
18. Результаты измерений (массивы спада или спектра) могут быть выведены в текстовом виде в буфер обмена Windows, что позволяет использовать их в других программах, таких как Excel, Origin и т.п.
19. Предоставляет возможность получения тестовых спадов с задаваемыми параметрами, что может использоваться для обучения работе с программой без реальной связи со спектрометром.
20. **Версия 2.0** включает возможность автоматической пакетной обработки набора спадов, полученных при проведении автоматических измерений по программе с получением набора спектров, а также пакетной обработки набора спектров.
21. Позволяет экспортировать в двумерном формате NUTS не только спады, но и спектры, полученные при обработке.
22. Добавлены функции циклического сдвига массивов в форме отображения графиков, усовершенствована функция коррекции фазы.
23. Позволяет осуществлять редактирование массивов также и в формах графиков в полярных координатах.

24. Графики спектров могут представляться как в зависимости от частоты в килогерцах, так и от единиц PPM.
25. Позволяет обрабатывать наборы спадов или спектров для получения значений интегралов по диапазону, амплитуд и положений пиков в зависимости от изменяемого параметра эксперимента с выводом результатов в буфер обмена, что позволяет использовать их для дальнейшей обработки в программах типа Origin или Excel.
26. Позволяет осуществлять усреднение спадов как по нескольким запускам на каждом шаге программы автоматических измерений, так и по нескольким проходам всей программы, что позволяет более точно измерять времена релаксации при изменении условий измерения во времени, а также выполнять некоторую обработку спадов уже в процессе измерений.
27. **В версии 2.1** добавлена возможность проверки базы данных на соответствие ссылок, а также возможность сжатия базы данных.
28. **В версии 2.2** добавлена контекстно-зависимая справочная система приложения для русскоязычного интерфейса пользователя.
29. **В версии 3.0** добавлена возможность работы с другими ядрами, соответственно изменена структура таблицы экспериментов БД.
30. Введен текстовый файл параметров, из которого при запуске программы загружаются массивы параметров для работы на различных ядрах и растворителях.
31. При экспорте и выводе данных значения температуры и градиента выводятся в физических единицах с пересчетом по полиномам, коэффициенты которых заданы в файле параметров.
32. **В версии 3.1** имеются средства настройки поля и управления стабилизатором поля спектрометра, реализованные через дополнительный интерфейс нового варианта доработки спектрометра.

Аппаратный интерфейс.

Установка TESLA BS 587A представляет собой импульсный Фурье спектрометр ЯМР высокого разрешения с рабочей частотой на протонах 80.018 МГц, рассчитанный на исследования спектров и измерения времен релаксации. В исходном варианте спектрометр имел собственный специализированный компьютер. Доработка спектрометра сводится к подключению к интерфейсу узлов спектрометра компьютера типа IBM PC, оснащенного специальной платой, включающей цифро-аналоговые и аналого-цифровые преобразователи, а также к добавлению в состав оборудования блока импульсного градиента для обеспечения возможности измерения коэффициентов самодиффузии.

Плата, встраиваемая в компьютер, позволяет контролировать сигналы квадратурного детектора спада, сигналы, вырабатываемые стабилизатором поля спектрометра, а также выдавать напряжения для управления температурным блоком спектрометра и блоком импульсного градиента.

Структура программного пакета.

Основная часть программного пакета "TESLA spectrometer" создана с помощью среды разработки и языка программирования Visual Basic v.6.0. Поскольку реализация всех функций обработки и взаимодействия с аппаратурой в этой среде невозможна, либо снижает скорость выполнения операций, все функции взаимодействия с аппаратурой, а также преобразование Фурье и операции, связанные с отображением графиков, реализованы с помощью среды разработки Visual C++ v.6.0 в 2 проектах:

1. Библиотека API-функций APINMR.DLL, включающая в себя функции взаимодействия с аппаратурой и функцию быстрого преобразования Фурье. Передача данных и управление температурой и градиентом реализованы непосредственно в данной

библиотеке, а получение данных через DMA осуществляется с помощью драйвера VHWD.VXD и обслуживающей библиотеки XAPI.DLL. В демонстрационной версии библиотеки вместо выполнения операций с DMA производится генерация тестового спада с тремя линиями спектра, параметры которых зависят от передаваемых кодов температуры и градиента. Это позволяет имитировать эксперименты по измерению самодиффузии или зависимости времен релаксации от температуры. Эта версия также имитирует контроль сигналов, выдаваемых блоком стабилизатора поля спектрометра.

2. Элемент управления OGraph.osx, реализующий функции отображения графиков с масштабной сеткой. Элемент включен в диалоговые формы отображения графиков в виде белого поля с сеткой. Для вывода графиков запускаются отдельные процессы, что позволяет одновременно с выводом графиков обрабатывать другие события, возникающие в процессе измерений.

Основная диалоговая форма приложения включает в себя элементы управления для ввода и выбора параметров спектрометра и импульсной последовательности, а также меню и элементы управления измерениями. Основная форма активна в течение всего времени работы программы. Кроме основной формы могут быть открыты немодальные диалоговые формы: редактор программы автоматических измерений, форма управления экспериментом, форма генератора тестовых спадов и до 4 форм отображения графиков результатов измерений. Вызов некоторых функций меню или подача команд посредством командных кнопок могут приводить к открытию модальных диалоговых форм управления, которые должны быть закрыты для продолжения работы программы. Закрытие основной формы программы закрывает и все порожденные немодальные формы.

Для нормальной работы программы требуется компьютер с процессором типа Pentium I/II/III или подобным, частотой не ниже 133 МГц, объемом ОЗУ не менее 32 Мб с установленной ОС Windows 98/ME. Установка программы на компьютер не имеет каких-либо особенностей, вместе с программой в качестве образца устанавливается база данных с некоторым набором параметров и последовательностями, а также с данными реальных измерений.

Основная форма приложения.

При запуске приложения TESLA.EXE на экране появляется форма заставки, а затем, после окончания загрузки – основная диалоговая форма. При ее загрузке из реестра Windows извлекается информация о текущей базе данных, путях к каталогам баз данных и экспортируемых файлов, а также выбранных наборе параметров, импульсной последовательности, программе автоматических измерений, текущем эксперименте, температуре и градиенте, установленных в программе при ее последнем корректном завершении. Если текущая база данных была открыта без ошибок, в заголовке основной формы появится надпись “Tesla spectrometer:” и путь и имя файла текущей базы данных, а если БД не была открыта, то в заголовке будет надпись “Tesla spectrometer”. В случае успешного открытия указанные в реестре набор параметров, последовательность и программа автоматических измерений будут загружены из БД.

В основной диалоговой форме размещены следующие элементы управления, входящие в текущий **набор параметров** спектрометра:

1. 3 элемента с общим заголовком “Приемник”: “Фаза=”, “Пар.2=” и “Пар.3” задают параметры приемника спектрометра.
2. Под общим заголовком “Усиление” расположены элементы задающие усиление различных элементов приемного тракта спектрометра: “ВЧ1 х” – усиление первого высокочастотного усилителя, “ВЧ2 х” – второго, “НЧ х” – низкочастотного усилителя, “Фильтр” – усиление фильтра. В поле “Всего=” выводится суммарное усиление

- приемного тракта. При наведении указателя мыши на это поле будет появляться всплывающая подсказка – описание текущего набора параметров.
3. Под общим заголовком “Передачик” расположены элементы управления, задающие параметры передатчика спектрометра: “F=” – код частоты синтезатора (реальная частота в герцах равняется сумме этого параметра и некоторой константы). При двойном щелчке на поле параметра частоты в него будет загружено значение константы растворителя, выбранного или введенного в форме управления структурами экспериментов. “Пар.1=”, “Пар.2=” – параметры затухания, “P” – параметр мощности (при установленном флаге мощность нормальная, при сброшенном – уменьшенная), “Ф90” – сдвиг фаз на 90 градусов, “Н1” – принудительный выбор протонов при использовании двухчастотного датчика.
 4. Под общим заголовком “Декаплеры” расположены 4 элемента управления, задающие параметры декаплеров, в том числе и параметры синтезаторов частот.
 5. Флажок с заголовком “Термо” задает разрешение работы термоблока спектрометра.

Элементы управления, связанные с текущей **импульсной последовательностью**:


1. В нижней части основной формы расположена таблица импульсной последовательности (элемент управления MSFlexGrid), над полями которого расположены текстовые заголовки, при наведении указателя мыши на которые появляются всплывающие подсказки, поясняющие назначения параметров (кроме поля “Описание шага”, подсказка которого является описанием текущей последовательности). Шаг последовательности состоит из названия, мантиссы и порядка интервала времени и разрядов управляющего слова (активное состояние разряда – 0, пассивное – 1). Для ввода нового или изменения параметров уже введенного шага следует выполнить двойной щелчок мышью на полях названия, мантиссы или порядка интервала соответствующего шага, либо нажать клавишу “Enter”, выделив любое из этих полей шага. При этом открывается модальная диалоговая форма редактора шага последовательности с заголовком “Шаг N последовательности”, в которой можно задать все параметры шага последовательности: ввести название, задать интервал в микросекундах, миллисекундах или секундах, в диапазоне от 0.1 микросекунды до 1023 секунд, а также задать разряд управляющего слова, который будет активен в течение интервала данного шага. Если редактируется существующий шаг, то активный разряд будет добавлен к уже имеющимся. Если дважды щелкнуть мышью на поле соответствующего разряда управляющего слова в таблице последовательности – разряд инвертируется. Поле “BE” содержит метки начала и конца цикла при использовании в последовательности циклического режима. Если дважды щелкнуть мышью на этом поле соответствующего шага, появится модальная форма установки границ цикла с заголовком “Установка границ цикла”, в которой можно установить на данном шаге метки начала или конца цикла (сбросить их нельзя – можно только переустановить на другой шаг). Если циклы не используются, метки рекомендуется устанавливать за пределами последовательности. Последним шагом последовательности должен быть шаг с активным разрядом “Exit”.
2. Под заголовком “АЦП” расположены элементы, задающие параметры работы аналого-цифровых преобразователей спада: “Шаг (мкс)” задает шаг регистрации точек спада по времени в микросекундах, а текстовый элемент со счетчиком “Кол. точек” задает количество регистрируемых точек спада (количество точек кратно степеням 2, изменить значение текстового поля можно только с помощью счетчика). При наведении указателя мыши на поле шага по времени выводится всплывающая подсказка: ширина полосы спектрометра при данном шаге в килогерцах.

3. В поле “N циклов” вводится количество раз, которое будут выполняться шаги последовательности между метками начала и конца цикла включительно. Допускаются значения от 1 до 65535.
4. В поле “Таймаут (с)=” вводится значение таймаута АЦП в секундах после начала последовательности, после истечения которого будет прекращено ожидание завершения приема данных. Вводимое значение должно превышать суммарное время, включающее начальные паузы и время необходимое для приема данных.
5. В поле “Время АЦП (мс)=” выводится время в миллисекундах, необходимое для приема всех точек спада с заданным шагом по времени. В соответствии с этим значением следует задавать интервал последовательности, предназначенный для приема данных.
6. В поле “Полн.время (с)” выводится полное время последовательности в секундах с учетом заданного количества циклов. Поле автоматически корректируется при любом изменении шагов последовательности, границ и количества циклов. Учитываются все введенные шаги последовательности до признака выхода (разряд “Exit”). В процессе измерений в этом поле показывается обратный отсчет времени для исполнения последовательности или паузы шага программы автоматических измерений.
7. Командные кнопки “Вставить” и “Удалить” предназначены для вставки шага последовательности перед текущим или удаления текущего шага. При вставке шага открывается модальная форма редактора шага.


Другие элементы управления:

1. Текстовое поле со счетчиком “N нак.” задает количество запусков, по которым должно быть выполнено усреднение измеряемого спада. Значение можно выбрать с помощью счетчика или ввести непосредственно в поле. Можно менять его и в процессе измерений для ограничения или увеличения количества накоплений. При измерениях по программе задает либо количество запусков на каждом шаге, либо количество проходов программы в зависимости от флажка “Прог.”. Если ввести в это поле 0, то при ручном режиме измерений запускается бесконечный цикл измерения без накопления, что позволяет выполнить настройку спектрометра.
2. Флажок “Прог.” задает режим накопления по нескольким проходам программы. При сброшенном флажке накопление ведется по нескольким запускам на каждом шаге программы. В ручном режиме измерений игнорируется.
3. Текстовое поле “Нак.=” показывает текущее количество накоплений. Двойной щелчок мыши на поле позволяет сбросить выполненные усреднения и начать накопление заново. Допускается ввод в поле, если при накоплении по программе нужно к уже выполненным накоплениям добавить новые, возможно даже при других условиях измерений.
4. Поля “Код темпер.” и “Код градиент” предназначены для ввода кодов для управления температурой образца и величиной импульсного градиента. Введенные значения сохраняются в БД при сохранении спадов или спектров, а также в системном реестре при корректном завершении программы. При наведении указателя мыши появляются всплывающие подсказки, содержащие физическую величину, соответствующую введенному коду.
5. Командная кнопка “Загр. и запуск” посылает введенные набор параметров, последовательность, коды температуры и градиента в спектрометр, после чего запускает его на исполнение последовательности и получение данных.
6. Командная кнопка ■ “Остановка измерения” прерывает исполнение циклической последовательности, процедуры накопления или программы автоматических измерений. Спектрометр должен выполнить текущий цикл последовательности до

конца, поэтому до запуска дальнейших операций следует дождаться завершения исполнения последовательности спектрометром (по индикатору на панели) или прервать исполнение соответствующей кнопкой на панели спектрометра.

7. Командная кнопка  “Запуск последовательности” запускает загруженную последовательность на исполнение без посылки установок в спектрометр.

Элементы индикации:

1. Индикатор справа от флажка “Пар.3” группы “Приемник” показывает признак изменения текущего набора параметров по сравнению с сохраненным в текущей записи БД. Зеленый цвет означает, что изменений не было, а коричневый – что были. Индикатор справа от него показывает, соответствует ли текущий набор параметров тому, который был загружен в спектрометр при последнем запуске (зеленый – соответствует). Любое изменение в элементах управления, связанных с набором параметров, делает оба индикатора коричневыми, сохранение набора параметров делает зеленым левый индикатор, а посылка параметров в спектрометр – правый. В процессе передачи параметров цвет правого индикатора желтый, ошибка при посылке параметров делает его красным.
2. 2 индикатора справа от кнопки  выполняют функции, аналогичные п.1, но по отношению к текущей импульсной последовательности и связанным с ней параметрам.
3. 2 индикатора справа от полей “Код темпер.” и “Код градиент” показывают, были ли текущие значения кодов посланы в спектрометр. Изменение значения кода делает соответствующий индикатор коричневым, а посылка кода – зеленым.
4. Индикатор справа от поля “Таймаут (с)=” показывает процесс и результат получения данных АЦП спектрометра. В процессе ожидания получения данных его цвет – желтый, при корректном завершении – зеленый, а при завершении по таймауту – красный. Если запусков еще не было – индикатор голубой, а если произошла ошибка при запуске исполнения последовательности – розовый.
5. Индикатор справа от поля “Время АЦП (мс)=” показывает соответствие текущих параметров, последовательности, кодов температуры и градиента текущим результатам измерения. Зеленый цвет означает, что результаты измерения соответствуют текущим установкам и могут быть сохранены в БД, а коричневый – что установки были изменены после получения результатов и требуется повторный запуск.
6. Индикатор справа от заголовка “АЦП” показывает, было ли при последнем получении данных зафиксировано переполнение АЦП: зеленый – нет, красный – да. При измерениях по программе красный цвет означает, что переполнение зафиксировано хотя бы в одном запуске.

Команды меню основной формы:

1. “Файл > Создать БД” создание новой базы данных для сохранения наборов параметров, последовательностей, программ автоматических измерений и результатов измерений и выбор ее в качестве текущей. Открывает модальное диалоговое окно для ввода имени или выбора файла БД. Если был выбран уже существующий файл БД, будет запрошено подтверждение на его уничтожение.
2. “Файл > Открыть БД” выбор текущей БД для всех операций. Открывает модальное окно для выбора файла БД. При успешном открытии файла его путь и имя будут выведены в заголовок основной формы, а если при открытии файла зафиксирована ошибка (это возможно, например, при выборе файла, формат которого не соответствует данной программе), то будет выведено сообщение об ошибке, а в

заголовке основной формы будет “Tesla spectrometer”. При открытии данной программой базы данных, созданной в программе версии 2.0 – 2.2, вам будет предложено преобразовать БД в формат версии 3.0. Обратное преобразование формата невозможно, поэтому, если потребуется работать с программой прежней версии, нужно выполнить резервное копирование.

3. “Файл > Очистить данные” очищает текущую БД от всех результатов измерений. Наборы параметров, последовательности и программы автоматических измерений сохраняются. Обычно используется, чтобы очистить копию ранее использованной базы данных от сохраненных в ней спадов и спектров. Очистка не уменьшает размер файла БД, но позволяет использовать освободившееся пространство для сохранения новых данных. Если требуется уменьшить размер файла, можно воспользоваться командой сжатия БД.
4. “Файл > Сжать БД” производит сжатие и упорядочивание текущей базы данных, что позволяет удалить из файла БД неиспользуемое пространство и ускорить операции с БД. Перед применением команды нужно убедиться, что свободное пространство текущего раздела диска превышает размер базы данных, иначе данные могут быть потеряны. При большом размере БД сжатие может занять несколько минут. По окончании операции будет выдано сообщение.
5. “Файл > Проверить БД” проверяет текущую базу данных на соответствие подсчитываемого количества ссылок на наборы параметров, последовательности, эксперименты и программы данным, записанным в соответствующих полях таблиц. Кроме того, проверяется наличие таблиц массивов, соответствующих записям таблиц списков. По команде открывается модальное окно с таблицей, в полях которой отображаются описание соответствующего объекта, количество ссылок на этот объект в таблицах спадов, спектров, экспериментов и программ, суммарное количество ссылок: подсчитанное и записанное в БД. При расхождении данных предлагается скорректировать записанные данные. При отсутствии таблиц массивов, соответствующих записям списков спадов, спектров и программ предлагается удалить эти записи.
6. “Параметры > Обзор” открывает модальную форму обзора наборов параметров с заголовком “Наборы параметров спектрометра”. Используя элементы управления формы можно загрузить, переименовать или удалить выбранные наборы параметров (см. ниже).
7. “Параметры > Сохр.тек.набор” сохранение текущего набора параметров в текущей записи БД. Если на текущую запись набора параметров имеются ссылки в сохраненных результатах измерений (спадах или спектрах), то изменить ее параметры невозможно, и будет предложено создать новую запись для сохранения текущих параметров. Если таких ссылок нет, но есть ссылки в программах автоматических измерений или записях структур экспериментов, будет задан дополнительный вопрос о сохранении. На любом этапе можно отказаться от сохранения.
8. “Параметры > Сохр.новый” создание новой записи набора параметров в БД и сохранение в ней текущего набора. Будет открыта модальная форма для ввода описания набора параметров. Описания не должны повторяться. Если набор предназначен для проведения серий автоматических измерений с изменением некоторого ключевого параметра, то его числовое значение должно быть в начале описания и отделено от остальной части каким либо символом, отличным от пробела. Это позволит нормально обрабатывать результаты измерений и экспортировать результаты в двумерном формате программы NUTS (подробнее см. параграф, посвященный экспорту данных).

9. “Последовательность > Обзор” аналогично п.6, но для импульсных последовательностей с заголовком “Импульсные последовательности”.
10. “Последовательность > Сохр.текущую” аналогично п.7.
11. “Последовательность > Сохр.новую” аналогично п.8.
12. “Последовательность > Очистить” Очищает текущую последовательность.
13. “Программа > Редактор” открывает немодальную форму редактора программы автоматических измерений (см.ниже).
14. “Программа > Обзор” аналогично п.6, но для программ автоматических измерений с заголовком “Программы автоматических измерений”.
15. “Программа > Сохр.текущую” аналогично п.7, но, поскольку ссылок на программы в спадах и спектрах нет, нет и соответствующего ограничения.
16. “Программа > Сохр.новую” аналогично п.8.
17. “Программа > Запуск” запуск программы автоматических измерений с текущего шага (можно выбрать в форме редактора программы). Перед запуском должна быть создана или выбрана структура эксперимента (см.ниже), а также сохранены текущие установки (если нет – будут запросы на их сохранение). Если в текущей структуре эксперимента уже есть спады, то будет запрос на их удаление, а при отказе измеренные данные будут переписывать их или добавляться к ним в зависимости от режима накопления.
18. “Программа > Останов.накопление” остановка программы автоматических измерений. При установленном флажке режима накопления программа будет остановлена после завершения текущего прохода программы, а при сброшенном – после завершения заданного числа накоплений на текущем шаге программы. Для немедленной остановки программы можно использовать кнопку ■ “Остановка измерения”.
19. “Эксперимент” открывает немодальную форму управления структурами экспериментов, если выбрана текущая БД.
20. “Спад > Сохр.текущий” сохраняет текущий спад в текущей записи структуры эксперимента БД. Обычно может выполняться после редактирования спада средствами формы отображения графика. Если текущая запись не выбрана, то будет создан новый спад. До сохранения должна быть создана или выбрана структура эксперимента. Если измененные набор параметров или последовательность еще не сохранены, программа предложит их сохранить.
21. “Спад > Сохр.новый” создает новую запись спада в текущей структуре эксперимента и сохраняет в ней текущий спад.
22. “Спад > В буфер обмена” вывод комплексного массива текущего спада в буфер обмена Windows в виде текста, в каждой строке которого выводятся 3 числа, разделенные символами табуляции: время точки в миллисекундах, действительная и мнимая часть точки спада, без учета суммарного усиления.
23. “Спад > Экспорт в Nuts” вывод массива текущего спада в файл одномерного формата программы NUTS v.4.54. Открывает окно для выбора файла с расширением .FID. Экспорт производится с учетом суммарного усиления приемного тракта спектрометра.
24. “Спад > Тестовый спад” открывает немодальную диалоговую форму генератора тестовых спадов.
25. “Спектр > Сохр.текущий” аналогично п.20, но для текущего спектра.
26. “Спектр > Сохр.новый” аналогично п.21.
27. “Спектр > В буфер обмена” вывод комплексного массива текущего спектра в буфер обмена Windows в виде текста, в каждой строке которого выводятся 3 числа: значение частоты в килогерцах, действительная и мнимая часть точки спектра, без учета суммарного усиления.
28. “Спектр > Экспорт в Nuts” аналогично п.23, но расширение имени файла - .NMR.

29. “Графики > Спад в декартовых” включает или выключает показ формы графика спада в декартовых координатах. Если форма открыта, то она закрывается и наоборот. Режим показа подтверждается галочкой в пункте меню.
30. “Графики > Спад в полярных” то же, для спада в полярных координатах.
31. “Графики > Спектр в декартовых” – для спектра в декартовых координатах.
32. “Графики > Спектр в полярных” – для спектра в полярных координатах.
33. “Графики > X в PPM” – выключает или включает вывод графиков спектров с осью X в единицах PPM. При сброшенном флажке в меню ось X проградуирована в килогерцах.
34. “Графики > Показывать графики” – выключает или включает автоматическую активизацию форм графиков при обновлении данных.
35. “Help > Содержание” – открывает стандартную форму содержания справочной системы.
36. “Help > О программе” – открывает модальную форму с информацией о программе и авторе.

Диалоговые формы обзора.

Для управления наборами параметров, импульсными последовательностями или программами автоматических измерений, хранящимися в соответствующих структурах текущей базы данных, из соответствующего пункта меню основной формы подается команда “Обзор”, которая приводит к открыванию модальной диалоговой формы обзора соответствующих структур. В верхней части окна формы расположен список описаний структур (элемент типа ListBox), а внизу – командные кнопки для управления структурами.

С помощью кнопки “Загрузить” можно загрузить выбранную структуру в соответствующие ей элементы управления основной формы или память компьютера (для программы). Такое же действие имеет и двойное нажатие кнопки мыши на выбранном элементе списка. После загрузки форма обзора закрывается. После загрузки программы автоматически открывается немодальная диалоговая форма редактора программы.

Кнопка “Переименовать” позволяет изменить описание выбранной структуры, для чего открывается диалоговое окно для редактирования описания. Описания не могут повторяться, поэтому, если это окно не закрывается, значит вы пытаетесь использовать уже имеющееся описание.

Кнопка “Удалить” удаляет выбранную структуру из базы данных и списка, однако, если на выбранную структуру есть ссылки в каких либо других записях БД, например в спадах, спектрах, структурах эксперимента или программах, то в удалении будет отказано. В этом случае сначала нужно удалить все записи, ссылающиеся на данную структуру.

Кнопка “Выход” закрывает форму обзора, такое же действие имеет нажатие клавиши “Esc” на клавиатуре.

Форма редактора программы автоматических измерений.

Программа автоматических измерений предназначена для проведения серии замеров спадов при изменении каких-либо условий измерения: параметров узлов спектрометра, импульсной последовательности, температуры или градиента. На каждом шаге программы могут изменяться любые параметры, можно, например, автоматически исследовать образец с помощью различных последовательностей и с различными параметрами запуска, но, если предполагается последующая пакетная обработка или экспорт двумерных данных в программу NUTS, то требуется соблюдать некоторые правила, которые будут рассмотрены в параграфе, посвященном экспорту данных.

Диалоговая форма редактора программы автоматических измерений открывается по команде меню основной формы “Программа > Редактор” или при загрузке программы из формы обзора программ. Форма содержит следующие элементы управления:

1. “Описание программы” – текстовое поле, содержащее описание программы, сохраненное в БД. Если программа не была загружена, то ввод в поле разрешен, и можно ввести туда описание новой программы. Изменить описание загруженной программы нельзя: это делается из формы обзора программ.
2. Метка “Количество шагов=” показывает текущее количество шагов программы. Допускается максимальное количество шагов = 256.
3. “Шаг” – текстовое поле со счетчиком для отображения или выбора текущего шага программы. При изменении текущего шага элементы управления загружаются значениями параметров шага.
4. “Параметры:” – список описаний наборов параметров, имеющийся в текущей БД. Выбор элемента из списка включает на текущем шаге программы загрузку в спектрометр соответствующего набора параметров. Если элемент не выбран (пустое описание), то загрузка параметров на данном шаге не производится и запуск производится с ранее загруженным набором. Выбор набора параметров при последующем сохранении программы добавляет ссылку на этот набор, что будет зафиксировано в соответствующей структуре БД. Если в программе не предполагается изменения параметров, поле следует оставить пустым на всех шагах, что позволит использовать введенную программу при различных настройках спектрометра.
5. “Послед-ть:” – список описаний последовательностей текущей БД. Выбор элемента включает на текущем шаге загрузку в спектрометр соответствующей последовательности и сопутствующих ей параметров. Рекомендации аналогичны п.4.
6. “Код температуры” – значение кода температуры образца на текущем шаге программы. Если поле пустое, то код температуры, заданный в соответствующем поле основной формы не будет изменен. При наведении указателя мыши появляется всплывающая подсказка, содержащая величину температуры в градусах Цельсия, пересчитанную из кода с помощью полинома, коэффициенты которого загружены из файла параметров.
7. “Код градиента” – значение кода величины импульсного градиента на текущем шаге. Если поле пустое, то код градиента, заданный в соответствующем поле основной формы не будет изменен. При наведении указателя мыши появляется всплывающая подсказка, содержащая величину градиента в физических единицах: Гс/см, пересчитанную из кода с помощью полинома, коэффициенты которого загружены из файла параметров
8. “Пауза (с)” – пауза в секундах, на которую задерживается запуск исполнения последовательности после загрузки в спектрометр всех параметров шага программы. Пауза может потребоваться, например, для установления температуры образца после изменения соответствующего кода. Кроме того, паузу можно использовать для установления равновесного состояния образца вместо задания соответствующего интервала в последовательности (только если не используется накопление по шагам). При нулевом значении пауза не выполняется, а при отрицательном после истечения интервала времени, заданного ее абсолютным значением, программа выведет дополнительный запрос на продолжение измерений. Это может потребоваться, например, для того, чтобы перед измерением провести подстройку однородности поля. Если во время исполнения программы открыта форма настройки поля с установленным флажком автозахвата, то при потере захвата эта форма будет активизироваться, чтобы восстановить захват. Чтобы это было возможно, следует устанавливать значение паузы, превышающее период сканирования развертки поля.

9. “Добавить” – командная кнопка для добавления шага программы в ее конце. Последний шаг становится текущим. Если вводится новая программа, первый шаг нужно добавить перед тем, как вводить его параметры. После ввода параметров последнего шага кнопку нажимать не следует.
10. “Вставить” – вставка шага программы перед текущим.
11. “Удалить” – удаление текущего шага программы.
12. “Очистить” – удаление всех шагов программы.
13. “Запуск” – запуск программы с текущего шага (дублирует пункт меню “Программа -> Запуск” основной формы).
14. “Стоп” – остановка исполнения программы (дублирует пункт меню “Программа -> Останов.накопление” основной формы). Программа продолжает исполняться до окончания шага или накопления в зависимости от режима накопления. После остановки программы кнопка “Запуск” станет разрешенной.

Для ускоренного ввода программы можно использовать клавишу “Enter”: при ее нажатии происходит ввод параметров текущего шага и переход к следующему, а, если указатель находится на последнем шаге, производится добавление шага. После ввода параметров последнего шага нажимать “Enter” не нужно.

Перед запуском программы следует установить шаг (“Шаг”), начиная с которого будет выполняться программа. В процессе выполнения программы в форме редактора отображается текущий шаг программы. Форма редактора является немодальной, т.е. может быть открыта и закрыта в любое время без потери данных. При выборе новой текущей базы данных форма будет закрыта.

Форма управления структурами экспериментов.

Для сохранения в базе данных результатов измерений в виде спадов или спектров в ней создаются структуры экспериментов с собственными описаниями и ссылками на другие структуры. Каждый сохраняемый массив спада или спектра имеет ссылку на соответствующую структуру эксперимента, что позволяет легче ориентироваться в сохраненных результатах.

Для открытия диалоговой формы управления структурами экспериментов из меню основной формы подается команда “Эксперимент”. Форма имеет заголовок “Управление экспериментами” и содержит следующие элементы управления:

1. “Описание эксперимента” – список описаний структур экспериментов, имеющихся в текущей БД. Выбор элемента из списка заполняет элементы управления формы параметрами выбранной структуры. Для изменения описания или для создания новой структуры содержимое поля можно редактировать.
2. “Ядро” – список для выбора ядра, с которым будут осуществляться измерения. При использовании двухчастотного датчика измерения могут проводиться с различными ядрами без замены датчика, поэтому в элементе управления №1 основной формы может быть принудительно установлен режим измерения на протонах, независимо от выбора ядра в данном элементе. При выборе ядра в этом списке в следующем элементе всплывающие подсказки перезагружаются для выбранного ядра в соответствии с параметрами из файла параметров. Параметр влияет только на правильность вывода графиков спектров в единицах PPM и последующего анализа результатов измерений с помощью программы NUTS.
3. “Параметр частоты” – список для выбора параметра опорной частоты для правильного вывода графиков спектров в единицах PPM и последующего анализа результатов измерений с помощью программы NUTS. Этот параметр связан с исследуемым образцом. Список содержит набор параметров для различных растворителей, загруженный из файла параметров, поэтому нужно просто выбрать используемый

- растворитель. Значение параметра в герцах выводится в качестве всплывающей подсказки при наведении указателя мыши. Оно близко к значению параметра частоты передатчика основной формы и переносится в этот параметр при двойном щелчке на нем, что можно использовать для быстрой настройки на резонанс.
4. “Набор параметров спектрометра” – список описаний наборов параметров из текущей БД. Если в эксперименте используется только один набор параметров, имеет смысл выбрать его в данном списке, чтобы можно было загрузить его без загрузки каких либо результатов, например для продолжения измерений. Если в эксперименте используется программа автоматических измерений, загружающая разные наборы параметров, поле лучше оставить пустым.
 5. “Импульсная последовательность” – список описаний импульсных последовательностей из текущей БД. Если в эксперименте используется только одна последовательность, выберите ее в списке.
 6. “Программа автоматических измерений” – список программ автоматических измерений из текущей БД. Если в эксперименте используется программа – выберите ее в списке. Если выбраны параметры, последовательность или программа, то при последующем сохранении структуры эксперимента в соответствующих структурах БД будет зафиксировано наличие ссылок.
 7. “Время создания” – поле, содержащее дату и время создания данной структуры эксперимента.
 8. “Спады” – таблица, содержащая информацию обо всех спадах, сохраненных в БД и имеющих ссылку на данную структуру эксперимента. Таблица содержит дату и время сохранения спада (“Дата и время”), код ссылки на набор параметров (“Парам.”), код ссылки на последовательность (“Посл.”), код температуры (“Темп.”) и код величины градиента (“Град.”). Поле “N” содержит код ссылки на запись спада и имеет служебное назначение, а при большом количестве спадов оно скрыто полосой скроллинга. Если выбрать мышью поле кода ссылки на параметры или последовательность, то будет появляться всплывающая подсказка, содержащая описание соответственно набора параметров или последовательности с данным кодом ссылки.
 9. “Спектры” – таблица, содержащая информацию обо всех спектрах, имеющих ссылку на данную структуру эксперимента. Поля таблицы аналогичны п.8. При выборе мышью таблиц п.8 или п.9 назначение большинства командных кнопок меняется, что отражается во всплывающих подсказках кнопок.
 10. “Грузить” – командная кнопка с двойным назначением. Если до нажатия кнопки фокус управления находился на элементах управления, связанных с параметрами структуры эксперимента (п.1...п.6), то производится загрузка выбранных в них набора параметров, последовательности и программы автоматических измерений, а если перед нажатием кнопки было выбрано какое-либо поле в таблицах спадов или спектров, то производится загрузка выбранного спада или спектра в память программы. При этом также загружаются указанные в соответствующей таблице набор параметров и последовательность, что позволяет воспроизвести условия измерения. При загрузке спада кроме вывода графиков спада выполняется преобразование Фурье и спектр показывается на соответствующем графике. При преобразовании Фурье производится свопинг половин спектра, поэтому нулевая точка выводится в середине оси X. Кроме того, при загрузке спада производится обнуление значений действительной и мнимой части спектра в точке нулевой частоты, чтобы исключить влияние смещений базовых линий спада. Вместо нажатия кнопки операция загрузки спада или спектра выполняется при двойном нажатии левой кнопки мыши в соответствующей таблице.

11. “Запись” – командная кнопка для сохранения текущей структуры эксперимента, либо текущего спада или спектра в текущей записи БД в зависимости от нахождения фокуса управления перед нажатием кнопки. Для спада или спектра действие аналогично команде меню основной формы “Сохр.текущий” из соответствующего пункта, но запись, в которую сохраняется текущий массив выбирается в соответствующей таблице, что позволяет сохранять текущий массив в заданной позиции таблицы.
12. “Создать” – командная кнопка для создания новой структуры эксперимента, либо для добавления новой записи спада или спектра, в зависимости от нахождения фокуса управления перед нажатием кнопки. При создании структуры эксперимента должно быть введено или отредактировано описание эксперимента в поле “Описание эксперимента”. Созданная структура становится текущей. Для спада или спектра действие аналогично команде меню основной формы “Сохр.новый” из соответствующего пункта.
13. “Удалить” – удаление текущей структуры эксперимента или выбранного спада или спектра, в зависимости от нахождения фокуса управления перед нажатием кнопки. При удалении эксперимента, содержащего спады или спектры, будет выведен запрос подтверждения.
14. “Экспорт” – вывод набора спадов или спектров (в зависимости от фокуса управления) данного эксперимента в файл двумерного формата программы NUTS. Открывает окно ввода имени или выбора файла с расширением .FID или .NMR. Подробнее экспорт данных описан в соответствующем параграфе.
15. “Обраб.” – если фокус управления находится на таблице списка спадов, то выполняется пакетная обработка набора спадов данного эксперимента для получения набора спектров. При обработке производится вывод данных в соответствующие формы отображения графиков спада и спектра в декартовых координатах и выполнение в них введенных макросов, что позволяет производить настройку программы обработки. Если фокус управления находится на таблице спектров, то выполняется пакетная обработка набора спектров с помощью макроса формы отображения спектра в декартовых координатах. Подробнее обработка описана в соответствующем параграфе.
16. “Вывод” – выполнение для набора спадов или спектров (в зависимости от фокуса) процедуры вычисления интеграла по заданному диапазону, а также определения в нем амплитуды и положения пика. Данные, включающие значение изменяемого параметра эксперимента, значения интеграла, амплитуды пика и его положения по частоте выводятся в текстовом виде в буфер обмена Windows, из которого они могут быть вставлены в соответствующую программу для дальнейшей обработки. Подробнее вывод описан в параграфе, посвященном обработке данных. Все вышеописанные кнопки снабжены всплывающими подсказками, уточняющими их действие в зависимости от нахождения фокуса управления.
17. Метка “Экспорт:”, “Обработка:” или “Вывод:” появляется в процессе экспорта, обработки или вывода результатов и показывает процент выполнения операции.

В процессе обработки или вывода данных происходит отображение данных в формах графиков. Если в этом нет необходимости, то для экономии времени можно минимизировать (но не закрывать) соответствующие формы графиков.

Форма управления структурами экспериментов является немодальной и может быть открыта и закрыта в любое время без потери данных, однако при выборе текущей или создании новой базы данных она будет закрыта.

Форма настройки поля.

При выборе пункта меню “Настройка” основной формы открывается форма настройки поля, содержащая следующие элементы управления:

1. Поле отображения графика (элемент типа PictureBox) служит для отображения сигнала поглощения ядерного резонанса по дейтерию, вырабатываемого блоком стабилизатора поля спектрометра, в зависимости от сигнала пилообразной развертки поля. Сигнал развертки присутствует на разъеме 02Н блока стабилизатора, а сигнал поглощения – на разъеме 02К. Эти сигналы подключаются соответственно к коаксиальным разъемам 4 и 5 платы сопряжения. В поле графика помимо точек графика отображаются 2 линии: желтая вертикальная линия показывает текущее значение сигнала развертки, а розовая горизонтальная – уровень автозахвата для автоматического управления захватом (Lock) стабилизатора поля. Положение уровня автозахвата может быть изменено щелчком левой кнопки мыши на поле графика.
2. Командная кнопка “PRESET” дублирует соответствующую кнопку консоли спектрометра, которая вызывает принудительное прекращение исполнения запущенной последовательности. Сигнал от кнопки выведен на контакт “Key 8” дополнительного интерфейса платы. На нем вырабатывается нулевой сигнал длительностью 220–270 мс.
3. Индикаторы “Run”, “Flux”, “Lock”, “Shim” дублируют состояние соответствующих индикаторов консоли спектрометра. Сигналы подключены через контакты “Stat 08” – “Stat 11” дополнительного интерфейса соответственно. Контроль состояния сигналов производится с периодом 275 мс.
4. Командные кнопки “ON”, “RESET”, “OFF” дублируют действие соответствующих кнопок управления стабилизатором поля спектрометра. Сигналы длительностью 220–270 мс выведены на контакты “Key 1” – “Key 3” разъема дополнительного интерфейса.
5. Командные кнопки “<<”, “<”, “>”, “>>” предназначены для управления протяжкой поля, дублируя действие кнопок “<”, “>” и их же, совместно с кнопкой “<<>” консоли. Сигналы выведены на контакты разъема дополнительного интерфейса “Key 4” – “Key 7” соответственно. Длительность нулевого сигнала соответствует длительности нажатия кнопок.
6. Флажок “Сканирование” включает действие пилообразной развертки поля. После запуска программы флажок установлен. При проведении измерений без стабилизации поля его нужно снять, чтобы развертка не влияла на установленное поле. Флажок управляет сигналами “Contr 1” разъема дополнительного интерфейса.
7. Флажок “Автозахват” включает режим автоматического управления захватом резонанса стабилизатора поля. При установленном флажке контролируется превышение сигналом поглощения уровня автозахвата: при превышении уровня на контакте “Key 1” (“ON”) вырабатывается импульс, включающий стабилизацию. Это происходит, если включен индикатор “Flux” и выключен “Lock”. При включенном флажке автозахвата управление флажком сканирования запрещено, при активизации формы сканирование будет автоматически включаться и выключаться при ее деактивации. Режим автозахвата позволяет автоматически восстанавливать потерянный захват во время пауз при исполнении программы автоматических измерений. Для этого форма настройки поля должна быть открыта во время исполнения программы, а паузы в программе должны быть больше длительности цикла сканирования.

Когда форма настройки поля находится на переднем плане (активна) у АЦП платы сопряжения включена пара каналов, предназначенная для измерения сигналов стабилизатора поля. Это препятствует измерению сигналов квадратурного детектора спада. Поэтому при проведении измерений спада форма настройки поля должна быть закрыта или свернута. При исполнении программы автоматических измерений ее

активизация и свертывание происходит автоматически, но не следует активизировать форму вручную во время исполнения программы.

Действие кнопок управления формы зависит от конкретной реализации схем, соединяющих разъем дополнительного интерфейса платы с элементами консоли спектрометра, поэтому могут работать не все кнопки.

Генератор тестовых спадов.

Для обучения работе с программой без регистрации реальных спектров в программе предусмотрена возможность симуляции получения данных путем создания тестовых спадов. Для открытия диалоговой формы генератора тестовых спадов из меню основной формы подается команда “Спад > Тестовый спад”. При этом будет открыта немодальная форма с заголовком “Тестовый сигнал”, содержащая следующие элементы управления:



1. “Частота (кГц)=” – поле для ввода частоты компоненты спада в килогерцах. Частота может быть как положительной, так и отрицательной.
2. “Время релаксации (мс)=” – поле для ввода времени релаксации, т.е. показателя затухания амплитуды компоненты в миллисекундах.
3. “Начальная фаза (град)=” – поле для ввода начальной фазы компоненты в градусах. Нулевое значение означает, что по действительной части спада записывается спадающая косинусоида, а по мнимой – синусоида.
4. “Амплитуда=” – поле для ввода начальной амплитуды компоненты в единицах АЦП. Для имитации работы АЦП она не должна превышать 2047.
5. “Квантование спада (квант =1)” – флажок, включающий режим квантования спада по амплитуде, т.е. имитации работы АЦП.
6. “Очистить” – командная кнопка для очистки текущего спада. Нужно нажать перед созданием тестового спада.
7. “Добавить” – добавляет к имеющемуся спаду компоненту с заданными параметрами, после чего отображает графики спада и спектра. Вводя новые параметры и нажимая данную кнопку можно сформировать спад и спектр с любым количеством компонент.
8. “Закрыть” – закрывает форму генератора спадов.
9. “Шаг по времени (мкс)=”, “Количество точек=” дублируют соответствующие элементы управления основной формы. Изменение параметров производится из основной формы, при этом текущий спад очищается.







Отображение графиков результатов измерения.

Формы отображения графиков результатов измерения открываются каждый раз при завершении процедуры регистрации спада, загрузке спада или спектра из формы управления структурами экспериментов или при добавлении компоненты из формы генератора тестовых спадов. Результаты измерения могут одновременно отображаться в 4 видах: график квадратурного спада в декартовых координатах, т.е. с отображением действительной и мнимой части; график спада в полярных координатах, т.е. с отображением квадратурной амплитуды и фазы; график комплексного спектра в декартовых координатах; график спектра в полярных координатах. Настройка количества отображаемых графиков производится посредством меню “Графики” основной формы, в котором галочками помечены формы графиков, которые будут отображаться при получении или загрузке результатов. Выбор соответствующих пунктов меню устанавливает или сбрасывает галочки и открывает или закрывает соответствующие формы отображения графиков.

Немодальная диалоговая форма отображения графиков позволяет отображать графики 2 массивов данных в различных режимах и масштабах, адаптировать формат под потребности отображения, выполнять ряд функций редактирования массивов. Форма

отображения графиков является масштабируемой, т.е. при изменении размеров формы размеры области построения графиков и полос скроллинга будут адаптированы под новый размер формы. Форма содержит следующие **элементы управления**:

1. Область построения графика занимает большую часть формы, окруженную полосами скроллинга.
2. Метки “X=”, “Y=” и “I=” появляются при попадании указателя мыши на область построения графиков и показывают значения координат его положения в физических единицах массивов. Третья метка появляется только в режиме отображения графиков в зависимости от времени или частоты, показывая, какому индексу массивов соответствует положение указателя мыши по оси X, и отсутствует при отображении диаграммы.
3. Флажок “1” включает режим отображения диаграммы, т.е. зависимости между действительной и мнимой частью комплексного массива: по координате X откладываются значения из первого массива, а по Y – второго.
4. Флажок “lg>=” справа от флажка “1” включает отображение графиков в логарифмическом масштабе по оси X, при этом в текстовом поле со счетчиком справа от него задается значение минимального логарифма нижней границы оси с учетом масштабирования и скроллинга. При сброшенном флажке графики отображаются в линейном масштабе по оси X, значение поля игнорируется.
5. Поле “MX” со счетчиком управляет масштабом по оси X и может иметь значения от 0.5 до 1000 относительно вычисленных или установленных максимума и минимума координаты X. Значения можно менять с помощью счетчика или вводить непосредственно в поле. Значение также меняется при применении оконных функций. Двойной щелчок мыши на данном поле устанавливает масштаб =1.
6. Поле “Центр X” показывает или задает положение центра диапазона отображения по оси X, обозначенного на графике желтой линией. Изменить положение центра можно с помощью горизонтальной полосы скроллинга, функций центровки, оконными функциями или прямым вводом в данное поле. Двойной щелчок мыши на данном поле устанавливает центр на среднее значение между максимумом и минимумом по X.
7. Кнопка  устанавливает стандартный масштаб по X (MX=1) и среднее положение центра относительно максимума и минимума оси.
8. Кнопка  устанавливает максимальный масштаб по X и среднее положение центра относительно максимума и минимума отображаемого диапазона. В данной программе действие кнопок не различается.
9. Флажок “2” включает отображение синим цветом и в основной масштабной сетке графика второго массива, что позволяет выполнять по отношению к нему все функции редактирования. Элемент запрещен в режимах отображения диаграммы или при показе двух графиков.
10. Флажок “lg>=” справа от флажка “2” включает отображение графиков в логарифмическом масштабе по оси Y, при этом в текстовом поле со счетчиком справа от него задается значение минимального логарифма нижней границы оси с учетом масштабирования и скроллинга. Значение поля действует как по отношению к основной оси Y, так и по отношению к дополнительной. При сброшенном флажке графики отображаются в линейном масштабе по основной оси Y.
11. Поле “MY” со счетчиком управляет масштабом по оси Y и может иметь значения от 0.5 до 1000 относительно вычисленных или установленных максимума и минимума массивов, отображаемых в основной сетке по координате Y. Значения можно менять с помощью счетчика или вводить непосредственно в поле. Значение также меняется при

- применении оконных функций. Двойной щелчок мыши на данном поле устанавливает масштаб =1.
12. Поле “Центр Y” показывает или задает положение центра диапазона отображения по оси Y. Изменить положение центра можно с помощью вертикальной полосы скроллинга, функций центровки, оконными функциями или прямым вводом в данное поле. Двойной щелчок мыши на данном поле устанавливает центр на среднее значение между максимумом и минимумом массивов, отображаемых в основной сетке по Y.
 13. Флажки “Фикс1” и “Фикс2” устанавливают режимы отображения графиков массивов в фиксированном окне по Y. При установке сброшенного флажка максимальное и минимальное значение соответствующего массива фиксируются и не изменяются при последующих изменениях данных. Сброс установленного флажка заменяет максимум и минимум окна границами текущего загруженного массива. При последующих изменениях границы пересчитываются при обновлениях данных.
 14. Кнопка  устанавливает стандартный масштаб по Y ($M_Y=1$) и среднее положение центра относительно вычисленных или установленных максимума и минимума массивов, отображаемых в основной сетке по Y.
 15. Кнопка  устанавливает максимальный масштаб по Y и среднее положение центра относительно максимума и минимума отображаемого диапазона массивов.
 16. Кнопка с числом справа от метки “I=” показывает текущее количество узлов функции коррекции фазы. Нажатие кнопки позволяет очистить функцию коррекции, но не отменяет результаты произведенной коррекции. При выполнении функций коррекции фазы шрифт цифры становится жирным, если указатель мыши по координате X или центр окна по X (в зависимости от функции) находится вблизи от узла функции коррекции фазы, что позволяет вместо добавления нового узла изменить значение функции в существующем узле.
 17. Флажок “+” включает режим отображения 2-х графиков. 1-й массив отображается синим цветом, а 2-й – красным. При сброшенном флажке красный график отсутствует, а синим отображается массив, выбранный флажком “2”. Элемент запрещен в режиме отображения диаграммы.
 18. Флажок “Сетка” при установленном флажке “+” включает отображение 2-го массива в собственной дополнительной масштабной сетке, деления и метки которой отображаются в правой части области отображения. Дополнительная сетка по Y не масштабируется и не центруется. При сброшенном флажке “Сетка” и установленном флажке “+” оба графика отображаются в основной масштабной сетке по Y.
 19. Флажок “lg” включает логарифмический масштаб дополнительной оси Y. Используется значение минимального логарифма нижней границы от основной оси Y (см.п.10).
 20. Кнопка  начинает запись макроса для групповых операций редактирования. Подробнее операции с макросами будут описаны ниже.
 21. Кнопка  завершает запись макроса.
 22. Кнопка  фиксирует текущие параметры масштаба по X в макросе.
 23. Кнопка  запускает исполнение макроса.
 24. Флажок “Л” включает режим соединения точек графиков отрезками прямых. При сброшенном флажке графики отображаются точками.
 25. Флажок “Т” включает режим вывода графиков крупными точками (размером 2 пиксела). При крупном масштабе это позволяет видеть точки на фоне соединительных линий, однако скорость вывода графиков при таком режиме снижается. При сброшенном флажке графики выводятся точками размером в 1 пикселл или отрезками.

26. Элемент списка ComboBox содержит раскрывающийся список функций настройки отображения и редактирования массивов. Выбор элемента списка включает соответствующую функцию. Подробное описание функций см. ниже.
27. Кнопка “Вернуть” отменяет результаты редактирования и восстанавливает исходные массивы, если еще не была нажата кнопка “Вывод”. Полученная в результате коррекции фазы функция коррекции очищается. При записи макроса он очищается.
28. Кнопка “Вывод” на графиках спада или спектра в декартовых координатах переносит результаты редактирования в основные массивы программы, после чего отредактированные спады и спектры можно сохранять или экспортировать. В формах графиков в полярных координатах при переписывании в основные массивы производится преобразование полярных координат в декартовые. При нажатии кнопки в форме графика спада для отредактированного спада будет выполнено преобразование Фурье и полученный спектр отображен на соответствующих графиках. Результаты представляются также и на графиках соответственно в полярных или декартовых координатах, если включен их вывод. Если ведется запись макроса, то нажатие кнопки завершает ее. В отличие от процедуры загрузки спада из БД или получения его в результате измерения, при этой операции после преобразования Фурье нулевая точка спектра не обнуляется и может отклоняться от массива в результате наличия смещений базовых линий спадов. Чтобы избежать этого, следует удалить смещение хвостов спада с помощью соответствующей функции.
29. Пустая кнопка в правом верхнем углу области отображения устанавливает стандартные параметры масштабов по обеим осям, что эквивалентно нажатию двух кнопок, описанных в п.7 и п.14.
30. Горизонтальная и вертикальная полосы скроллинга перемещают центр отображаемой области по соответствующей координате. Размер движка зависит от текущего масштаба по соответствующей оси.

Каждая из форм графиков, вновь открываемая в программе имеет свои собственные **исходные настройки**, которые потом могут быть изменены:

1. В форме отображения графиков спада в декартовых координатах при открытии устанавливается фиксированный масштаб отображения по Y, соответствующий диапазону возможных значений АЦП: от -2048 до +2048. Это позволяет визуально оценивать амплитуду сигнала. Графики действительной и мнимой части изображаются в основной координатной сетке. По оси X откладываются значения времени в миллисекундах.
2. В форме отображения графиков спада в полярных координатах отображается график квадратурной амплитуды в собственном нормальном масштабе. Изображение 2-го графика выключено, но, если его включить, будет показан график фазы в фиксированном масштабе от $-\pi$ до $+\pi$ в дополнительной сетке.
3. В форме отображения графиков спектра в декартовых координатах показан график действительной части массива в собственном нормальном масштабе. При включении отображения обоих графиков мнимая часть будет показана в той же сетке. При выводе в форму графика массив спектра делится на коэффициент суммарного усиления, отображаемый в поле “Всего=” основной формы, что позволяет сравнивать абсолютные амплитуды линий спектров, зарегистрированных при различном усилении приемного тракта. По оси X откладываются единицы РРМ или значения частоты в килогерцах, в зависимости от установленного в меню основной формы режима.
4. Настройка формы отображения графиков спектра в полярных координатах аналогична форме графиков спада в полярных координатах, по X откладываются РРМ или килогерцы.

Фиксированный масштаб по Y может быть установлен, отменен или изменен установкой или снятием флажков фиксации окна “Фикс1” и “Фикс2”.

Функции настройки и редактирования формы отображения графиков позволяют выполнять определенные действия по настройке параметров масштаба отображения и редактированию массивов с помощью мыши. Включение нужной функции осуществляется выбором соответствующего элемента из списка функций или нажатием на клавиатуре клавиши в латинском регистре:





1. “Центр X” – установка центра отображаемого окна по X. Можно выбрать нажатием клавиши “X”. При нажатии левой кнопки мыши в позиции указателя появляется черная вертикальная линия, которую нужно установить в позицию желаемого центра оси X. При отпускании кнопки мыши графики будут перерисованы с выбранным центром. При попытке установления центра за пределами диапазона оси X, он установится на соответствующей границе диапазона.
2. “Центр Y” – установка центра отображаемого окна по Y. Можно выбрать нажатием клавиши “Y”. В качестве указателя изображается горизонтальная линия, остальное аналогично п.1.
3. “Центр X,Y” – установка центров отображаемого окна по обеим координатам. Можно выбрать нажатием клавиши “C”. В качестве указателя изображаются пересекающиеся линии.
4. “Окно X” – установка границ отображаемого окна по X. Можно выбрать нажатием клавиши “H”. Окно выбирается перемещением мыши с нажатой левой кнопкой, в процессе чего выделенное окно изображается черным. При отпускании кнопки мыши графики будут перерисованы в новом окне. Если в результате операции значение масштаба превышает 1000 или центр попадает за пределы диапазона массива, производятся соответствующие коррекции.
5. “Окно Y” – установка границ отображаемого окна по Y. Можно выбрать нажатием клавиши “V”. Аналогично п.4.
6. “Окно X,Y” – установка границ отображаемого окна по обеим координатам. Можно выбрать нажатием клавиши “W”.
7. “Фазировка” – коррекция фазы комплексного массива с выбором узловых точек. Можно выбрать нажатием клавиши “P”. Применение функции целесообразно только на графиках в декартовых координатах, как правило, на спектре. При применении данной функции создается функция зависимости смещения фазы от координаты X в виде ломаной линии с задаваемыми узлами. Количество узлов – до 7. При обработке спектра с несколькими разделенными линиями или группами линий спектра целесообразно выбирать узлы, совпадающие с линиями или центрами групп. Добавление узла производится нажатием (без отпускания) левой кнопки мыши в точке узла. Если при нажатии кнопки указатель мыши находится вблизи от существующего узла, что индицируется изменением на жирный шрифта кнопки сброса функции коррекции фазы, то вместо добавления узла производится изменение значения функции коррекции в этом узле. При перемещении мыши вдоль X с нажатой кнопкой производится коррекция фазы и показ результата на графике. При получении приемлемого результата коррекции по выбранной линии кнопку мыши нужно отпустить. При этом график перерисовывается в новом масштабе с учетом коррекции фазы. Точно так же выполняется коррекция в других узлах, но при перемещении мыши не нужно обращать внимания на изменения фазы других линий, кроме выбранной: после отпускания кнопки график будет перерисован в соответствии с полной функцией коррекции, т.е. со всеми добавленными узлами. Перед началом коррекции следует выбрать минимальное окно, включающее весь спектр, а также

- выключить вывод графика крупными точками, чтобы сократить время на перерисовку графика. При записи макроса запоминаются значения координаты узла и значения функции для всех операций коррекции, в том числе и повторные.
8. “Обнуление” – обнуление данных обоих массивов в выбранном окне по X. Можно выбрать нажатием клавиши “Z”. Может применяться на графиках спада, чтобы очистить хвост спада от шумов. Выделение окна производится также, как в п.4., после отпускания кнопки мыши операция завершается и графики перерисовываются. При записи макроса запоминается диапазон индексов массивов.
 9. “Удал.сдвиг” – удаление постоянного смещения обоих массивов с вычислением сдвига при усреднении по выбранному окну по X. Можно выбрать нажатием клавиши “D”. Выполняется, чтобы исключить сдвиг базовой линии каналов АЦП. При записи макроса запоминается диапазон индексов массивов для усреднения.
 10. “Корр. Y1” – прямая коррекция данных массива, изображенного синим с помощью мыши. Можно выбрать нажатием клавиши “R”. Коррекция осуществляется перемещением мыши с нажатой левой кнопкой по траектории требуемой функции. В макрос не записывается.
 11. “Добав. Y1” – добавление постоянного смещения к массиву, изображенному синим. Можно выбрать нажатием клавиши “A”. Может применяться, например на графике спектра, чтобы убрать смещение базовой линии. Добавляемая константа вычисляется по разнице между положением указателя мыши в момент нажатия кнопки и точкой графика, над которой находится указатель. При записи макроса запоминается величина смещения.
 12. “Умнож. Y1” – умножение массива, изображенного синим на константу, вычисляемую по разнице между положением указателя мыши в момент нажатия кнопки и точкой графика, над которой находится указатель. Можно выбрать нажатием клавиши “M”. Может применяться, например, на графиках спада, чтобы скорректировать разницу коэффициентов усиления действительной и мнимой части. При записи макроса запоминается множитель.
 13. “Вырезать” – вырезание из обоих массивов точек выделенного окна по X. Можно выбрать нажатием клавиши “U”. Выделение окна производится также, как в п.4. Точки справа от удаленных сдвигаются влево, а в конце массивов добавляются нули. Может использоваться, например, на графиках спада, чтобы удалить искаженные начальные точки. При записи макроса запоминается диапазон индексов массивов.
 14. “Фазир. в X” – функция коррекции фазы, аналогичная п.7, но узел функции коррекции выбирается в точке центра окна по X. При этом в одной точке можно выполнять коррекцию несколько раз, и это не приведет к добавлению новых узлов. Индикация близости существующего узла к центру окна включается при перемещении скроллера или других операциях, приводящих к изменению положения центра по X. Можно выбрать нажатием клавиши “F”. При записи макроса запоминаются все операции коррекции.
 15. “Интеграл” – функция позволяет вычислять интеграл от массива, изображаемого синим, по выделенному окну по X, а также определять амплитуду пика на этом интервале и его положение по X. Информация выводится во всплывающей подсказке после выделения окна по X. Можно выбрать нажатием клавиши “I”. Выбранный интервал для вычисления интеграла запоминается и используется при выполнении пакетной операции вывода результатов, описанной в параграфе, посвященном обработке данных. Положение пика также запоминается и используется в функции автосдвига (п.17). В макрос не записывается.
 16. “Сдвиг по X” – циклический сдвиг точек обоих массивов производится перемещением вдоль оси X мыши с нажатой левой кнопкой. Точки, уходящие за пределы графика

появляются с другой стороны. Можно выбрать нажатием клавиши “S”. В макросе запоминается величина сдвига индексов.

17. “Автосдвиг” – циклический сдвиг массивов по X на величину, определяемую по разнице между положением пика на выбранном интервале и положением пика, определенном в функции вычисления интеграла. Выделение окна для поиска пика производится также, как в п.4.

Для отмены активной функции можно щелкнуть мышью на любом свободном месте формы отображения графиков. Если на графике выбрана активная функция, нужно быть внимательными при выполнении действий двойным щелчком левой кнопки мыши, поскольку при этом операция запускается при втором нажатии кнопки, а при ее отпуске указатель может находиться уже в форме графика и будут вызваны действия в соответствии с активной функцией. В этом случае лучше пользоваться альтернативным способом вызова операции, например кнопкой “Грузить”.

Макрос формы отображения графиков используется для выполнения некоторых повторяющихся операций с вновь регистрируемыми или загружаемыми данными. Например можно использовать такой набор операций со спадом: удаление смещений базовых линий по окну по X, вырезание определенного количества “плохих” точек в начале спада, коррекция усиления канала АЦП умножением массива на константу, показ графиков спада в определенном окне по X и подача команды “Вывод” для выполнения преобразования Фурье по полученному спаду с выводом соответствующих графиков. В форме отображения графиков спектра в макросе могут, например, использоваться функции коррекции фазы. Для создания макроса нужно в форме с необработанным графиком нажать кнопку записи макроса . После этого выполняются нужные функции коррекции данных. Заканчивается запись макроса нажатием кнопки остановки записи , либо нажатием кнопки “Вывод”. В макрос записываются операции функций коррекции, описанные в п.7...9, 11...14, 16 и 17, а также операции, инициируемые кнопкой сброса функции коррекции фазы и кнопкой “Вывод”. При нажатии кнопки “Вернуть” в процессе записи макроса записанные операции очищаются и можно начать их запись заново (например, если допущена ошибка). Для запоминания в макросе параметров масштаба по X используется кнопка фиксации . В каждой форме отображения графиков может использоваться свой макрос. При начале записи нового макроса старый уничтожается, поэтому для удаления макроса можно последовательно нажать кнопки записи и остановки. Если в форме введен макрос, то кнопка исполнения макроса  будет разрешена. При закрытии форм отображения графиков макросы сохраняются, но нужно помнить, что параметры, записанные в макрос могут быть непригодны для данных, имеющих другой формат, например шаг по времени или частоте и т.п. Если изменилось количество точек, макрос не исполняется.

Проведение измерений.

После включения установки и необходимого прогрева выполняется настройка поля магнита для проведения измерений. Если в образце присутствует достаточное количество ядер дейтерия, то для настройки и стабилизации поля можно использовать систему стабилизации спектрометра. Для выполнения настройки открывается форма настройки поля выбором пункта “Настройка” в меню основной формы. При этом АЦП платы сопряжения переключается на измерение сигналов, вырабатываемых системой стабилизации. Поле графика формы настройки при этом выполняет роль графического дисплея установки. Для протяжки поля и управления стабилизатором можно использовать как кнопки консоли установки, так и командные кнопки формы. Если резонанс ядер дейтерия слабый и система стабилизации иногда срывается с захвата, можно использовать

средства автозахвата формы настройки. Если дейтерия в образце недостаточно для работы системы стабилизации, то можно работать без нее, отключив сканирование поля снятием соответствующего флажка формы настройки. Настройка на резонанс в этом случае производится по наблюдению спада или спектра ЯМР при зацикливании запуска.

Для проведения измерений в ручном режиме следует создать или выбрать структуру эксперимента для последующего сохранения данных. Описание структуры должно содержать название образца, тип эксперимента и неизменные условия измерений.

Перед проведением измерений, как правило, требуется настройка режимов измерения для получения наиболее информативных данных. Для настройки рекомендуется создать в БД различные тестовые последовательности и наборы параметров, с которыми не следует сохранять никаких спадов и спектров, включать их в программы автоматических измерений, чтобы можно было свободно изменять и сохранять их параметры при настройке спектрометра. При настройке оптимальных параметров измерения образца подбираются: частота передатчика спектрометра, чтобы спектр попадал в середину полосы; шаг точек по времени, чтобы получить полосу, достаточную для отображения спектра с небольшими запасами; количество точек спада, чтобы спад полностью укладывался во временное окно и обеспечивалось необходимое разрешение по спектру; усиление приемного тракта, чтобы получить начальную амплитуду спада, не приводящую к переполнению АЦП, но и не слишком маленькую; количество накоплений для обеспечения приемлемого соотношения сигнал-шум. Запуск измерения производится нажатием кнопки “Загр. и запуск” на основной форме, после получения данных будут выведены выбранные графики спадов и спектров, полученные в результате измерения и преобразования Фурье. При преобразовании Фурье производится свопинг половин спектра, поэтому нулевая точка выводится в середине оси X. Кроме того, при выводе спектра производится обнуление значений действительной и мнимой части спектра в точке нулевой частоты, чтобы исключить влияние смещений базовых линий спада, хотя это и может исказить спектр, если одна из линий находится близко от нулевой точки. Чтобы исключить такое искажение, нужно произвести в форме отображения графиков спада удаление смещения хвостов и нажать кнопку “Вывод”. Если в процессе настройки получился спад или спектр, приемлемый для сохранения, следует сначала сохранить текущий набор параметров и последовательность как новые записи БД, после чего сохранить полученный спад или спектр. После этого можно изменить условия измерения (загрузить новую последовательность или изменить ее параметры, изменить температуру и т.п.) и снова запустить измерение. Операции повторяются до получения всех нужных данных.

Для проведения автоматических измерений по программе также требуется предварительная настройка параметров и проверка качества получаемых данных в 2-3 точках диапазона изменения ключевого параметра, но без сохранения результатов. После этого создается или выбирается имеющаяся программа автоматических измерений. Чтобы иметь возможность последующего анализа данных с помощью средств данной программы, а также возможность корректного экспорта данных в файлы двумерного формата программы NUTS, при разработке программы следует придерживаться определенных правил, описанных в параграфе, посвященном экспорту данных. Перед запуском программы нужно создать новую структуру эксперимента с указанием используемых постоянных установок, сохранить текущие установки, если это нужно. В соответствующем элементе основной формы вводится количество накоплений, производимое в каждом замере. Рекомендуется для экономии времени убрать из списка отображаемых ненужные графики спадов или спектров. Если программа должна исполняться не с начала, нужно выбрать начальный шаг в форме редактора программы. Программа запускается командой “Программа > Запуск” из меню основной формы.

Результаты измерений в виде спадов, полученные на каждом шаге программы будут автоматически сохраняться в текущей структуре эксперимента.

При проведении измерений по программе с накоплением следует выбрать один из двух режимов накопления:

1. Режим с усреднением по нескольким запускам на каждом шаге программы (сброшенный флажок “Прог.” на основной форме) применяется, если используются длительные паузы между шагами программы, например при изменении температуры. При запуске программы предлагается удалить все имеющиеся в структуре эксперимента спады. Если этого не сделать, то будут добавляться новые спады. При прерывании исполнения программы соответствующей командой меню или кнопкой в форме редактора программы остановка произойдет после завершения всех накоплений на текущем шаге программы. При запуске программы в этом режиме текущее количество накоплений сбрасывается в 0.
2. Режим с усреднением спадов по нескольким проходам программы (установленный флажок) применяется при большинстве измерений времен релаксации, поскольку уменьшает влияние ошибок, связанных с медленным изменением условий измерений и свойств образца. В этом режиме можно продолжить накопление после остановки программы. При подаче команды остановки накопления из меню или редактора остановка произойдет после исполнения последнего шага программы в текущем проходе. При использовании данного режима возможно выполнение сложения спадов, полученных с использованием различных последовательностей, но нужно помнить, что количество и шаг точек должны совпадать. Если в структуре эксперимента есть спады, то при запуске программы текущее количество накоплений не сбрасывается, это нужно сделать вручную. Если в структуре эксперимента имелись зарегистрированные спады, то измеренные данные будут усредняться с ними с учетом текущего количества накоплений.

Не рекомендуется использование накоплений при отключенной стабилизации поля, поскольку дрейф поля приводит к смещению линий и искажению спектра при накоплении.


Если при исполнении программы требуется контроль и автоматическое восстановление захвата системы стабилизации поля, следует перед запуском последовательности открыть форму настройки поля и установить в ней флажок автозахвата, предварительно настроив уровень захвата. Активизация формы будет происходить в паузах программы в случае потери захвата.

Обработка результатов измерений.

При проведении измерений в ручном режиме спектр вычисляется и отображается сразу после получения спада и может быть вручную обработан средствами формы отображения графика и сохранен в текущей структуре эксперимента. Если используются повторяющиеся процедуры обработки по отношению к однотипным спадам, в формах отображения графиков спадов и спектров могут быть введены макросы для выполнения набора операций. Как правило, в форме спадов используются операции удаления смещения хвоста, вырезания “плохих” точек в начале спада, коррекции разницы усиления каналов посредством умножения данных одного канала на постоянный коэффициент, а в форме отображения спектра – коррекция фаз компонент и, если нужно, сдвиг графика по X (обычно вручную, индивидуально для каждого спектра, чтобы скомпенсировать дрейф поля, но можно и автоматически).

После получения набора спадов в процессе проведения экспериментов по программе автоматических измерений может быть выполнена пакетная обработка спадов с получением соответствующего им набора спектров. Для проведения пакетной обработки

необходимо предварительно настроить макросы обработки в формах отображения графиков спадов и спектров:

1. Загрузите в память компьютера наиболее характерный спад из зарегистрированного набора. Это может быть спад из начала или середины списка в зависимости от типа эксперимента. Должен быть включен показ графиков спада и спектра в декартовых координатах.
2. Выберите форму отображения графиков спада. Настройте режим отображения для получения максимума информации по начальному и конечному участкам спада. Для операций удаления смещения хвоста и вырезания начальных точек удобно использовать логарифмический масштаб по оси X.
3. Включите запись макроса нажатием кнопки .
4. Выполните необходимые операции коррекции. В процессе выполнения можно настраивать режимы отображения графиков, менять масштабы для получения наибольшей информации о соответствующем участке. Если при коррекции допущена ошибка, можно восстановить исходные данные и перезапустить запись кнопкой “Вернуть”, после чего операции выполняются заново.
5. По окончании коррекции нажмите кнопку “Вывод”. Запись макроса будет завершена, отредактированные данные переписаны в основную память программы, после чего будет выполнено преобразование Фурье и отображен график полученного спектра.
6. Если требуется коррекция спектра, выполните аналогичные операции по записи макроса на форме отображения графика спектра, завершив их нажатием кнопки “Вывод”. Если коррекция не требуется, либо предполагается провести ее позже, после предварительной ручной коррекции, то макрос можно не записывать.

Пакетная обработка запускается нажатием кнопки “Обраб.” формы управления структурами экспериментов после выбора мышью любого поля в таблице списка спадов. Перед этим можно свернуть (минимизировать) соответствующие формы графиков для экономии времени на отображение. Если в таблице списка спектров имеются записи, то будет выведен запрос на удаление спектров. В процессе пакетной обработки будут последовательно загружаться спады, имеющиеся в списке, выполняться макрос обработки из формы отображения спада, выполняться преобразование Фурье для результата выполнения макроса, выполняться макрос из формы отображения спектра, после чего полученные спектры будут сохраняться в структуре эксперимента.

Если измерения проводились без использования системы ЯМР-стабилизации поля, положения линий могут изменяться от спектра к спектру за счет дрейфа поля. В этом случае, до проведения коррекции фазы можно вручную выполнить сдвиг спектров по X, что удобно проводить на графике спектра в полярных координатах. Если отклонения небольшие, т.е. пики не перекрываются, то можно воспользоваться функцией автосдвига. После этого спектр следует переписать в основную память программы, нажав кнопку “Вывод” и сохранить в текущей записи БД. После этого можно выполнить пакетную обработку спектров, например для коррекции фаз компонент. Эта обработка выполняется с помощью макроса формы графика спектра в декартовых координатах нажатием кнопки “Обраб.” формы управления структурами экспериментов после выбора мышью любого поля в таблице списка спектров.

После пакетной обработки полученные спектры могут быть снова дообработаны вручную, например можно подкорректировать фазы компонент. Каждый спектр после ручной обработки в форме отображения графика следует переписать в основную память программы, нажав кнопку “Вывод” и сохранить в текущей записи БД.

Для получения информации, необходимой для расчета по набору спектров целевых параметров, таких как время релаксации или коэффициент самодиффузии для выбранной компоненты спектра выполняются следующие операции:

1. Загрузите из полученного набора наиболее характерный спектр.
2. В форме отображения графика спектра выберите функцию “Интеграл” и выделите мышью интервал по X, по которому требуется вычислять интеграл, например спектральную линию или группу линий с захватом боковых частей. Во всплывающей подсказке будут выведены следующие параметры: значение интеграла от выбранного интервала, амплитуды пика (максимума или минимума, в зависимости от знака интеграла), положение пика по оси X в PPM или килогерцах.
3. Перейдите в форму управления структурами экспериментов, выберите в списке спектров запись, начиная с которой нужно получить точки искомой функции.
4. Нажмите кнопку “Вывод”. Перед этим можно минимизировать ненужные формы графиков. После завершения операции в буфер обмена Windows будет помещен текстовый фрагмент, строки которого содержат по 4 числовых параметра, разделенные символом табуляции: изменяемый параметр эксперимента, определяемый по первым 2 записям списка, как описано в параграфе, посвященном экспорту данных, значение интеграла действительной части спектра по выделенному интервалу (выдается значение интеграла в шкале частоты, поэтому может отличаться от значения, выводимого в форме графика), значение амплитуды максимального пика, попадающего в этот интервал, положение пика по оси X.

Аналогичные операции можно выполнить и с наборами спадов, но в этом случае вычисление интеграла производится в форме отображения спада в полярных координатах. Вычисленное значение интеграла и амплитуды пика делится на величину суммарного усиления приемного тракта.

Для дальнейшей обработки данные из буфера обмена можно вставить в программу типа Origin или Excel. После соответствующей обработки и получения необходимых параметров, можно аналогично получить данные и по другим компонентам спектра.

Экспорт результатов измерений в файлы формата программы NUTS.

Программа TESLA имеет значительное количество функций для обработки регистрируемых и сохраненных данных, но в программе предусмотрена также возможность вывода текущих или сохраненных результатов измерений в файлы для последующего анализа с помощью специализированной программы для обработки данных ЯМР измерений – NUTS.

Текущие спад или спектр могут быть экспортированы в файлы одномерного формата NUTS подачей из меню основной формы команд “Спад > Экспорт в Nuts” и “Спектр > Экспорт в Nuts”. Никаких ограничений и особенностей такой экспорт не имеет, только для правильного отображения данных в единицах PPM в форме управления экспериментами должен быть выбран или введен параметр опорной частоты образца.

Большой интерес представляет экспорт данных в файлы двумерного формата NUTS, что позволит с помощью этой программы определять времена релаксации компонент спектра, получать двумерные спектры и т.п. Для того, чтобы корректно экспортировать данные, полученные при проведении серии автоматических измерений, требуется соблюдать ряд ограничений и требований при создании программ, последовательностей и наборов параметров:

1. Следует создать серии наборов параметров и последовательностей для использования в программах автоматических измерений. Каждая последовательность или набор параметров, должны иметь описания, в начале которых должно быть в текстовом виде указано численное значение ключевого изменяемого параметра данного набора или последовательности. В случае последовательностей это обычно временной параметр в секундах. Это значение должно отделяться от остальной части описания символом,

- отличным от пробела или другого символа, который может быть интерпретирован как часть числа. Таким разделительным символом может быть, например, двоеточие.
2. Программа автоматических измерений, предназначенная для получения данных для последующего экспорта в двумерные файлы NUTS должна осуществлять изменение только одного параметра: градиента, температуры, последовательности или набора параметров, а остальные должны оставаться постоянными. Это правило можно нарушать, помня, что функция экспорта определяет изменяемый параметр по первым двум записям спадов или спектров в структуре эксперимента: если изменяется градиент, считается, что он является изменяемым параметром и проверка изменения других параметров не производится, если же он остается постоянным, проверяется изменение кода температуры, затем кода записи последовательности, а затем набора параметров. Таким образом, в программе с изменением градиента можно, например, загружать разные наборы параметров, в частности для изменения усиления приемного тракта, это не будет ошибкой. Длина программы не должна превышать 64 шагов.
 3. Структура эксперимента, предназначенная для сохранения данных, которые предполагается экспортировать, не должна содержать других спадов или спектров, поэтому не следует сохранять в ней спады или спектры, полученные при ручных измерениях.

Экспорт данных спадов или спектров в двумерный формат программы NUTS выполняется нажатием командной кнопки “Экспорт” после выбора соответствующей таблицы списка формы управления экспериментами, после чего выбирается имя файла с расширением .FID или .NMR. Массив параметров времени файла заполняется значениями градиента, температуры, пересчитанными из соответствующих параметров посредством полиномов, коэффициенты которых заданы в файле параметров, либо параметрами, считанными из начала описаний последовательностей или наборов параметров. При экспорте элементы массивов спадов или спектров делятся на значения суммарного коэффициента усиления приемного тракта спектрометра, что позволяет сравнивать результаты, полученные при различном усилении. Описания набора параметров, последовательности и значения температуры, включаемые в файл берутся для спада или спектра, на котором стоит указатель при запуске экспорта.

Структура базы данных.

База данных, создаваемая программой TESLA имеет формат, совместимый с программой MS Access v.8 (из пакета MS Office 97 pro), и содержит постоянные таблицы, появляющиеся сразу при создании, а также таблицы, появляющиеся при сохранении последовательностей, программ и массивов результатов измерений. Связи между таблицами в БД не создаются, учет и анализ ссылок осуществляется программно.

После создания БД в ней имеются следующие пустые таблицы:

- 1) “Params” содержит записи наборов параметров узлов спектрометра и состоит из следующих полей:
 - a) “N” – счетчик записей, длинное целое, автоинкрементное ключевое поле, имеет индекс “Key”.
 - b) “RPhase” – код фазы приемника, байт.
 - c) “RPar2” – параметр 2 приемника, байт.
 - d) “RPar3” – параметр 3 приемника, байт.
 - e) “AmHF1” – параметр усиления 1 ВЧ усилителя, байт.
 - f) “AmHF2” – параметр усиления 2 ВЧ усилителя, байт.
 - g) “AmLF” – параметр усиления НЧ усилителя, байт.
 - h) “AmLF” – параметр усиления фильтров, байт.
 - i) “TFreq” – параметр частоты передатчика, длинное целое.

- j) "TPar1" – параметр 1 передатчика, байт.
 - k) "TPar2" – параметр 2 передатчика, байт.
 - l) "TPar3" – параметр 3 передатчика, байт.
 - m) "TPar4" – параметр 4 передатчика, байт.
 - n) "DPar1" – параметр 1 декаплера, байт.
 - o) "DPar2" – параметр 2 декаплера, байт.
 - p) "DFreq3" – параметр частоты декаплера 3, длинное целое.
 - q) "DFreq4" – параметр частоты декаплера 4, длинное целое.
 - r) "TermEn" – разрешение термоблока, байт.
 - s) "Descr" – описание набора параметров, строка 80 символов, имеет одноименный индекс.
 - t) "Refs" – счетчик ссылок, целое.
- 2) "Seqs" – записи содержат общие параметры импульсных последовательностей, не относящиеся к конкретным шагам.
- a) "N" – счетчик записей, длинное целое, автоинкрементное ключевое поле, имеет индекс "Key".
 - b) "TStepC" – код параметра периода шага, байт.
 - c) "Deg" – показатель количества точек, байт.
 - d) "NCycles" – количество циклов, длинное целое.
 - e) "CBeg" – адрес шага начала цикла, байт.
 - f) "CEnd" – адрес шага конца цикла, байт.
 - g) "TOut" – таймаут ожидания приема данных, число с плавающей точкой одинарной точности.
 - h) "Descr" – описание последовательности, строка 80 символов, имеет одноименный индекс.
 - i) "Refs" – счетчик ссылок, целое.
- 3) "Programs" – общие параметры программ автоматических измерений, не относящиеся к конкретным шагам.
- a) "N" – счетчик записей, длинное целое, автоинкрементное ключевое поле, имеет индекс "Key".
 - b) "Descr" – описание программы, строка 80 символов, имеет одноименный индекс.
 - c) "Refs" – счетчик ссылок, целое.
- 4) "Expers" – структуры экспериментов.
- a) "N" – счетчик записей, длинное целое, автоинкрементное ключевое поле, имеет индекс "Key".
 - b) "NPars" – ссылка на поле счетчика записи таблицы наборов параметров, длинное целое.
 - c) "NSeq" – ссылка на поле счетчика записи таблицы последовательностей.
 - d) "NProg" – ссылка на поле счетчика записи таблицы программ.
 - e) "DTime" – дата и время создания структуры эксперимента.
 - f) "Descr" – описание структуры эксперимента, строка 80 символов, имеет одноименный индекс.
 - g) "Refs" – счетчик ссылок, целое.
 - h) "Nuc" – индекс ядра, выбранного в эксперименте, байт.
 - i) "Solv" – индекс растворителя, выбранного в эксперименте, байт.
- 5) "Decays" – общие параметры спадов.
- a) "N" – счетчик записей, длинное целое, автоинкрементное ключевое поле, имеет индекс "Key".
 - b) "NExp" – ссылка на поле счетчика записи таблицы структур экспериментов, длинное целое, имеет одноименный индекс.

- с) “NPars” – ссылка на поле счетчика записи таблицы наборов параметров, имеет одноименный индекс.
 - д) “NSeq” – ссылка на поле счетчика записи таблицы последовательностей, имеет одноименный индекс.
 - е) “Temper” – код температуры, целое.
 - ф) “Grad” – код градиента, целое.
 - г) “DTime” – дата и время записи спада.
- б) “Spectra” – общие параметры спектров, структура аналогична таблице общих параметров спадов.

При сохранении в БД импульсных последовательностей в ней появляются таблицы с именами, состоящими из буквы “Q” и 5-значного целого числа, равного содержимому поля счетчика соответствующей записи таблицы “Seqs”. Записи таблицы соответствуют шагам последовательности. Таблица имеет следующие поля:

- а) “Mant” – мантисса интервала, целое.
- б) “Ord” – порядок интервала, байт.
- с) “Ctl1” – 3 разряда управляющего слова, байт.
- д) “Ctl2” – 8 разрядов управляющего слова, байт.
- е) “Ctl3” – 8 разрядов управляющего слова, байт.
- ф) “Descr” – описание шага, строка 32 символа.

Программы автоматических измерений сохраняются в таблицах с именами, состоящими из буквы “P” и 5-значного целого числа, равного содержимому поля счетчика соответствующей записи таблицы “Programs”. Записи таблицы соответствуют шагам программы. Таблица имеет следующие поля:

- а) “NPars” – ссылка на поле счетчика записи таблицы наборов параметров, длинное целое, имеет одноименный индекс.
- б) “NSeq” – ссылка на поле счетчика записи таблицы последовательностей, имеет одноименный индекс.
- с) “Temper” – код температуры, целое.
- д) “Grad” – код градиента, целое.
- е) “Pause” – пауза ожидания, число с плавающей точкой одинарной точности.

Спады и спектры сохраняются в БД в таблицах с именами, состоящими из буквы “D” для спада и “S” для спектра и 5-значного целого числа, равного содержимому поля счетчика соответствующей записи таблицы “Decays” или “Spectra”. Записи таблиц соответствуют точкам массивов. Таблица имеет поля “Re” и “Im” формата числа с плавающей точкой одинарной точности.

База данных, созданная программой TESLA имеет идентификационное свойство текстового типа «TESLA» со значением “Tesla_3”, соответствие которого проверяется при открывании БД программой.

При удалении каких-либо записей и таблиц из базы данных размер файла не уменьшается, а освободившееся пространство впоследствии используется для сохранения новых данных. Если же в дальнейшем не предполагается сохранять в этой БД какие-либо данные, то для экономии места ее следует сжать, используя команду меню основной формы “Файл > Сжать БД”.

Файл параметров.

При запуске приложения TESLA.EXE производится загрузка чисел и массивов, содержащих управляющие параметры программы из текстового файла TESLA.PAR, находящегося в рабочем каталоге программы. Данный файл устанавливается в процессе установки приложения, но может редактироваться пользователем для добавления или

изменения параметров. Файл содержит следующую информацию (по строкам, отдельные параметры разделены символами табуляции, текстовые параметры вводятся в кавычках):

1. Коэффициенты полинома 3-го порядка для перевода кода температуры в значение температуры в градусах Цельсия, начиная со свободного члена и заканчивая коэффициентом при 3-й степени кода.
2. Коэффициенты полинома 3-го порядка для перевода кода градиента в значение градиента в Гауссах на сантиметр.
3. Слово "Nucleus", за которым следуют обозначения ядер, с которыми возможны измерения, начиная с "H1".
4. Слово "Frequency", за которым следуют значения частот (в мегагерцах) резонанса ядер, перечисленных в строке 3.
5. Слово "TMS", за которым следуют значения параметра частоты (опорной частоты в герцах) для линии спектра тетраметилсилана для ядер, перечисленных в строке 3. Для ядер, отличающихся от H1 и C13 может быть выбрана другая метка.
- 6.. В данной и последующих строках указываются параметры сдвига частоты линии спектра TMS (или другой метки) для различных растворителей для ядер, перечисленных в строке 3. Количество строк не должно превышать 255, а количество ядер - 16.

При редактировании файла параметров уже после проведения экспериментов не следует удалять, вставлять или изменять порядок строк описания параметров растворителей и столбцов ядер, поскольку в БД сохраняются индексы растворителей и ядер в соответствии с их расположением в файле.

Сведения об авторе:

Одиванов Владимир Леонидович, E-mail: odivanov@mail.ru
Личная www-страница: <http://odivanov.narod.ru>