









**Unitat de RMN**

## Tema-7

### Procesado de espectros

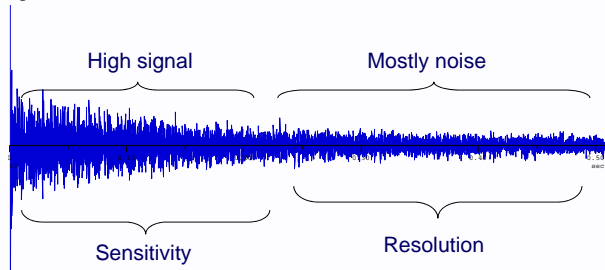




## Window functions

The weighting functions can improve the appearance of the spectra and to extract better information

weighting functions = Window functions



Decreasing the tail of the FID ➔ enhancing sensitivity

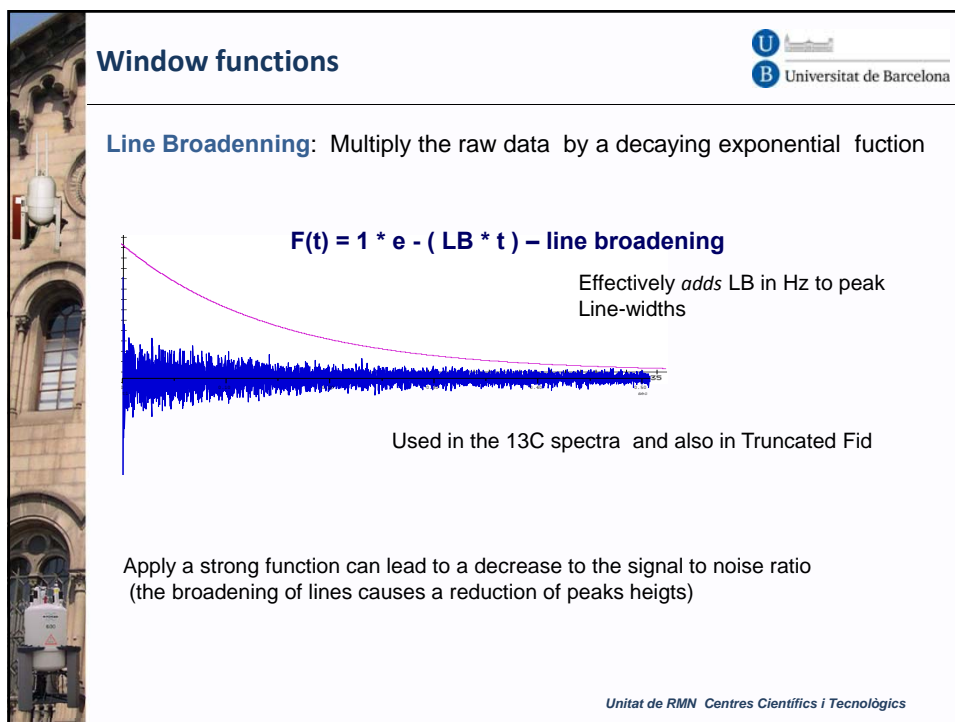
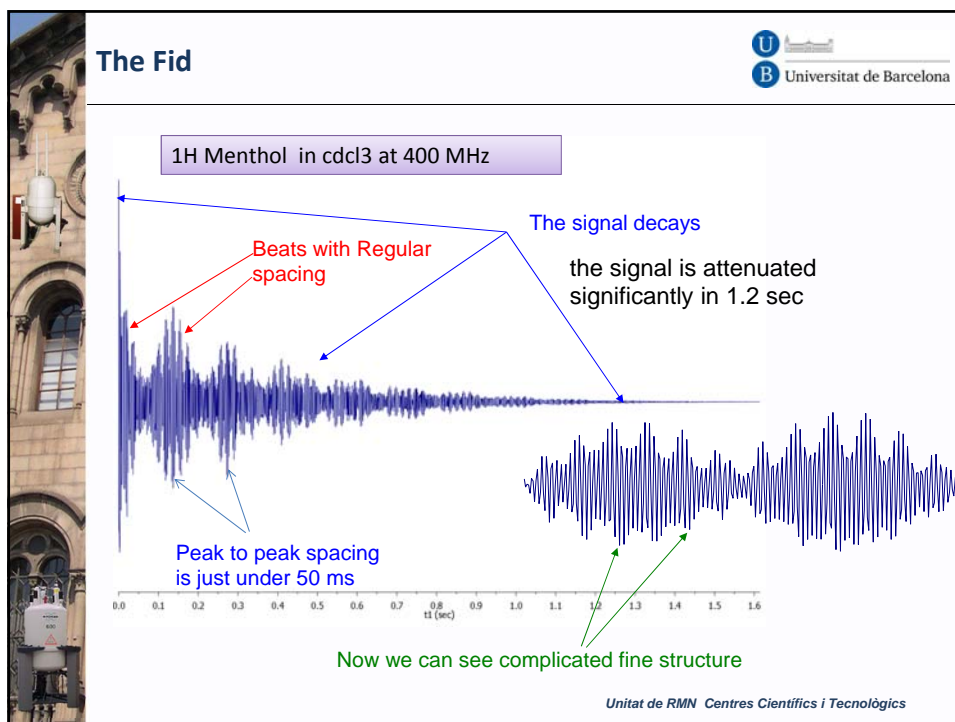
Increasing the middle and last part of the FID ➔ enhancing resolution

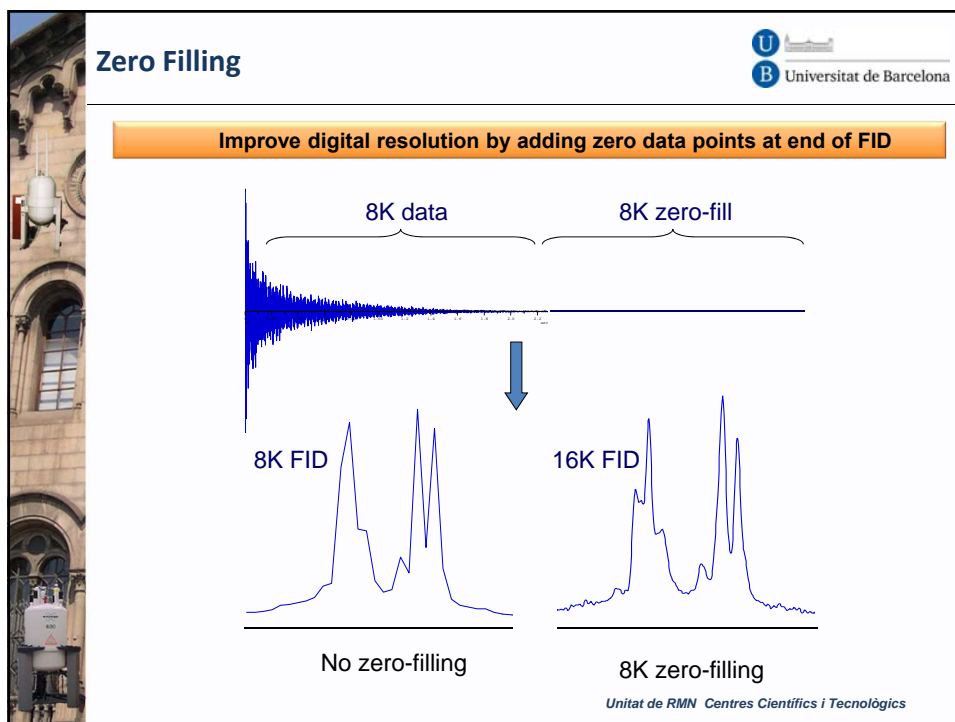
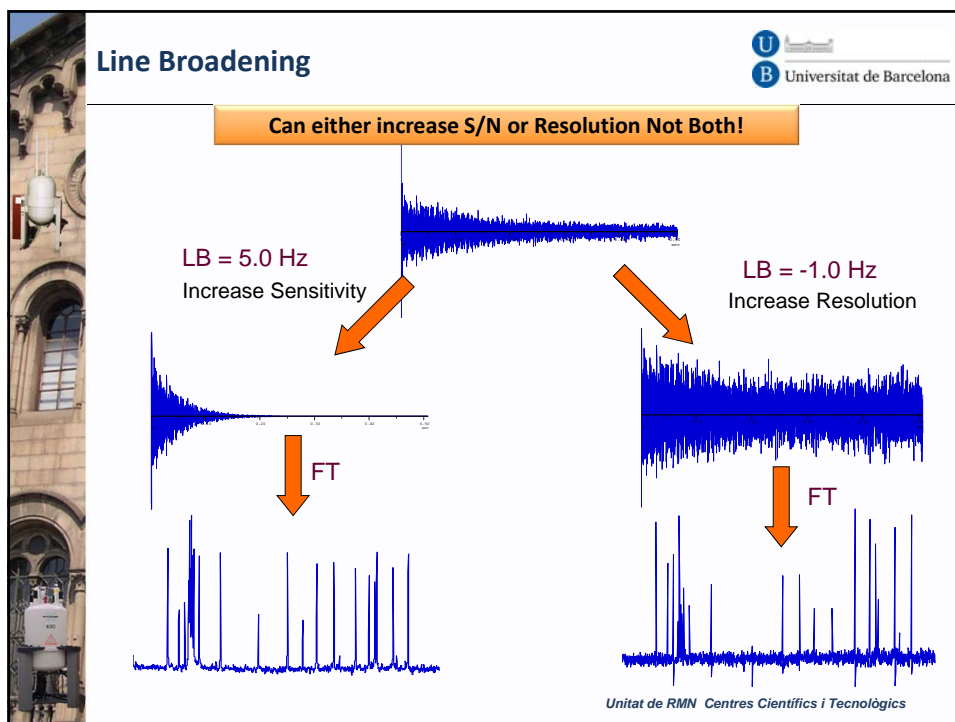
Truncation correction of FID ➔ 2D processing

Reconstruction of the FID

Digital resolution enhancement

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics





## Linear Prediction

U  
B Universitat de Barcelona

Linear prediction can be used to improve both the digital and real resolution in a spectrum.  
Linear prediction uses the data collected in an FID to extrapolate new data and add to the end of the fid

**Zero Filling vs Forward Linear Prediction**

Untreated  
Zero Filled  
Forward Linear Prediction

1.4 1.3 1.2 ppm

**Backward Linear Prediction**

B LP

Glenn Facey blog

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

## Data acquisition

U  
B Universitat de Barcelona

Basic 1D NMR sequence

pw (5-15 $\mu$ s)  
D1 (1-10s)  
Acquisition time (1-5s)  
nt  
FT  
SW

### Basic Concepts

- Relaxation (spin-spin, spin lattice)
- Pulse width
- Acquisition time
- Spectral window
- Scans

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics




Universitat de Barcelona

*Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics*

Dos Campus d'Excel·lència Internacional:

**B:KC** Barcelona Knowledge Campus **HUB** Health Universitat de Barcelona Campus

[www.ub.edu](http://www.ub.edu)

Segueix-nos a:


 [facebook.com/UniversitatdeBarcelona](https://facebook.com/UniversitatdeBarcelona)  
 [twitter.com/#1/ub\\_endirecte](https://twitter.com/#1/ub_endirecte)





Universitat de Barcelona

# MNova

## Procesado de espectros Utilidades




## Overview











- **Requisitos de instalación**
  - Funciona en Windows, Mac y varias versiones de Linux.
  - Licencia de Campus (ordenadores de grupo UB).
  - Es posible instalarlo en portátiles, licencia valida durante 90 días sin conexión al servidor.
- **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 Tutorials.

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics




## Procesado básicos de espectros 1D

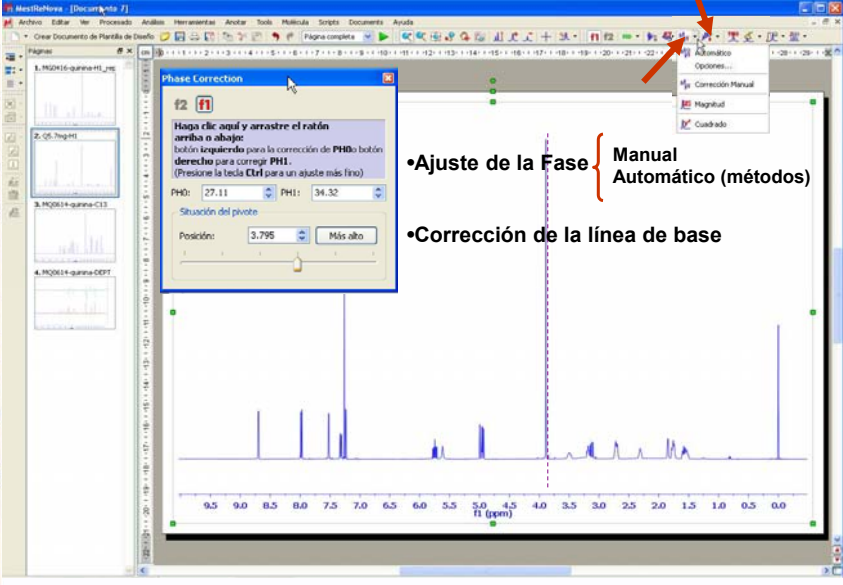


- Abrir Archivos. 
- Ajuste de fase, corrección de la línea de base.  
- Referencia del espectro. 
- Tablas de parámetros 
- Listado de señales.
  - Propiedades y ajustes
- Definición de las zonas de integración. 
  - Propiedades, ajustes y normalización
- Análisis de multipletes.
- Incorporación figuras, ajuste del display, inset 
- Presentación de los resultados
  - Generación de gráficos
  - Incorporación en informes y presentaciones

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

## Ajuste de fase y corrección de la línea de base


 Universitat de Barcelona



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: 27.11 PH1: 34.32

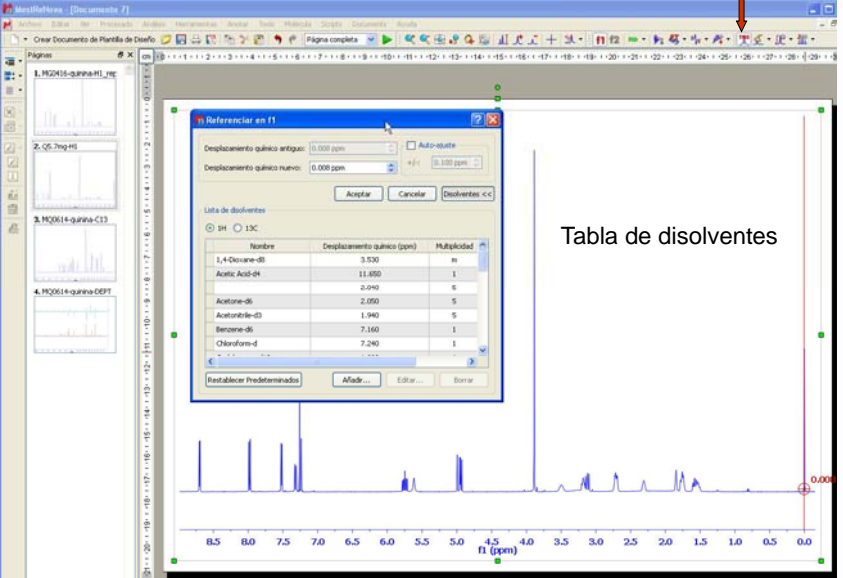
Situación del pivote  
 Posición: 3.795 Mús alto

- Ajuste de la Fase
  - Manual
  - Automático (métodos)
- Corrección de la línea de base

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

## Referencia


 Universitat de Barcelona



Desplazamiento quimico antiguo: 0.000 ppm Auto-ajuste  
 Desplazamiento quimico nuevo: 0.000 ppm +f1 0.100 ppm

Aceptar Cancelar Disolventes c/c

Lista de disolventes  
 1H  13C

Nombre	Desplazamiento quimico (ppm)	Multiplicidad
1,4-Dioxano-d8	3.530	m
Acetic Acid-d4	11.400	1
Aceton-d6	2.050	6
Aceton-d6	2.050	6
Aceton-d6	2.050	6
Aceton-d6	2.050	6
Benzene-d6	7.160	1
Chloroform-d	7.240	1

Restablecer Predeterminados Añad... Editar... Borrar

Tabla de disolventes

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics



## Tablas de parámetros

U  
B Universitat de Barcelona

Información sobre la adquisición del espectro

Parámetro	Valor
Contenedor	HT (100MHz-50)
Armadura	50mm BBO Avance III 1H/13C
Nombre	13C-MNVA-Espectro-Quina-GS-7mg-1H
Fecha	07/03/12
Operador	CSA
Procesado	13C-MNVA-Espectro-Quina-GS-7mg-1H
Visualización	13C-MNVA-Espectro-Quina-GS-7mg-1H

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

## Listado de señales

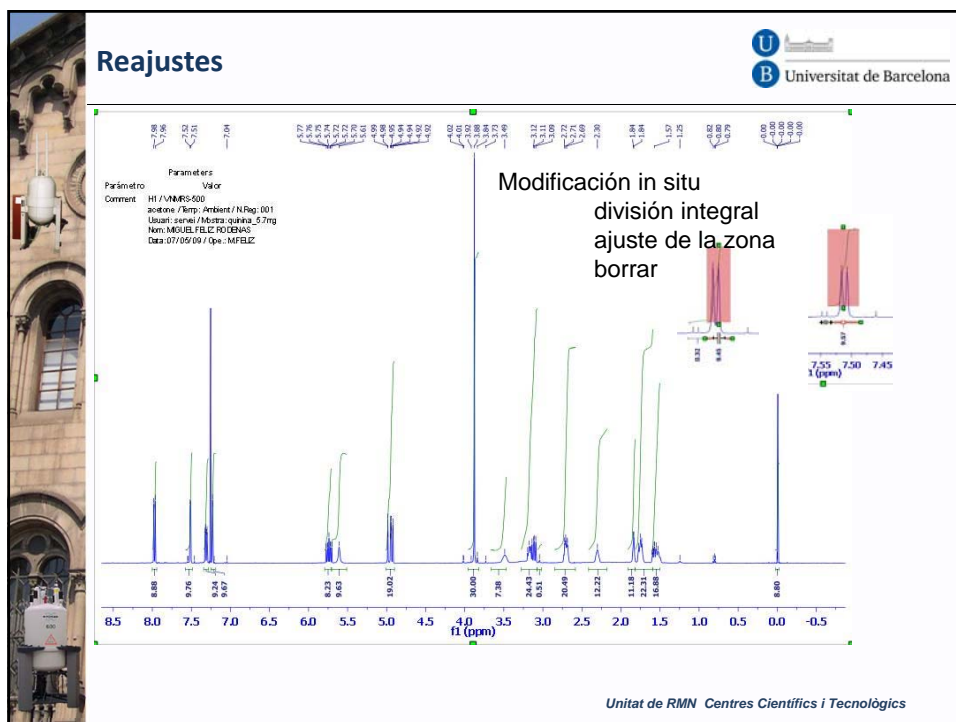
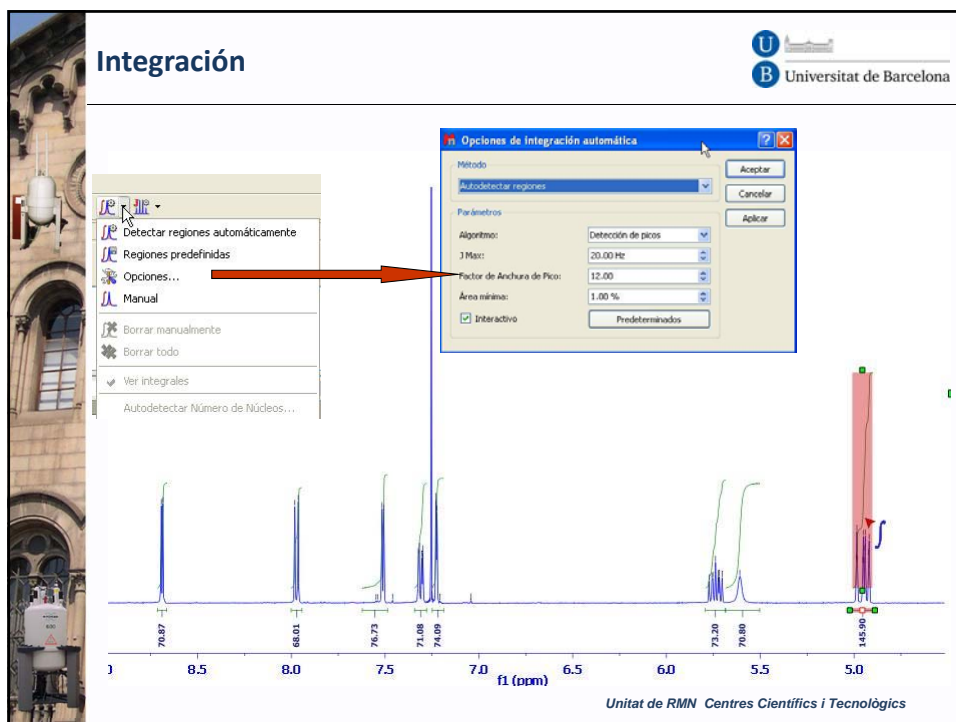
U  
B Universitat de Barcelona

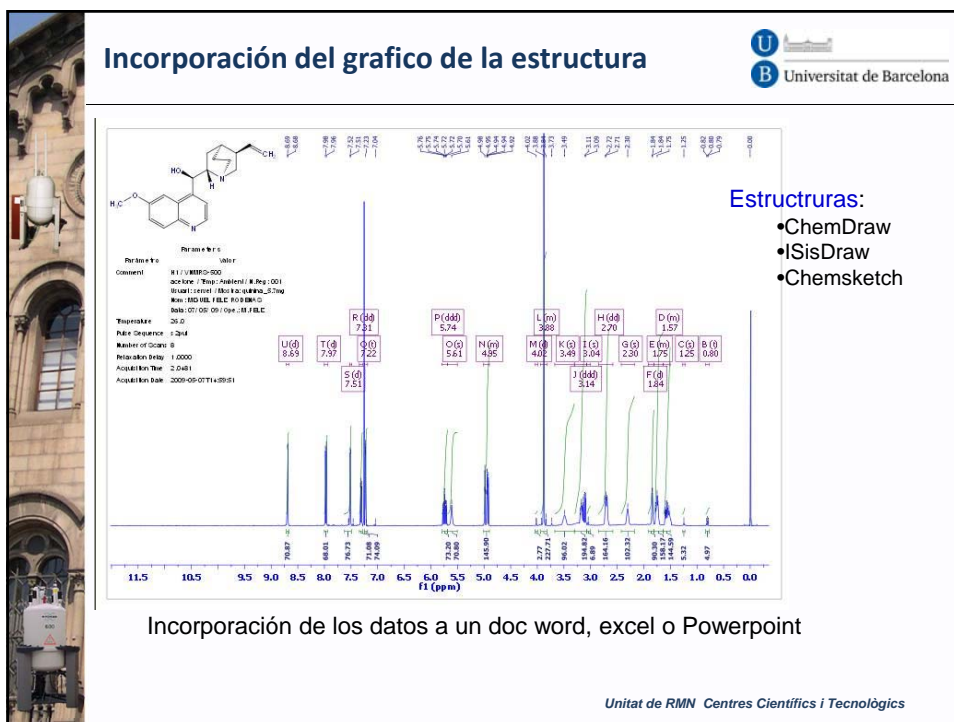
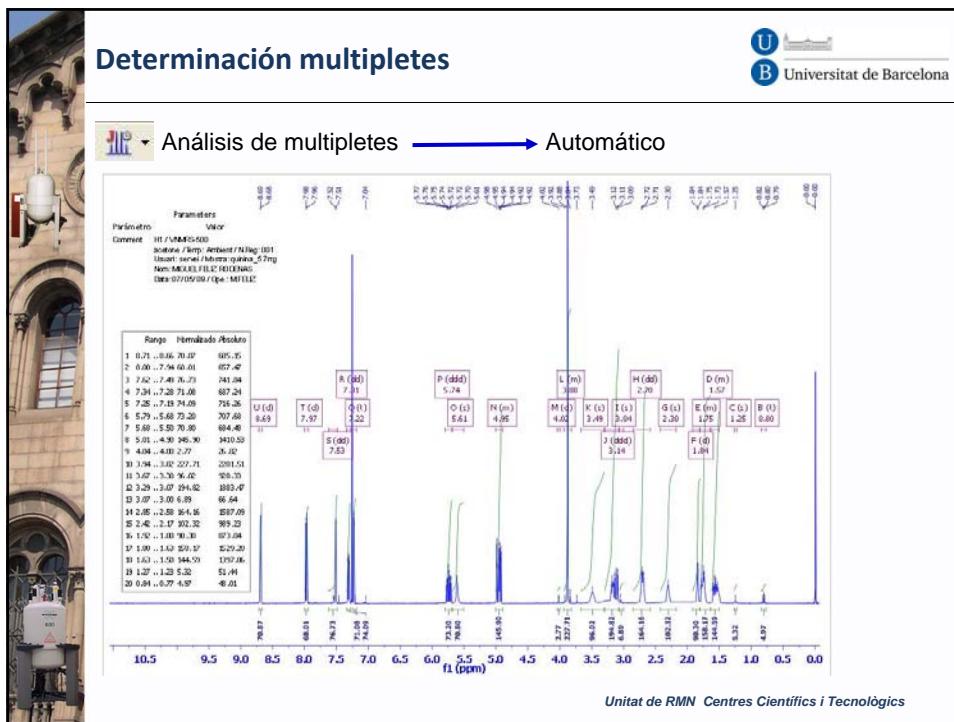
•Automático  
•Opciones  
•Manual  
•Pico a pico

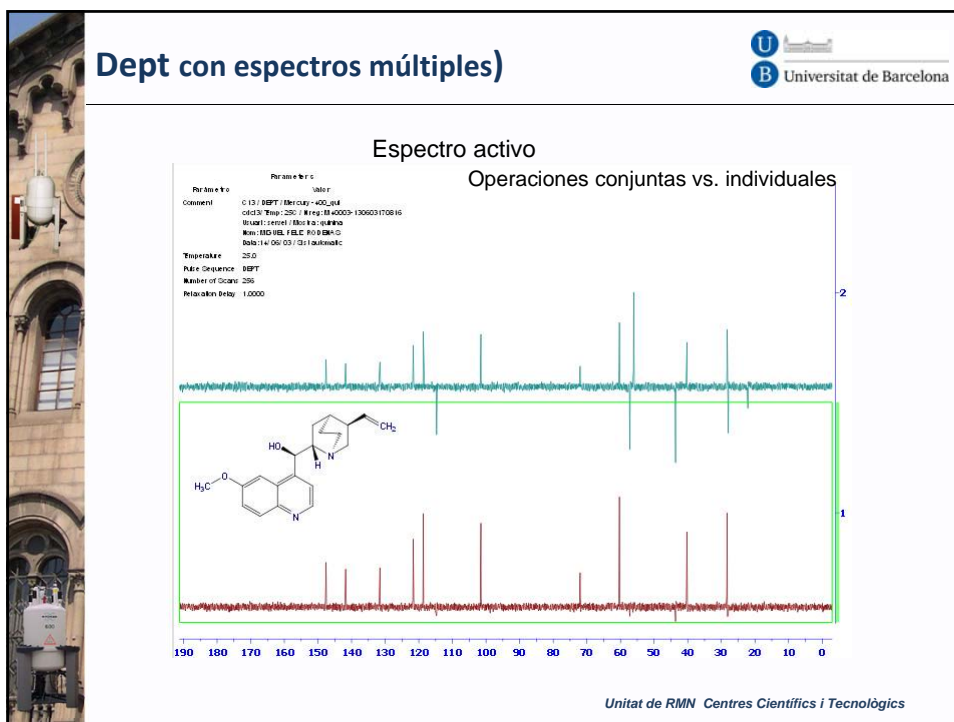
Chemical Shift (ppm)	Integration
~7.5	~1.0
~7.2	~1.0
~6.8	~1.0
~6.5	~1.0
~6.2	~1.0
~5.8	~1.0
~5.5	~1.0
~5.2	~1.0
~4.8	~1.0
~4.5	~1.0
~4.2	~1.0
~3.8	~1.0
~3.5	~1.0
~3.2	~1.0
~2.8	~1.0
~2.5	~1.0
~2.2	~1.0
~1.8	~1.0
~1.5	~1.0
~1.2	~1.0
~0.8	~1.0
~0.5	~1.0
~0.2	~1.0

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics









Exp 2D

U  
B Universitat de Barcelona

- Procesado espectros 2D
  - Dimensión F1 y F2 (¿que importancia tiene?)
  - Representación gráfica (mapas de color, de contorno, etc.)
    - Ajuste de los contornos, paleta de colores.
  - Espectros AV (Cosy, HMBC .....
  - Espectros sensibles a la fase (hsqc, noesy.....)
  - Ajuste de la fase
  - Referencia.
  - Trazas y proyecciones (incorporación del espectro 1D).
  - Optimización del procesado
    - Predicción lineal
  - Listado de señales
  - Operaciones en el Cosy
    - Simetrización
    - Eliminación de la diagonal.

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics


## Dimensión F1 y F2

U  
B Universitat de Barcelona

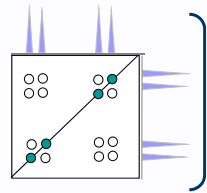
- Control del Procesado
  - Selección de la dimensión
  - Hasta donde llega el procesado?

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

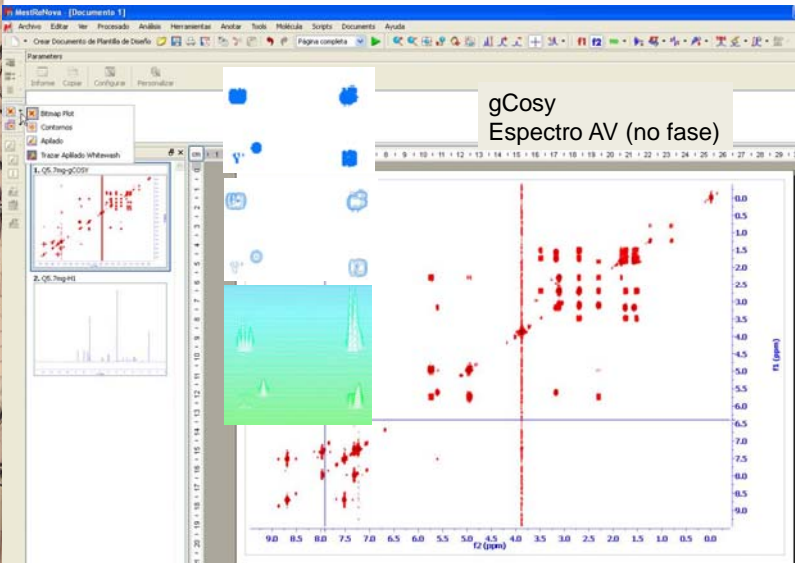
$$A(t_1, t_2) \xrightarrow{FT} S(F_1, F_2)$$


Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

## Mapas de contorno


U  
B Universitat de Barcelona

gCossy  
Espectro AV (no fase)





Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

## Tipos de experimentos 2D




- **Espectros en AV**
  - COSY
  - HMBC
- **Espectros sensibles a la fase**
  - HSQC
  - TOCSY
  - DQFCOSY
  - gHMBCAD (parcial)
  - NOESY
  - .....

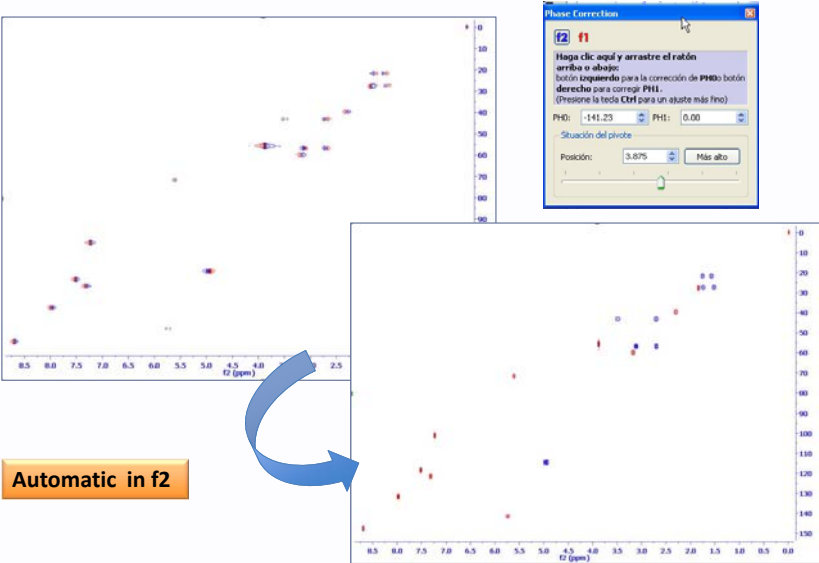

 Puede ser necesario reajustar los parámetros de fase y efectuar una corrección de línea de base



Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

## Ajuste fase (HSQC)

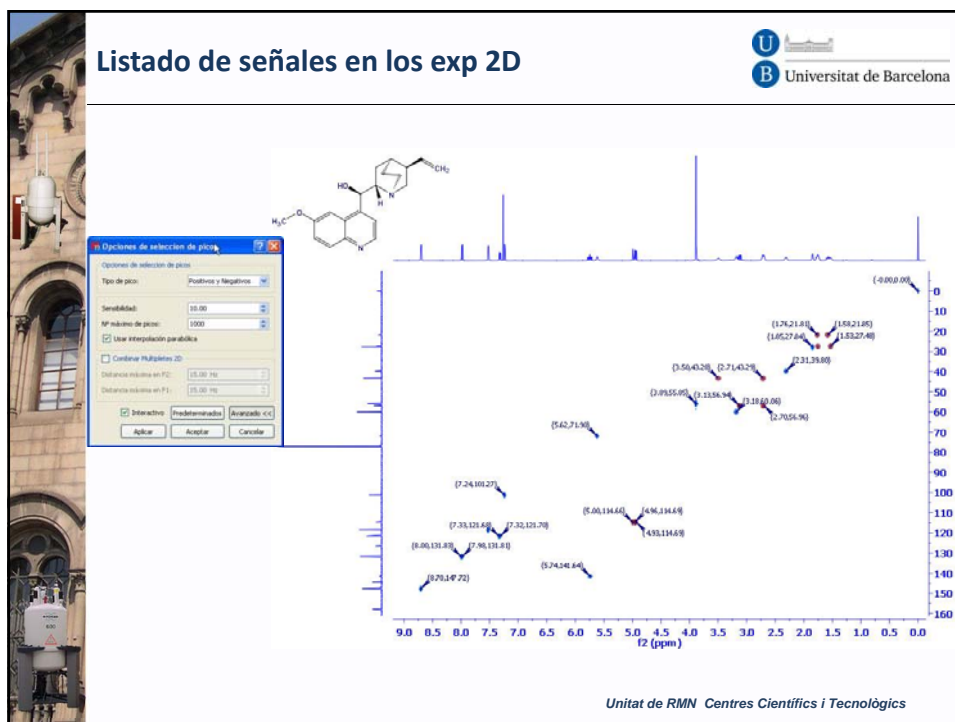




**Automatic in f2**


Phase Correction  
 f2 f1  
 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: -141.23 PH1: 0.00  
 Situación del pivote  
 Posición: 5.07% Más alto

Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

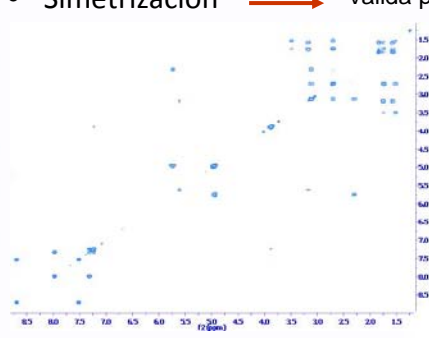




**Opciones en el Cosy -I**




- Simetrización → Valida para el Cosy



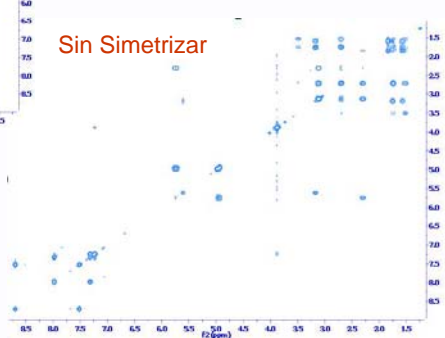
Simetrizar  
Inclinación 45

como COSY  
Resolución-J




Cruces de colas

Sin Simetrizar



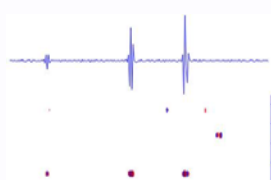
Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics

**gHMBCAD**

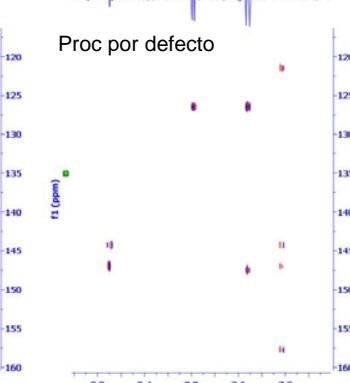


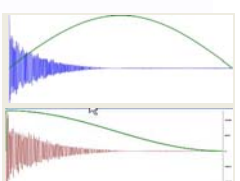
F2: campana de seno  $0^\circ$   
 F1: seno cuadrado  $90^\circ$   
 LP: 2xni en F1

**F2: AV; F1: sensible a la fase**



Proc por defecto





Unitat de RMN Centres Científics i Tecnològics



