

# GUÍA DE INSTALACIÓN DE TOPSPIN 4



## INDICE

- 1. OBJETIVO
- 2. ALCANCE
- 3. DEFINICIONES
- 4. DESARROLLO

GUÍA DE INSTALACIÓN DE TOPSPIN 4 Página 3 de 9 Nº Revisión: 2 21/03/2025



### 1. OBJETIVO.

Detallar los pasos a seguir para instalar y activar correctamente el software TopSpin 4 de Bruker.

### 2. ALCANCE.

Este documento está dirigido a los clientes/usuarios de la unidad de RMN del CIC para procesar los datos que se les envía desde dicha unidad con el software TopSpin. La licencia para uso académico es gratuita.

#### **3. DEFINICIONES.**

C.I.C: Centro de Instrumentación Científica.

Licencia: acuerdo de alquiler de software que permite a una persona utilizar en un ordenador dicho software.

R.M.N.: Resonancia Magnética Nuclear.

## 4. DESARROLLO.

- Regístrate en la web de Bruker (<u>https://www.bruker.com/about-us/register.html</u>). No es necesario utilizar el correo institucional. Para finalizar el registro, Bruker envía un email de autentificación al correo electrónico con el que nos hemos registrado.
- 2) Inicia sesión en la web de Bruker (<u>https://www.bruker.com/login.html</u>).
- Descarga el número de licencia de academia para el TopSpin 4 desde <u>https://www.bruker.com/service/support-upgrades/software-downloads/nmr/free-topspin- processing/nmr-topspin-license-for-academia.html</u>. Haz clic en "Request academia license", copia la licencia y pégala en un bloc de notas.
- 4) Desde la página anterior, pincha en "TopSpin for Windows". También hay descargas para Linux y Mac Os.
- 5) Se abrirá una ventana nueva para descarga el ejecutable de la última versión de TopSpin 4. Ha fecha de 30 de abril de 2025 la versión es "TopSpin 4.5.0 & CMC-assist 2.26".
- 6) Ve a la carpeta donde se ha descargado el ejecutable, pincha sobe él con el botón derecho y selecciona "Ejecutar como administrador"
- 7) Comenzará la instalación guiada. Aparecen las siguientes ventanas (ver imágenes)



#### INSTRUCCIÓN TÉCNICA ESPECÍFICA

IE16-12-TOPI

Página 4 de 9 Nº Revisión: 2 21/03/2025



#### GUÍA DE INSTALACIÓN DE TOPSPIN 4



- Dele a "Next"

\_

| *    | install@NETBOOK-LUQUE                |   |  |                           |                  |          |       |       |
|------|--------------------------------------|---|--|---------------------------|------------------|----------|-------|-------|
|      | BRUKER                               | Bruker NMR Software Installer   |  |                           |                  |          |       |       |
|      | i i                                  | including TopSpin 4.0.5 and CMC-a   |  |                           |                  |          | -     |       |
|      |                                      | Overall progress  | s/twapi/process.tcl<br>s/twapi/rds.tcl<br>s/twapi/README.TXT   |                           |                  |          |       |       |
|      | Setup parameters                     | running   | <pre>is/twapi/resource.tcl is/twapi/security.tcl is/twapi/service_tcl</pre>  |                           |                  |          |       |       |
|      | Check consistency                    | -   | s/twapi/share.tcl<br>s/twapi/shall.tcl   |                           |                  |          |       |       |
|      | Select target directories            |   | <pre>is/twapi/sspi.tcl is/twapi/storage.tcl is(twapi/storage.tcl is(twapi/storage.tcl is(twapi/symph.tcl is(</pre> |                           |                  |          |       |       |
|      | Prepare harddisk                     |   | 🖕 install@NETBOOK-LUQUE  |                           |                  | $\times$ |       |       |
|      | Install files                        | -   | Selection of   | components to install     |                  |          |       |       |
|      | Post processing                      |   | 🗸 🗹 Install Bruker NMR S   | oftware                   |                  |          |       |       |
| Sta  | atus: Retrieving spectrometer        | r version   | √ 🗹 Install <u>G</u> PL licensed   | Cygwin 1.7.4 Software (re | commended)       |          |       |       |
|      | inflating<br>inflating               | g: install-topspin-4.0.5.tr<br>g: install-topspin-4.0.5.tr                                | G Back O Next  | Cancel                    | 🕢 Help           |          |       |       |
| dNot | inflating<br>extracting<br>inflating | g: install-topspin-4.0.5.to<br>g: install-topspin-4.0.5.to<br>g: install-topspin-4.0.5.to | mp/install.cmd<br>mp/TopSpin_4.0.5_2018-08-09T03<br>mp/license-info-zip-2009.txt   | .49.23                    |                  |          |       |       |
|      | Executing a                          | auto-run command cmd.exe //   | c install-topspin-4.0.5.tmp\in   | stall.cmd -c              | sh86.exe" "D:\Ar | tonio\De | scarg | as\in |

Selecciona los dos ítem y dele a "Next"





- Elige la carpeta donde quiere guardar el programa. Por defecto la ruta es "C:\Buker\TopSpin4.X.X"

| Este      | install@NETBOOK-LUQUE   |  |  |   |
|-----------|---|--|--|---|
| Į         | BRUKER Bruke  | er NMR Software Installe<br>ng TopSpin 4.0.5 and CM  | ler<br>MC-a xe – – ×<br>s/twah/nooraes.trl   | < |
| Pap<br>re | Overall progress Setup parameters running   |  | s/twapi/processici<br>s/twapi/ReAME.TXT<br>s/twapi/REAME.TXT<br>s/twapi/scurret.tol<br>s/twapi/scurret.tol   |   |
| Mes       | Check consistency<br>Select target directories  | •  | Srtuapi/share.tcl s/tuapi/share.tcl s/tuapi/share.tcl s/tuapi/shell.tcl winstal@NETBOOK-LUQUE X  |   |
|           | Prepare harddisk<br>Install files   |  | Please select the setup type<br>(a) Data processing only   |   |
| Me<br>Do  | Post processing Status: Selecting the setup type  | •  | O Data processing, acquisition and automation     O Data processing, acquisition and automation     Instals Data Processing, Acquisition and Automation Components for Spectroscopy     O Customized |   |
| Enc       | inflating: in:<br>inflating: in:<br>inflating: in:<br>extracting: in:<br>inflating: in: | stall-topspin-4.<br>stall-topspin-4.<br>stall-topspin-4.<br>stall-topspin-4.<br>stall-topspin-4. | Customized setup (allows component selection)  |   |
|           | Executing auto-<br>Starting "D:\An<br>1-topspin-4.0.5<br>NOTE: using log                | run command cmd.<br>tonio\Descargas\<br>.tmp\xwinstall.d<br>file: C:\WINDOW                      | .exe /c install-topspin-4.0.5.tmp\install.cmd -c<br>\install-topspin-4.0.5.tmp\windows\tcl-8.6.8\bin\tclsh86.exe" "D:\Antonio\Descargas\instal<br>d\swim\lib\winstall.tcl" -c<br>WS\Temp\install.log | ~ |
|           |   |  |  |   |

Selecciona la primera opción, "Data processing only"





- Crea una contraseña fácil de recordar. Esta contraseña solo se utiliza para ciertos comandos.

| Este      |          | in    | nstall@NETBOOK-LUQUE                                      |  |  |  |  |   |   |  |         |          |          |
|-----------|----------|-------|---|--|--|--|--|---|---|--|---------|----------|----------|
| 1         |          |       | BRUKER  | Bruker NMR Soft  | tware Installer<br>4.0.5 and CMC-                                  | a xe   |  |   |   |  |         |          | ×        |
| Pap<br>re |          | ~     | Setup parameters  | Overall progress   | complete   | (S)<br>(S)<br>(S)<br>(S)<br>(S)<br>(S)<br>(S)      | /twapi/pd<br>/twapi/rd<br>/twapi/Rd<br>/twapi/rd<br>/twapi/sd<br>/twapi/sd | rocess.<br>ds.tcl<br>EADME.T<br>esource<br>ecurity<br>ervice. | tcl<br>XT<br>.tcl<br>.tcl<br>tcl                              |  |         |          |          |
|           |          | ~     | Check consistency   |  | complete   | 🔹 install@NETBOO                                   | DK-LUQUE   |   |   | >  | <       |          |          |
| Mes       |          | ~     | Select target directories                                 |  | complete   |  |  | The inst<br>and will  | allation has been setup<br>start now with these prograr       | ms:  |         |          |          |
|           |          |       | Prepare harddisk  |  |  |  |  |   |   |  |         |          |          |
|           |          |       | Install files   |  |  | Product  | Version  | Size/MB   | Target directory  |  |         |          |          |
|           |          |       |   |  |  | TopSpin  | 4.0.5  | 1815  | E:\Archivos de programas\E                                    | Bruker NMR\TopSpin4.0.5  |         |          |          |
| Me        | ٤.       |       | Post processing   |  |  | CMC-a<br>NMR-Data                                  | 2.11   | 125   | E:\Archivos de programas\E                                    | Sruker NMR\ LopSpin4.0.5<br>Bruker NMR\ TopSpin4.0.5\ evamdata |         |          |          |
| D         | <u>ا</u> | Statu | us: Last dialog before disk                               | c changes  |  | CodeMeter Runtin                                   | ne 6.40b   | 37  | C:\WINDOWS\Temp\Code  | Meter  |         |          |          |
| Er        | E        | lote  | inflatin<br>inflatin<br>inflatin<br>extractin<br>inflatin | ng: install-to<br>ng: install-to<br>ng: install-to<br>ng: install-to<br>ng: install-to | opspin-4.0<br>opspin-4.0<br>opspin-4.0<br>opspin-4.0<br>opspin-4.0 |  | G  | Open Sou<br>GNU Pub<br><u>B</u> ack                           | rce Components provided u<br>lic License v3 will be installed | nder<br>I  |         |          |          |
|           |          |       | Executing<br>Starting<br>1-topspin<br>NOTE: usin          | auto-run comm<br>"D:\Antonio\De<br>-4.0.5.tmp\xwi<br>ng log file: (                    | nand cmd.el<br>escargas\in<br>install.d\s<br>C:\WINDOWS\           | stall-topspin-<br>wim\lib\xwinst<br>Temp\install.] | -4.0.5.tr<br>tall.tcl<br>log   | mp∖wind<br>" -c   | ows\tcl-8.6.8\bin\t   | clsh86.exe" "D:\Antonio\                                       | Descarg | gas∖inst | .al<br>~ |
| Drog      |          |       | da Varias late  | waradas an las CM  | C seriet 2.6   | Descenaria D                                       | lostalas do  | 0.  | 000   |  |         |          |          |

- Después de darle a "Next", comenzará la instalación. Puede durar varios minutos. Paciencia
- 8) Al finalizar la instalación se abre la siguiente ventana





- Dele a "Finish"
- Abre el enlace <u>https://www.wibu.com/support/user/downloads-user-software.html</u>. Descarga la última versión de "CodeMeter User Runtime for XXX". A fecha de 30 de abril de 2025 la última versión es 8.20a.
- 10) Ejecuta el instalador "CodeMeterRuntime.exe" e instala el software.
- 11) Abre TopSpin 4 desde el icono del escritorio y se abrirá la siguiente ventana

| Este equipo Cosmebla | nc_Cl Certificado nn.png Instalar CMC-assist 2.11  |
|----------------------|--|
|                      | 🖕 LICENSE X  |
| de To                | X  |
| TopSp                | TACLEPI, DO NOU SHOW ELICENSE Again TACLEPI Cancer   |
| Insta                | Please read and accept license.  |
| Papelera de Waitin   | If you don't agree, press Cancel. The program will terminate in this case.                             |
| reciclaje 2018-1     | Functionable outputs. If any provision of this antername is next to be interfective, mentioreasite     |
| No ma                | 152 provisions bereaf and such provision shall be reformed the analytic the extent personal            |
| CmCon                | 153 effective, enforceable and legal. All headings are solely for convenience and shall not be         |
| Codell               | 154 interpreting this AGREEMENT. This Agreement shall be governed by and construed in accordan         |
| empty                | 155 the laws of the Commonwealth of Massachusetts.   |
| MestReNova A         | 156  |
|                      | 157 TopSpin utilizes a number of open source software packages. These packages are subject to          |
|                      | 158 license terms. For example GPL (GNU public license) or LPGL (Lesser GNU public license) 1          |
|                      | 159 own license terms that also include additional underlying license terms. These packages are        |
|                      | 160 TopSpin's "Help> License Info" menu and the respective license terms are available for v:          |
| Mendeley Er          | 161  |
| Desktop              | 162  |
|                      | 163  |
|                      | 164 This license agreement is also available as a PDF file:  |
| EN                   | 165 <topspin directory="" installation="">/prog/docu/English/topspin/pdf/topspin_license.pdf</topspin> |
|                      | 166  |
| EndNote              | 167  |
|                      | 168  |
|                      | 159  |
|                      | 170  |
|                      | 172  |
| Programas de Vario   | 173  |
| estadística          | 174  |
|                      |  |
|                      | 1:1  |

Dele a "I Accept, do not show license again"

- 12) En la nueva ventana que se abre, seleccionar "Install License ticket". En ese momento se abre una página web donde es necesario introducir en "Tiquete" el número de licencia que tenemos en el bloc de notas. En la nueva web que aparece, hacer clic en "Activar Licencias".
- 13) Aparecerá una ventana web:



| ← → ♂ ☆                           | licensecentral-bbio.bruker.de/get.php     Mis Licencias  | … 🛛 ☆  |   |
|-----------------------------------|--|--|---|
|                                   | Licencias Disponibles - Seleccionar el vínculo de unión pa   | ra sus licencias   |   |
|                                   | Sus licencias se pueden vincular a un ordenador ( <b>CmActLicense</b> ) o a un dongle (<br>• Si usted elige vincular a su ordenador, la licencia se transfiere a este equipo. L<br>• Si decide vincular a un CmDongle, la licencia se transfiere por completo en esi<br>ordenadores. | CmDongle).<br>a licencia queda vinculada a las propiedades de su ordenador.<br>e dongle. La licencia es por tanto, portâtil y puede ser usada en distintos |   |
|                                   |  |  |   |
|                                   | Quiero transferri mis liconcias a un dengle (CmDonglio) para hacentas<br>portátiles y que éstas funcionan en ordenadores diferentes<br>Firm Code: 102/802  | Quiero transferir mis licencias a mi ordenador (CmActLicense)<br>Firm Code: 5000506   CmContainer: BRUKER_BBIO_WMLV (0002)                                 |   |
|                                   | Nota Legal   ©W/IBU-SYSTEMS AG   CodeMete  | r License Central WebDepot v17.07.180.500.ws   | • |
| licensecentral-bbio.bruker.de/aet |  |  |   |

- Seleccionar la opción de la derecha.
- 14) Se abre otra web donde explica "Como activar sus licencias". Solamente hay que darle a "Activar las licencias seleccionadas"
- 15) Si se ha activado la licencia correctamente debe aparecer la siguiente web

| <ul> <li>TopSpin 4.0</li> <li>ExtTopSpin 4.0</li> <li>Installation</li> <li>Validing for<br/>2018-10-08</li> <li>Cannot check</li> <li>No matching</li> <li>Cuncontainer</li> </ul> | .5 - Copyright (C<br>n directory: "E:/Ar<br>CodeMeter license<br>13:09:05.582 +0200<br>Kout TopSpin CodeMe<br>license entry foun<br>Entry not found, E | ) 2018 Bruker BioSpin GmbH<br>chivos de programas/Bruker NMH<br>ter license<br>d for feature "TOPSPIN4" mappo<br>rroor 200. | R/TopSpin4.0.5"<br>ed to product code 101101400 | a .                       |                   |       |
|---|--|---|---|---------------------------|-------------------|-------|
| 👇 Conta   | cto - Bidah Chaumel 🛛 🗙  | as AS.com - Diario online deportiv X  | CodeMeter License Central WebDep $	imes$        | 😋 WebAdmin   Container    | × +               | - 🗆 × |
| (←) → C'  | ŵ  | licensecentral-bbio.bruker.de/over  | view.php  | •                         | ♥ ☆               |       |
|   | Inicio Mis Lice  | ncias   |   | Espa                      | ñol 🏧             |       |
|   | Nombre   |   | Activado el                                     | CmContainer               | Estado            |       |
|   | TopSpin4 Processing  | Only (academia license) incl. TopSpin3  | 2018-10-08 13:0                                 | 09:43 128-14480961        | Disponible: 0 (1) |       |
|   | Realojamiento de   | i Licencias<br>Nota Legal   ©WIBU-SYSTEP  | /IS AG   CodeMeter License Central W            | ebDepot v17.07.180.500.ws | _                 | •     |

16) Cierra TopSpin 4 y vuelve a abrirlo. Aparecerá la siguiente ventana.



| 💩 Bruker TopSpin 4.0.5 on NETBC   | OK-LUQUE as i                  | Antonio [Academic Lice                      | nse]   |                                    | -   | - 🗆 🗡     |     |     |  |  |
|---|--------------------------------|---|--|------------------------------------|-----|-----------|-----|-----|--|--|
| <u></u> <u> </u>  | n <u>aly</u> se                | App <u>l</u> ications                       | <u>M</u> anage                                       |                                    | · ش | P BRUKER  | - 0 | × • |  |  |
| Λ Pro <u>c</u> . Spectrum →   | 🖕 Configui                     | ration check                                | 3  | × )                                | •   | · · · · · |     |     |  |  |
| *2 /2   \$ +>   \$ + Warning:   |                                |   |  |                                    |     |           |     |     |  |  |
| Image: Data       Image: Data       Image: Comparison of the program will not work correctly until "expinstal"         Image: Data       Image: Comparison of the program will not work correctly until "expinstal" |                                |   |  |                                    |     |           |     |     |  |  |
| Search:   | has been e                     | executed.                                   |  |                                    |     |           |     |     |  |  |
| E:\Archivos de programas\E  | For spectro                    | ometer control press                        | "Cf" to execute "cf" fin                             | st,                                |     |           |     |     |  |  |
| ,   | for datasta<br>"Close" to i    | tions press "Expinst<br>ignore this message | all" to execute "expinsta<br>and execute "cf" or "ex | all" or press<br>xpinstall" later. |     |           |     |     |  |  |
| A <b>V</b>  |                                |   |  |                                    |     |           |     |     |  |  |
| 0 % 0   | Do not snow this message again |   |  |                                    |     |           |     |     |  |  |
|   | 1                              |   | Cf Expinsta  | all Close                          |     |           |     |     |  |  |
| No structure available.   |                                |   |  |                                    |     |           |     |     |  |  |
| p   |                                |   |  |                                    |     |           |     |     |  |  |
| E   |                                |   |  |                                    |     |           |     |     |  |  |
| Ehaivote CiC  | Quilez.uocx                    | Programas de Di                             | onar container                                       |                                    |     |           |     |     |  |  |

 Selecciona "Expinstall" y marca la casilla "Do not show this message again". Por defecto se instalan los parámetros de un espectrómetro de 600 Hz. El directorio donde están dichos archivos es TopSpin4.X.X > conf > instr > Bruker\_default\_TRX\_600

17) Ya puedes utilizar TopSpin 4 para procesar los espectros.

| c  | 5 =                                |                    |                       | INSTAL AR TOP  | PIN / docx - Wo        | rd              |            |             |    |       |     | 2 1   | _          |
|----|------------------------------------|--------------------|-----------------------|----------------|------------------------|-----------------|------------|-------------|----|-------|-----|-------|------------|
| 0  | INSERTAR DISEÑO                    | DISEÑO DE PÁGINA   | REFERENCIAS           | CORRESPONDENCI | REVISAR                | VISTA           | EndNote X7 | Matemáticas |    |       |     |       |            |
|    | 🖕 Bruker TopSpin 4.0.5 on          | NETBOOK-LUQUE as A | ntonio [Academic Lie  | cense]         |                        |                 |            |             |    | -     | - 0 | x I   |            |
| fo |                                    | A <u>n</u> alyse   | App <u>l</u> ications | <u>M</u> anage |                        |                 |            |             | 88 | i 🔅 1 | B   | TUKER | ar<br>Ir T |
| ;  | ∫ Pro <u>c</u> . Spectrum •        | - Adjust Pl        | hase 🗸   🔍 <u>E</u>   | Baseline 🗸 🛛 🧄 | Calib. A <u>x</u> is • | - A <u>d</u> va | anced -    |             | Ê  | •     | •   | E R   |            |
|    | *2 /2   🗘 🕩                        | ‡⇔±∣⊕              | ╡                     | ⊼± ≫           | l                      |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    | 🗏 Data 🔗 🔠                         | "                  | F                     |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    | Search:<br>⊞-E:\Archivos de progra | amas\Bruker NMR\To | Find<br>opSpin4.0.5\c |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    |                                    |                    |                       |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    |                                    |                    |                       |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    |                                    |                    |                       |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    |                                    |                    |                       |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    | <<br>A <b>T</b>                    |                    | >                     |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    | 0%0                                |                    |                       |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
| C  | No stru                            | icture available.  |                       |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |
|    |                                    |                    |                       |                |                        |                 |            |             |    |       |     |       |            |