

MestReNova 一维谱图处理简明指南

Pablo Monje, Ph D

www.mestrelab.com

中国科学技术大学理化科学实验中心核磁共振与高分子微结构实验室 译

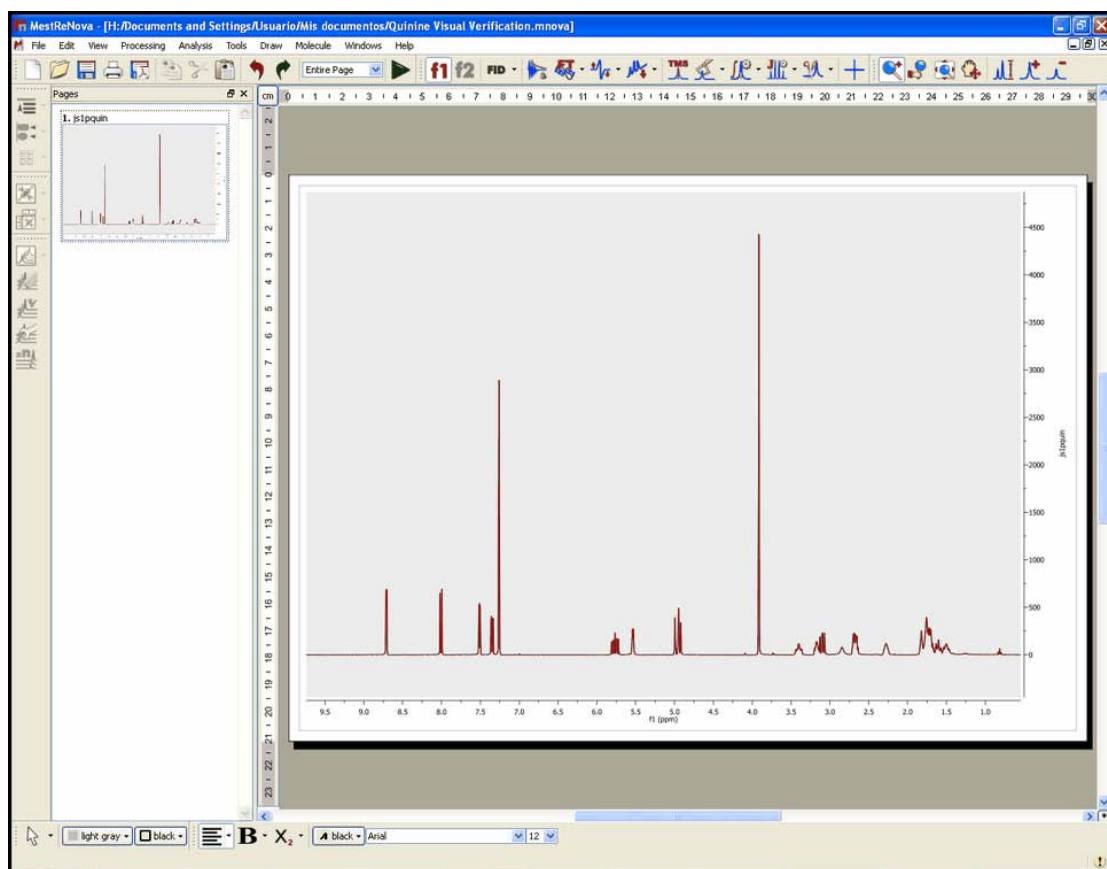
以下操作可以让您方便地处理常规的一维核磁共振谱图。

1、单击 Mnova 图标  运行 Mnova。

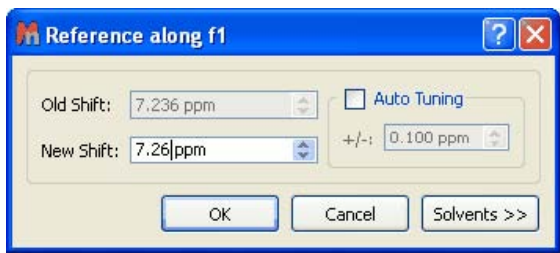
2、进入 '**File/Open**' 菜单，或使用键盘快捷键 **<Ctrl+O>** (Cmd+O in Mac)，或单击工具栏的 '**Open**' 按钮。





3、找到您磁盘上需要处理的实验数据，打开实验数据文件夹，打开名为 **fid** 的文件。Mnova 界面上将会出现在谱图上已经经过初步处理的谱图。

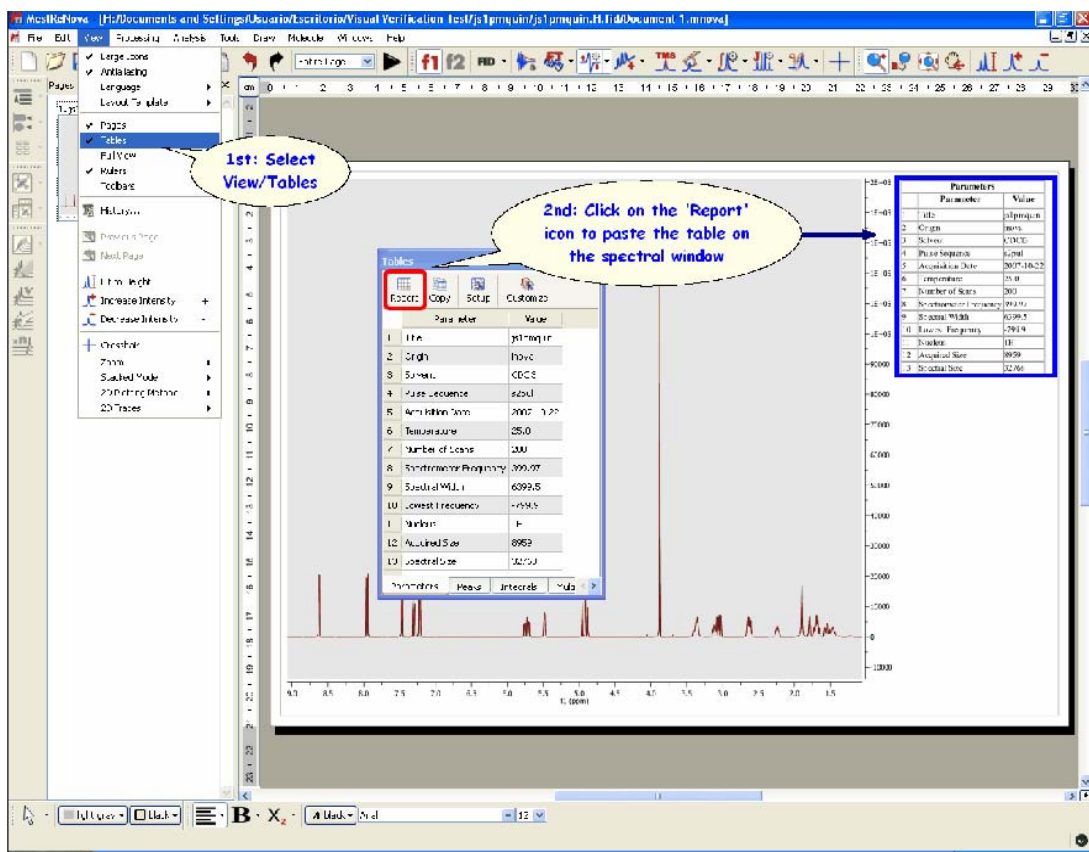


4、标定化学位移。单击工具栏的 '**Reference**' 按钮 ，选择要用来定标的峰。



5、调整相位和基线。单击工具栏的'Phase Correction'按钮  和'Baseline Correction'按钮 。

6、粘贴参数表格在谱图上。在菜单栏上按以下操作：View/Tables/Parameters。出现对话框之后，单击'Report'按钮：



译者注：如无特别需要，此步骤可以不做。

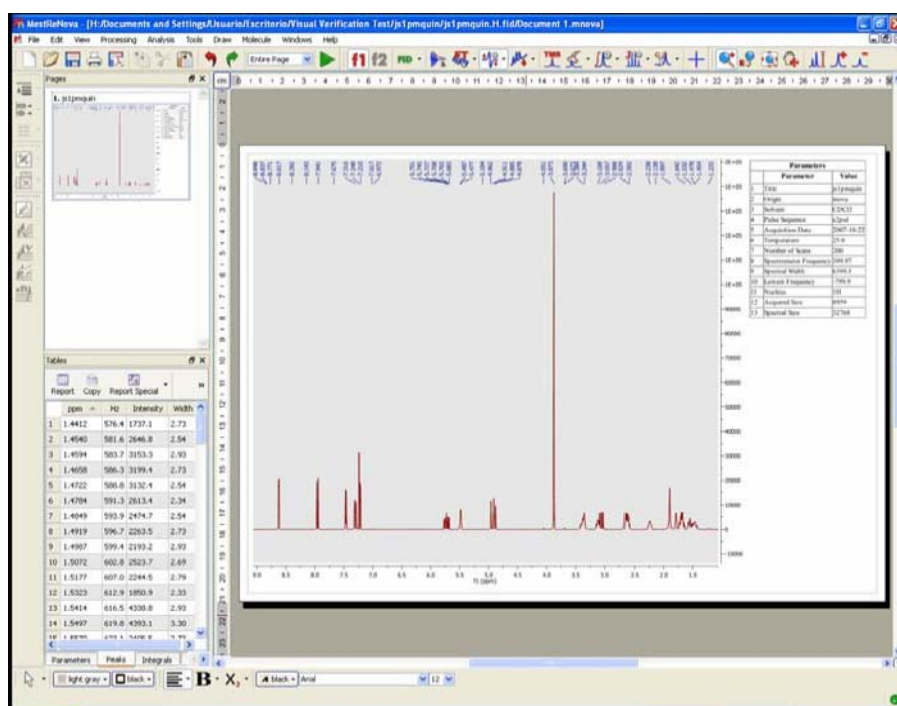
建议在谱图上手动添加样品编号，其操作方法是：通过菜单操作 Annotate/Text，或按键盘 T 键，在谱图的某一位置手动添加一个文本框，加入样品编号。


7、标注各峰化学位移。单击工具栏的'Peak Picking'按钮 ，自动标注各峰化学位移。

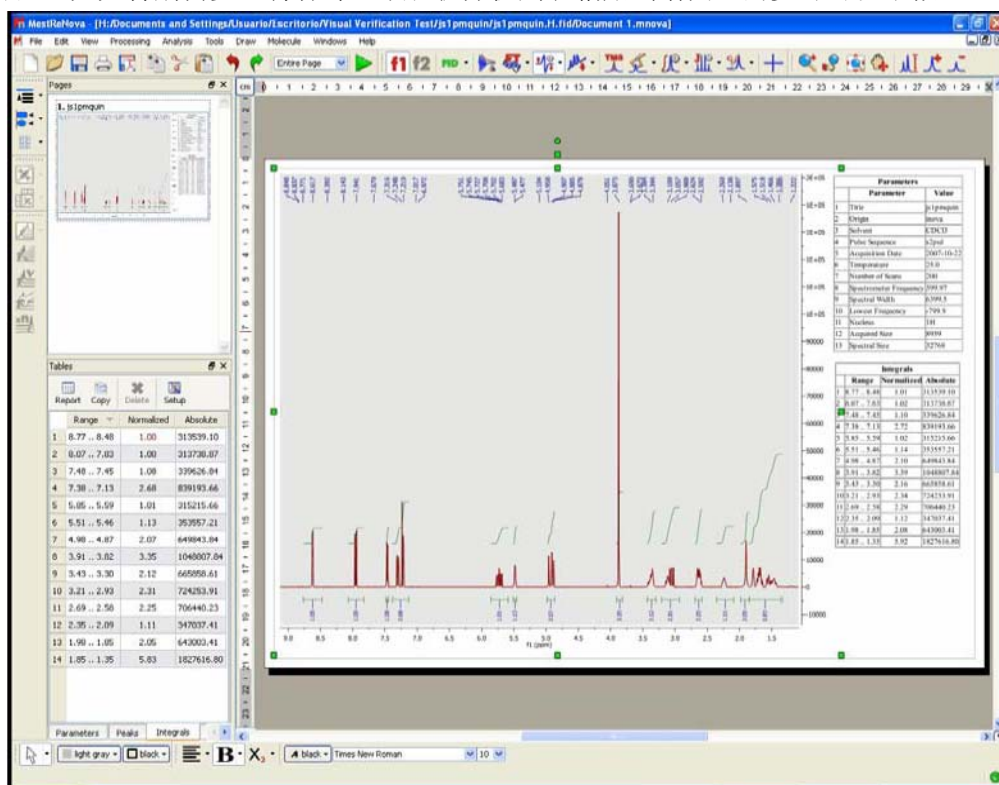
译者补充：如果您认为自动标注标出的峰太多或太少，可以选择手动标注，其操作方法是：

单击工具栏的'Peak Picking'按钮右边的小箭头 ，在其中选择 manual，这样便可以


能过鼠标选择区域进行标注。



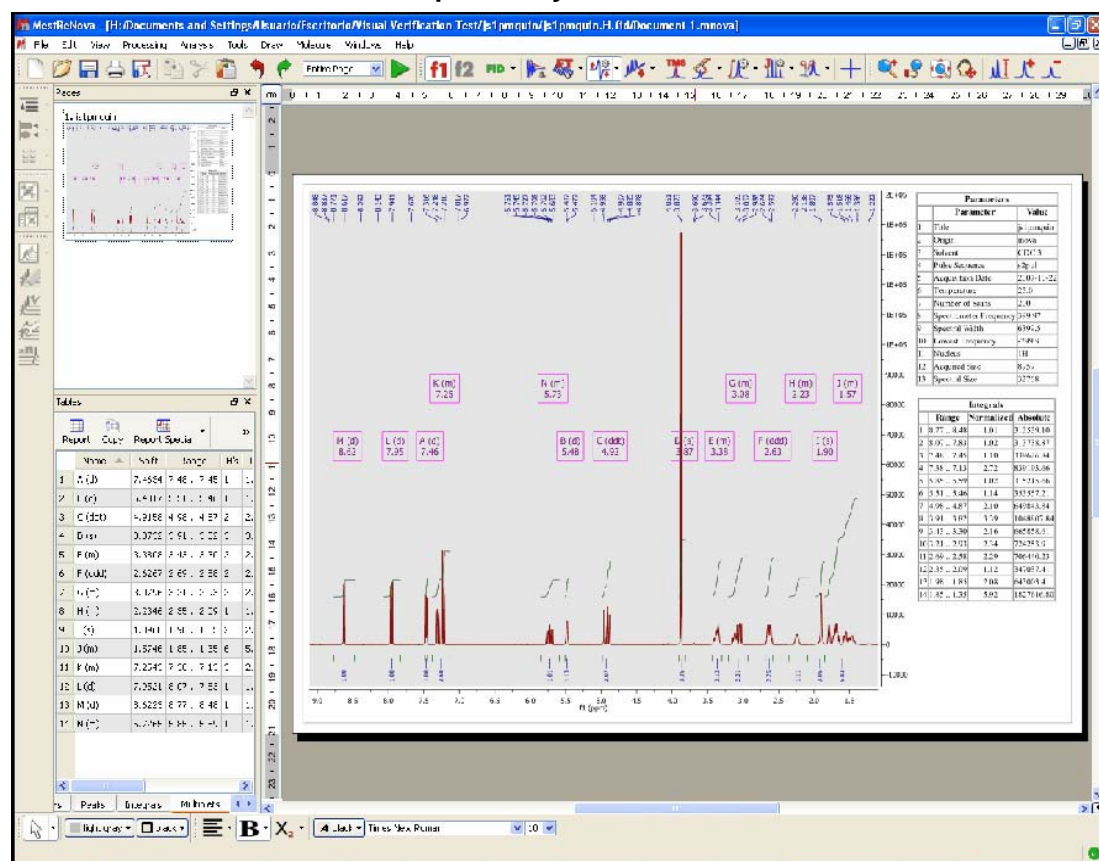
8、积分。单击工具栏的'Integration'按钮 ，谱图将会被自动积分。积分数值显示在各峰的下面。详细的各峰区域和积分值列表可以通过菜单操作：View/Tables/Integrals 将其显示出来。单击'Report'按钮可将其粘贴到谱图上。
译者注：如无特别需要，将各峰区域和积分值列表粘贴到谱图上的步骤可以不做。




译者补充：如果您认为自动积分可能会不准确，可以选择手动积分，其操作方法是：单击工

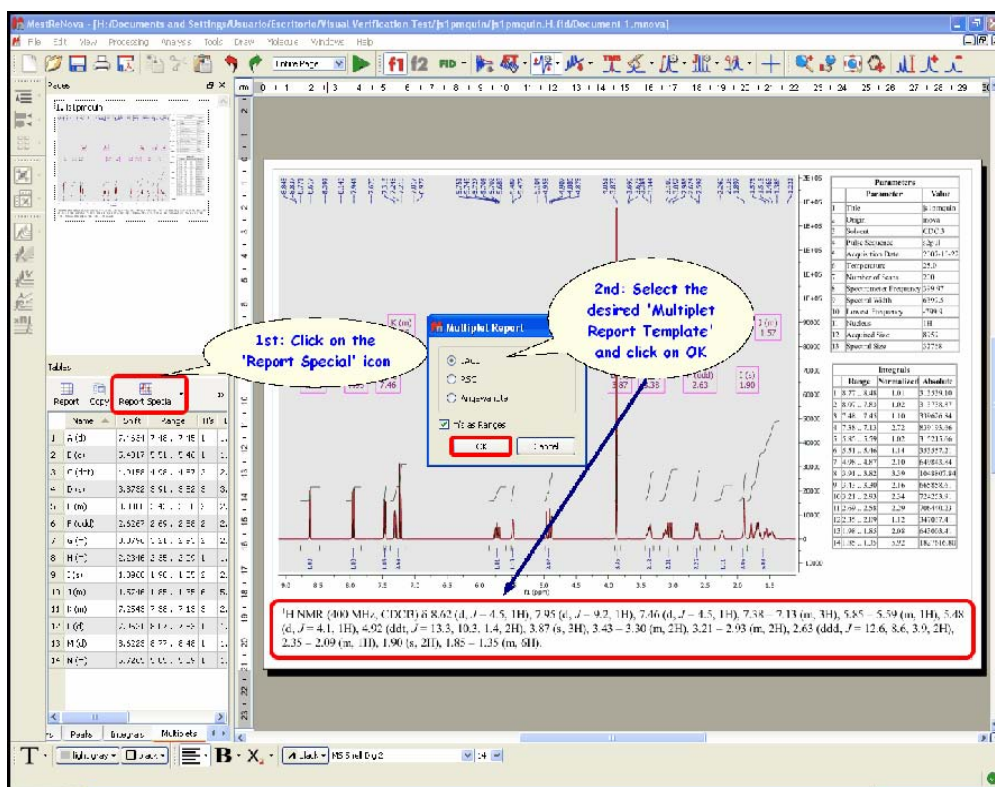
具栏的'**Integration**'按钮右边的小箭头，在其中选择 **manual**，这样便可以过鼠标选择区域进行积分。

9、您可以通过单击工具栏的'**Multiplet Analysis**'按钮自动进行多重峰分析。





10、您可以输出各种格式的多重峰自动分析结果。单击工具栏的'**Multiplet Analysis**'按钮右

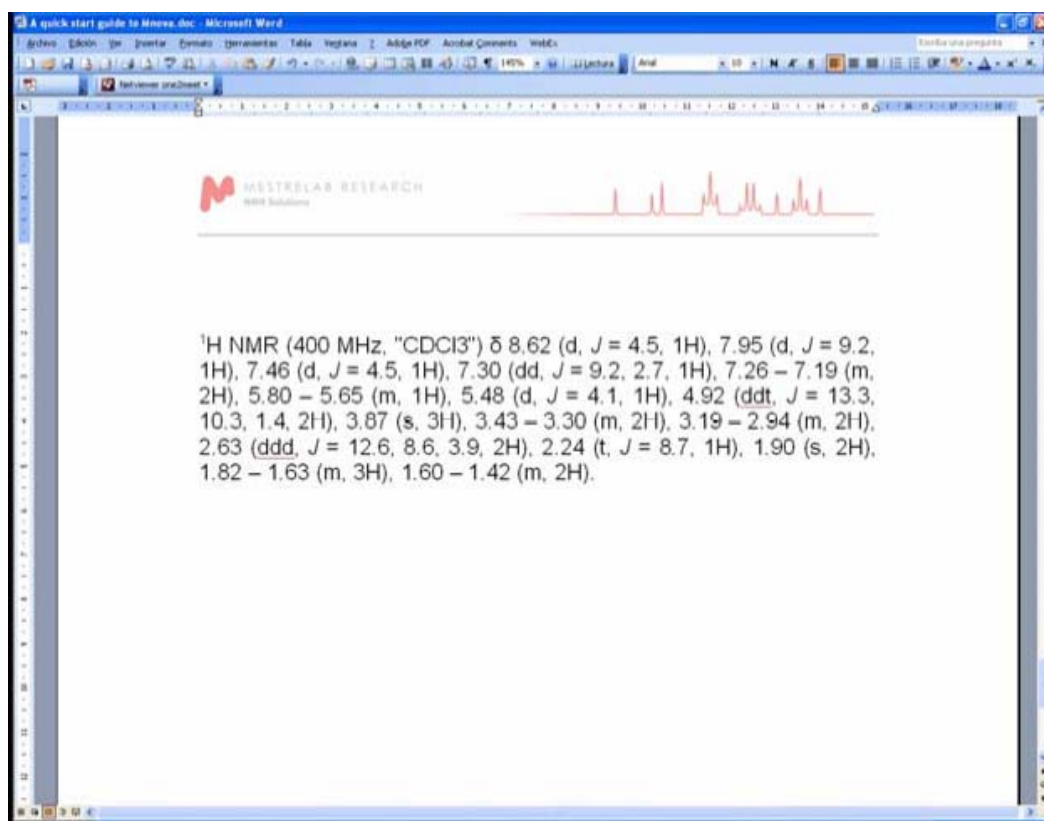
边的小箭头，在其中选择 '**Report**'，出现一个对话框，您可以选择您所需要的模板（JACS, Royal Society of Chemistry and Angewandte）。



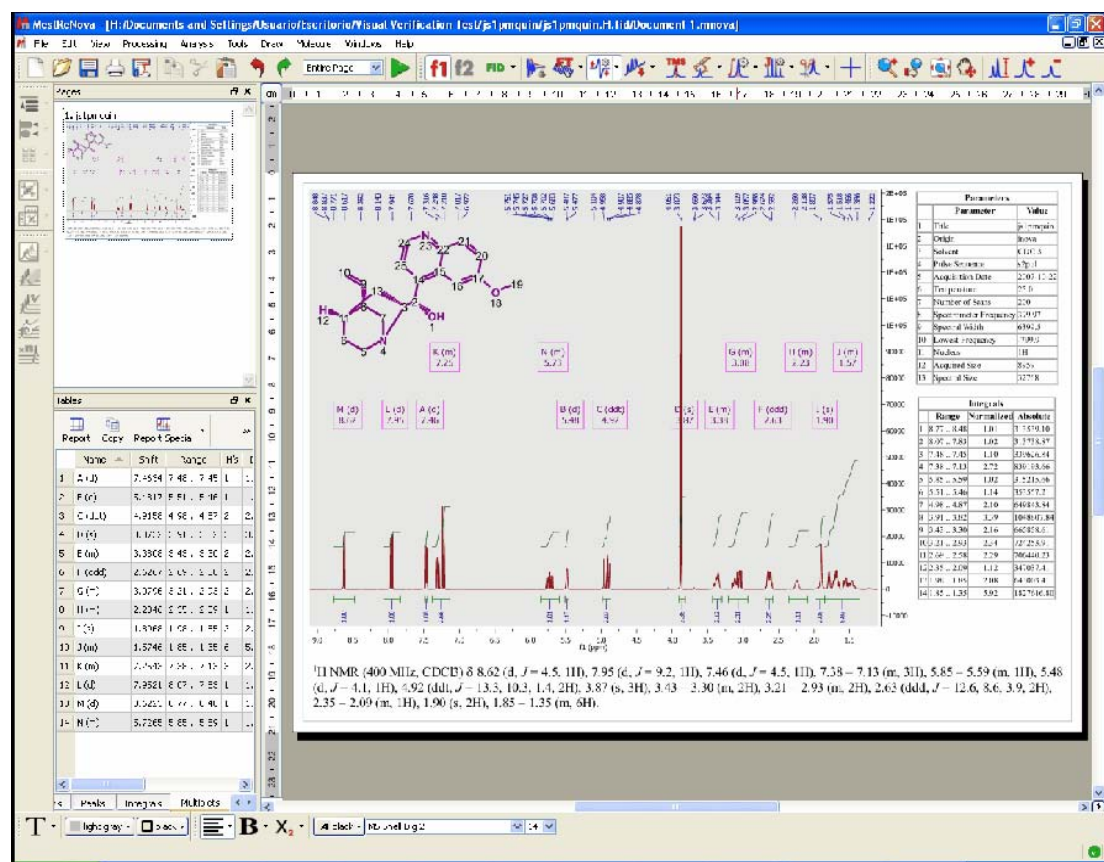
11、您可以通过单击工具栏的'Multiplet Analysis'按钮右边的小箭头，在其中选择

 Report
 Copy

'copy'，将多重峰自动分析结果复制到剪贴板，粘贴到别的文档中去。



12、您也可以很容易的从别的软件中（如 Chemdraw, IsisDraw or Chems sketch）将化学式粘贴到 Mnova 的谱图上来。



译者补充:

一、工具栏中与一维谱图处理有关的各图标释义。



- 1: 放大谱图;
- 2: 缩小谱图;
- 3: 显示谱图全部;
- 4: 手动输入数值放大谱图;
- 5: 放大谱图之后, 移到观察谱图的区域;
- 6: 为谱图的某个小区域做一个放大扩展图;
- 7: 调整谱图的峰高至适合屏幕;
- 8: 增大峰强;
- 9: 减小峰强;
- 10: 准确显示谱图上某一点的信息;
- 11: 裁减谱图, 右边小箭头有可选项;
- 12: 调出 FID 数据, 右边小箭头有可选项;
- 13: 对 FID 数据进行傅立叶变换, 右边小箭头有可选项;
- 14: 调整相位, 右边小箭头有可选项;
- 15: 调整基线, 右边小箭头有可选项;
- 16: 化学位移标定;
- 17: 标注化学位移, 右边小箭头有可选项;
- 18: 积分, 右边小箭头有可选项;
- 19: 多重峰分析, 右边小箭头有可选项。

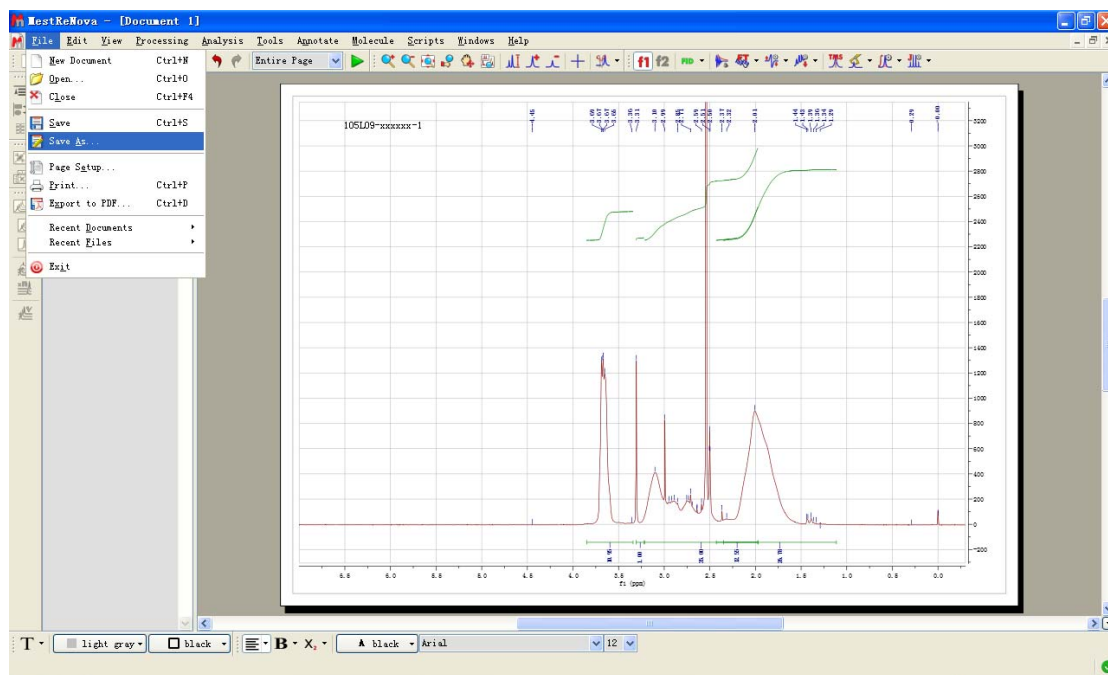
二、部分快捷键列表

+	增大峰强
-	减小峰强
Z	激活放大模式 一次'Z': 水平放大; 两次'Z': 垂直放大 三次'Z': 区域放大
SHIFT+Z	激活缩小模式, 按键次数功能同上
X	激活裁减模式 一次'X': 水平裁减; 两次'X': 垂直裁减
P	激活平移模式 一次'P': 普通平移; 两次'P': 水平平移 三次'P': 垂直平移


Space Bar	临时激活平移模式
ESC	取消工具栏选择
SHIFT+键盘上键	增大峰强
SHIFT+键盘下键	减小峰强
鼠标滚轮	增大减小峰强
F	显示谱图全部
M	手动输入数值放大谱图
H	调整谱图的峰高至适合屏幕
T	文字注释
E	为谱图的某个小区域做一个放大扩展图

三、谱图输出

Mnova 处理的谱图可输出为多种格式 (pdf、jpg、txt 等)，通过菜单操作：File/Save As，可以选择输出格式。



四、谱图打印

通过菜单操作：File/Print，或单击工具栏按钮 ，或通过快捷键 Ctrl+P，可以打印

出 Mnova 处理的谱图。由于现在大家使用的普遍是黑白打印机，为了保证打印质量，建议将谱图上的各种图形的颜色改为黑色。其操作方法是：通过菜单操作：**Edit/Properties**，或在谱图上双击，或在谱图上单击右键选择 **Properties**，出现 **Properties** 对话框，可以调整谱图上各种图形的颜色、线型等内容。

