




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

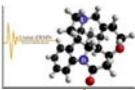


Presentación



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 Tutorials.



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

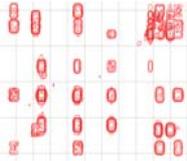
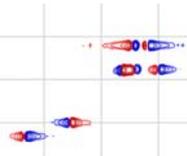


Procesado experimentos 2D



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

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

FT automática

Abrir directorio xx.fid ser

Marcar y arrastrar

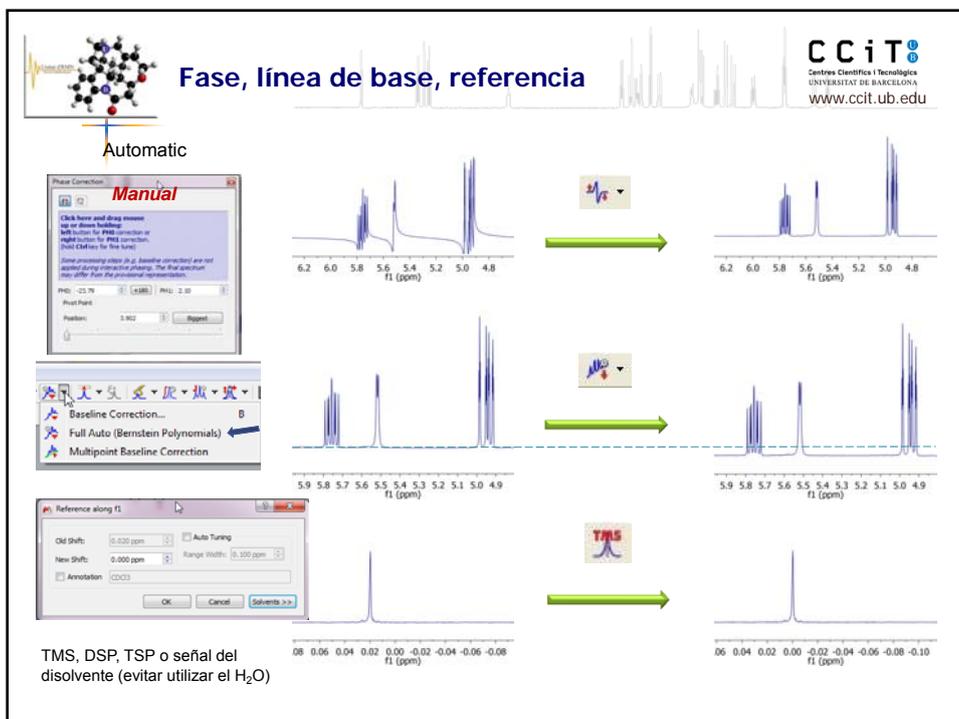
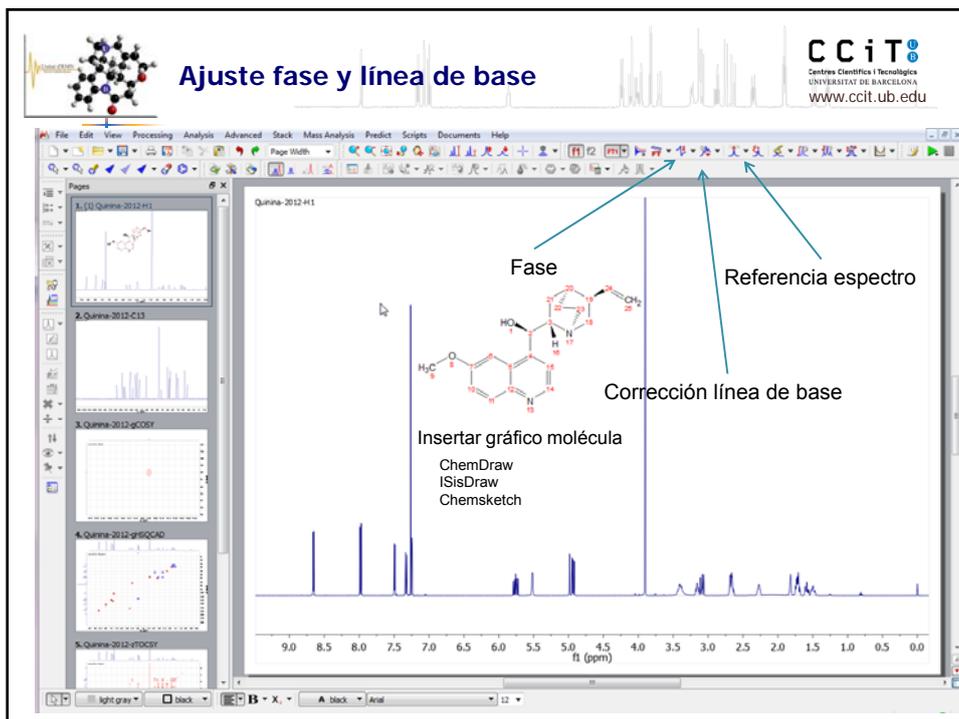
Condiciones procesado

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

Modificación condiciones proc

Ajuste del método

Edit > Preferences > NMR > Import



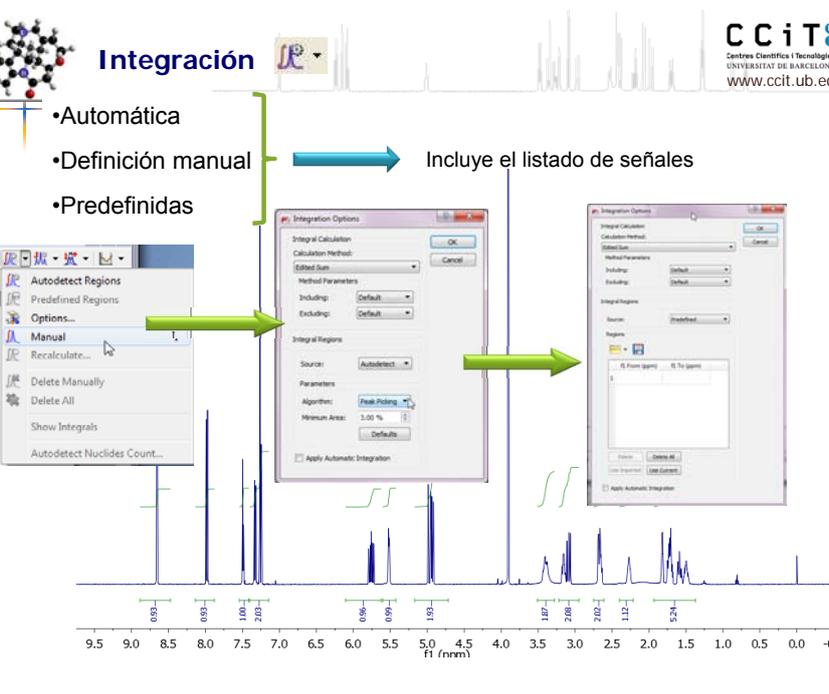
Integración



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

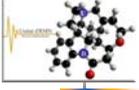
•Automática
•Definición manual
•Predefinidas

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)

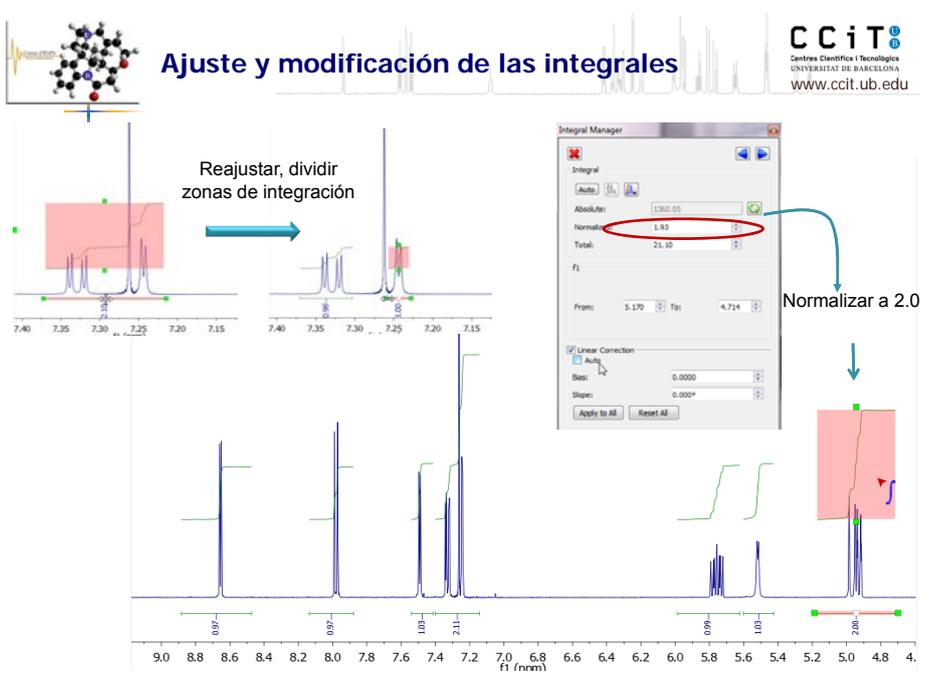
Ajuste y modificación de las integrales



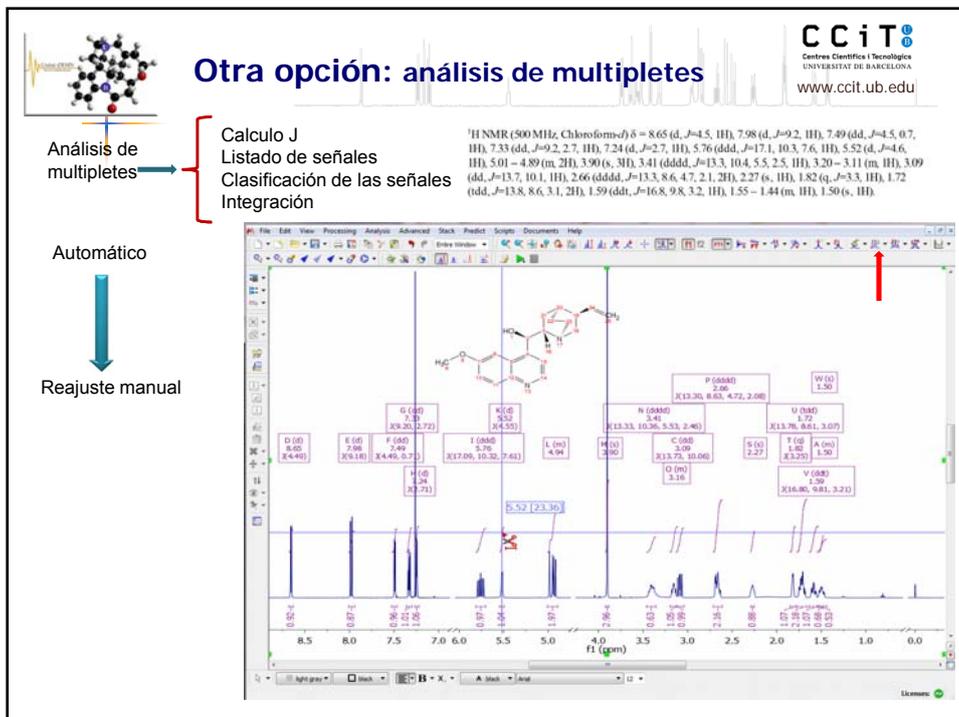
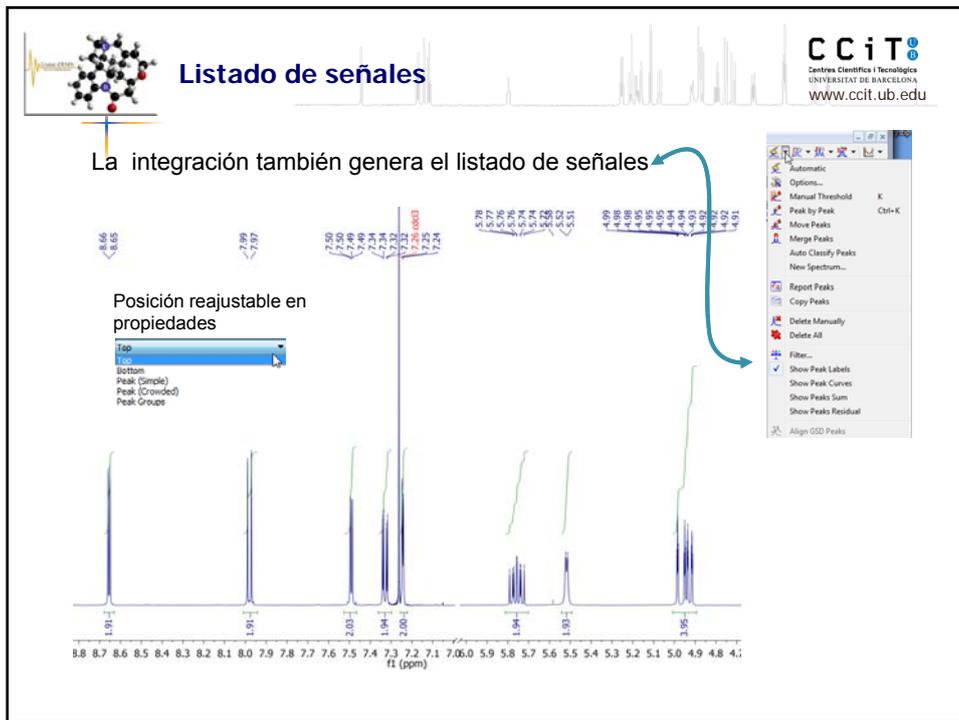
CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

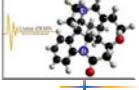
Reajustar, dividir zonas de integración

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 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

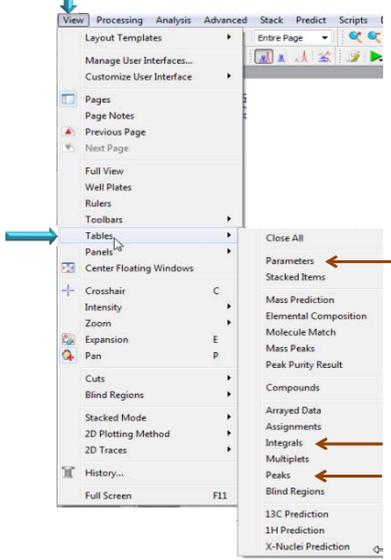


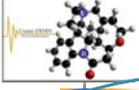


Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Información complementaria

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





Listado integraciones



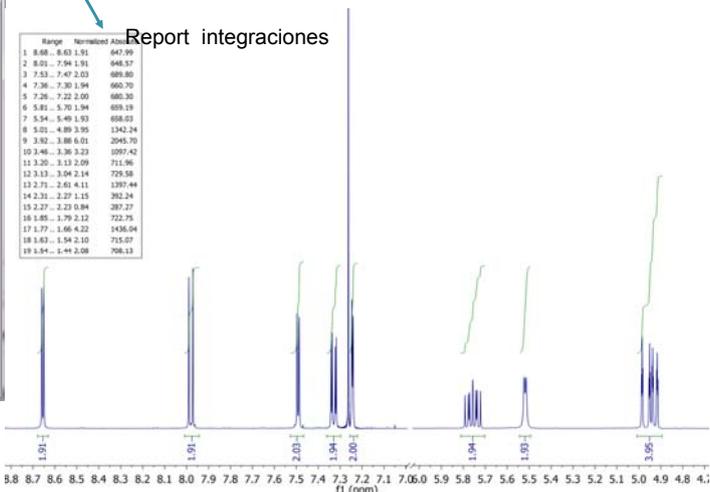


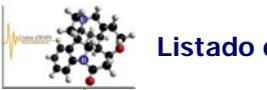
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu



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





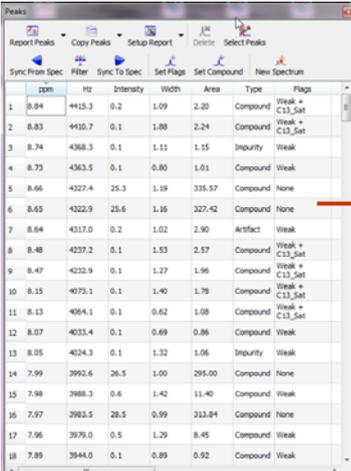
Listado de señales



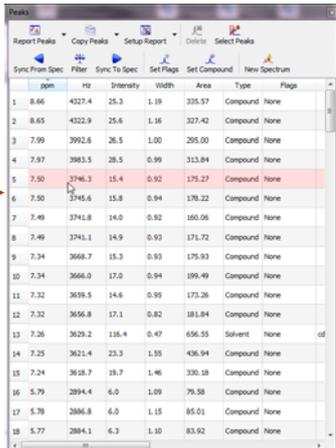
View → Tables → Peaks

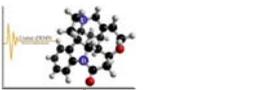
•Informe:
•Copiar:
•Info especial:

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



Filtro

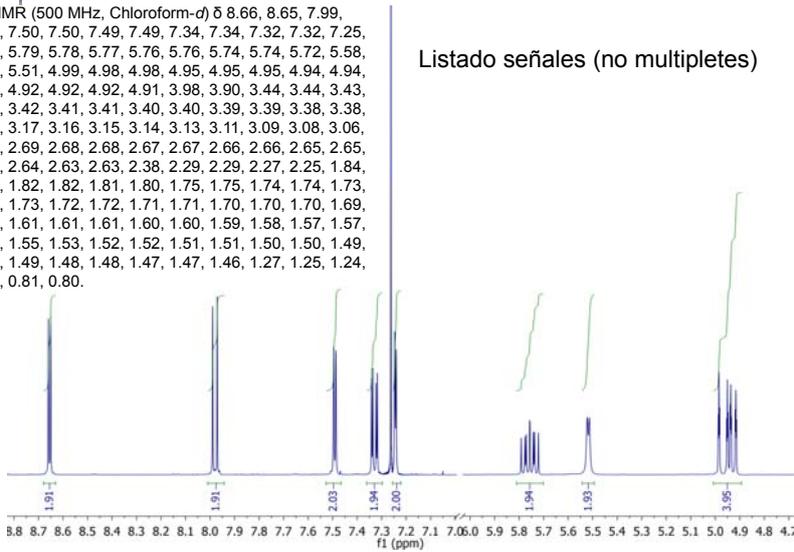




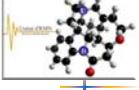
Listado señales (no multipletes)



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

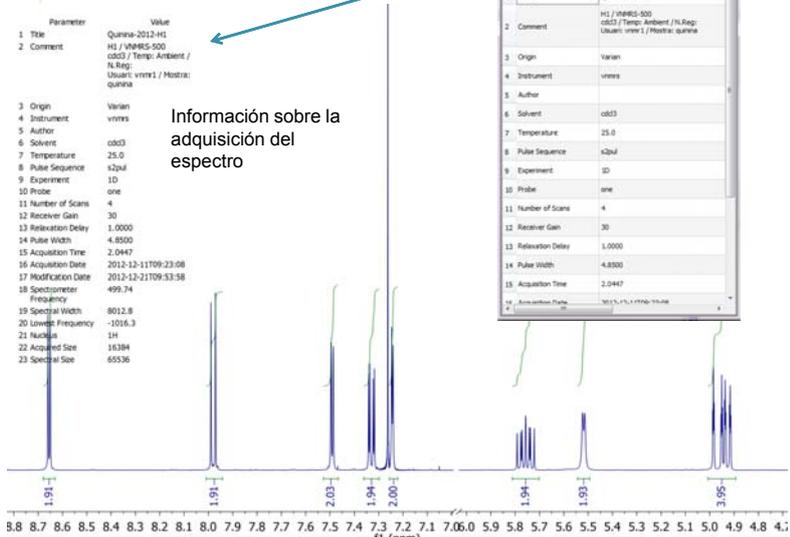


Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

Parameter	Value
1 Title	Quinine-2012-H1
2 Comment	H1 / INMR-500 cd03 / Temp: Ambient / N.Reg: Usuari: vnmr1 / Muestra: 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	2012-12-21T09:53:58
18 Spectrometer Frequency	499.74
19 Spectral Width	8012.8
20 Lower Frequency	-1016.3
21 Nucleus	1H
22 Acquired Size	16384
23 Spectral Size	65536

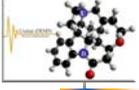
Información sobre la adquisición del espectro

Parameter	Value
1 Title	Quinine-2012-H1
2 Comment	H1 / INMR-500 cd03 / Temp: Ambient / N.Reg: Usuari: vnmr1 / Muestra: 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	2012-12-21T09:53:58
18 Spectrometer Frequency	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

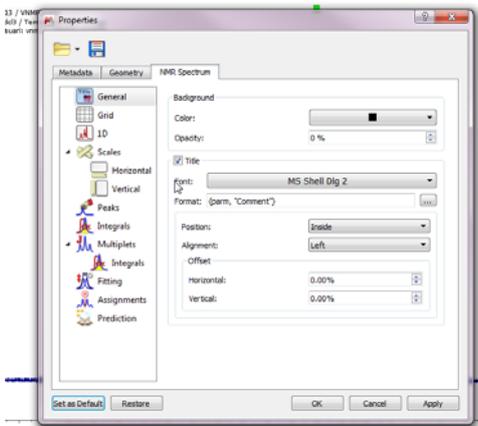


Edit → Propiedades
Botón derecho del ratón



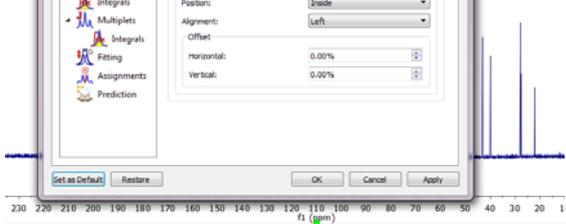
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

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

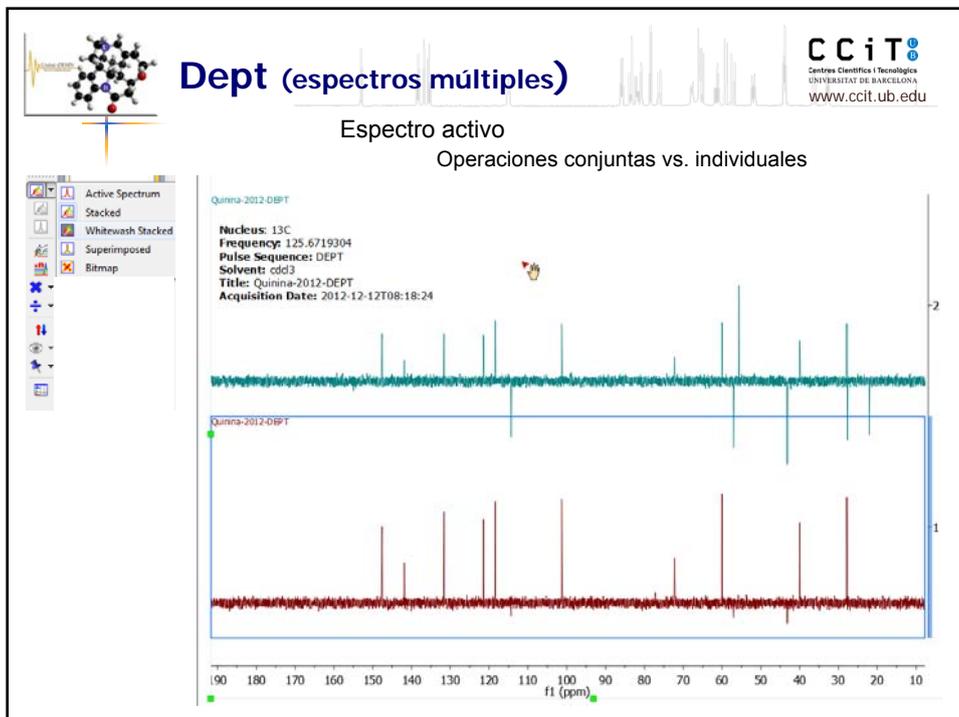
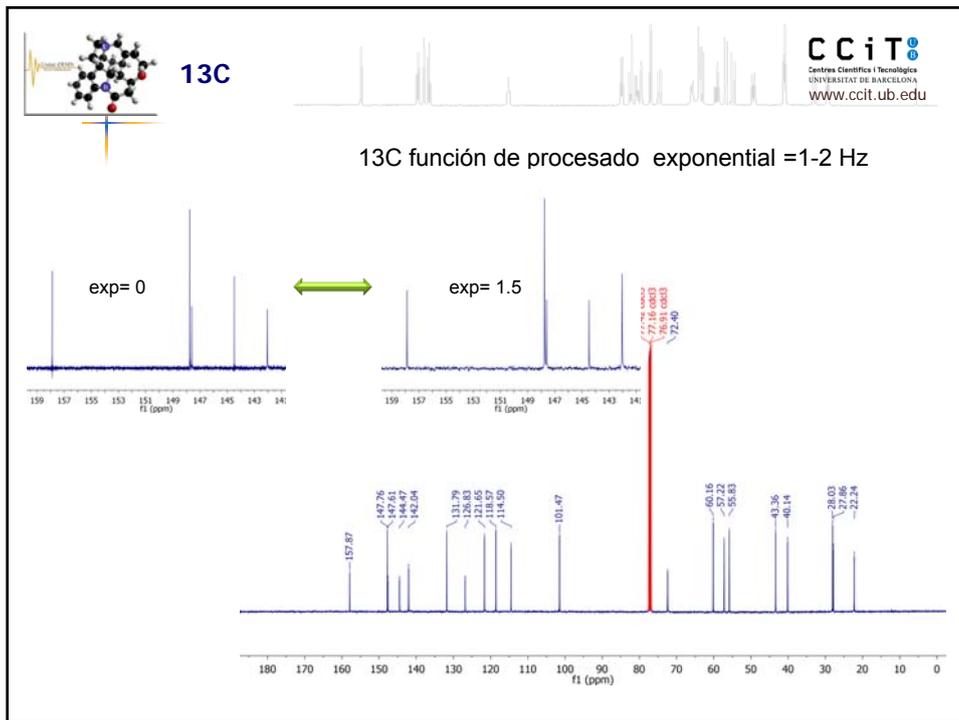


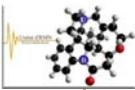
Ajustar las propiedades
Tamaño y color de letra
Escala en los espectros
Formato de picos, integrales, etc

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?

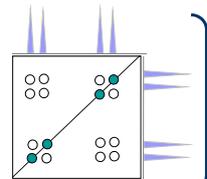
Define donde se aplica el ajuste manual de fase, LP, etc

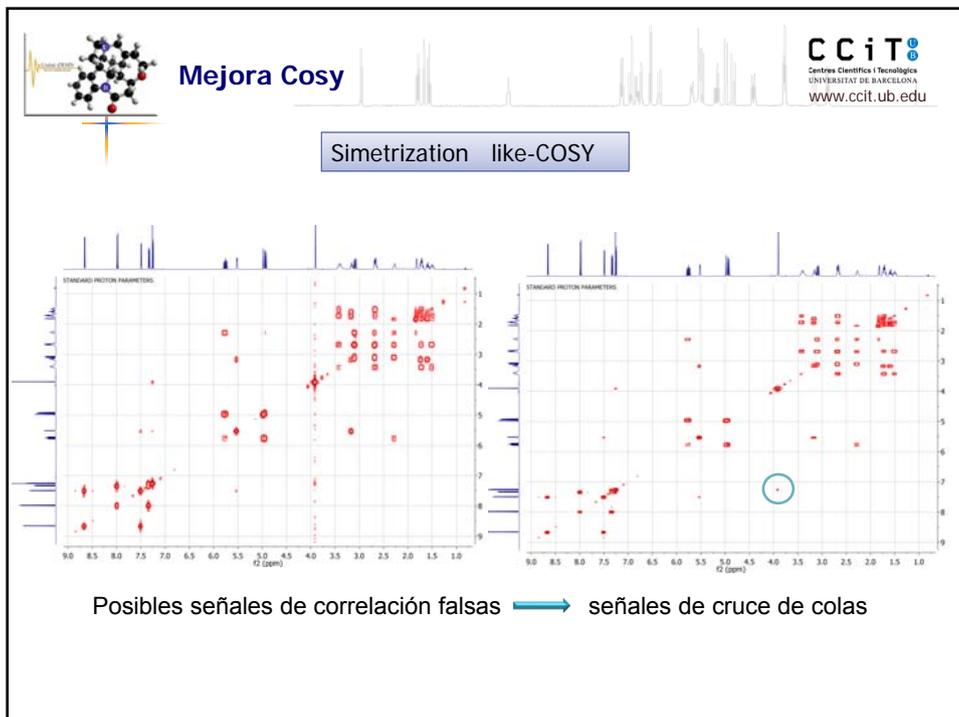
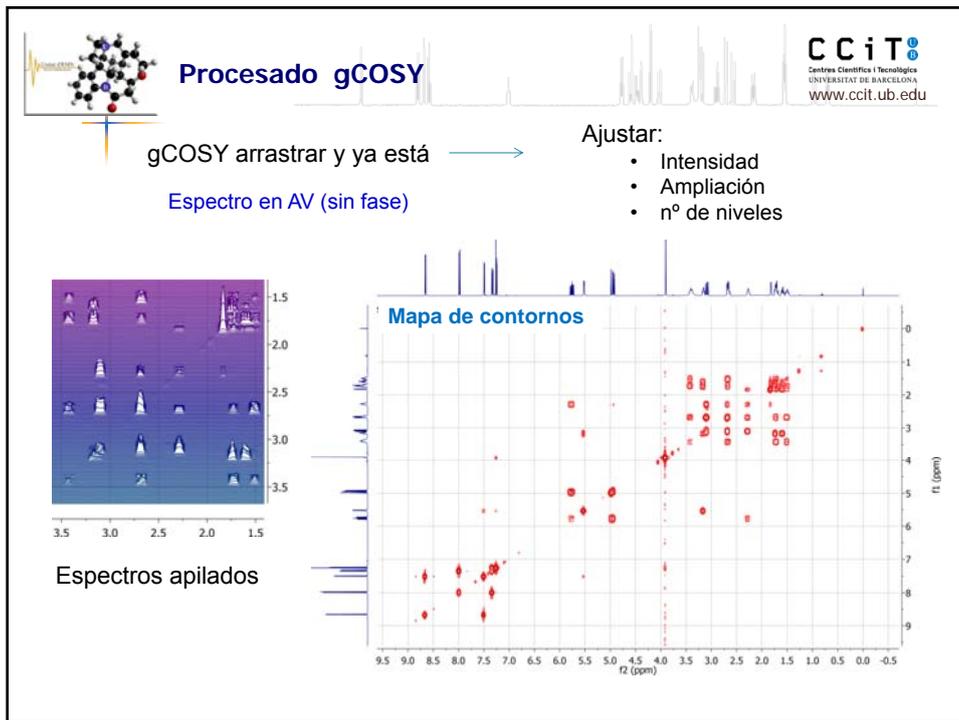


Para seguir el procesado y ver el resultado de las etapas intermedias

La señal obtenida es función de dos tiempos de adquisición

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





Modificaciones de las condiciones de display



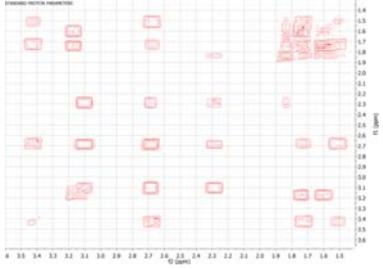
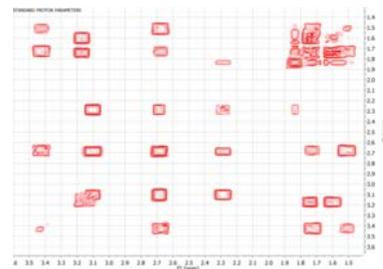


CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

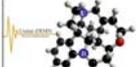


Esquema colores

Ajuste del número de Contornos

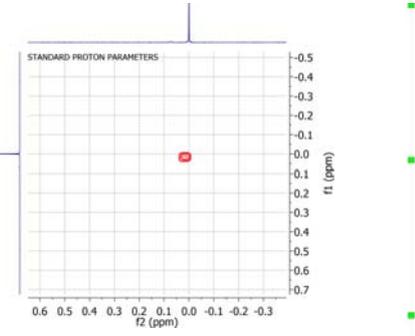
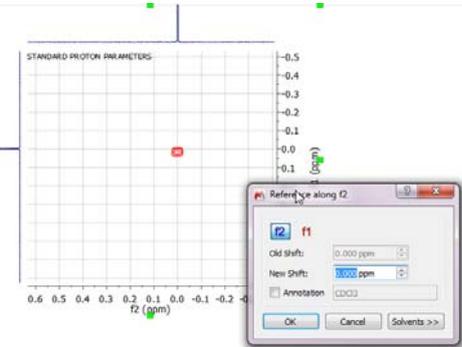
Referencia (TMS, disolvente)

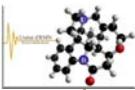




CCiT
Centres Científics i Tecnològics
UNIVERSITAT DE BARCELONA
www.ccit.ub.edu

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

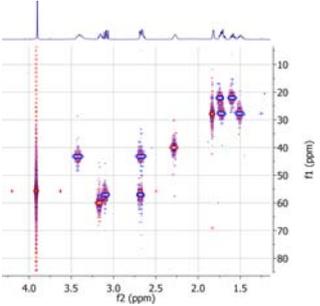





HSQC reajuste condiciones procesado

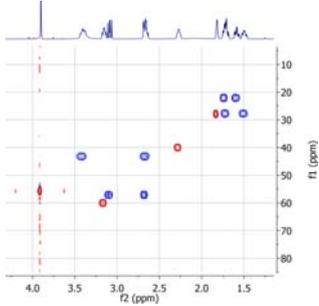


Si se observa → Reajustar condiciones



F1 Gaussian 56.43
F2 Gaussian 7.65



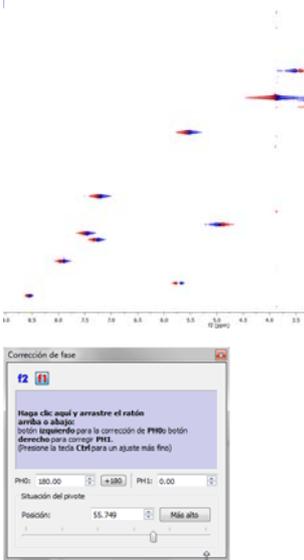


F1 Sine Square 90 °
F2 Sine Square 90 °

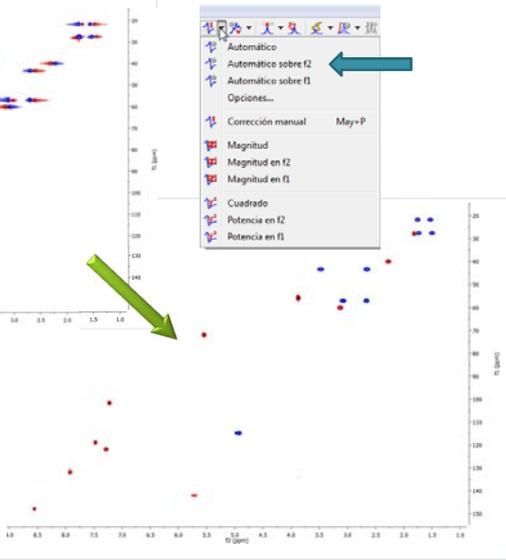


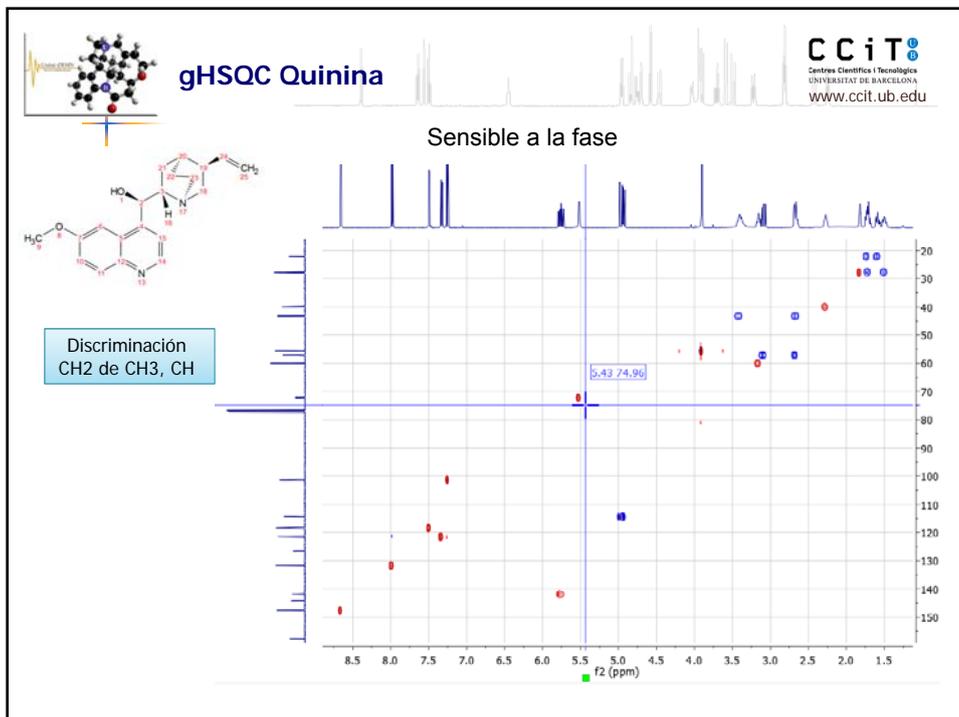
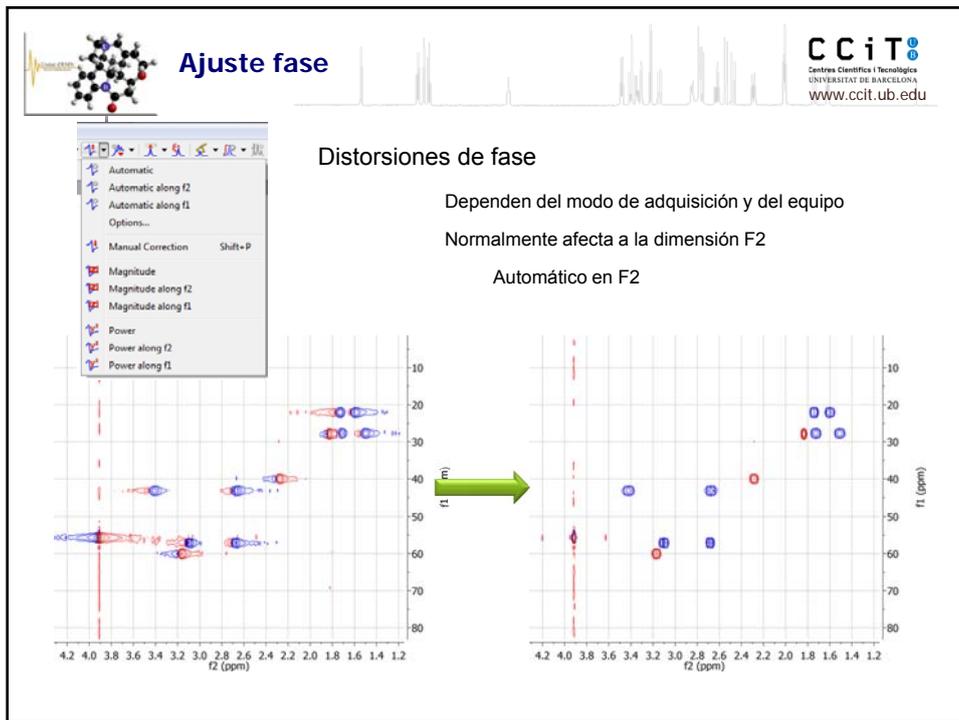
Ajuste fase (HSQC)





- Automático
- Automático sobre f2
- Automático sobre f1
- Opciones...
- Corrección manual May+P
- Magnitud
- Magnitud en f2
- Magnitud en f1
- Cuadrado
- Potencia en f2
- Potencia en f1







Gracias por su atención

Preguntas ???

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

Chemical structure and NMR spectrum logos.

The image features a colorful mosaic background. At the top left, there is a logo for 'Chemical structure' showing a ball-and-stick model of a molecule. To its right is a line graph representing an NMR spectrum. In the top right corner, the 'CCiT' logo is displayed, along with the text 'Centres Científics i Tecnològics', 'UNIVERSITAT DE BARCELONA', and the website 'www.ccit.ub.edu'. The central text 'Gracias por su atención' is written in a blue cursive font, and 'Preguntas ???' is in a bold yellow font with a black outline. The mosaic itself consists of various colored tiles (red, green, blue, yellow) and some painted sections.