



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 MastReliova 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仪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。

Old Shift:	7.236 ppm	Auto Tuning
New Shift:	7.26 ppm	+/-: 0.100 ppm 🗇

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

按钮パ・

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。

2 🖬 🖨 🖪 🖄 🖉 🔊 🤊	Ertre Page		1 f2 mo ·	1- 42 · 1/2	Nº I	至•此•1	E-37.+	St = 9 - 93 (2	1 L L
hages 🖸 X [cm	0 11 12	3 + 4 + 6	6 1 7 1 8 1	8 + 10 + 11 + 12	1.13 1.14 1.1	5 + 16 + 17 + 11	0 + 10 + 20 + 21 +	22 + 23 + 24 + 26 +	26 + 27 + 28 + 2
L plandal	(INCO)	* * 5 78				EGA ANASK	-	(^{)a-a} [,	for associa re
	411	1114	10 4	20 JU 12		VG 1274		III = 01 IIII III = 01 1 Non-same III = 01 2 Non-same III = 01 10 Non-same III = 01 10 Non-same III = 01 12 Non-same III = 01 12 Non-same III = 01 13 Non-same	Jone Wert Values IP (Pression) Inter-spectra Marrie S.Qual Marrie S.Mual Marrie S.Mual
iklen Øx 9								- 90008 - 79808	
Report Copy Report Special * *								-60000	
ppm + H2 Internety Width + 17 1 1.4412 576.4 1737.1 2.73								-0000	
1.4094 503.7 3153.3 2.90 4 1.4658 506.3 3199.4 2.73 10								- 3100	
1.1752 3000 31.0.7 2.34 p 6 1.4704 591.3 261.3.4 2.34 - 7 1.4049 592.9 2474.7 2.54 1 8 1.4919 596.7 2263.5 2.73 g							-lun		
1.4907 599.4 2193.2 2.99 10 1.5072 602.6 2523.7 2.69 1 11 1.5177 607.0 2244.5 2.79 R	nin ak	- <u>1</u> - 25	10 6A	ά το	45 44	ń ń	ù ù ù	-13098	
12 1.5523 512.9 1650.9 2.33 13 1.5414 616.5 4330.8 2.99 14 1.5497 619.8 4393.1 3.30	-								
¢ > 8									
Parameters Peaks Integrals		100							

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,这样便可以能过鼠标 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。

Mes:	n MestReNova - [H:Macuments and SettingsAkwarloffsertinrio/Hisual Verification Test/[e1 pmguin/l-f.fd/Document 1mova] 📰 💽											e de la companya de l
🗶 Fle El View Processing Anaryss Tools Draw Molecus Will-ra Hels 📃 🖉 🖉												
	🌽 🖬 🕹 🔣 🛅 🕈 🛅 🏓) 🥐	Folim Page	× 🕨	f1 f2	FID - 🎠 🐻 -	12 · 10	· T & 1	尼・脂・以	· + 🔍	19 🗐 🕼	I.L.
	Peces dP ¥	m U	11 2	1 1 4	15 61		P 1 12 10 1	14 1 15 10 1	NU TU LINE LA	6 12 122	201024 20102	6 22 1 20 1 29 🛄 🖍
	Litigandi ori Tanang (Jang Kang Kang Kang Kang ang Tanang Kang Kang Kang Kang Kang Kang Kang	1 1 2 1									18, 1	
		2	110			HEREE SE	AN ANA	10 2 2 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1		日本語 (本) (本) 日本 マススト ア マススト ア ・ ・ マススト ア ・ ・ ・ ・ マススト ア ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	Parame	aber: Value
프 및 및 및 및 및 및 및		8 - 5 - 4 - 3 - 2			1 20 10					- 1500 (- 16 - 16 - 16 - 16 - 16 - 16 - 16 - 16	1 Tule 4 Origin 4 Origin 4 Origin 4 Origin 4 Origin 5 Acquire trace intervention 6 Temperature 6 Temperature 6 Separation 9 Separation 9 Separation 10 Longer 10 Description	- pangala 1006a 1006a - 1007 - - - - - 2007 - - - - - 2007 - - - - - - 2007 - - - - - - - - -
≡£	Talis 8 x	6 - 8 - 6			K (m) 7,25	N (TT) 5.73		C.	i (m) 3.08 H (m) 2.23	1 (m) 1.57	12 Acquired Size 13 Spect of Size 2000 Fatter Range Nor	8,55 j2778 malizet[Absolute
	None Soft Songer HS 1 1 3.(j) 7.4584 7.46 1 1. 2 1 (r) 4.417 2.1. 1 1.	10 H 10	И (d 8,63	L (d) 7,95	A (d) 7,46	B (d) 5,48	C (ddt) 4,92	L (s) 387 3,35	F (add) [2.63]	(3) .90 -80	1 8.77 8.48 2 8.07 7.83 3 7.46 7.45 4 7.55 7.13 5 5.56 5.79 2010 2 5.16	101 3.1539.16 102 3.1738.37 110 1366.6 44 2.72 836.08.36 132 1.5218.66 132 1.5218.66 134 35357.2
	3 C (HD) 4,2166 4,567 2 2, 4 D (s) 0,3775 C (L) C (S) 0 0, 5 F (m) 3,3876 2,45,3,576 2 2, 2, 6 F (walt) 2,5267 2, 65, 2, 56, 2 2 2, 2, 7 N (T) 0,1296 2, 15, 3, 577 2 2, 2,	16 1 16 1 14 13	_[ſ	U	51]	. [,	_F .		I 1 0.1 1.67 I 1 1.01 3.67 II 1.01 3.67 3.30 III 2.02 11 2.03 3.30 III 2.09 2.03 1.12 2.03 III 2.09 2.05 1.19 2.09 101 1.08 1.85 1.19 1.13	210 074025 2110 07460754 2116 065558.0 214 72425530 229 766410.33 112 347057.4 206 9470(94 5.92 1827616.80
	8 H () 2.2346 2.85.2 2.15 1 1. 9 (4) 1.1411 1.411 1.411 2.2 2. 10 J(m) J.5746 1.85.1 1.5 2. 2. 14 1411 1.415 1.15 2. 2. 3. <th>18 - 17 -</th> <th></th> <th></th> <th></th> <th><u></u></th> <th></th> <th></th> <th></th> <th>Min_</th> <th>91. 191</th> <th></th>	18 - 17 -				<u></u>				Min_	91. 191	
	11 F (m) 7.2541 7.1 2 2 12 L (d) 7.5521 E (7 + 7 ± 5) 1 1 13 M (u) 3.5225 E 77 E 4E 1 1 14 N (-) 5.2445 E 45 E -1 1 1	21 23 19	8	5 E.O	1 1 74 2	6.5 60 5.5	10 15 10 15	4 1 40 25	1 1 1 1 30 25 20		.81.	
1 A.	S Peals Bicegras Milhnets D	A 23 1 22	10						1			v Pi≪
43	<u>iu _u'a;•</u> ax.•) ≣ · B	· X2	* <u>A .b.</u> t	• Tin es Se.	k Ruman	10 💌						

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。 Un puerta En 104304474 And States - Contracting and an and the state and an and a state of the states of the * 10 * 1 N # 8 🔳 🖩 🖩 10 10 10 🕸 • 🛆 tatviewer practiceset * COLUMN A $10^{-1} + 5^{-1} + 10^{-1} + 5^{-1} + 10^{-1} + 10^{-1}$ 1.1.14 1 1 1 5 MUSTRECAN RELEARCH 1 1 M. Michel ¹H NMR (400 MHz, "CDCI3") δ 8.62 (d, J = 4.5, 1H), 7.95 (d, J = 9.2, 1H), 7.46 (d, J = 4.5, 1H), 7.30 (dd, J = 9.2, 2.7, 1H), 7.26 – 7.19 (m, 2H), 5.80 - 5.65 (m, 1H), 5.48 (d, J = 4.1, 1H), 4.92 (ddt, J = 13.3, 10.3, 1.4, 2H), 3.87 (s, 3H), 3.43 - 3.30 (m, 2H), 3.19 - 2.94 (m, 2H), 2.63 (ddd, J = 12.6, 8.6, 3.9, 2H), 2.24 (t, J = 8.7, 1H), 1.90 (s, 2H), 1.82 - 1.63 (m, 3H), 1.60 - 1.42 (m, 2H).

12、您也可以很容易的从别的软件中(如 Chemdraw, IsisDraw or Chemsketch)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。

: X	C	ا 😰	ջ 🕼	. 🖏	ΙL	ر	J	+	<u>M</u> -	- I f1	f2	FID •	1	& -	* /≩ -	,嶋	TALS	• يک	JP -	- <u>111</u> -
1	2	3	45	6	7	8	9	10	11			12		13	14	15	16	17	18	19
1:	放	大诸	普图;																	
2:	缩	小语	晋图;	스며																
3:	显工	不ら	普图至 今) 料	È部;		计反	1													
4: 5.	于动	切れ	則八労 並図ラ	い目の	又人 彩	宿囵 到如];]废;	並反	山豆	击.										
6.	成为	······································	ョロス 図的某	-///, [个/	(() ()	5万/0 域 做	ניתיµ ק	百日 个前	115区 大扩	. _场 ; "展图										
7:	调	整语	普图的	白峰高	· 至:	适合	、 F屏3	,次 幕:	./、./		,									
8:	增	大屿	夆强;																	
9 :	减	小崎	夆强;																	
10	: 7	隹确	显示	谱图	上某	ţ—,	点的	」信』	急;											
11	: [±]	裁减	谱图	,右	边小	節	头有	可ì	先项;											
12	: Ì	周出	FID	数据	,	ī边 [,]	小箭	F头7	有可ì	先项;										
13	: X 、	讨F]	ID 数	据进	行俱	立	计变 ハナ	を换, ーー、	右i 小石	力 小育	箭头有	有可选	运项;	1						
14	: ไ :	周整 田動	相位。	,	辺小	前	头 有	日式	选坝; 生雨											
10 16	: 1, . 1	回登 ↓学	至 (気) 位 移う	, ⁄ 口 标 完	121	、則こ	天有	1 11 1	匹坝;											
10	: 下 • 末	モナ 示注	亚。 化学	が 足 位移	;	动	小篰	「头ィ	有可 i	先项.										
18	• 「 • 禾	只分	,右	边小	箭头	,,, ;有ī	可选	·项;	1.1											
19	:	多重	峰分	折,	右边	1小1	箭头	;有可	可选J	页。										
<u> </u>	部分		捷键	列表																
				+									ు	一大岐	昏氓					
				-									减	小峰	强					
				7								Š	がない		- 北古					
				2							\/~· 7	י די ארי די	成在	小双人	、医坏	× 7'・ 壬	古土	±++		
											ίλZ	·小ヿ 二	□瓜 次' 7	入, r "· 区	对仈▲ 載放	∠.垩 `大	且人	以 入		
			c	HIF	T+7					证	新汪名	— 宿小橇	シン と まず		建次都	//、 断	に見	F		
				21.111						v	<u>и</u> 1Ц :	111 1 1 19	5-1-(9	181	タエ レヘ3	& つ月	ын <u></u>).	1.		
					х									激活	裁减	模式				
										一次	:'X':	水平	裁减	;两	次'X'	: 垂]	复裁	减		

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

Ρ

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
М	手动输入数值放大谱图
н	调整谱图的峰高至适合屏幕
т	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 处理的谱图可出输出为多种格式 (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 合,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。

M Properties		?×
Properties	i Spectrum 1D Spectrum Common Style: Color: Line Uine Width: 3	
Set as Default	Restore OK Cancel Ap	ply