

Water suppression 실험방법(CO2RR)

- 1H spectrum을 찍어서 water peak의 위치를 확인
 - New → proton.kaist을 선택
 - sx 홀더번호 ; lock h2o+d2o; atma; topshim tuneaz; getprosol; ns 1; rga; zg;
 - efp; apk ; absn ; 으로 스펙트럼 확인
 - .pp → 꼭지점을 포함하도록 box를 긁음 → .sret
 - water peak 위치를 메모
 - # 시료가 잘 안 섞였을 경우 water peak모양이 이상할 수있음. → 제대로 섞거나 눈대중으로 peak 중앙을 가늠하여 메모
- Water suppression 실험을 실행
 - New → water_NOESYGPPR1D.kaist 선택
 - pulsecal 실행
 - p1 (90도 pulse), p2(180도 pulse)이 자동 계산됨
 - p0 를 (flip angle/90) * p1으로 설정
 - Flip angle이 90일 경우 p0 = p1
 - 45일경우는 p0 = p1 / 2
 - D1 : 3~7 * T1으로 설정
 - O1P : proton실험에서 메모해둔 water peak위치를 입력
 - SW : 12~ 16ppm으로 설정
 - NS : 8의 배수로 설정
 - rga;zg;

Water suppression 실험방법(CO2RR)

• 기타

- Labile proton(NH, OH)등을 정량할 때는 다른 방법으로 시도(예> N2RR)
 - noesy1D 또는 presaturation 방법은 exchangeable proton을 같이 suppressio함
 - 예> PGSE pulse + PULCON
 - 예> Excitation Sculpting
- T1은 inversion recovery 실험으로 측정
 - T1을 보고해야할 경우에는 Pseudo2D 방법으로 측정
 - 측정시간 : 약 40분 ~ 2시간
 - 대략적인 T1은 null metho으로 측정하여 사용
 - 측정시간 : 약 5~10분
- pulsecal 을 사용할 수 없는 경우에는 flip angle을 30 또는 45로 정해서 측정 권장
- NS는 원하는 LOQ를 고려하여 설정
 - SNR ~10이면 80~90%, SNR 50 이면 95%, SNR 150이면 99% 신뢰도
 - Baseline noise level이 클 경우에는 LB 를 적당한 값(0.2 ~ 3)으로 설정하여 분석 가능 (apodization)
- Noesy 1d실험후 스펙트럼이 뒤집어져서 나오면 다음과 같이 입력
 - Topspin에서 efp ; apk; → .ph ; .ph180 ; .sret → absn
 - Mnova에서 뒤집에서 봐도 됨
- 정확한 정량을 위해 적절한 processing과 integration이 중요함