

Aufsetzen von Service-Messungen in SciPeaks (Stand 05/2026)

- Klicken Sie auf der [Homepage der NMR-Plattform](#) auf das Icon „**Messauftrag erstellen**“. Wenn Sie zum ersten Mal einen Auftrag bei uns abgeben müssen Sie sich außerdem noch mit Ihrem SSO-Kürzel (Uni-Account) anmelden.
- Sobald sich das SciPeaks-Jena-Fenster geöffnet hat, klicken Sie in der oberen, linken Hälfte des Fensters auf das „**Add sample**“ Icon (rechts neben dem Suchfeld).
- In dem sich öffnenden Fenster geben Sie im Feld „**Reference**“ Ihr Benutzerkürzel (z.B. ABC oder PPT1) ein. Bitte mindestens drei Zeichen, maximal 8 Zeichen verwenden. Keine Leerzeichen, nur Buchstaben und Zahlen. Geben Sie dann im Feld „**Batch**“ die Probenbeschreibung aus Ihrem Laborjournal (sample i.d. etc.) ein. Die Bezeichnung darf nur aus Buchstaben, Zahlen und Bindestrichen bestehen und nicht länger als 20 Zeichen sein (z.B. Test-10-Service). Klicken Sie dann auf „**Submit**“.
- Anschließend wird ein neues Fenster als Tab sichtbar, das den Namen des Messauftrags besitzt. Klicken Sie hier zuerst auf das Icon „**Molecule**“ und geben Sie die Struktur der zu untersuchenden Verbindung ein. Dazu können Sie entweder den integrierten Struktureditor nutzen oder die Struktur hochladen/importieren¹. Für den Import nutzen Sie das Icon „**Import...**“ rechts oben im Editor-Fenster. Bitte beachten Sie, dass für jeden Auftrag eine Struktur angegeben werden muss. Klicken Sie dann auf „**Save data**“.
- Wählen Sie nun den „Home“ Tab in der oberen linken Ecke von SciPeaks an. Die gerade erzeugte Probe sollte dann aktiv sein (grüner Hintergrund) - klicken Sie sonst in das Feld der Probe.
- Klicken Sie nun auf der rechten Hälfte (Kachel-Bereich) auf die rosafarbene Kachel „**NMR request**“, um die Experimente für Ihre Messung auszuwählen.
- Es öffnet sich das **Auftragsformular**, bei dem folgende Angaben erforderlich sind: Deutiertes Lösungsmittel (aus der Pull-down-Liste „**Solvent**“ auswählbar), Einwaage („**Weight**“), **Temperatur** (default-Wert 25°C), Abgabestelle („**Lab**“ – hier bitte die Probenannahmestelle auswählen, wo Sie die Probe abgeben möchten) und Arbeitsgruppe („**Group**“ – wählen Sie hier Ihre Arbeitsgruppe aus). Falls Ihre Probe ein Polymer ist, bitte die Option „**Polymer**“ anklicken. Wählen Sie als Letztes die gewünschten NMR-Experimente („**Experiments**“) aus. Wenn sich das gewünschte Experiment nicht in der Auswahl befindet, markieren Sie „Other“ und geben Sie im darunterliegenden Freitextfeld („**Remarks**“) an, welche Spektren gemessen werden sollen. Das Feld „**Keyword**“ ist optional und kann für eigene Informationen genutzt werden.
- Wenn alle Angaben eingetragen wurden, bitte in der rechten Spalte unter dem „List...“-Feld auf „**Create request**“ klicken. Ab diesem Moment kann der Auftrag nicht mehr geändert werden!
- Sobald die Messungen in der NMR-Plattform durchgeführt wurden, können Sie die Spektren direkt durch Markieren der entsprechenden Probe im „**Home**“-Tab und Klicken auf die grüne Kachel „**Analyse NMR**“ im rechten Bereich der Oberfläche ansehen. Die Spektren können durch Klick auf das Icon „**Download raw data**“ heruntergeladen werden.

¹ Aus ChemDraw können Sie eine Struktur mit „auswählen“, „edit“ und „copy as“ „MOL text“ kopieren!