

Anleitung zur Nutzung des Python Skripts "nmrtabelle" (Version 1.0)

B. Sc. Felix Krickl

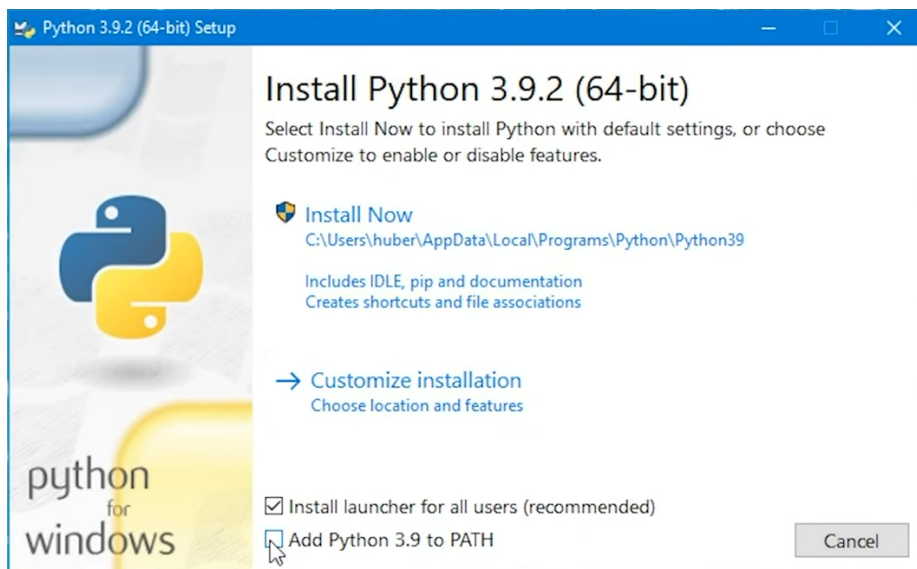
17. Oktober 2023

Anwendungsbereich und Funktionalität

nmrtabelle ist ein Kommandozeilenprogramm zur automatisierten Auslese und Zusammenstellung von Metadaten gemessener Kernmagnetresonanzspektren. Die Metadaten werden als .csv-Datei ausgegeben um z. B. in Excel geöffnet zu werden. Dadurch wird insbesondere der Überblick über die gemessenen Spektren gewährleistet; weiterhin könnten die ausgegebenen Tabellendateien als Anhaltspunkt für Kostenabschätzungen genutzt werden. **nmrtabelle** wurde zuerst in BASH implementiert. Damit es auch unter Windows genutzt werden kann habe ich eine PYTHON-Version verfasst. Die BASH-Version finden Sie ebenfalls auf meiner Homepage.

1 Python installieren

Installieren Sie Python 3.10 oder eine neuere Version auf Ihrem PC. Laden Sie dazu die Installer-Datei aus dem Netz herunter und führen Sie diese aus. **WICHTIG: Wählen Sie im Installations-Wizard unbedingt die Option „Add to Path“ aus (siehe Bild)!** Wird diese Option nicht gewählt können Sie python später nicht ohne Weiteres in cmd starten. Danach können Sie „Install Now“ auswählen.



2 Eine Ordnerstruktur für die NMR-Messdaten erzeugen

Damit **nmrtabelle** Ihre Metadaten auslesen kann müssen alle Messordner in einen gemeinsamen Ordner in einem lokalen Dateisystem kopiert werden. Das Skript lässt sich nicht auf die Messordner des Servers anwenden. Erstellen Sie also in einem beliebigen Verzeichnis Unterordner für die Messordner, z. B.:

```
C:\Users\maxmuster\Documents\nmr300mhz
```

und

```
C:\Users\maxmuster\Documents\nmr600mhz
```

Und laden Sie alle Messordner in diese Verzeichnisse herunter.

3 Python Skript in die Verzeichnisse kopieren

Kopieren Sie jetzt die Datei **nmrtabelle.py** in alle oben aufgeführten Verzeichnisse, in denen auch die Messordner liegen.

4 Ausführen des Skripts

Öffnen Sie das Start-Menü und geben Sie **cmd** ein. Drücken Sie die Eingabe-Taste. Es öffnet sich nun das Terminal (commandline). Navigieren Sie unter Nutzung des Befehls

```
cd
```

in das Verzeichnis, indem Messordner und die Skript-Datei liegen. Das könnte verglichen mit obigen Beispiel-Verzeichnissen so aussehen:



```
Auswählen Eingabeaufforderung
C:\Users\felix>
C:\Users\felix>cd Documents
C:\Users\felix\Documents>cd nmr300mhz
C:\Users\felix\Documents\nmr300mhz>
```

Führen Sie mit folgendem Befehl das Skript aus:

```
python nmrtabelle.py
```

5 Betrachten der .csv-Datei

Im selben Verzeichnis sollte nun die Datei **nmrtabelle.csv** erzeugt worden sein. Öffnen Sie diese mit Excel und wählen Sie Kommata als Separatoren aus. Sie kann auch im Texteditor betrachtet werden.