

#### FRIEDRICH-SCHILLER-UNIVERSITÄT JENA NMR-Platform, Faculty of Chemistry and Earth Sciences

Friederike Pielenz

## Introduction to NMR data processing and analysis with Origin

# Introduction to NMR data processing and analysis with Origin

- Installation
- Loading data
- Processing & Integration
- DOSY analysis

#### Install Software

cle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 (wird ausgeführ						🔹 📭 📢 🗐	🔀 13:00 🕘 🎇	Friederike Pi
	Windows7 [wird ausgeführt] - O	racle VM VirtualBox						-
Anzeige Geräte Hilfe								
	/F=14=4 /							
b UriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\tpielenz\Documents\DriginLab\2016\Anwenderdateien\UNIIILED	-/Folderl/							
			արիսի պել ՀՀ 🖉	K XY7	I ADC NOME G S	14 4 B		
						- <u>-</u>		
					Apps	↓ ↓ × ○		
					50 A	bjek		
					Ann	s hinzufüg		
					12 14	altur		
Einheiten Einheiten						D		
F(x)=								
	Computer	<ul> <li>Lindows7 (\\vboxsvr)</li> </ul>	) (X:) 🕨		↓ ↓ Lindov	vs7 (\\vboxsvr) (X:)	durchs 🔎	
	Organiziana a Nava	Orderer				9		
	Organisieren 👻 Neuer	Ordner		· •	_			
	📩 🔶 Favoriten	Name	A	nderungsdatum	Тур	Größe	Â.	
	E Desktop	screenshots topspir	ninstallation 2	1.03.2016 13:45	Dateiordner			
	Downloads     Tuletat berucht	in onmr	0.	3.11.2016 09:37	Dateiordner			
	<u>20</u> Zuccit besucht	topspindatenFÜRor	rigin 0	5.06.2017 09:32	Dateiordner			
	ᇘ Bibliotheken	퉬 Desktopdatein	0	5.06.2017 13:18	Dateiordner			
	🔚 Bilder	onmr8.opx	1	).10.2014 09:18	OPX-Datei	1.416 KB		
	Dokumente	license.dat	Typ: OPX-Datei	11_2015_15:57	DAT-Datei	1 KB	E	
	Musik     Videos	Unbenannt 1	Größe: 1,38 MB Änderungsdatum: 10.10.20	14.09-18 00-47	OpenDocument I	439 KB		
Weiss E	Vices	xTrianggle	0	7.01.2016 14:13	Datei	1.409 NB		
	🖳 Computer	windows-topspin3.	.5.3 1	2.01.2016 10:52	Anwendung	916.187 KB		
	🚣 Lokaler Datenträger	Graph3	2	9.01.2016 17:20	Eingebettete Post	104 KB		
	Lindows7 (\\vboxsrv	Graph5	2	9.01.2016 17:22	Eingebettete Post	103 KB		
	Lindows7 (\\vboxsvr	Komplex mit Mang	jan NMR.rar 0.	2.02.2016 12:30	RAR-Datei	2.027 KB		
/, ·, /, <b>h</b> , 🛛 🖣, 🖬, 10, 🖣, 📾 📜 🖉, 12, 12, 🕮 🗮 🔛 📜 🔛	I == 1 == 1	Grapho	0	3.02.2016 10:55	Eingebettete Post	119 KB		
Für Hilfe drücken Sie bitte F1.	* · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	formel2	1	7.02.2016 10:52	OpenDocument F	3 KB		
		SINO 1H	1	7.02.2016 11:37	Eingebettete Post	80 KB		
Download the NMR-plugin		🛃 SINO 13C	1	7.02.2016 12:54	Eingebettete Post	82 KB		
		PiHalbe_av400	1	3.02.2016 08:44	Datei	1 KB	<b>T</b>	
from the Origin website. Drag	28 Elemente							
and drop the onmr8.opx file								
into the program								



#### Install Software





9

DE DE 15.06.2017 DE DE

🗐 🛛 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 (wird ausgeführ		ti 😑 (1)) 🖂 13:03 💿 📆	Friederike Pieler
<b>A</b>	Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox		- 8
Maschine Anzeige Geräte Hilfe			
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\fpielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UN	TITLED * - /Folder1/		
: Datei NMR Bearbeiten Ansicht Zeichnen Spalte Worksheet Analyse Statistik Bild Hi	Ifsmittel Format Fenster Hilfe		
	ă⊚ĦŊĦ₽₽₽ŸŎਲ਼₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩		
$\beta = \mathbb{I}_{\mathbf{a}} = \mathbb{I}_{\mathbf{a}}$ Standard: Arial $\bullet = \mathbb{I}_{\mathbf{a}} = \mathbb{I}$	▖▘ <sub>╤</sub> ┊▝╩▝▝╩▝▝▁́ゞ░░ <mark>───ヽ ○ ヽ</mark>   <b>◯ ヽ</b>  ○ ヽ <mark>巡</mark> ヽ⊞₂⊟ <sub>╤</sub> ┊М X  ᡤᢚ		
Producer (1)     Bonce limite	Image: Control of Cont	Choose as filter: XWINMR fid, ser, 1r, 2rr). That are the Bruker data files for raw lata (fid for 1D, ser for 2D) and for processed data (1r and 2rr for 1D and 2D espectively). Click <i>Folder</i> and browse to your data directory.	

′, · , / , 💼 🔀 🐳 10, 🗰 🗊 🖉 / 🖉 , 🖉 , 🗱 🚞 📄 😳 🖾 🖼 📄 😳 🖾 🖬 👘 💷 🗰 🖬 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉

📰 PV... 🗗 😐 🔀

- 🛃

Search another folder. <Ctrl> prints path to script window. <Shift> to refresh file list.

0

4 III +

🧕 🔣 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 [wird ausgeführ		🕇 📮 📢) 🖂 🛛 13:03 🛛 🔞	Friederike Pielenz
2	Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox		_ @ X
Maschine Anzeige Geräte Hilfe			
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\fpielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdat Date: NMR Rearbeiten Anricht Zeichnen Spalte Workchest Analyze Statistik	teien/UNTITLED * - /Folder1/		
	, · [A] ♥ ■ ■ ■ ♥ = ≅   &   ŭ Ki ⊞ ♥ @   + ] : ΣΙ Σ 81   ™   JI M. 4.   ♡ ♡ & ] : × Y Z + 40 mm   G S     • • • •		
$\downarrow$ $\square$		• •	
	Image:		Apps • 4 × Apps hinzufüg
			13:03
			8 🖃 🤍 15.06.2017

💩 🔣 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 [wird ausgeführ]		tt 🤤 (1)) 🖂 13:04 🕘 📆 Friederike Pielen
Naschina Anzaiga Garāta Hilfa	Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox	_ C >
Maschine Anzeige Gerate Hine OriginPro 2016G (Lebre) 64-bit - C:\Users\fpielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UI	ITITI FD * - /Folder1 /	
Datei NMR Bearbeiten Ansicht Zeichnen Spalte Worksheet Analyse Statistik Bild H	ifsmittel Format Fenster Hilfe	
	画 🖬   🔊 🚍 😫   ず 🕫 📾 🐼 🚸   📲 🧴 🤃 🐨 部   🛄 🎹 🐨 👉   ム 🖉 🏂 🗄   × × × z	a⊉o mome
🗄 🌡 🗈 💽 📮 📅 Standard:: Arial 🔹 0 🔹 Β 🖌 ឬ 🗴 🗴 🖛 🗚 Α΄ 🗮 🕅 🖉	, • ; ; <u>◇</u> • <u>⊘</u> • <u>∠</u> • <u>*</u> <del> • 0 • • □ • 0 • <u>∞</u> • <u>∞</u> • <u>∞</u> , <u>∞</u> • <u>*</u> <u>*</u>   <u>*</u>   <del>*</del>   <del>*</del>                                      </del>	🕪 🥲 🕰 🎎 🛍 🔍 📮
	Import NMR - X\toppindaterFÜRorigin\test BBO_Z8248\10\         Z Mes         11 relocted)         Subtrider         Fe Stock         Remove         Move Up         Move Up         Move Up         Move Up         Move Up         Subtrider         Fe Stock         Remove         Move Up         Move Up         Move Down         Subtrider         Fe Stock         Remove         Move Up         Move Down         Subtrider         Fe Stock         Remove         Move Down         Subtrider         Fe Stock         Subtrider         Fe Stock         Fe Stock         Stock	tivate the <i>Preview</i>
		Durchschnitt=0 Summe=0 Anzahl=0 📕 AU : ON 1: [Book1]Sheet1! Bogenma
		DE 13:04

🖇 🖪 Oracle VM VirtualBox Man 🙀 Windows7 [wird ausgeführ Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox	tı 😑 (t)) 🖂 13:04 💽 📆	Friederike Pielen
Maschine Anzeige Geräte Hilfe		
y organization (canegor-bit-conservice) and analyse Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► ■ Ω ■ A, Δ @ P ← Costsuperint Congress Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe □ ► □ ► □ ► □ ► □ ► □ ► □ ► □ ► □ ► □ ►	<u>F</u> algo wasα G S   (◆ ◆ → →) ] ↓ (▷ ) → (□) ☆ ∰ ∰ ℝ ↓ ↓	Apps v 1 X Operation
A00 B() Langhare FO2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	Deactivate the maginary and magnitude part	Apps hinzufug

Für Hilfe drücken Sie bitte F1.

- 🛃

0

-- F AU : ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R)[1:32768] 1:[NMR1]1!1 Bogenmaß

4 III +

🔞 🛛 Oracle VM VirtualBox Man 🎇	🖞 Windows7 [wird ausgeführ 👔 🥮 📢 🕺 13:05 💽 👸	Friederike Pielenz
73 Maschine Anzeige Geräte Hilfe	Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox	×
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\f	ipielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UNTITLED * - /Folder1/	
Datei NMR Bearbeiten Ansicht Grafi	k Daten Analyse Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe	
🗅 🖻 🗎 🔛 🖬 💹 🗟 🖉 🖆 🧉	雲 🖻 🕒 🦔 朦朦朦朦朦朧 🕼 🕼 📧 🕑 🛅 💁 📓 📓 📓 📓 📓 📓 👹 🖾 📾 📾 🍪 📲 🗄 21 🗑 部1 🛄 🎹 🐨 🕼 🛆 🖉 🏂 🐩 X X Z ∓ 🏎 📧 G S   (◆ ◆ ◆ ◆) 👌	
🔏 🗈 🕰 🖕 🎦 Standard:: Arial 🔽 0	• B I U x <sup>2</sup> x <sub>2</sub> x <sup>2</sup> αβ A Δ ≡, III, Δ + ↓ Δ + ψ Δ + ω + ↓ 0 + □ + 0 + □ + 0 + ∞ 2 + □, 国 ↓ M X + + + □ □ ↓ Φ ↓ G & M M ↓	
Pontat Fundorer (1)       Image: Constraint of the second se	Image: State of the state	Apps · · · · · · · · · · · · · · · · · ·

୵⋰୵⋕⋈ଽଽ⋈⋈⋈⋦∁∅⋏⋻⋻⋿⋍⋶⋼⋓⋭⋓⋼⋼⋼⋼⋶⋼⋼⋎⋎⋩⋝А₽⋈⋼⋼⋼⋼

**1** 

0

-- F AU : ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R)[1:32768] 1:[NMR1]1!1 Bogenmaß

DE • • • • 13:05 15:06:2017

< III >

## Changing from Hz to ppm...



IS.06.2017
 IS.06.2017

#### Zoom in...



👂 💿 🤌 🗗 🚍 💷 🔟 🛛 🐼 🚭 Strg Rechts

#### Extract data...



🗵 💿 🥢 🗗 🚍 💷 🔟 🛛 🚫 💽 Strg Rechts

#### Extract data...

🔞 🛛 🛛 Oracle VM VirtualBox Man 🏽 🎇 Window	vs7 [wird ausgeführ		tı 😑 ()) 🖂 13:06 🛛 🙀	Friederike Pielenz
2. · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox		_ @ ×
Maschine Anzeige Geräte Hilfe	europante) Origin Lab 2016) Anno a deviato instituti ED * (Estato 1/			
Maschine Anzeige Geräte Hilfe OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - CAUsers/fpielenz/DC Datei NMR Bearbeiten Ansicht Zeichnen Spa De Protection Space De Prot	NMR1-X\toppindatenFÜRorigin\test BB0_Z8248\10\pdata\1\1r*         NMR1 - X\toppindatenFÜRorigin\test BB0_Z8248\10\pdata\1\1r*         NUR1 - X\toppindatenFÜRORIGIN\test BB0_Z8248\10\pdata\1\1r*         NUR1 - X\toppindatenFÜRORIGIN\test BB0_Z825         N 0 12080          10	Windows / wind ausgeführt - Oracle VM VirtualBox		Apps V A X Apps hinzufug
	S ,	11 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日	umme=0 Anzahi=0 🏴 AU : ON 11	< III > (IMR1w1)Sheet1: Bogenmal
			DE 🔺 📔	13:06
				15.06.2017
				🛥 🄐 😡 🗹 Strg kéchts

### ...and plot!



🗵 💿 🤌 🖓 🚍 💷 🛄 🚫 🕙 Strg Rechts

#### Processing on your own

Image: Second Stress Statistic Sta	Windows7 (wird ausgeführt) - Oracle VM VirtualBox fe 고 학생 표 교 양 승규는 유민 고 한 문화 유민 바람이 제 아내 가 정 중 구	t₁	Friederike Piel
Image: Tree standard: Anal + 0       Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0       Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0       Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0       Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0       Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0       Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0       Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0     Image: Tree standard: Anal + 0       Image: Tree standard: Tree stand	Image:	If you import the fid-file all processing steps which are already done (right after the measurement before the data is saved on the server) will be ignored and can be done with Origin.	Apps V V X Apps hinzufüg
		Durchschnitt=0 Summe=0 Anzahl=0 📕 AU : ON	1: [Book1]Sheet1! Bogen

#### Processing on your own



👂 💿 🤌 🖓 🗖 💷 🔍 🐼 🐼 Strg Rechts

#### Pseudo 2D-Spectra

्रे 🛛 🛛 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 [wird ausgeführ	ti 🤤 (1) 🖂 13:09 💽 📆	Friederike Pieler
	Windows7 (wird ausgeführt) - Oracle VM VirtualBox	- 8
Maschine Anzeige Geräte Hilfe OriginPro 2016G (Lebra) 6/L-bit - CAUsers/Enielent/Documents/OriginLab/2016/Anwenderdateien/UNTIT	11ED *_ /Folder1 /	
Datei NMR Bearbeiten Ansicht Zeichnen Spalte Worksheet Analyse Statistik Bild Hilfs	nittel Format Fenster Hilfe	
🗅 🖻 🗎 🔛 🚔 🚧 🗟 🕒 🖆 🛱 🖬 🔚 🖀 🖀 👒 👘 🛷 💽 🕼 👳	圓 閧   図 〓 罠   &   및 岐 囲 図 @   +  및 : 21 益 助   当 加 冊   7 家 家 및 : × Y Z + ** ***   G S   (+ ◆ → →) 및	
$ \begin{array}{c} \begin{array}{c} \begin{array}{c} \\ \end{array} \end{array} \end{array} \\ \begin{array}{c} \\ \end{array} \end{array} \\ \begin{array}{c} \\ \end{array} \end{array} \\ \begin{array}{c} \\ \end{array} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} \\ \end{array} \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \begin{array}{c} \end{array} \\ \end{array} $	, : <u>◇ - @ - ∠ - * 0 0 22 - 21,</u> E , : M ⋈ I ++ ++ I A , : <b>▷ 秒 / : ▷ 秒</b> / : <b>▷</b> , :	
	<image/> <complex-block><complex-block><complex-block><image/><image/><image/></complex-block></complex-block></complex-block>	Apps V I X Apps hinzufüg Apps hinzu
	DE	13:09
		15.06.2017

🛛 💿 🖉 🗗 🚍 💷 🔟 🛛 🚫 💽 Strg Rechts

Control Model       Control Minimute       Control Minimute         Control Model       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute         Control Model       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute         Control Model       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute         Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute         Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute         Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute       Control Minimute         Control Minimute       Control Minimute <th>🧿 🛛 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 [wird ausgeführ</th> <th></th> <th>ti 🤤 (I) 🖂 13:09 💽 🧱</th> <th>Friederike Pielenz</th>	🧿 🛛 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 [wird ausgeführ		ti 🤤 (I) 🖂 13:09 💽 🧱	Friederike Pielenz
Alter and the constrained of the second of t		Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox		_ @ X
Image: And the set of th	Maschine Anzeige Geräte Hilfe			
Image: A real back back back back back back back back	UriginPro 2010G (Lehre) 64-bit - C:\Users\Tpielenz\Uocuments\UriginLab\2010\Anwenderdateien\UNI1 Datei NMR Bearbeiten Ansicht Zeichnen Snalte Worksheet Analyse Statistik Bild Hilf	illED^-/Folder1/		
	<pre>concertainty into dougending: Maschine Anzeige Geräte Hilfe Origin/ro 2016G (Lehre) 64-bit - CxUsers/tpielenx/Documents/OriginLab/2016/Anwenderdateien/UNTI Date NMR Bearbeiten Ansicht Zeichnen Spalte Worksheet Analyse Statistik Bild Hilfs P B P P P P P P P P P P P P P P P P P P</pre>	TLD - /FolderL/         smittel Format Fenster Hilfe         Import NMR - X:\topspindatenFURorigin\DOSY_Gradientenkalibrierung\13\         Ziffes         1 selected         Sudfolder         Site         Sudfolder         File Name         Size         Sudfolder         File Name         Size         Size         Sudfolder         File Name         Size         Modified         Size         Size	By choosing more than one 1r-file you can create a pseudo 2D data set out of multiple 1d data files. So you can evaluate kinetic data from different experiments all at once.	Apps V 1 X Apps V 1 X Apps hinzufug Apps hinzufug U U U U U U U U U U U U U
		ser 2097152 06/30/2016 09 02:21 pdeta/1\ 2r 2097152 06/30/2016 09 02:22 Folder Files: [XWINNMR [fid:ser:1r:2r  Preview Import Cancel	one 1r-file you can create a pseudo 2D data set out of multiple 1d data files. So you can evaluate kinetic data from different experiments all at once.	

∕, ↔, ∕, ♣, ⊠, 单, ◙, ₩, ◙, ▮, ∅, । ∅, ∅, ‱, ‱, , ▯ № № । ◙ ∺( ≕) ⊨ ↓ ₽ ₽ ₽ ♥ ♥ ▲ च ≙ ₽ ⊠ ∌ @ !!! ---, ↓

🛄 PV... 💣 📼 🕱

**7** 

0

Durchschnitt=0 Summe=0 Anzahl=0 F AU : ON 1: [Book1]Sheet1! Bogenmaß

DE ▲ 🔀 💭 15.06.2017 🔊 ⊙ 🌽 🛱 🚍 💷 🔟 🔇 🔆 Strg Rechts

۰ III +



-- F AU : ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R1)[1:16384] 1:[NMR1]1!1 Bogenmaß

DE ▲ 🕞 🖶 🕪 15.06.2017 🛛 ⓒ 🖉 🗗 🚍 💷 🔟 🚺 🐼 Strg Rechts

4 III +

o 🙍 🔤 Oracle VM VirtualBox Man 🎇	Windows7 (wird ausgeführ	🏚 🧲 📢) 🖂 13:10 🛛 📆 Frieder	ke Pielenz
1	Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox		_ @ ×
Maschine Anzeige Geräte Hilfe			
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\fpi	ielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UNTITLED * - /Folder1/		đX
X Ca Ca - The Standard: Arial - 0			
Product Explore (1)       Book1         Image: Second	Ru Xitoppinderer UReign0007 Gederere kallikerung US geden US.	Apps the spectra second layer.	A X Uzufüg
Show layer 2.		AU: ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R1)[1:16384] 1:[NMR1]1!1	Bogenmaß
		DE 🔺 😼 💭 👘 15.0	6.2017
		🛛 💿 🖉 🖓 🖬 💷 🔘 🐼 🗖 s	trg Rechts

![](_page_21_Figure_2.jpeg)

-- = AU : ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R12)[1:16384] 1:[NMR1]1!1 Bogenmaß

DE 🔺 😼 🛱 🕪 15.06.201

4 III +

🗵 💿 🤌 🗗 🚍 💷 🔟 🛛 🚫 💁 Strg Rechts

![](_page_22_Figure_2.jpeg)

🔋 🙁 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 [wird ausgeführ 💼 Screenshot	tu 😑 📢 🖂 13:11 💿 👔	Friederike Pielenz
	Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox	- 8 ×
Maschine Anzeige Geräte Hilfe		
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\fpielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UNTITLED * - /Fo	older1/	
Datei NMR Bearbeiten Ansicht Grafik Daten Analyse Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe		
	□ ☐ ☐ 2	
δ Hailuna <sub>y</sub> ; 2 <u>h</u> i Standard: Arial y 0 y 16 2 U x <sup>+</sup> x <sub>2</sub> x <sub>1</sub> CCβ A, A ≡ , W , <u>A</u> y <sub>y</sub> ; O y	/ ºº · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
Booki Booki Enhetten Kommentare T T T T T T T T T T T T T	NMAX the desired range with the big blue square.	Appshinzufug

0

**1** 

-- 
AU: ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R12)[1:16384] 1:[NMR1]1!1 Bogenmaß

DE 🔺 🔀 🛱 🌒 13:11 15.06.2017 🛛 💿 🥜 🖓 🚍 📾 🔟 🕼 🚱 Strg Recht

🎯 – 🔤 Oracle VM VirtualBox Ma	n 🏽 🎇 Windows7 [wird ausgeführ 🗰 Sc	reenshot		tu 🤤 (ii) 🖂 13:11 💽 🧱	Friederike Pielenz
3			Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox		_ @ ×
Maschine Anzeige Geräte	Hilfe				
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C	:\Users\fpielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwe	enderdateien\UNTITLED * - /Folder1/			
Datei NMR Bearbeiten Ansich	t Grafik Daten Analyse Minitools Hilfsmit	tel Format Fenster Hilfe			
			≝₩\$\$\$;112;212;21;1111;111;111;11;11;11;11;11;		
Image: standard: Analytic	X B(Y)	adientenkalibrierung\13\pdata\1\2rr*	Attention!       Ja       Nein       Abbrechen       4,06       3,77       3,48	<image/> <image/>	Apps I   Apps I   Apps I   Apps I   Apps I   I

┆╱╷┽╱╷┪╷⊠、┋╷┉╷Ю╷╡,╘╏╎╔╷╔╷╔╷╔╴╩╴═╏┊╚┊╩╵╚╺╡╪╵╪┇╵╸╡が╵╽╧╶┙╧╶╝┢╒╔╵╍╶╶╏

Integration mode.

**7** 

-- 📕 AU : ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R1)[1:16384] 1:[NMR1]1!1 Bogenmaß

DE • 😼 🛱 🌗 15.01 15.06.2017

۰ III +

🎯 🛛 🔣 Or	racle VM VirtualBox Man  📆 W	indows7 [wird ausgeführ 🛅 Screer	nshot			ti 🤤 🗤) 🖂 13:11 🔮 📆	Friederike Pielenz
E.				Windows7 [wird ausgeführt] - Or	acle VM VirtualBox		_ @ ×
Maschine	Anzeige Geräte Hilfe						
OriginPro	o 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\fpiel	enz\Documents\OriginLab\2016\Anwende	rdateien\UNTITLED * - /Folder1/				
	NR Bearbeiten Ansicht Grank	Daten Analyse Minicolis Hinsmitter	romat renster nine		°		
	- : The Standard:: Arial V	$\mathbf{B} \mathbf{I} \mathbf{U} \mathbf{x}^2 \mathbf{x}_2 \mathbf{x}_1^2 \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\beta} \mathbf{A}^* \mathbf{A}^*$	≣, Ⅲ, Δ		▓ • , 韓 - : M X   +‡ +*		
	Pr       Standard: Arial       0         Book1       A(X)       Bit         Langname       Einheiten         Einheiten       F(X)=         2       Image: Arial         3       Image: Arial         4       5         6       7         10       1         11       Image: Arial         1       Ima	• B     A     U     x     x;     x;     α,     α,       • D     D     D     D     D     A     A		Achtung ! Achtung ! integral #1 5 4,06 3,77	MR × S → 2 ↔ 1 ↔ 2 ↔ 1 ↔ 2 ↔ 2 ↔ 1 ↔ 2 ↔ 2 ↔ 2 ↔		Apps • • • • • • • • • • • • • • • • • •
ntegration m	node.					📕 AU: ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R1)	[1:16384] 1:[NMR1]1!1 Bogenmaß
<b>7</b>						DE 🔺	

🕘 🙆

0

DE 🔺 🔀 🛱 🌗 13:11 15.06.2017 🗵 💿 🖉 🗗 📾 💷 🚫 🕙 Strg Rechts

🔣 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 (wird ausgeführ 💷 Screenshot	tų 🚍 (I)) 🖂 13:11 🛛 🚱	Friederike Pielenz
Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox		_ @ ×
Aaschine Anzeige Geräte Hilfe		
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\fpielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UNTITLED * - /Folder1/		
Jatel NMR bearbeiten Ansicht Grank Daten Analyse Minitools Hinsmittel Format Fenster Hinte 飞入员员员人们民人们在全体口口,终于要然下的人们如果是我们的人们的这些问题。		
Image: state of the state o	Image: Controls (6634-62)         ? Image: Controls (6634-62)	Apps X   Apps inzufus Operworwaltung Apps hinzufus Image: Apps inzufus Image: Apps inzu

, ┆╱, ⋅, ╱, ╋, ⊠, ♥, ♥, ♥, ♥, Ø, Ø, ▦, ಱ, █, ; Ც №, ♥ ♥; ♥ ♥ ♥ ♥ ♥ ▲ ♥ ₳ ₽ ₭ ₯ @ ▫╸╸,

Integration mode.

0

DE ▲ 13:11 15.06.2017 ③ ④ ② ♂ ₽ 급 ■ ◎ 1 5% ● Strg Rechts

🏮 🛛 Oracle VM VirtualBox Man 🏽 🎇 🛛	Vindows7 [wird ausgeführ 💷 Screenshot		🏚 🛑 📢) 🖂 13:12 🛛 🔞	Friederike Pielenz
3	Windows7 (wird	rd ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox		_ @ ×
Maschine Anzeige Geräte Hilfe				
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\fpie	elenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UNTITLED * - /Folder1/			
Datei NMR Bearbeiten Ansicht Grafik	Daten Analyse Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe			
	모 🖀 🎬 🖀 👒 🤌 100% 💽 🖨 및 💽 🗮 🔟 🚍 💑 🛄 💐 🖽 🕅 🤹 +	੍ਰਾΣੀ Σੇ ੀ ਪੀ ਪਿੰਜਾ ਦਿ ਨਿ ਨੇ ਦੇ × X Z ਦੇ ਦੇ ਲਾ≋ G S   ♦ ♦ →   ਦ		
👗 🗈 🗒 📮 🧵 🎦 Standard:: Arial 👻 0	- Β Ι U x² x₂ x² αβ Α Α΄ Ε, 🖷, Δ - 📮 🖄 - 🙅 - 🖄 - 🔹 1 🔹 🗖	コ・・・ 巡・三, 国 , M X は が ビー , ゆ 🦻 🖏 🖺 🔍 ,		
	30) 1 - X:\toppindatenFÜRorigin\DOSY_Gradientenkalibrierung\13\pdata\1\2r*	Image: Sected results to wks         Image: Sected results to wks <td< td=""><td>() () () () () () () () () ()</td><td>Apps hinzufüg</td></td<>	() () () () () () () () () ()	Apps hinzufüg

┆╱, -, ╱, <mark>-</mark>, ⊠, <sup>©</sup>, ⋈, ⋈, ⋈, ∅, ∅, ∅, ∅, ╨, ⋈, □, ┆ ⋈ ⋈ │ ⋓ ⊨╡ ⊨╡┆ ӣ Ф ∜ Ѝ А Ҭ А ₽ ⋈ *┢ ∅* । · · · · ;

Integration mode.

**7** 

0

-- 📕 AU: ON Dark Colors & Light Grids 1:[NMR1w]Sheet1!Col(R1)[1:16384] 1:[NMR1]1!1 Bogenmaß

DE 🔺 😼 🛱 🕪 15.06.201

🛛 💿 🖉 🗗 🚍 💷 🔟 🛛 🚫 💽 Strg Rechts

۰ III +

ັ້ງ 🔣 O	racle VM VirtualBox Man	n 🎇 Wii	ndows7 [wir	rd ausgeführ.	🛅 Screensh	iot					-					tı 🥮 📢) 🖂 13:12 🛛 🔞	Friederike Pielenz
									Windows7 [wi	rd ausgeführt]	- Oracle VM Virt	ualBox					_ @ ×
Maschine	e Anzeige Geräte	Hilfe															
OriginP	ro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\	\Users\fpiele	nz\Document	ts\OriginLab\2	2016\Anwenderda	teien\UNTITLED *	' - /Folder1/										- đ <mark>-</mark>
Datei N	IMR Bearbeiten Ansicht	Zeichnen	Spalte We	orksheet Ana	alyse Statistik	Bild Hilfsmittel	Format Fenst	er Hilfe									
🗅 🖻 🖩	à 🗟 🗎 🚧 🔝 🔒 🔒	i 🖻 🔁 🖥	8 🖯 🖓 i	n n n n n n n n n n n n n n n n n n n	100%	- 🖨 🛒 💽	🖩 🔰 🚍 🚟	💑 🛄 🙀	🎟 📝 🤬 🕂	📜 🖸 🖾 🗐		$\mathbb{A} \setminus \mathbb{A}$	XYZ	∄ а <u>р</u> с ноне G	s  + +	· • • • -	
XD	🖁 📮 🤅 🎦 🗗 Standard:: Arial	• 0	• B I ]	$\mathbf{\underline{U}} = \mathbf{x}^2 - \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1^2$	αβΑΑ΄ Ε	, III, <u>A-</u> I	<u>ð</u> - <u>Ø</u> - <u>Ø</u>	• 🔆 📖 🖡	0 -	- O	- 🥢 - 🛄 🛤	]               =	*    6  <b>.</b>	þ 🦻 🖏 🕼 🖡	r R		
																	Apps 🔻 🛱 🗙 💡
. ⊕	Book1																
	A(X	<) B()	0		<u> </u>												Apps hinzufüg
+	Langname																
8 ₽3	Einheiten																
*	F(x)=										NMR	×					
<b>*</b>	1	 					1.102.0				🗟 🖸 🦉 🐔	nisi 😫 🗈 ?					
摇	3		X:\topspinda	atenFUKorigin	DOSY_Gradienter	nkalibrierung\13\j	odata\1\2rr *									)	
	4		//R1w1 - D1 Ir	ntegrals - X:\to	pspindatenFURor	rigin\DOSY_Gradie	entenkalibrierung <sup>\</sup>	\13\pdata\1\2rr '									
1	6		Integ	Record	Area(Y)	Center(Y)	Height(Y)	Width(Y)	Centroid(Y)	Variance(Y)	X1(Y)	X2(Y)	BLX1(Y)	BLX2(Y)	BLY		
	7																
	9	Lan	Integral	Record	Total Area	X value at	Real max	Full width	Center of	2nd moment	Left Integral	Right Integral	Left BL	Right BL	Left		
	10	1	1	1	976022,36231	4,70256	3,67115E7	0,02257	4,69386	1,53579E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		E a a laise a tila	E .
va,	Sheet1 /	2	1	2	925509,07086	4,70113	3,62251E7	0,02164	4,69443	2,10621E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		For kinetic	E. Contraction of the second sec
		4	1	3	878457,51122 827802,15574	4,70113	3,5858E7 3,53103E7	0,02078	4,69291	9,77362E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			10- 11-11-1
\$		5	1	5	761598,51571	4,70113	3,43897E7	0,01881	4,69374	1,34925E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		experiments	
1		7	1	7	696009,45205	4,6997	3,33518E7 3,20599E7	0,01768	4,69405	1,26085E-4 6,69898E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			
, <sup>1</sup>		8	1	8	534283,5402	4,6997	3,06503E7	0,01482	4,69341	7,0393E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		plot the	0°
		10	1	10	458719,52889 387764,1612	4,69826	2,85579E7 2,64906E7	0,01361	4,69332	6,79595E-5 2,57217E-5	5,06241	4,44451 4,44451	17,7443	-5,74287 -5,74287			<u>Do</u>
		11	1	11	322741,72282	4,69826	2,41109E7	0,01129	4,6948	1,37056E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	=	dained	#
:  ∓ĉ  *		12	1	12	213478,45069	4,69826	2,10007E7 1,81812E7	0,01054	4,6927	-1,60037E-5 5,55126E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			<del>o()</del>
		14	1	14	170123,87693	4,69683	1,47927E7	0,00945	4,69352	4,88111E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		Intensities	
		15	1	15	103808,05919	4,69683	1,18922E7 9,77863E6	0,00919	4,69333	4,86873E-5 3,12439E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287 -5,74287	_		äö
		17	1	17	79737,86722	4,69683	7,67275E6	0,00831	4,69335	3,20408E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		versus the	
<b></b>		18	1	18	45593,07507	4,69683	5,89584E6 4,42973E6	0,00823	4,69299	1,34847E-5 1,17251E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287 -5,74287	_		
D.		20	1	20	34133,04291	4,69683	3,25928E6	0,00821	4,69302	-1,72825E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		time.	
		21	1	21	25553,50125	4,69826	2,39095E6 1,74886E6	0,00818	4,69353	-2,73921E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			
	L	23	1	23	14533,87473	4,69683	1,18576E6	0,00952	4,69388	4,93129E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			
- 1		24	1	24	8910,76289	4,69683	952959 696480	0,00901	4,69329	-5,92347E-5 -4,89281E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	_		
- 1		26	1	26	7297,44413	4,69826	543992	0,01062	4,6936	-1,17608E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			11
		27	1	27	5451,60041	4,69826	444230,625 364839,5	0,0112	4,69529	-6,67964E-6 -1,19314E-4	5,06241	4,44451 4,44451	17,7443	-5,74287 -5,74287			
		29	1	29	4954,98963	4,6997	335619,25	0,01172	4,69561	8,54301E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			
		30	1	30	4612,17034	4,6997	298870,375	0,0131	4,69369	-1,56503E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,/428/			
			\ Sheet1 /														

Für Hilfe drücken Sie bitte F1.

**1** 

0

 Plot

![](_page_29_Figure_2.jpeg)

🗵 💿 🤌 🗗 🚍 📟 🛄 🐼 🛃 Strg Rechts

@ 🛛	🛿 Oracle VM VirtualBox Man 🎇 Windows7 [wird ausgeführ]									tų 😑 (1)) 🖂 13:15 🛛 🛛 📆	Friederike Pielen
÷2				Windows7 [wi	rd ausgeführt] -	Oracle VM Virt	ualBox				_ @ >
Masch	nine Anzeige Geräte Hilfe										
🕑 Orig	jinPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\fpielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UNTITLE	D * - /Folder1/									
Datei	NMR Bearbeiten Ansicht Zeichnen Spalte Worksheet Analyse Statistik Bild Hilfsmith	el Format Fenst	er Hilfe								
	) 🗎 🗈 🗎 🖳 🖉 🖆 🛱 🖬 🔚 🖀 🛸 🋸 100% 💽 👶 🛒 🦉		💑 🛄 🕅	🖽 📝 🥋 🕂	<u>,</u> Σ∎ <u>Σ</u> ậ≬↑		H Z Z P	<sub>₹</sub> × Υ Ζ	<sup>I</sup> а≌с ноне G S	+ + + + <sub>≠</sub>	
i 🔏 🗈	$ \overset{\mathbf{a}}{\overset{\mathbf{a}}}{\overset{\mathbf{a}}{\overset{\mathbf{a}}}}}}}}}}$	🍐 🕶 🗠 🖉	• 🌢 👝 •	0,5 • 🗆	- U	• 🦉 • 🖳 🛤		\$ \$*    6  <mark>-</mark>	Þ 🦻 🖏 🖏 🕷	÷	
Pro		、 、									Apps 🔻 🗭 🗶
ekt B	Bookl *										
S S	A(X) B(Y)										Apps hinzufüg
Fer (	Langname Gradient Intensität										
3 🖽	Kommentare							-			
*	F(x)=					NMR	×				
Sot A	2 - 925509,07086	\ndata\1\2rr*					i fisi ≭ 🖹 ?	J			
Inell 活	3 878457,51122		12\							For diffusion	
hilfe	<u>4</u> <u>82/802,155/4</u> <u>5</u> <u>761598,51571</u>	lientenkalibrierung	13\pdata\1\2rr "								L
ו ד	6 696009,45205	Height(Y)	Width(Y)	Centroid(Y)	Variance(Y)	X1(Y)	X2(Y)	BLX1(Y)	BLX2(Y) BLY	avnoriments	
z /	8 - 534283,5402									слреннениз	
	9 - 458719,52889	Real max	Full width at half may	Center of	2nd moment	Left Integral	Right Integral	Left BL	Right BL Lei	somo moro	
ng 🔊	10 38/764,1612 11 322741,72282	3,67115E7	0,02257	4,69386	1,53579E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		E
prot 🗖	12 264278,09108	3,62251E7	0,02164	4,69443	2,10621E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	noromotore oro	
ĕ 🔛	13 213478,45069	3,5858E7 3,53103E7	0,02078	4,69291	9,77362E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	parameters are	
8	15 133808,05919	3,43897E7	0,01881	4,69374	1,34925E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	nococcony Tho	
1	16 - 103891,89124 17 - 79737 86722	3,33518E7	0,01708	4,69405	6,69898E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	necessary. The	
P	18 60548,95479	3,06503E7	0,01482	4,69341	7,0393E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	aradiant and ha	00
aktis	19 - 45593,07507 20 - 34133,04291	2,85579E7	0,01361	4,69332	6,79595E-5 2,57217E-5	5,06241	4,44451 4,44451	17,7443	-5,74287	yraulerit carr be	<u>Da</u>
iche 🤤	21 - 25553,50125	2,41109E7	0,01129	4,6948	1,37056E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	imported from	8
Hinv *	22 - 19172,70765	2,10007E7	0,01054 0,0097	4,6927	-1,60037E-5 5,55126E-5	5,06241	4,44451 4,44451	17,7443	-5,74287		θĐ
Veise	24 - 11217,7826	1,47927E7	0,00945	4,69352	4,88111E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	the file colled	
	25 - 8910,76289	9,77863E6	0,00919	4,69333	4,86873E-5 3,12439E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287 -5,74287		00
5	27 - 6206,87788	3 7,67275E6	0,00831	4,69335	3,20408E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	diffict	
===	28 5451,60041	5,89584E6 4,42973E6	0,00823	4,69299	1,34847E-5 1,17251E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287 -5,74287	almist.	
IÞ.	30 4612,17034	3,25928E6	0,00821	4,69302	-1,72825E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		
	31 - 4396,17003	2,39095E6	0,00818	4,69353	2,07216E-6 -2 73921E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		) <b>-</b> (
	33	1,18576E6	0,00952	4,69388	4,93129E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		
	34	952959	0,00901	4,69329	-5,92347E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	-	1 <u>1</u>
		543992	0,01062	4,6936	-1,17608E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		珀
		444230,625	0,0112	4,69529	-6,67964E-6	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		D.
	29 1 29 4954,98963 4,699	7 335619,25	0,01172	4,69561	8,54301E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		
	<u>30 1 30 4612,17034 4,699</u>	7 298870,375	0,0131	4,69369	-1,56503E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		
	<u> </u>					1	•	III	Þ	at a second s	

Für Hilfe drücken Sie bitte F1.

Durchschnitt=0 Summe=0 Anzahl=0 F AU : ON

🖻 💿 🤌 🗗 🗖 💷 🔟

ð)	🚾 Oracle VM VirtualBox Ma	n 🎇 Windows7 [	wird ausgeführ											🛊 🚍 📢) 🖂 13:15 🛛 👸	Fried	lerike Pielenz
2							Windows7 [wi	rd ausgeführt] ·	Oracle VM Virt	ualBox						_ @ ×
Mase	chine Anzeige Geräte	Hilfe														
) Or	riginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C	:\Users\fpielenz\Docum	ents\OriginLab\2016\Anwenderdat	teien\UNTITLED	) * - /Folder1/											
Date	ei NMR Bearbeiten Ansich	t Zeichnen Spalte	Worksheet Analyse Statistik I	Bild Hilfsmitte	el Format Fenst	er Hilfe										
2	Öffnen	Strg+O	11 11 11 11 100%	- 🕼 🖳 💿		🚴 🔟 🙀	🗄 📝 🄬 +			HVXX	XYZ	I арс ноне G	s  + + +	+		
	Sample-Projekt öffnen	+	II x² x₀ x² αß A⁺ A⁺ ≣	III A -	ð - @/	- 20		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	- <i>111</i> - Fi		• ± ±+    A	b 🕩 🖻 🕅	e R. I.	•		
	Projekt speichern unter			···· 2 mm 👳		270				a <u>e </u> e nor nor i e	<u>.</u>	4 − 3 00. 8	= <u></u>		Apps	▼ ₽ X 👩
	Template speichern unter															bjektv
	Arbeitsmappe als Analysevorlag	e speichern		<u>^</u>											App:	s hinzufüg
	Word-Lesezeichen zu Analysevo	rlage hinzufügen	_												25	gung
	Import	•	Einzelnes ASCII	1							1					
	7. Jahr		Mehrere ASCII						NMR	×						
	Zuletzt verwendete Mappen				\pdata\1\2rr *						J					
			×		lientenkalibrierung)	13\pdata\1\2rr *										
	Beenden		71	-									<u> </u>		E	
- /	7	607010,68	p5 89		Height(Y)	Width(Y)	Centroid(Y)	Variance(Y)	X1(Y)	X2(Y)	BLX1(Y)	BLX2(Y)	BLY			
/	8	- 534283,54	02		Real max	Full width	Center of	2nd moment	Left Integral	Right Integral	Left BL	Right BL	Left			
	10 <b>9</b>	- 387764,16	12			at half max	gravity	about centroid	Imit		limit				E	
-	11	- 322741,722	82		3,67115E7	0,02257	4,69386	1,53579E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			E.T.	
1	12	264278,091	69		3,62251E7 3.5858E7	0.02164	4,69291	2,10621E-4 1.02496E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			E.C.	
	14	- 170123,876	93		3,53103E7	0,01995	4,69357	9,77362E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
۵	15	133808,059	19		3,43897E7	0,01881	4,69374	1,34925E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
	16	- 103891,891	24		3,33518E7	0,01/68	4,69405	1,26085E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
	17	- /9/3/,80/	22		3.06503E7	0.01482	4,69341	7.0393E-5	5.06241	4,44451	17,7443	-5.74287			10	
	19	- 45593.075	07		2,85579E7	0,01361	4,69332	6,79595E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			Do	
	20	34133,042	91		2,64906E7	0,01236	4,693	2,57217E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
	21	25553,501	25		5 2,41109E7	0,01129	4,6948	1,37056E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	=		#	
	22	- 19172,707	65		1 81812E7	0,01054	4,0927	-1,60037E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			θÐ	
	23	- 11217.78	26		1,47927E7	0,00945	4,69352	4,88111E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
	25	- 8910,762	89		3 1,18922E7	0,00919	4,69333	4,86873E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
2	26	7297,444	13		9,77863E6	0,00849	4,69358	3,12439E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			DÖ	
- Q	27	- 6206,877	88		5 89584E6	0,00831	4,09335	3,20408E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			5	
E	28	5451,000	63		4.42973E6	0.00807	4,69344	1,17251E-5	5.06241	4,44451	17,7443	-5.74287			P1	
	₽ 30	- 4612.170	34		3,25928E6	0,00821	4,69302	-1,72825E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			40	
	31	4396,170	03		2,39095E6	0,00818	4,69353	2,07216E-6	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			300	
	32	4254,337	71		3 1,74886E6	0,00832	4,69355	-2,73921E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			121	
	33	-	-		3 1,18576E6	0,00952	4,69388	4,93129E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
	34		-		952959	0,00901	4,69329	-5,92347E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			121	
	35				543002	0,00995	4,09330	-4,09201E-5	5,06241	4,44401	17 7443	-5,74287			IT .	
	A Sheet1 /				444230,625	0,0112	4,69529	-6,67964E-6	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			D•	
		28	1 28 5451,60041	4,69826	364839,5	0,01225	4,69445	-1,19314E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
		29	1 29 4954,98963	4,6997	335619,25	0,01172	4,69561	8,54301E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
		30	1 30 4612,17034	4,6997	298870,375	0,0131	4,69369	-1,56503E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	<b>*</b>			
		A P Sheet1	/			1113-157	a stight			•			►			

// . . . / 💼 🔀 🖢 10, 👊 🔍 10, 🙋 20, 🕮 🛗 🔲 🖟 🖄 🖬 📜 🗄 🖉 🖬 🖉 🖬 🖉 🖬 🖉 🖬 🖉 🖬 👘 👘 👘 👘 👘 👘 👘 🖓

ASCII-Datei/Dateien importi

-----

😼 💿 🤌 🗗 🚞

🎯 🛛 🔤 Ora	cle VM VirtualB	ox Man 臂	🚪 Windows7 [wird	ausgeführ											tı 🖨 (	()) 🖂 13:16 - 🍕	) 📆	F	riederike Pieler
2								Window	rs7 [wird ausgeführt] -	Oracle VM Virtu	alBox								18
Maschine	Anzeige Ge	räte Hilfe																	
OriginPro	2016G (Lehre) 64-	bit - C:\Users	\fpielenz\Documents	\OriginLab\2016\Anwenderdateier	n\UNTITLEI	D * - /Folder1/													
Datei NMI	R Bearbeiten	Ansicht Zeic	hnen Spalte Wor	ksheet Analyse Statistik Bild	Hilfsmitt	el Format Fenst	er Hilfe								_				
	🖻 🗎 🚧 🔝	ک 🖌 🗟	😤 🖬 🖶 🖀 🖀	100% 🔹	و 🛒 👶	] #   7 = 5	🕺 🛄 🕅	H 📝 🥋	<b>↓ + ↓  Σ 1 Σ.</b> 211		1 2 2 2	<sub>₹</sub> × Υ Ζ	<u>∃</u> а⊵с ноне G	s  + + + +	-				
X 🗈 🚨	🗧 🧵 🏦 Standard	l:: Arial 🔻 🛛 0	- B <i>I</i> U	$\mathbf{x}^2 \mathbf{x}_2 \mathbf{x}_1^2 \alpha \beta \mathbf{A} \mathbf{A} \equiv \mathbf{w}$	. <u>A</u> ∗ <sub>₹</sub>	<u>ð</u> - @//	• 🔆 📖 🖣	0	· 0 ·	· <u>///</u> • 🖳 🔤	<u> -</u> EIMI IXI I ≉	\$ \$\$"   B  _	🕪 🦻 📽 🛛	li ®k -					
						\ \												Ap	ops ▼ ₽ × c
£ €.	Book1 *																	1,≈	A Contraction
9		A(X)	B(Y)		<u>^</u>													<u> </u>	Apps hinzufüg
<b>+</b>	Langname	Gradient	Intensität															2	
≥ ⊠_	Kommentare											-							
_	F(x)=		976022 36231								×								
° +2	2		925509,07086			\pdata\1\2rr *					nisf 👫 💷 ?								
	3		878457,51122 827802,15574			lientenkalibrierung	13\pdata\1\2rr *												
T	5		761598,51571											<u> </u>				L	
7.	6		696009,45205 607010,6889			Height(Y)	Width(Y)	Centroi	d(Y) Variance(Y)	X1(Y)	X2(Y)	BLX1(Y)	BLX2(Y)	BLY					
. /.	8		534283,5402			Real max	Full width	Cente	r of 2nd moment	Left Integral	Right Integral	Left BI	Right Bl	Left					
	10		387764,1612				at half max	0	ASCII								<b>—</b> ×-		
	11		322741,72282			3,67115E7	0,02257	6	🔍 🗢 📗 « Lindov	s7 (\\vboxsrv) (E:)	topspindat	enFÜRorigin 🕨	DOSY_Gradientenk	alibrierung 🕨 13 🕨	<b>- - + + +</b>	13 durchsuchen	2	E AG	
	13	-	213478,45069			3,5858E7	0,02078											•	
3 .00:	14		170123,87693			3,53103E7 3,43897E7	0,01995		Organisieren 🔻 Nei	ier Ordner									
1	16		103891,89124			3,33518E7	0,01768		🃗 Import and Expor	Name			Änderungsda	tum Typ	Größe			8	
	17		79737,86722			3,20599E7 3,06503E7	0,01609		👉 Favoriten	鷆 pdata			30.06.2016 09:	31 Dateiordne				ma	
	19		45593,07507			2,85579E7	0,01361		Desktop	acqu			30.06.2016 09:	04 Datei	9 KI	B		<u></u>	
6	20		34133,04291 25553.50125			2,04900E7	0,01236	_	Downloads	acqu2			30.06.2016 09:	02 Datei	1 K	B			
	22		19172,70765			2,10007E7	0,01054		🖳 Zuletzt besucht	acques			30.06.2016 09:	02 Datei 02 Datei	9 KI	B		θĤ	
	23		14533,87473 11217,7826			1,47927E7	0,00945			audita			30.06.2016 09:	02 Textdokum	ent 1 Ki	B			
	25		8910,76289			1,18922E7	0,00919	_	Bibliotheken	difflist			30.06.2016 09:	02 Datei	1 K	В		:0: 115	
	26		6206,87788			3 7,67275E6	0,00849		Dokumente	format.a	sed Tv	p: Datei		02 ASED-Date	4 KI	В			
	28		5451,60041			5,89584E6	0,00823	_	Musik	format.t	emp Gr	öße: 217 Bytes	20.05.2015.00.02	02 TEMP-Date	i 4 Ki	B		12 D	
•	30		4954,98963 4612,17034			3,25928E6	0,00821		Videos	prosol_H	listory Ar	iderungsdatum:	30.06.2016 09:02 p:	02 Datei	6 KI	B			
	31		4396,17003			2,39095E6	0,00818	_		puisepro	igram		30.06.2016 09:	02 Datei 02 Datei	5 KI 1 KI	B		300	
	33		4204,33771			1,18576E6	0,00952		Normal Computer	ser			30.06.2016 09:	02 Datei	2.048 KI	B		) (MEE) (	
	34		-		-	8 952959 8 696480	0,00901		Lokaler Datenträg	uxnmr.p	ar		30.06.2016 09:	02 PAR-Datei	18 KI	В		E	
	A P Sheet1			<		543992	0,01062		Lindows7 (\\vbo:									臣	
l		,	28 1	28 5451.60041	4.6982	444230,625 6 364839.5	0,0112												
			29 1	29 4954,98963	4,699	7 335619,25	0,01172			Schreibge	eschürtzt		Optionendialog						
			30 1	30 4612,17034	4,699	7 298870,375	0,0131	_		offnen			zeigen:						
			A Sheet1 /						Dat	einame:					-	Alle Dateien (*.*)			
																Öffnen	Abbrechen		
1/	<b>.</b>	🛛 🖶 🛌	, IO, 👊 🐻 📜 🙆	9.   2. 9. 🗰 🗎 💷 📜		) =1 =1 <b>=1</b> ];	中中学生											4	4
ür Hilfe drück	en Sie bitte F1.													Durchschnitt=	0 Summe=0 Anzahl=0	AU: ON		1: [Book1]!	Sheet1! Bogenma
																			12:16

Anzeige Ge	eräte Hilfe													
016G (Lehre) 64-	bit - C:\Users\t	fpielenz\Documents\Origin	Lab\2016\Anwenderdatei	en\UNTITLED	* - /Folder1/									
Bearbeiten	Ansicht Zeich	inen Spalte Worksheet	Analyse Statistik Bi	Id Hilfsmitte	el Format Fenst	er Hilfe			1 (22 <b>3</b> ) _J m	<b>b</b> 1 - <b>b</b> 2				
2 🖬 兴 🔛	i 🖉 🛃 🖾 I	≝⊌⊌ ∰ ᢚᢚ				A Q K	= 17 🎲 🕂	≑ :Σ≣ 꽆 밝			<sub>₹</sub> XYZ	<u>н</u> а <u>р</u> о коне G S  ♦ ♦	+ +I <sub>₹</sub>	
The Standard	d:: Arial 🝷 9	• <b>B</b> <i>I</i> <u>U</u> x <sup>2</sup> x	₂ ײ αβ Α Ă ਛ, I	₩, Δ • ,		• 🏩 💶 •	0,5 •	- 0	· <u>///</u> · <u>·</u> / •	∃ <u>,</u> E M IXI I ≎	‡ \$*"   <b> </b> 0  <mark>_</mark> }	P 🖓 🖏 & 🖺 🔍 📮		
				)										5
difflist *	I H.													14 A
Longnomo	A(X1)	C(X2) B(Y2)		Â										XŶ Iœ
Einheiten	Gradient	intensitat												
Kommentare F(x)=									NMR	×	1			
Sparklines									k 🖸 🖉 🐔	) 🎧 😫 🖹 ?				
1	963	976022.3623	1		\pdata\1\2rr *								If your Origin	
2	2454	925509,0708	5		lientenkalibrierung	\13\pdata\1\2rr *							n your Ongin	-620 E
3	3945 5436	8/8457,5112 827802,1557	4		Height(Y)	Width(Y)	Centroid(Y)	Variance(Y)	X1(Y)	X2(Y)	BLX1(Y)	BLX2(Y) BLY	cot un ic	Final Press
5	6927	761598,5157			(i)	man(i)		vanance(1)		×2(1)	BEAT(I)		set up is	
7	9910	607010,688	)		Real max	Full width	Center of	2nd moment	Left Integral	Right Integral	Left BL	Right BL Left	aormon (oc	
8	11401	534283,540	2		3,67115E7	at nair max 0,02257	gravity 4,69386	1,53579E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	yennan (as	<u>E</u>
10	14383	387764,161	2		3,62251E7	0,02164	4,69443	2,10621E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	mina) the date	<u> </u>
11 12	15874 17365	322741,7228	2		3,5858E7	0,02078	4,69291	9,77362E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	mine) the uots	
13	18856	213478,4506	)		3,43897E7	0,01881	4,69374	1,34925E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	of the original	
14	20347 21838	170123,8769	3		3,20599E7	0,01609	4,69289	6,69898E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	or the onymai	
16	23329	103891,8912	L.		3,06503E7 2,85579E7	0,01482	4,69341	7,0393E-5 6 79595E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	file won't he	ÖÖ
17	24821 26312	60548,9547	2	i i i i i i i i i i i i i i i i i i i	2,64906E7	0,01236	4,693	2,57217E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		
19	27803	45593,0750	7		2,41109E7 2,10007E7	0,01129	4,6948	1,37056E-4 -1.60037E-5	5,06241	4,44451	17,7443 17,7443	-5,74287	recognized as	串
20	30785	25553,5012	5		1,81812E7	0,0097	4,69375	5,55126E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	recognized as	Ð
22	32276 33767	19172,7076	5		1,47927E7 1,18922E7	0,00945	4,69352	4,88111E-5 4,86873E-5	5,06241	4,44451 4,44451	17,7443	-5,74287	comma and	:0:
24	35258	11217,782	3		9,77863E6	0,00849	4,69358	3,12439E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	comma and	Ωġ
25 26	36749 38240	8910,7628	9		5,89584E6	0,00823	4,69335	1,34847E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	vou need to	°,
27	39732	6206,8778	3		4,42973E6	0,00807	4,69344	1,17251E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	you need to	暭
28 29	41223 42714	5451,6004 4954,9896	3	6	2,39095E6	0,00818	4,69353	2,07216E-6	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	adjust the	)0(
30	44205	4612,1703	4		1,74886E6 1,18576E6	0,00832	4,69355 4.69388	-2,73921E-5 4,93129E-5	5,06241 5.06241	4,44451 4.44451	17,7443 17,7443	-5,74287 -5,74287		) <b>2</b> (
31 32	45090	4396,1700 4254,3377	1		952959	0,00901	4,69329	-5,92347E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	imported list so	121
33				Ě	696480 543992	0,00995	4,69336	-4,89281E-5 -1,17608E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		啦
<b>(])</b> \difflist	/	001 4			444230,625	0,0112	4,69529	-6,67964E-6	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	the gradient	•
		28 1 29 1	28 5451,60041 29 4954,98963	4,69826	364839,5 335619,25	0,01225	4,69445 4,69561	-1,19314E-4 8,54301E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	the gradient	
		30 1	30 4612,17034	4,6997	298870,375	0,0131	4,69369	-1,56503E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287 -	ranges	
		♦ ► Sheet1 / Shee							]	•				
													between 0 and	
													50 (G/cm).	

🖉 🚞 🔊

Für Hilfe drücken Sie bitte F1

64

Durchschnitt=0 Summe=0 Anzahl=0 📕 AU : ON

1: [diff[ist]diff[ist]2 Bogenm

👂 📀 🤌 🗗 🚞

	🎇 Windows7 [wird ausgef	ühr												🏚 🤤 📢) 🖂 13:25		Friederike Pi
						Windows7 [win	d ausgeführt] - O	racle VM Virt	ualBox							-
hine Anzeige Geräte	Hilfe															
ginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:	Users\fpielenz\Documents\OriginL	.ab\2016\Anwe	enderdateien\UNTITL	ED * - /Folder1/												- F
i NMR Bearbeiten Ansicht	Zeichnen Spalte Worksheet	Analyse Sta	atistik Bild Hilfsmi	ttel Format Fenster	Hilfe											
è 🖻 🖻 🖬 🚧 🕼 🖻	🖻 📽 🖶 🖶 🎥 🖀 🦉	1 🕼 🥠 🛛	100% 🔹 🏟 🖳	o 🖩 🗹 🗖 🚟 🏅	š 🔍 🙀 🗄	8 📝 🥋 🕂	<u>,</u> Σ∎ 🚠 ≌↑	110 lh. i''	₩ 7 <i>%</i> §	<sub>₹</sub> X Y Z	I арс ноне G	S  + +	→ →l <sub>∓</sub>			
🚡 🕰 💂 🤅 🎢 Standard:: Arial	• 9 • <b>B</b> <i>I</i> <u>U</u> x <sup>2</sup> x <sub>2</sub>	$x_1^2 \alpha \beta A$	ĂĒ, ₩, <b>Δ</b> •	i 🕭 + 座 - 🖉 + 🖉	» — •	0,5 🔹 🖂	- 0 -	<u>///</u> =		\$ \$\$*    A  📮 i	þ 🦻 诺 🕼 🖡	r R 📮				
1															1	🚆 Apps 🔻 🗜 🤅
difflist *			Werte setzen - [difflis												2	
	1) C(X2) <b>fi</b>	B(Y2) E0	armel wcol(1) Col(	<ul> <li>A) Funktion Variable</li> </ul>	n Ontionen										7	Apps bipzuf
Langname Grag	ent Int	ensität		, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	optionen										1	R R R
Einheiten		Zei	eile ( i ): Ab <auto></auto>	Bis <auto></auto>											14	
Kommentare	7010 004511(4))401(	· / /		_					~	1						<u></u>
F(X)= Sparklines	70*0,0015*col(A))*2*(	Co	ol(A) =				- <u>1</u> K<	< >> >>	A 1+1 10 9							
			ol(A)/1000						inisf ä→ä ä… ≦	J						
1	963 1,78381E12 9760	22,3623	· ·												li i i i i i i i i i i i i i i i i i i	
3	945 2,99358E13 8784	57,5112				- +b	41								1	E
4	436 5,68402E13 8278	02,1557	⊢or e	xample	e like	e ina	l!		X2(Y)	BLX1(Y)	BLX2(Y)	BLY			ſ	
4 5	927 9,22968E13 7615	98,5157		I											1	
7	910 1,88905E14 607	010,688 Ne	eu Berechnen Manuel	•		📍 ОК	Abbrechen Anwe	nden 🔉	Right Integral	Left BL	Right BL	Left			F	
8 1	401 2,50024E14 534	283,540	Ekript vor Anwanden d	ar Formal					4 44454	limit 17,7442	5 74007				l i i i i i i i i i i i i i i i i i i i	L.,
9 1	892 3,19696E14 4587 383 3,0792E14 387	19,5288	LabTalk-Skri	nt zum Defini	eren der	Formel	aingeben		4,44451	17,7443	-5,74287				l i	1.
11 1	874 4,84696E14 3227	41,7228	der Berechn	ung vor Forme	l ausfüh	iren	Singesen		4,44451	17,7443	-5,74287					D•
12 1	365 5,80024E14 2642	78,0910		2					4,44451	17,7443	-5,74287				I. I	
13 1	856 6,83905E14 2134 347 7.96338E14 1701	23 8769							4,44451	17,7443	-5,74287				7	
15 2	838 9,17323E14 1338	08,05919		3,20599E7	0,01609	4,69289	6,69898E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287					
16 2	329 1,04686E15 1038	91,89124		2,06503E7	0,01482	4,69341	7,0393E-5 6,79595E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287					10
17 2	312 1.33169E15 605	48.95479		2,64906E7	0,01236	4,693	2,57217E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				<u> </u>	<u>ם.</u>
19 2	803 1,48689E15 455	93,07507		\$ 2,41109E7	0,01129	4,6948	1,37056E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	=			1	8
20 2	294 1,65065E15 341	33,04291		1.81812E7	0.0097	4,6927	5.55126E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				£	88
22 3	276 2,00381E15 191	72,70765		3 1,47927E7	0,00945	4,69352	4,88111E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				a a a a a a a a a a a a a a a a a a a	
23 3	767 2,19322E15 145	33,87473		1,18922E7	0,00919	4,69333	4,86873E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				iii F	.0; 118
24 3	258 2,39118E15 11 749 2,59769E15 89	217,7826		3 7,67275E6	0,00831	4,69335	3,20408E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287					
26 3	240 2,81276E15 72	97,44413		3 5,89584E6	0,00823	4,69299	1,34847E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				۲. T	<u>-</u>
27 3	732 3,03653E15 62	06,87788		8 4,42973E6	0,00807	4,69344	1,1/251E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				7	23
28 4	714 3.50943E15 49	54,98963		2,39095E6	0,00818	4,69353	2,07216E-6	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				м	
30 4	205 3,75871E15 46	12,17034		3 1,74886E6	0,00832	4,69355	-2,73921E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				м	
31 4	696 4,01655E15 43	96,17003		952959	0,00952	4,69388	4,93129E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				7	
33	4,20293E13 42		-	8 696480	0,00995	4,69336	-4,89281E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287					
✓ → \difflist /		•		543992	0,01062	4,6936	-1,17608E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				4	
	28 1	28 5451.	,60041 4,698	26 364839,5	0,0112	4,69529	-1,19314E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287					
	29 1	29 4954,	,98963 4,69	97 335619,25	0,01172	4,69561	8,54301E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287					
		30 4612,	4,69	97 298870,375	0,0131	4,69369	-1,56503E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	*				
	↓ Nheet1 /								•			In the second secon				

Durchschnitt=24075 Summe=770400 Anzahl=32 F AU : ON

III
 Idifflist1difflist111:321
 Boge

Für Hilfe drücken Sie bitte F1.

Oracle VM Virtual	Box Ma 📲	💈 Windows7 [wird ausį	geführ										tt 😑 🕬 🛛	<b>⋌</b> 13:29 🥂 🎇	Fried
						Windows7 [wi	rd ausgeführt]	- Oracle VM Virt	ualBox						
nine Anzeige Ge	eräte Hilfe														
inPro 2016G (Lehre) 64	-bit - C:\Users\f	pielenz\Documents\Orig	inLab\2016\Anwenderdateien\UNTITLED *	- /Folder1/											
NMR Bearbeiten	Ansicht Zeich	inen Spalte Workshee	et Analyse Statistik Bild Hilfsmittel	Format Fenster Hilf	e		_						_		
) 🗎 🔛 🖬 🚧 🔝	🗟 🛃  🖉	2 🖬 🖶 🕍 🎬 📽	` 🕼 🤧 🛛 100% 💽 🌐 🛒 🧕	H 🛛 🗖 🚟 👗 .	Q 14 [	🖽 📝 🥋 🕂	÷Σ∎ <u>Σ</u> ∰	all his	₩ 7%	🚦 🗙 Y Z	I арс ноне G	S  + +	+ + +  <sub>=</sub>		
🛍 📄 🏦 Standar	d:: Arial 👻 9	• <b>B</b> <i>I</i> <u>U</u> x <sup>2</sup>	x <sub>2</sub> x <sub>1</sub> <sup>2</sup> αβ A A Ε, Η, A -	🕭 • 座 • 🖉 • 🐁 -		0,5 •	- O	- /// - 🖂 🗄		\$ \$ <del>*</del>    6  <b>]</b> }	þ 🦻 🛱 🕼 (	r R			
															Apps
I ALLER AND A															
diffist	40(4)	00/00 <b>A</b>													
Langnama	A(X1) Cradient	C(X2)	Zeichnen												App 10
Einheiten	Gradieni		👗 Ausschneiden	Strg+X											125
Kommentare			Kopieren	I	•					1					
F(x)=	col(A)/10 7	0*0,0015*col(A))^2*(	Spalte kopieren in						×						
Sparkines			遇 Einfügen	Strg+V					l filsf :∓: I⊞ Y						
1	0,0963	17838,11572 97	76 Zallan sinfüran		-										
2	0,2454	115836,52468 92	22 Zellen einingen		\1\2rr ^			1							E E
4	0,5436	568401,60912 82	27 Inhalt ontformen	Eatf	m	Centroid(Y)	Variance(Y)	X1(Y)	X2(Y)	BLX1(Y)	BLX2(Y)	BLY			
5	0,6927	922968,28458 76	Links entfernen	Enu	· /						22,2(1)				
7	0,8418	1,36306E6 69 1,88905E6 6	0 Links entremen		dth	Center of	2nd moment	Left Integral	Right Integral	Left BL	Right BL	Left			
8	1,1401	2,50024E6	53 Setzen Als	I	nax	gravity	about centroid	Imit		limit	5 7 4007				
9	1,2892	3,19696E6 45	Als Kategorisch setzen		2257	4,69386	1,53579E-4 2,10621E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				144
11	1,4363	4,84696E6 32	2 123 Spaltenwerte errechnen	Strg+Q	2078	4,69291	1,02496E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				- De
12	1,7365	5,80024E6 26	4 Werte für mehrere Spalten festleger	Strg+Umschalt+Q	1995	4,69357	9,77362E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
13	1,8856	6,83905E6 21 7 96338E6 17			1768	4,69405	1,34925E-4 1,26085E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		norm	ozile	
15	2,1838	9,17323E6 13	Spalte füllen mit	ļ	1609	4,69289	6,69898E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		ווטווו	alize	
16	2,3329	1,04686E7 10	Abtastintervall festlegen		1482	4,69341	7,0393E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		the inte	a noitre	00
17	2,4821	1,18505E7	X-Spalte zeigen		1236	4,693	2,57217E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			ensity	<u>Lin</u>
19	2,7803	1,48689E7 4	15 Filter	I	1129	4,6948	1,37056E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				8
20	2,9294	1,65065E7	Maskieren	I	0097	4,6927	-1,60037E-5 5.55126E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		columr	<b>)</b>	e⊟
21	3,0785	2.00381E7 1	Zellen nach Bedingung maskieren		0945	4,69352	4,88111E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
23	3,3767	2,19322E7 1	4 Spalte sortieren		0919	4,69333	4,86873E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				:Ci
24	3,5258	2,39118E7	Worksheet sortieren		0849	4,69358	3,12439E-5 3,20408E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				<u></u>
26	3,824	2,81276E7	7 Spalten pach Beschriftung sortierer	<u>"</u> п	0823	4,69299	1,34847E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				°D.
27	3,9732	3,03653E7	6 Umgekehrte Reihenfolge		0807	4,69344	1,17251E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				8
28	4,1223	3,2687E7 3,50943E7	4		0818	4,69353	2,07216E-6	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				)=(
30	4,4205	3,75871E7	4 Normieren		0832	4,69355	-2,73921E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				)@(
31	4,5696	4,01655E7	4 Häufigkeit zählen		0952	4,69329	4,93129E-5 -5.92347E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				125
32	4,1107	4,2029307	Spaltenstatistik		0995	4,69336	-4,89281E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				124
<b>▲</b> ► \ difflist			Spalten verbergen/zeigen	I	1062	4,6936	-1,17608E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				*
		28 1	Spalten verschieben	I	1225	4,69529	-0,07904E-0 -1,19314E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
		29 1	Spalten vertauschen		1172	4,69561	8,54301E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287				
	_	30 1	Spaltenbreite		0131	4,69369	-1,56503E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	*			
	L	♦ Sheet1 /	Slide-Show der abhängigen Diagra	nme					•			► Life			
			Snarklines hinzufügen oder aktuali	ieren											
				neretha											
			Zellen formatieren												
			Einstellungen												
1.1.1.1.	🖾, 🖶, 🛶, I	10, 👊 🚳 📑 🔊 🛯	🤪 😥 🛗 🛗 🔲 📜 🛄 📓 🚳	nt nt <b>nt ]</b> i de al	1+ +1	AVAP	窗声面 10	-							
					~										

**?** 

DE 🔺 😼 🛱 🕪 13 15.06

🗵 💿 🌽 🖃 🚍 💷 🔟 🛛 🐼 🕙 Strg Rec

![](_page_36_Figure_2.jpeg)

You find the parameter in the aqu-file ( $\delta$ , $\Delta$ ), difflist-file (G) and literature (nucleus dependent y).

/, ・・, /, 🏨 🗵, 単, 10, 4, 15 🖟 🖉, 🕼, 🕮, 🏙, 🔛 📜 🔛 🔛 💷 💷 💷 💷 💷 💷 💭 🖉 🛆 🖉 🛆 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉

Für Hilfe drücken Sie bitte F1

< III ►

1: [difflist]difflist!2[1:32] Bogenmaß

▲
 ▲
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●
 ●

		0					Window	ws7 (wird ausgeführt) - Or	acle VM VirtualBox				-+ -		
Anzeige Geräte	Hilfe						window	ws/[with ausgefullit] - Of							
2016G (Lehre) 64-bit - 0	:\Users\fpielenz\Document	OriginLab\2016\A	Anwenderdatei	en\UNTITLE	D * - /Folder1/										
Bearbeiten Ansich	t Zeichnen Spalte Wo	rksheet Analyse	Statistik Bi	ld Hilfsmit	tel Format Fenst	er Hilfe									
Pa 🖬 💫 🖪 🗛 🛛	) 🚅 🛱 🖬 🖪 🔛 😂 🛱	: :::: 🗽 🌆	100% -	i 🚓 👿 🛛		8 0 16	III 🔽 🖉	••   ↑ 8 Σ 8 7   <b>*</b>	" ₩₩₩₩ <u>₩</u> %%	XY7	арононе G S	I+ + + + I			
i The Standardy Aria		⇒ •⊞≣ ⊞≣ •⊞≣ =γ [ x <sup>2</sup> x, x <sup>2</sup> αβ				- 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 2 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240 - 240	- 05								
÷ др эканоаго Ана		a a <sub>2</sub> a <sub>1</sub> uop		• x <b>44</b> 1 ∓	· · · · · · ·		0,5				🍨 🥐 🖬 🥵 🎟 🤞	Ŧ			
Num					)									2	1
difflist *		5 Dava												1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	ł
Al	X1) C(X2) U	B(Y2)	D(Y2)	Â										×)	8
Einheiten		interisitat	NUTHAIIZE											12	-
Kommentare			Divided by												1
F(x)= Col( Sparklines	A)/10 70*0,0015*col(A))^2	*(													1
					\pdata\1\2rr *										1
1 0	0963 17838,1157 2454 115836 5246	976022,36231 925509.07086	0.94825		lientenkalibrierung	13\pdata\1\2rr *	*					23			í.
3 (	,3945 299357,6891	878457,51122	0,90004			4						<u> </u>		L	
4 0	5436 568401,6091	827802,15574	0,84814		Height(Y)	Width(Y)	Centro	vid(Y) Variance(Y)	X1(Y) X2(Y)	BLX1(Y)	BLX2(Y) E	LY		 	1
6 0	,8418 1,36306E	696009,45205	0,71311		Beelmax	Full width								L.	1
7	0,991 1,88905E	607010,6889	0,62192		Real IIIdx	at half max		🔍 🗢 📔 « topspindat	enFÜRorigin 🕨 DOSY Gradie	ntenkalibrierung	13 •	<ul> <li>✓ </li> <li></li></ul>	durchsuchen		
9 1	,2892 3,19696E	458719,52889	0,54741		3,67115E7	0,02257								L	
10 1	,4383 3,9792E	387764,1612	0,39729		3,62251E7	0,02164	-	Organisieren 🔻 Neuer (	Ordner				== -		
11 1	,5874 4,84696E .7365 5.80024E	322/41,/2282	0,33067		3,53103E7	0,01995		🛠 Favoriten	Name		Änderungsdatum	Тур	Größe		
13 1	,8856 6,83905E	213478,45069	0,21872		3,43897E7	0,01881		Desktop	\mu pdata		30.06.2016 09:31	Dateiordner			à
14 2	1929 9 17222E	170123,87693	0,1743		3,33518E7 3,20599E7	0,01768		Downloads	acqu		30.06.2016 09:04	Datei	9 KB	ä	1
16 2	,3329 1,04686E	103891,89124	0,10644		3,06503E7	0,01482		🗐 Zuletzt besucht	acqu2		30.06.2016 09:02	Datei	1 KB	ŪČ	I.
17 2	4821 1,18505E	79737,86722	0,0817		2,85579E7	0,01361			acqu2s Größe: 8,38 KB		30.06.2016 09:02	Datei	1 KB		Ī
10 2	,7803 1,48689E	45593,07507	0,06204		2,41109E7	0,01129		🥽 Bibliotheken	acqus Änderungsdatu	ım: 30.06.2016 09:04	30.06.2016 09:02	Datei	9 KB	e.	
20 2	,9294 <b>1,65065</b> E	34133,04291	0,03497		2,10007E7	0,01054		E Bilder	📄 audita		30.06.2016 09:02	Textdokument	1 KB	Ð	4
21 3	2276 2.00381E	19172.70765	0,02618		1,47927E7	0,00945		Dokumente	difflist		30.06.2016 09:02	Datei	1 KB		
23 3	,3767 2,19322E	14533,87473	0,01489		1,18922E7	0,00919		Musik     Midaaa	format.ased		30.06.2016 09:02	ASED-Datei	4 KB	:0 117	
24 3	5258 2,39118E 6749 2,59769E	11217,7826	0,01149		3 7,67275E6	0,00849		Videos	format.temp		30.06.2016 09:02	TEMP-Datei	4 KB		1
26	3,824 2,81276E	7297,44413	0,00748		5,89584E6	0,00823		Computer			30.06.2016.09:02	Datei	5 KB	5	i.
27 3	,9732 3,03653E	6206,87788	0,00636		3 4,42973E6 3 3,25928E6	0,00807		Lokaler Datenträger	scon2		30.06.2016 09:02	Datei	1 KB	42	a
29 4	,2714 3,50943E	4954,98963	0,00508		2,39095E6	0,00818		🖵 Lindows7 (\\vboxsrv	ser		30.06.2016 09:02	Datei	2.048 KB	)0	é.
30 4	,4205 3,75871E	4612,17034	0,00473		1,74886E6	0,00832		🖵 Lindows7 (\\vboxsvr	uxnmr.par		30.06.2016 09:02	PAR-Datei	18 KB	) <b>2</b>	k.
31 4	,5090 4,01055E ,7187 4,28293E	4396,17003	0,0045		952959	0,00901								tr.	
33				*	696480	0,00995		📬 Netzwerk						I.	
difflist / FitE	xp1 / FitExpCurve1 / FitEx	p2 🖌 FitExpCu		▶	444230,625	0,01002									
	28 1	28 5	451,60041	4,6982	6 364839,5	0,01225									
	30 1	30 4	954,98963 612,17034	4,699	7 298870,375	0,01172									
	Sheet1	24	206 17002	4 7044	2 200205 25	0.01057									
								14 Elemente							
The	hit unc c	n con	thin	പ		cition	nn	oromoto	Nro						

Für Hilfe drücken Sie bitte F1 C

-----

Durchschnitt=1,47947E7 Summe=4,73432E8 Anzahl=32 F AU : ON

o) 📝	acqu (~/Schreibtisc	ch/Lindo 🔣 [Or	acle VM VirtualE	Box Ma 🏽 🎇 🛚	Vindows7 [wird ausgefü	ır				🛊 🖨 🕪) 🖂 13:4	2	Friederike Pielenz
2							W	ndows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox				- 8 ×
Maschi	ne Anzeige Ge	eräte Hilfe										
Origin Datei	nPro 2016G (Lehre) 64 NMR Bearbeiten	-bit - C:\Users\fpieler	nz\Documents\Or Spalte Worksh	riginLab\2016\Anv	venderdateien\UNTITLED * tatistik Bild Hilfsmittel	- /Folder1/	fe					
				🖹 🥁 🕼 🍂 🛛	100% 🔹 🌧 🐺 💽		🔟 🍇 🖽	7 🖌 🔨 5 🖉 1 👔 1 👔 1 👔 1 🖓 1 🖉 1	Z I ADC NOME G S I + + > ]			
2 1	The Standard	d:: Arial 🝷 9	• B I U ×	<sup>2</sup> x <sub>2</sub> x <sup>2</sup> <sub>1</sub> αβ Α	▲ ■, ₩, <b>▲</b> • .	≫ - <u>∞</u> - <u>√</u> - ⊹ -						
												Apps 🔻 📮 🗙 🧕
÷.	difflist *				Datei Bearbeiter	Ansicht Suchen	Werkzeus	e Dokumente Hilfe	rierung/13) - geait			ektys
Sin G		A(X1)	C(X2) 🛍	B(Y2)	D(	- V Speichern		Rückgängig 🧼 🔛 📮 😭 🔍 🗛		_		Apps hinzufüg
	Einheiten	Gradient		Intensitat r			_			_		gur and a second
*	Kommentare F(x)=	col(A)/10 70*0,0	015*col(A))^2*(	C		au startdosva				_		
	Sparklines				18 ##\$AUTOPO	S= <>						
	1	0,0963	17838,11572	976022,36231	19 ##\$BF1= 4 09 20 ##\$BF2= 4				Parameter D20	$=\Delta$		
T	3	0,3945	299357,68915	878457,51122	0,9 21 ##\$BF3= 4			/ /	and [D20]-a			L
~	5	0,6927	922968,28458	761598,51571	0,8 22 ##\$BF4= 4 0,7 23 ##\$BF5= 4			/ č	and $[D20]=S$ .			
	6	0,8418 0,991	1,36306E6 1,88905E6	696009,45205 607010,6889	0,7 24 ##\$BF6= 4 0,6 25 ##\$BF7= 4				Caution: when		×=	
	8	1,1401 1,2892	2,50024E6 3,19696E6	534283,5402 458719,52889	0,5 0,4 26 ##\$BF8= 4	00.13						E.L.
	10	1,4383 1,5874	3,9792E6 4.84696E6	387764,1612 322741.72282	0,3 27 ##\$BYTORD 0,3 28 ##\$CFDGTY	A= 0 P= 0			counting up to		<u> </u>	E Rein Element
≧ <u>₩</u> . 3 @:	12	1,7365	5,80024E6	264278,09108	0,2 29 ##\$CFRGTY	P= 5 R= <none></none>		/	D20 the first			
	14	2,0347	7,96338E6	170123,87693	0, 31 ##\$CNST=	(063)						
• ••••	15	2,1838	1,04686E7	103891,89124	$\begin{array}{c} 0, \\ 0,1 \\ 0,1 \\ 33 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\$			$\begin{array}{c}1&1&1&1&2&98&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\1&1&1&1&1&1&1&1&1&$	nosition in the li	ine 📗		00
	17	2,4821 2,6312	1,18505E7 1,33169E7	79737,86722 60548,95479	0, 34 ##\$CPDPRG	= <>		/				
H	19	2,7803 2,9294	1,48689E7 1,65065E7	45593,07507 34133,04291	0,0 36 ##\$CPDPRG	2= <mlev></mlev>			IS DO.			8
	21	3,0785	1,82295E7 2.00381E7	25553,50125 19172,70765	0,0 37 ##\$CPDPRG	3= <mlev> 4= <mlev></mlev></mlev>		/				
	23	3,3767	2,19322E7	14533,87473	0,0 39 ##\$CPDPRG	5= <mlev></mlev>		/				
	25	3,6749	2,59769E7	8910,76289	0,0 40 ##\$CPDPRG 0,0 41 ##\$CPDPRG	5= <mlev> 7= <mlev></mlev></mlev>						
E	26	3,824 3,9732	2,81276E7 3,03653E7	7297,44413 6206,87788	0,0 42 ##\$CPDPRG	8= <mlev></mlev>						
D.	28	4,1223 4,2714	3,2687E7 3,50943E7	5451,60041 4954,98963	0,0 44 ##\$CPDPRG	T= <garp></garp>						300
	30	4,4205 4,5696	3,75871E7 4.01655E7	4612,17034 4396,17003	0,0 45 ##\$D= (0. 0, 46 0 3 0 0 0	.63) 00000.060		0 0 0.0001 0 0 0 0.07 0.005 0 0 0 0 0 0				
	32	4,7187	4,28293E7	4254,33771								5
	↓ difflist	FitExp1 / FitExpC	urve1 / FitExp2 /	FitExpCu	48 ##\$DATE= 49 ##\$DBL= (	07)						
		28	1	28 545 29 495	1,600 1,98963 4,6997	335619.25 0	0 01172	Ma	atlab 🔻 Tabulatorbreite: 8 👻 Z. 1, Sp. 1	I EINF ⊿		
		30	1	30 4612	2,17034 4,6997	298870,375	0,0131					
		<b>▲</b> ►	Sheet1 /					acqu Änderungsdatum: 30.06.2016 09:04 Erstellda	atum: 30.06.2016 09:31			
								Datei Größe: 8,38 KB				
	1.1.1.1	🕅. 🖶 🛶 lin	•	🚑 , 🖗 📫 🔒	<b>≜. N Ì ∷ (1</b> Ki ki ki ki	t =t   =t ] : a.	. (+ +) <i>∟</i>					4
ür Hilfe d	drücken Sie bitte F1.					• • • •			Durchschnitt=1,47947E7 Summe=4,73432E8 Anzal	hI=32 📕 AU : ON	1: [d	difflist]difflist!2[1:32] Bogenmaß
											DE 🔺	Image: Non-State     13:42       Image: Non-State     15:06:2017

📝 acqu (~/Schreibtisch/Lindo 📓 [Oracle VM VirtualBox Ma 🙀 Windows7 [wird ausgeführ	📬 🖨 📢 🖂 13:43 🗍 🛄 Friederike Piele
Windows7 [wird ausgeführt] - Oracle VM VirtualBox	- 7
aschine Anzeige Geräte Hilfe	
OriginPro 2016G (Lehre) 64-bit - C:\Users\tpielenz\Documents\OriginLab\2016\Anwenderdateien\UN111LED * - /Folder1/ Datei NMR Bearbeiten Ansicht Zeichnen Spalte Worksheet Analyse Statistik Bild Hilfsmittel Format Fenster Hilfe	
〕	
i 🗈 🖎 🚽 📴 Standard: Arial 🔹 9 🔹 Β Ι U 🖍 🗴 κ΄ αβ Α΄ Δ΄ Ε΄, Η΄, Δ + 🐙 δ + 🖉 + Δ + 🐙 ο. 5 - κ 🔽 - Ν - Ν - 🦉 + Η, 🗄 🖓 Μ 🗶 Ι + ++ Ι Θ 🐺 🖓 🖓 🖏 🏔 😓 🛫	
acqu (~/Schreibtisch/Lindows7/topspindatenFÜRorigin/DOSY_Gradientenkalibrierung/13) - gedit	_ 🗆 🗙 🖉 Apps 💌 🖡 🗙
Image: Comparison of the second se	
A(X1) C(X2) W B(Y2 B(Y2 B) Control Con	Apps hinzufüg
Einheiten acqu X Kommentare 2002 ##CO2_ 2000 CF	
F(x)= col(A)10 Sparklines	
$\frac{1}{4} = \frac{1}{5} = \frac{1}$	
$\frac{6}{7} = \frac{6}{7} = \frac{6}{1.88005} = \frac{6}{230} \# \text{SoverFLW} = 0$	
DUISEPIOUIAIIIIS	
$\mathbf{E}_{1,1} = \frac{3}{10} + \frac{3}{100} + \frac{3}$	
$\begin{bmatrix} 1 & 1,3074 & 4,3405020 & 522741, \\ 12 & 1,7365 & 5,80024E6 & 624278, (235 \#$PACOIL= (015) \\ 12 & 1,7365 & 5,80024E6 & 6,80000 & 0,00000 & 0,00000 \\ 12 & 1,7365 & 5,80024E6 & 6,80000 & 0,00000 & 0,00000 \\ 12 & 1,7365 & 5,80024E6 & 6,80000 & 0,00000 & 0,00000 \\ 12 & 1,7365 & 5,80024E6 & 5,80024E6 & 5,80024E6 & 5,800000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,000000 & 0,000000 & 0,000000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000 & 0,00000000$	
IS LICE MOSL 14 2,0347 7,9633866 7,796386 7,7966 7,7	8
$\frac{13}{10} = \frac{13}{2,133} = \frac{13}{1,0468667} = \frac{133806,238 \# \$ \text{PARMODE} = 1}{1038016,239 \# \$ \text{PARMODE} = 1} $ COMMON ONE) AN	d
$ \begin{bmatrix} 17 & 2,4621 \\ 18 & 2,6312 \\ 18 & 2,6312 \\ 1,33169E7 \\ 1,33169$	
$[P_{30}] = \frac{19}{20} = \frac{2,7803}{2,9294} = \frac{1,480398E7}{1,65065E7} = \frac{455933}{24133} (242,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,$	
182293E7 25033 C43 ##3PHL131 C 25033 C 25033 C 2503 C 250 C 2503 C 250 C 2500 C 2	
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	ü <u>n</u>
$\frac{25}{26} \frac{3,0749}{3,824} \frac{2,59769E7}{2,81276E7} \frac{89707}{7297} \frac{2,47}{248} \frac{120}{120} \frac{3,9}{120} \frac{120}{120} \frac{120}{120} \frac{120}{120} \frac{120}{120} \frac{59,44}{10,64} \frac{10,64}{30,64} \frac{30,64}{120} \frac{120}{120} \frac{120}{120}$	as 🖕
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	
31 4,5696 4,0165557 4396,1252 ##\$PLSTRT= -6 32 4,7187 4,2829357 4254,253 ##\$POWMOD= 0 DUISeprogram-file	e
33 254 ##\$PQPHASE= 0	
Matiab * Tabulatorbreite: 8 * 2, 1, sp. 1	
29         1         29         4564,55653         4,0997         3335019,25         0,01172         4,09501         6,04301E-5         5,00241         4,44451         17,7443         -5,74287           30         1         30         4612,17034         4,6997         298870,375         0,0131         4,69369         -1,5603E-4         5,06241         4,44451         17,7443         -5,74287         •           30         1         30         4,6927         298870,375         0,0131         4,69369         -1,5603E-4         5,06241         4,44451         17,7443         -5,74287         •           30         4         298870,375         0,0131         4,69369         -1,5603E-4         5,06241         4,44451         17,7443         -5,74287         •	

i /, . , /, 📶 🔀 🗉 (0, ), 🛯 ]; 🖉 / 🖉 / 🚱 🕮 🛗 🔲 ]; 😫 🖄 🐨 🖓 🖄 🖬 🖓 🗰 🖬 👘 🖉 🖬 👘 👘 👘 👘 👘 👘

Für Hilfe drücken Sie bitte F1.

C

< III >>

DE 🔺 😼 🛄

🗵 💿 🤌 🗗 🚍 📟 🛄 🚫 💽 Strg Rech

```
1
                         pulseprogram (~/Schreibtisch/Lindows7/topspindatenFÜRorigin/DOSY_Gradientenkalibrierung/13) - gedit
Datei Bearbeiten Ansicht Suchen Werkzeuge Dokumente Hilfe
 🗼 🕋 Öffnen 👻 🕗 Speichern  🍓 🦕 Rückgängig 🍌 🍒 🖣 📔 🔍 😪
pulseprogram 🗙
 1 # 1 "/opt/topspin2.1pl6//exp/stan/nmr/lists/pp/ledbpgp2s"
 2 ;ledbpqp2s
 3 ;avance-version (07/04/03)
 4 ;2D sequence for diffusion measurement using stimulated
 5 :
       echo and LED
 6 ;using bipolar gradient pulses for diffusion
                                                                           ...and read the end of
 7 ;using 2 spoil gradients
                                                                           the first line.
 8 :
 9 ;D. Wu, A. Chen & C.S. Johnson Jr.,
                                                                           For a better
10; J. Magn. Reson. A 115, 260-264 (1995).
                                                                           understandig of the
11 :
12 ;$CLASS=HighRes
                                                                           parameter read also
13;$DIM=2D
14 :STYPE=
                                                                           the very end of the
15 ;$SUBTYPE=
                                                                           file...
16 ;$COMMENT=
19 # 1 "/opt/topspin2.1pl6/exp/stan/nmr/lists/pp/Avance.incl" 1
20 ;Avance2.incl
21 ;
       for 1
22 :
23 ;avance-version (09/07/02)
24 :
25 ;$CLASS=HighRes Incl
26 ;$COMMENT=
```

![](_page_41_Figure_2.jpeg)

								Windows7 [wi	rd ausgeführt] - O	racle VM Virt	ualBox					
Anzeige Ge	räte Hilfe	fnielenz\Documents\	Origin ab 2016	Apwondordatov		- /Folder1 /										
Bearbeiten	Ansicht Zei	hnen Spalte Worl	sheet Analyse	Statistik Bil	d Hilfsmittel	Format Fenst	er Hilfe									
🖻 🗎 🚧 🔝	a 🛛 🖻	n 🔁 🔒 🖓	📸 🌇 🧕	<u>}</u> 100% -	i 🗐 🖳 🖨		🔏 🛄 🔤	8 📝 🥋 🕂	Σ Σ Σ Δ		4 7 8 6	XYZ	I арс ноне G	s  + +	→ →  =	
ूं 🚡 Standard	:: Arial 🝷 9	• B <i>I</i> U	$\mathbf{x}^2 \ \mathbf{x}_2 \ \mathbf{x}_1^2$ also be a second seco	A` ▲ ■, ∥	", <u>A</u> - <u>-</u> [	🕭 = 🙋 - 🖉 -	• 🙏 💶 💽	0,5 🔹 🗖	- 0 ·	<u>///</u> - 🖳 🖬		; \$ <del>*</del>    ≙  <mark>_</mark> [	þ 🦻 诺 🕼 I	ik.		
			(													A
difflist *		A		U Werte setz	en - [difflist]di	fflist!Col(C)										
Langname	A(X1) Gradient	С(Х2) Ш	B(Y2) Intensität	Formel wcol(1) Col(A) Funktion Variablen Optionen											Do ooroful with	X) 126
Einheiten				∠eile ( i ): Ab	<auto> B</auto>	s <auto></auto>									Be caleful with	1.frite
F(x)=		70*0,0018*col(A))^2*		Col(C) =							×				the units here I	
Sparklines	/			(2*3,14	1*42577	0*0,0018*c	ol(A))^2*	(0,07-0,0	0018/3)		nisi 🗱 🗎 ?					
1	0,963 2,454	1,49177E6 9,68723E6	976022,3623 925509,0708												used [G]=G/cm	
3	3,945 5,436	2,50348E7 4,75345E7	878457,5112 827802,1557								x2(Y)	BLX1(V)	BL X2(V)	BLY	an it in given by	
5	6,927 8,418	7,71864E7	761598,5157								A2(1)	BEXI(I)	BLAZ(T)		as it is given by	
7	9,91	1,57978E8	607010,688	Neu Berechne	n Manuell 🔻	]		🛃 💽	Abbrechen Anwe	nden 🔦	Right Integral	Left BL limit	Right BL	Left	TonSnin	
9	12,892	2,09091E8 2,67357E8	458719,5288	Skript vor Ar	nwenden der F	ormel					4,44451	17,7443	-5,74287		Topopin.	
10 11	14,383 15,874	3,32774E8 4,05343E8	387764,161 322741,7228	oder Be	-Skript erechnun	g vor Forn	neren den Mel ausfüł	r Formel - hren	eingeben		4,44451	17,7443	-5,74287		Instead of	E
12 13	17,365 18,856	4,85065E8 5,71939E8	264278,0910 213478,4506								4,44451 4,44451	17,7443	-5,74287 -5,74287			
14	20,347	6,65965E8 7,67143E8	170123,8769	0 1371	1	3,20599E7	0,01609	4,69289	6,69898E-5	5,06241	4,44451 4,44451	17,7443 17,7443	-5,74287 -5,74287		changing this	
16	23,329	8,75473E8	103891,89124	0,10644	2	3,06503E7 2,85579E7	0,01482 0.01361	4,69341 4,69332	7,0393E-5 6,79595E-5	5,06241 5.06241	4,44451 4,44451	17,7443 17,7443	-5,74287 -5,74287		value to the SI-	<u> </u>
18	26,312	1,11367E9	60548,95479	0,06204	6	2,64906E7	0,01236	4,693	2,57217E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			
20	27,803	1,24347E9 1,38041E9	45593,07507 34133,04291	0,04671		2,10007E7	0,01054	4,6927	-1,60037E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	=	unit T/m the	Ë 
21	30,785 32,276	1,5245E9 1,67575E9	25553,50125 19172,70765	0,02618 0,01964	8	1,81812E7 1,47927E7	0,0097	4,69375	5,55126E-5 4,88111E-5	5,06241	4,44451 4,44451	17,7443	-5,74287 -5,74287			
23	33,767 35,258	1,83415E9 1,9997E9	14533,87473	0,01489 0,01149	8	1,18922E7 9,77863E6	0,00919 0,00849	4,69333 4,69358	4,86873E-5 3,12439E-5	5,06241 5,06241	4,44451 4,44451	17,7443 17,7443	-5,74287 -5,74287		gyromagnetic	
25	36,749	2,17241E9	8910,76289	0,00913	8	7,67275E6 5,89584E6	0,00831 0,00823	4,69335 4,69299	3,20408E-5 1,34847E-5	5,06241 5,06241	4,44451 4,44451	17,7443 17,7443	-5,74287 -5,74287		ratio for 1H	°C,
20	39,732	2,5394E9	6206,87788	0,00636	8	4,42973E6	0,00807	4,69344	1,17251E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			먹고
28	41,223 42,714	2,73357E9 2,93488E9	4954,98963	0,00509		2,39095E6	0,00818	4,69353	2,07216E-6	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		v=42577000	) <b>—</b> (
30 31	44,205 45,696	3,14335E9 3,35898E9	4612,17034 4396,17003	0,00473 0,0045	8	1,74886E6 1,18576E6	0,00832	4,09355	4,93129E-5	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287			
32	47,187	3,58175E9	4254,33771	0,00436	- 8	952959 696480	0,00901 0,00995	4,69329 4,69336	-5,92347E-5 -4,89281E-5	5,06241 5,06241	4,44451 4,44451	17,7443 17,7443	-5,74287 -5,74287		HZ/I WAS	5
< ► \ difflist	(FitExp1 / F	itExpCurve1 / FitExp	2 🖌 FitExpCu			543992 444230,625	0,01062 0,0112	4,6936 4,69529	-1,17608E-4 -6,67964E-6	5,06241 5,06241	4,44451 4,44451	17,7443 17,7443	-5,74287 -5,74287		modified to	
		28 1 29 1	28 5	451,60041	4,69826	364839,5	0,01225	4,69445	-1,19314E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287		moumeu to	
		30 1	30 4	612,17034	4,6997	298870,375	0,0131	4,69369	-1,56503E-4	5,06241	4,44451	17,7443	-5,74287	-	v=425770 Hz/T	
		✓ ► Sheet1 / Shee								- · · - · · ]	(	III		► at		

/ . . . / 曲 図 動 🖬 10, 🧌 🛯 🖉 🖉 🖉 🛗 🔲 📜 😫 🕲 🖽 🖬 🗐 🗒 😫 🖉 🖬 🖬 🖉 🖉 🖬 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉

Für Hilfe drücken Sie bitte F1.

-4

🖸 💿 🤌 🗗 🗖 💷 🔟

![](_page_43_Figure_2.jpeg)

🗵 💿 🌽 🖶 🚍 💷 🔟 🛛 🐼 😎 Strg Recht

![](_page_44_Figure_2.jpeg)

![](_page_45_Picture_0.jpeg)

#### FRIEDRICH-SCHILLER-UNIVERSITÄT JENA NMR-Platform, Faculty of Chemistry and Earth Sciences

#### **Any Questions? - Please contact me.**

![](_page_45_Picture_3.jpeg)

#### f.pielenz@uni-jena.de