




UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Mnova

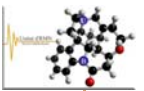
Versión 11.0
2016

Herramientas básicas
1D, 2D

Modulo-I

CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA

www.ccit.ub.edu



Presentación




CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

- **Requisitos de instalación**
 - Funciona en Windows, Mac y varias versiones de Linux.
 - Licencia de Campus (150 ordenadores de grupo UB).
 - Es posible instalarlo en portátiles, licencia valida durante 90 días sin conexión al servidor (UB).
- **Ventajas**
 - Reconoce múltiples formatos.
 - Muy intuitivo.
 - Facilidad para generar gráficos y tablas de datos.
- **Información MNova**
 - Pagina Web MestreLab (<http://mestrelab.com>).
 - Nuevas versiones.
 - Manuales y Tutoriales.




Procesado espectros 1D (operaciones)




Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

- **Apertura de espectros.**
 - Archivos → Abrir. 
- **Plantilla de procesado.**
 - Ajuste de las condiciones de procesado iniciales. 
- **Ajuste de fase, corrección de la línea de base.**  
- **Referenciar el espectro.** 
 - TMS, disolvente, señales a delta conocido
- **Integración, listados, acoplamientos.**
 - Opción-1  
 - Método clásico, definición de zonas de Integración , listado señales.
 - Opción-2
 - Análisis de multipletes, listados señales e integración 
- **Presentación de los resultados.**
 - Parámetros, desplazamientos, acoplamientos, Gráficos para informes

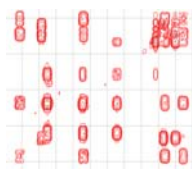
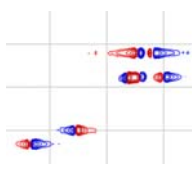


Procesado experimentos 2D




Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

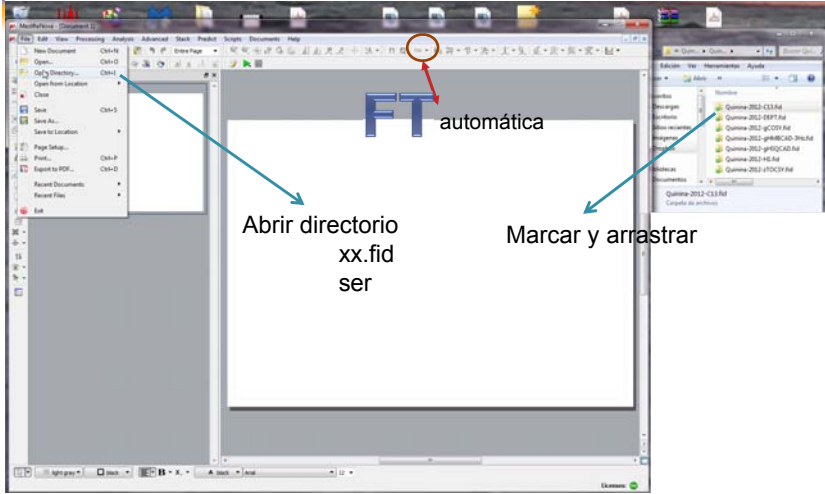
- **Herramientas básicas**
 - Experimento **gCOSY**
 - Incorporación espectros 1H
 - Simetrización
 - Experimento **gHSQC**
 - Incorporación de espectros 1H y 13C
 - Ajuste de fase
 - Ajuste de los contornos

Abrir datos y transformar el espectro



Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu



FT automàtica


Abrir directorio xx.fid ser

Marcar y arrastrar

Condiciones procesado



Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu



Modificación condiciones proc

Ajuste del método

Edit > Preferences > NMR > Import

CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Ajuste fase y línea de base

Fase

Referencia espectro

Corrección línea de base

Insertar gráfico molécula
ChemDraw
ISisDraw
Chemsketch

CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Fase, línea de base, referencia

Automatic

Manual

Click here and drag mouse up or down holding left button for phase correction or right button for PMR correction. Hold Ctrl key for fine tune.

(Some processing steps (e.g. baseline correction) are not applied during interactive phasing. The final spectrum may differ from the provisional representation.)

Phase: -25.75 | | Phase: 2.00

Phase Point: 0.800 | |

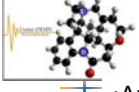
Old Shift: 0.000 ppm | | Auto Tuning

New Shift: 0.000 ppm | | Range Width: 0.100 ppm

Annotation

TMS, DSP, TSP o señal del disolvente (evitar utilizar el H₂O)

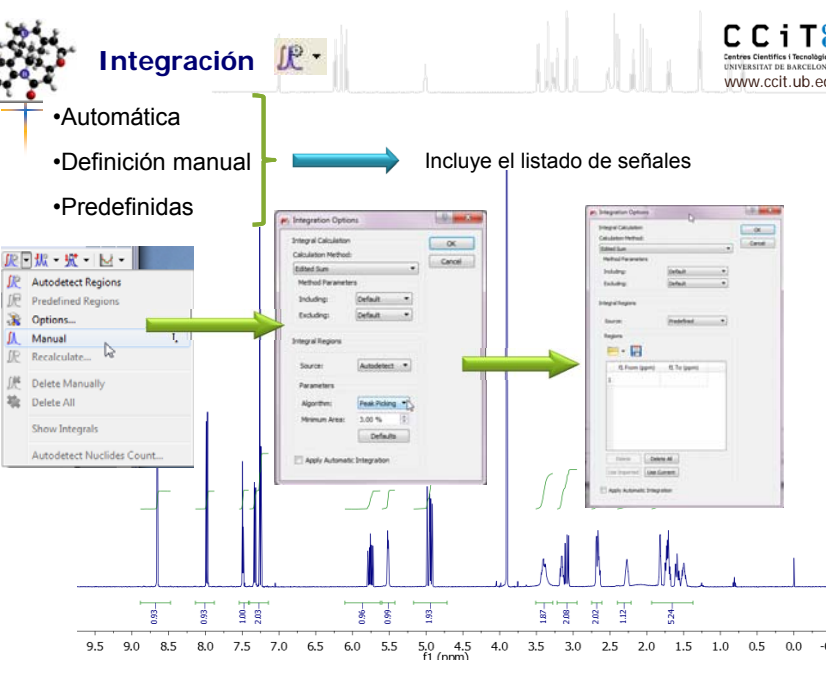
Integración



CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

•Automática
•Definición manual
•Predefinidas

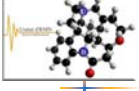
Incluye el listado de señales



9.5 9.0 8.5 8.0 7.5 7.0 6.5 6.0 5.5 5.0 4.5 4.0 3.5 3.0 2.5 2.0 1.5 1.0 0.5 0.0 -1

F1 (ppm)

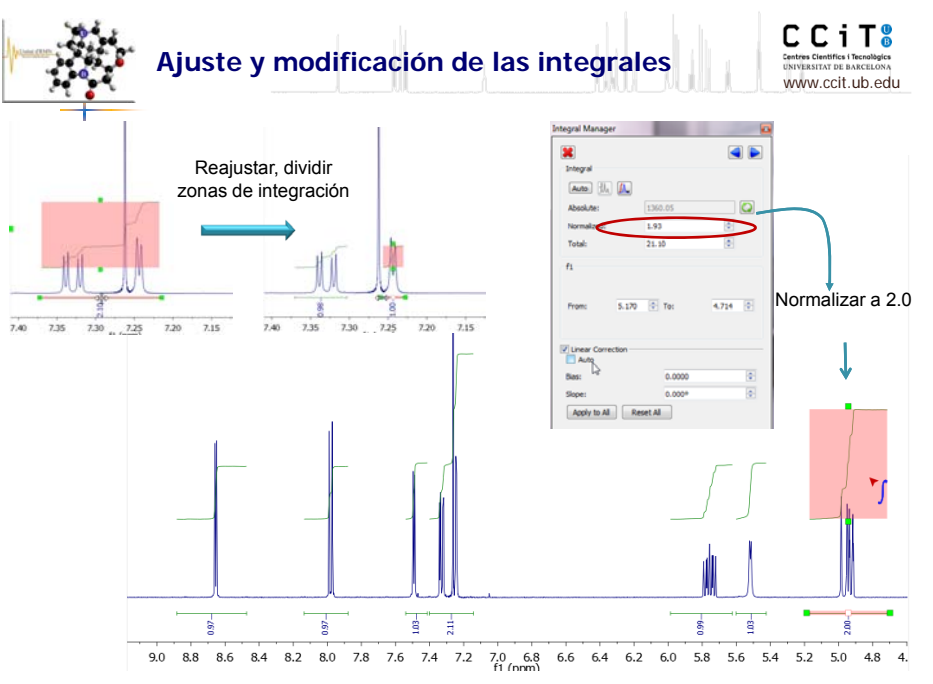
Ajuste y modificación de las integrales



CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Reajustar, dividir zonas de integración

Normalizar a 2.0

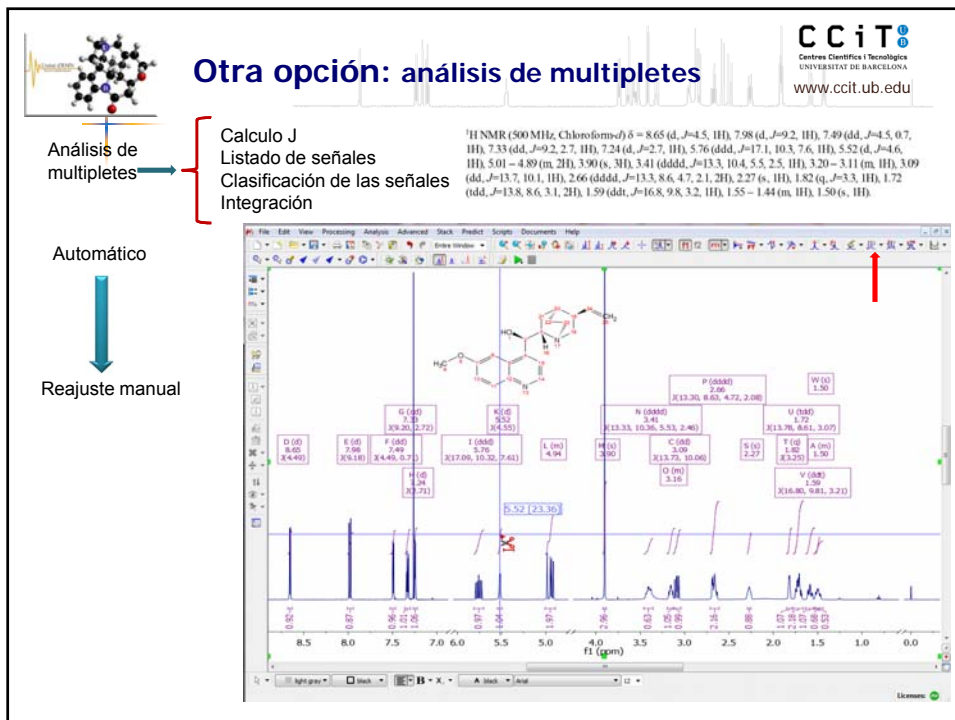
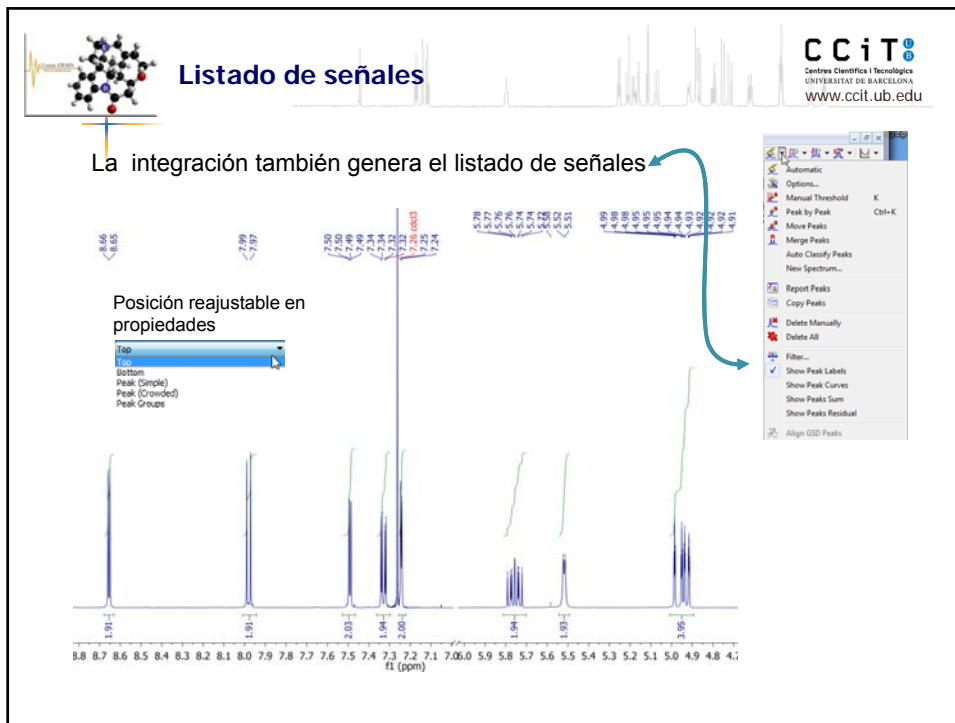


7.40 7.35 7.30 7.25 7.20 7.15

7.40 7.35 7.30 7.25 7.20 7.15

9.0 8.8 8.6 8.4 8.2 8.0 7.8 7.6 7.4 7.2 7.0 6.8 6.6 6.4 6.2 6.0 5.8 5.6 5.4 5.2 5.0 4.8 4.6

F1 (ppm)





Tablas de información



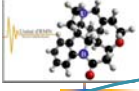


Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu


Información complementaria


- Listado de señales
- Relación de integraciones
- Constantes de acoplamiento
- Asignaciones
- Parámetros y texto



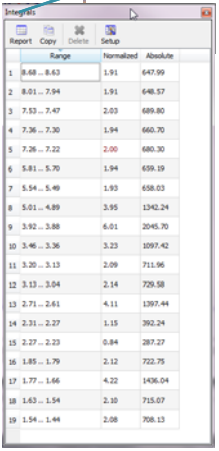


Listado integraciones



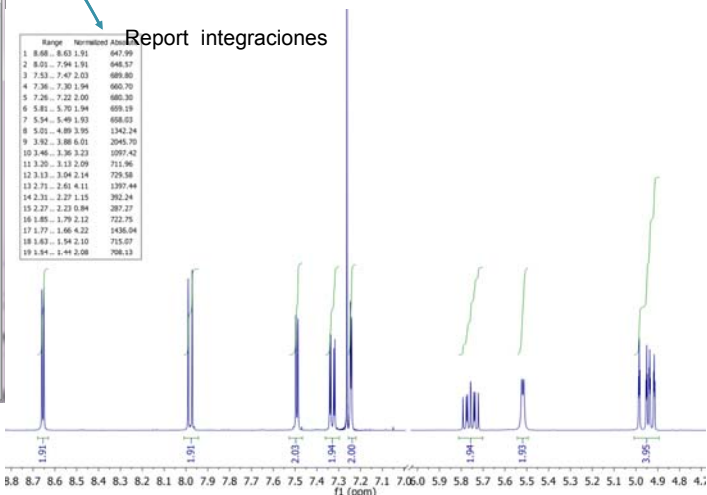


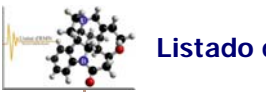
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu




Range	Normalized	Absolute
1 8.68 - 8.63	1.91	647.99
2 8.01 - 7.94	1.91	648.57
3 7.53 - 7.47	2.03	689.80
4 7.36 - 7.30	1.94	660.70
5 7.26 - 7.22	2.00	680.30
6 5.81 - 5.70	1.94	659.19
7 5.54 - 5.49	1.93	658.03
8 5.01 - 4.89	3.95	1342.24
9 3.92 - 3.88	6.01	2045.70
10 3.46 - 3.36	3.23	1097.42
11 3.20 - 3.13	2.09	711.96
12 3.13 - 3.04	2.14	729.58
13 2.71 - 2.61	4.11	1397.44
14 2.31 - 2.27	1.15	382.24
15 2.27 - 2.23	0.84	287.27
16 1.85 - 1.79	2.12	722.75
17 1.77 - 1.66	4.22	1436.04
18 1.63 - 1.54	2.10	715.07
19 1.54 - 1.44	2.08	708.13

Report integraciones





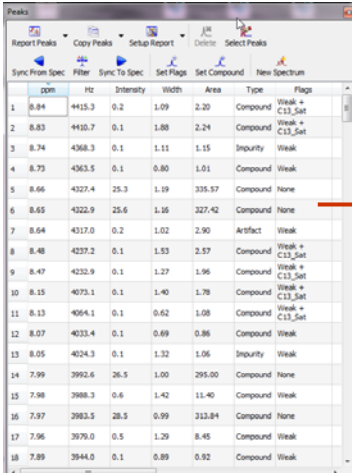
Listado de señales



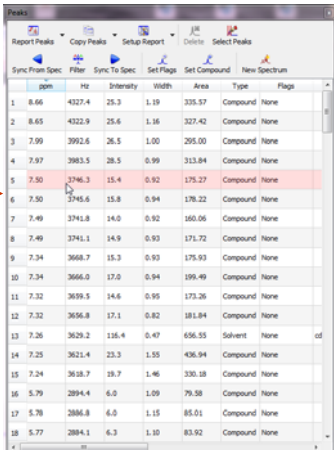
View → Tables → Peaks

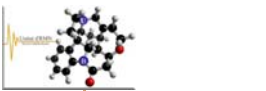
•Informe:
•Copiar:
•Info especial:

Incorporar como tabla al espectro
Pasarlo a word o excel
Relación deltas en distintos formatos




Filtro

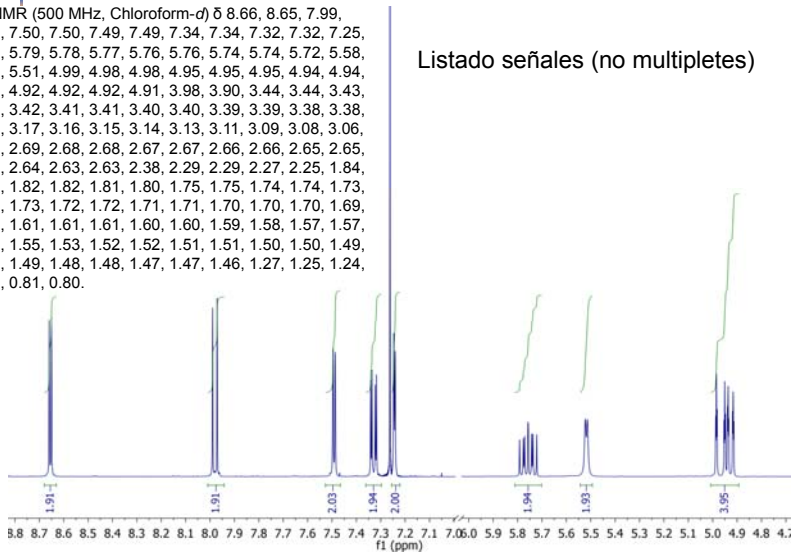




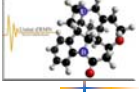
Listado señales (no multipletes)




¹H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 8.66, 8.65, 7.99, 7.97, 7.50, 7.50, 7.49, 7.49, 7.34, 7.34, 7.32, 7.32, 7.25, 7.24, 5.79, 5.78, 5.77, 5.76, 5.76, 5.74, 5.74, 5.72, 5.58, 5.52, 5.51, 4.99, 4.98, 4.98, 4.95, 4.95, 4.95, 4.94, 4.94, 4.93, 4.92, 4.92, 4.92, 4.91, 3.98, 3.90, 3.44, 3.44, 3.43, 3.42, 3.42, 3.41, 3.41, 3.40, 3.40, 3.39, 3.39, 3.38, 3.38, 3.18, 3.17, 3.16, 3.15, 3.14, 3.13, 3.11, 3.09, 3.08, 3.06, 2.69, 2.69, 2.68, 2.68, 2.67, 2.67, 2.66, 2.66, 2.65, 2.65, 2.64, 2.64, 2.63, 2.63, 2.38, 2.29, 2.29, 2.27, 2.25, 1.84, 1.83, 1.82, 1.82, 1.81, 1.80, 1.75, 1.75, 1.74, 1.74, 1.73, 1.73, 1.73, 1.72, 1.72, 1.71, 1.71, 1.70, 1.70, 1.69, 1.68, 1.61, 1.61, 1.61, 1.60, 1.60, 1.59, 1.58, 1.57, 1.57, 1.56, 1.55, 1.53, 1.52, 1.52, 1.51, 1.51, 1.50, 1.50, 1.49, 1.49, 1.49, 1.48, 1.48, 1.47, 1.47, 1.46, 1.27, 1.25, 1.24, 0.82, 0.81, 0.80.



Tablas de parámetros



View → Tables → Peaks

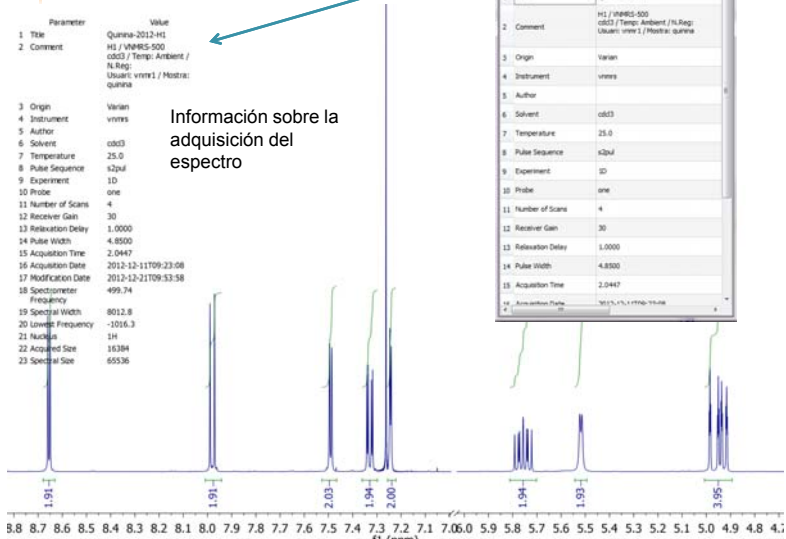


Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Parameter	Value
1 Title	Quinine-2012-H1
2 Comment	H1 / INHES-500 cd03 / Temp: Ambient / N.Reg: Usuari: vnmr1 / Mòdul: quina
3 Origin	Vnmr
4 Instrument	vnmr5
5 Author	cd03
6 Solvent	cd03
7 Temperature	25.0
8 Pulse Sequence	zgpg30
9 Experiment	1D
10 Probe	one
11 Number of Scans	4
12 Receiver Gain	30
13 Relaxation Delay	1.0000
14 Pulse Width	4.8500
15 Acquisition Time	2.0447
16 Acquisition Date	2012-12-11T09:23:08
17 Modification Date	2012-12-11T09:53:58
18 Spectrometer	499.74
19 Spectral Width	8012.8
20 Lower Frequency	-1016.3
21 Nucleus	1H
22 Acquired Size	16384
23 Spectral Size	65536

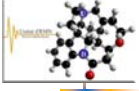
Información sobre la adquisición del espectro

Parameter	Value
1 Title	Quinine-2012-H1
2 Comment	H1 / INHES-500 cd03 / Temp: Ambient / N.Reg: Usuari: vnmr1 / Mòdul: quina
3 Origin	Vnmr
4 Instrument	vnmr5
5 Author	cd03
6 Solvent	cd03
7 Temperature	25.0
8 Pulse Sequence	zgpg30
9 Experiment	1D
10 Probe	one
11 Number of Scans	4
12 Receiver Gain	30
13 Relaxation Delay	1.0000
14 Pulse Width	4.8500
15 Acquisition Time	2.0447
16 Acquisition Date	2012-12-11T09:23:08
17 Modification Date	2012-12-11T09:53:58
18 Spectrometer	499.74
19 Spectral Width	8012.8
20 Lower Frequency	-1016.3
21 Nucleus	1H
22 Acquired Size	16384
23 Spectral Size	65536




f1 (ppm)

Ajustar las propiedades del Display

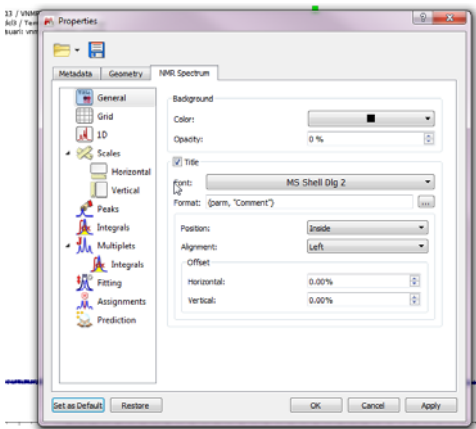


Edit → Propiedades
Botón derecho del ratón



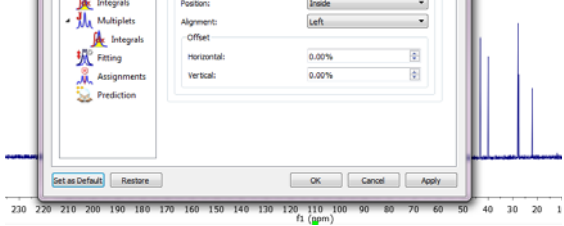
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Cut	Ctrl+X
Copy	Ctrl+C
Paste	Ctrl+V
Delete	Del
Select All	Ctrl+A
Properties...	

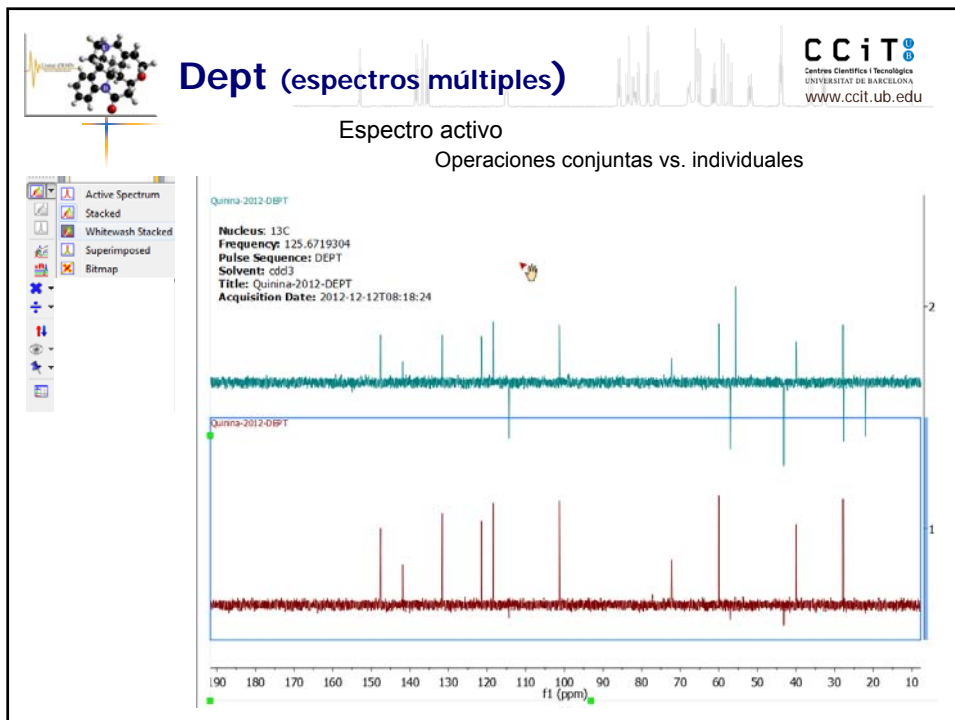
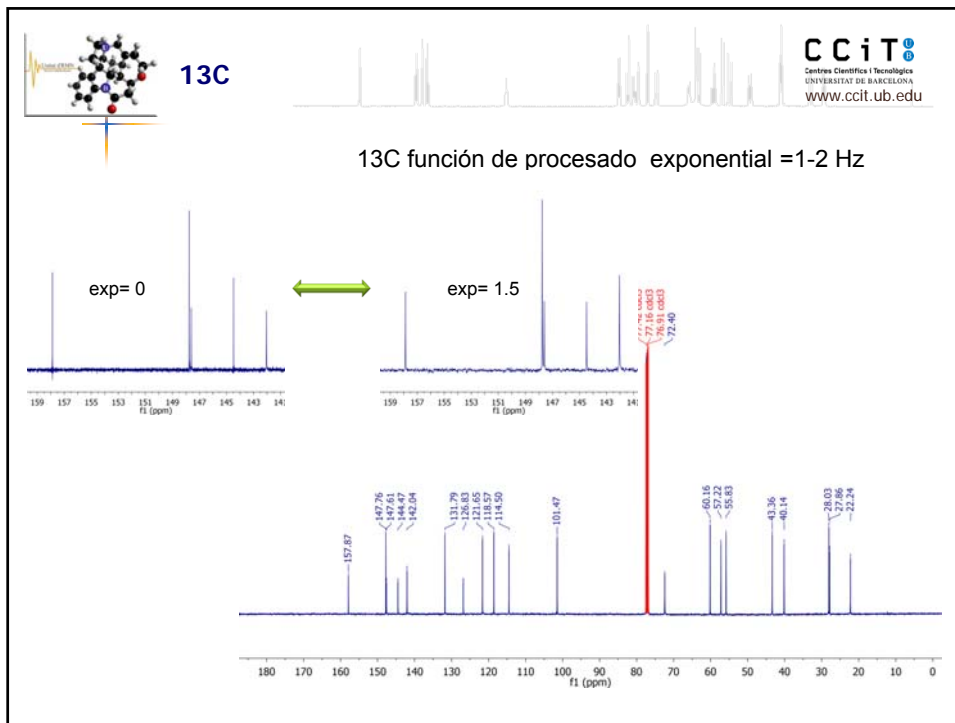


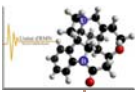
Ajustar las propiedades
Tamaño y color de letra
Escala en los espectros
Formato de
picos, integrales, etc

Salvar como :
Recuperar:
Poner como predeterminadas




f1 (ppm)

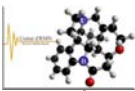





Experimentos 2D Herramientas básicas



- **Procesado espectros 2D**
 - Espectros AV ➔ **gCOSY**
 - Espectros sensibles a la fase ➔ **gHSQC**
 - Ajuste de la fase
 - Referencia.
 - Representación gráfica
 - Ajuste de los contornos, paleta de colores.
 - Trazas y proyecciones (incorporación del espectro 1D).

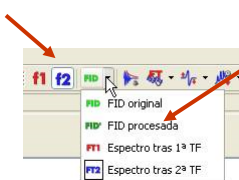


Dimensión F1 y F2



- **Control del Procesado**
 - Selección de la dimensión
 - Hasta donde llega el procesado?

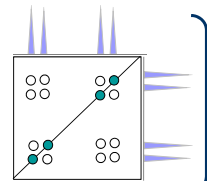
Define donde se aplica el ajuste manual de fase, LP, etc

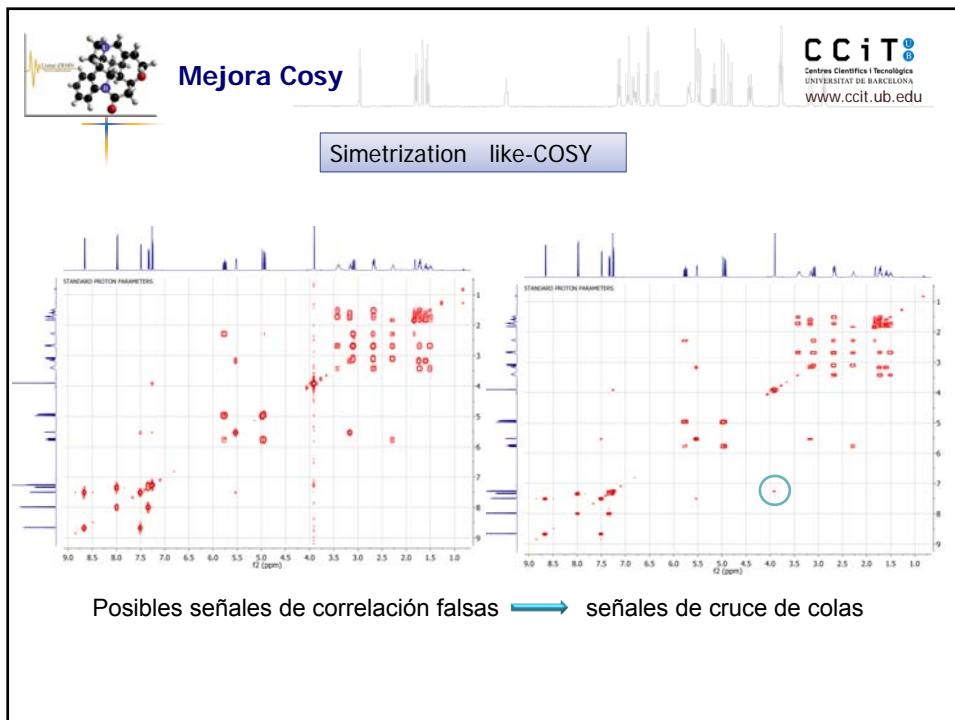
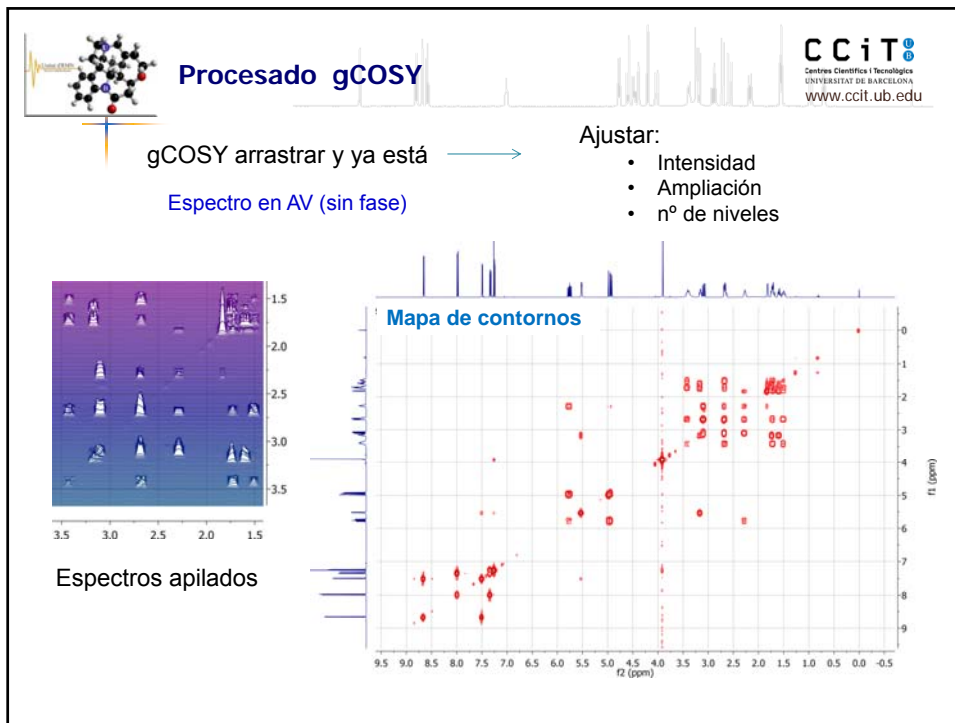


Para seguir el procesado y ver el resultado de las etapas intermedias

La señal obtenida es función de dos tiempos de adquisición

$$A(t_1, t_2) \xrightarrow{\text{FT}} S(F_1, F_2)$$





CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Modificaciones de las condiciones de display

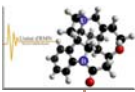
Esquema colores

Ajuste del número de Contornos


CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Referencia (TMS, disolvente)

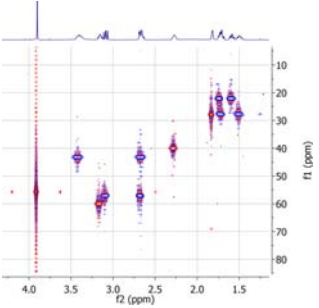
- Mantiene los valores de referencia de la adquisición
- Reajuste:




HSQC reajuste condiciones procesado

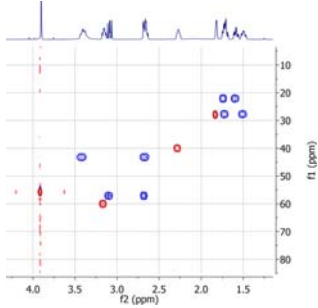


Si se observa → Reajustar condiciones

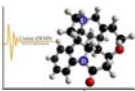


F1 Gaussian 56.43
F2 Gaussian 7.65




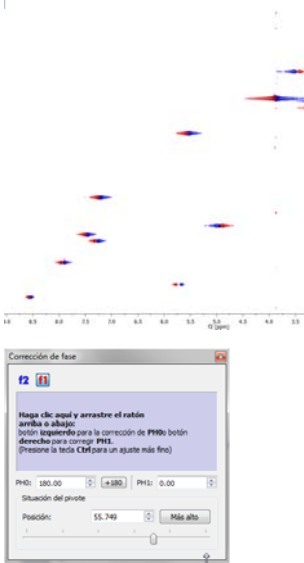


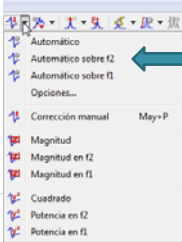
F1 Sine Square 90 °
F2 Sine Square 90 °



Ajuste fase (HSQC)







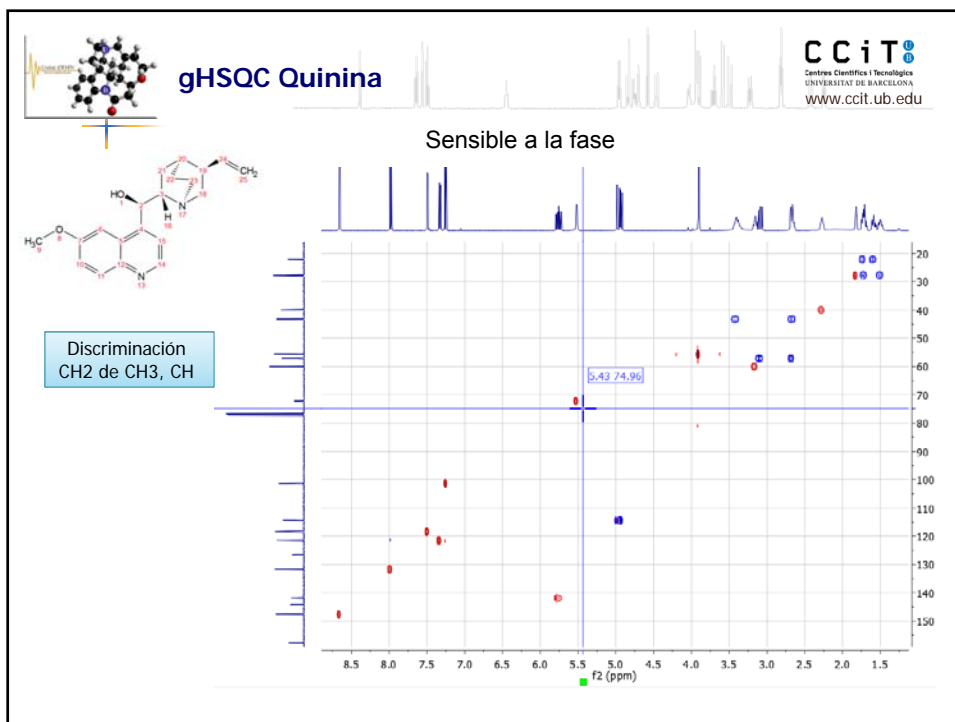
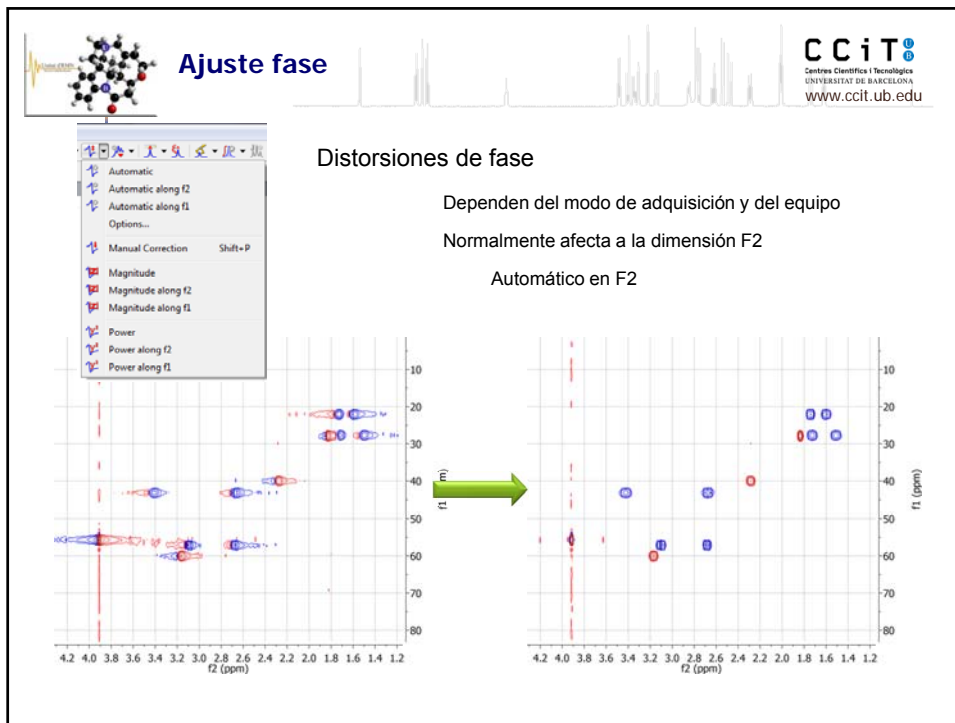
Corrección de fase

Haga clic aquí y arrastre el ratón
arriba o abajo:
botón izquierdo para la corrección de **PH0** botón
derecho para corregir **PH1**.
(Presione la tecla **Ctrl** para un ajuste más fino)

PH0: 180.00 PH1: 0.00

Situación del pivote

Posición: 55.749 Más alto



Gracias por su atención

Preguntas ???

CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Chemical structure and NMR spectrum

The image features a colorful mosaic background. At the top left, there is a chemical structure diagram and an NMR spectrum. The text 'Gracias por su atención' is written in blue cursive, and 'Preguntas ???' is written in yellow bold font. The CCiT logo and website information are in the top right corner.