

LIESMICH zum JCAMP-DX nD-NMR Testfile Ringversuch.

1) In JCAMP-DX 6.0 für 2D-NMR treten drei neue Label auf:

- **##NUM_DIM= 2**
Gibt die Anzahl der Dimensionen des Datensatzes an.
- **##.ACQUISITION SCHEME= NOT PHASE SENSITIVE**
In zweidimensionalen Datensätzen erscheinen neue DATA TABLES, die zu der zweiten unabhängigen Variablen T1 oder F1 gehören. Diese DATA TABLES können den Werten von T1 nur dann eindeutig zugeordnet werden, wenn der Aquisitionsmethode (phasensensitiv, nicht phasensensitiv) bekannt ist. Bei phasensensitiven Daten muß darüber hinaus das Verfahren der phasensensitiven Datenaufnahme (STATES, TPPI, TPPI-STATES) beschrieben werden, da die T1-Daten bei den drei genannten Verfahren in unterschiedlicher Weise abgelegt werden.
- **##.NUCLEUS= 1H, 13C**
Definiert die Kernart für die jeweilige Achse.

2) Folgende Label aus der noch unveröffentlichten Version 5.01 werden verwendet:

- **##.SOLVENT NAME=**
Lösungsmittel
- **##.PULSE SEQUENCE= HETCOR**
Pulssequenz im neu definierten Format. Die Definition beschränkt sich bisher auf einige häufig benötigte Pulssequenzen und umfaßt keine generische, auf beliebige Pulssequenzen anwendbare Beschreibung.
- **##UNITS= ... POWER**
Neue YUNITS für Powerspektren

3) Im Vergleich zu JCAMP-DX 5.00 werden folgende Label anders verwendet:

Beispiel ATTRIBUTE TABLES

```
##NTUPLES= nD NMR FID
##VAR_NAME= TIME1,          TIME2,          FID/REAL,          FID/IMAG
##SYMBOL=   T1,            T2,            R,                I
##.NUCLEUS= NUCLEUS_T1,    NUCLEUS_T2
##VAR_TYPE= INDEPENDENT,   INDEPENDENT,    DEPENDENT,         DEPENDENT
##VAR_FORM= AFFN,          ASDF,           ASDF,             ASDF
##VAR_DIM=  VAR_DIM_T1,    VAR_DIM_T2,     VAR_DIM_R,         VAR_DIM_I
##UNITS=    SECONDS,       SECONDS,        ARBITRARY UNITS,  ARBITRARY UNITS
##FIRST=    FIRST_T1,      FIRST_T2,      ,$$FIRST_R und FIRST_I sind in den Pages
##LAST=     LAST_T1,      LAST_T2,      ,
##MIN=      MIN_T1,       MIN_T2,        MIN_R,            MIN_I
##MAX=      MAX_T1,       MAX_T2,        MAX_R,            MAX_I
##FACTOR=   FACTOR_T1,    FACTOR_T2,     FACTOR_R,         FACTOR_I
```

```
##NTUPLES= nD NMR SPECTRUM
##VAR_NAME= FREQUENCY1,    FREQUENCY2,     SPECTRUM
##SYMBOL=   F1,            F2,             Y
##.NUCLEUS= NUCLEUS_F1,    NUCLEUS_F2
##VAR_TYPE= INDEPENDENT,   INDEPENDENT,    DEPENDENT
##VAR_FORM= AFFN,          ASDF,           ASDF
##VAR_DIM=  VAR_DIM_F1,    VAR_DIM_F2,     VAR_DIM_Y
##UNITS=    HZ,            HZ,             POWER
##FIRST=    FIRST_F1,      FIRST_F2,       $$FIRST_Y ist in den Pages
##LAST=     LAST_F1,      LAST_F2,
##MIN=      MIN_F1,       MIN_F2,         MIN_Y
##MAX=      MAX_F1,       MAX_F2,         MAX_Y
##FACTOR=   FACTOR_F1,    FACTOR_F2,     FACTOR_Y
```

- Es tritt eine zusätzliche unabhängige Variable, T1 für FIDs bzw. F1 für Spektren auf, die der zweiten Achse des Datensatzes entspricht. Diese zusätzliche Variable erfordert eine zusätzliche Spalte in der

"ATTRIBUTE TABLE". Da die zweite unabhängige Variable zur Unterscheidung der PAGEs verwendet werden kann, ist die in JCAMP-DX 5.00 verwendete PAGE NUMBER N nicht mehr erforderlich.

- **##PAGE= T1= 0.1144165E-03 (für FIDs bzw.)**
##PAGE= F1= 4370.000 (für Spektren)
Der aktuelle Wert der zweiten unabhängigen Variablen wird als Argument in jeder PAGE angegeben.
- **##FIRST= 0.1144165E-03, 0.00, 13165, 2733**
Der erste Y-Wert (bzw. bei FIDs der erste Wert für R und I) ist in jeder PAGE verschieden. Es ist deshalb nicht möglich, ihn in der ATTRIBUTE TABLE anzugeben. Aus diesem Grund enthält jede PAGE einen eigenen FIRST LDR.

In der ATTRIBUTE TABLE wird nur FIRST und LAST für T1 und T2 (für FIDs) bzw. F1 und F2 (für Spektren) angegeben, um die Inkremente der unabhängigen Variablen analog zu der Formel $(LASTX - FIRSTX)/(NPOINTS - 1)$ berechnen zu können.

Der Parameter SW ist redundant wird weder in der ersten, noch in der zweiten Dimension benötigt, da SW aus VAR_DIM und LAST sowie FIRST berechnet werden kann:

$SW2 = (VAR_DIM_T2 - 1) / (LAST_T2 - FIRST_T2)$ und
 $SW1 = (VAR_DIM_T1 - 1) / (n * (LAST_T1 - FIRST_T1))$,
wobei n=1 oder 2, je nach Pulsexperiment.

- **##DATA TABLE= (T2++(R..R)), PROFILE**
Die Variable X aus JCAMP-DX 5.00 wird durch T2 bzw. F2 ersetzt.