



Mnova 5.3.1 使用指南

青岛腾龙微波科技有限公司



MNOVA MestReC 5.0

内容提要

- ▶ 一维谱的处理和分析
- ▶ 多个谱图的同时处理和分析
- ▶ 二维谱的处理和分析
- ▶ 一维谱的预测和归属
- ▶ 其它功能介绍



谱图的导入和自动处理



- ▶ Mnova会自动识别和处理常见原始数据,包括Bruker, Varian, JEOL, JCAMP等
- ▶ 可以用File | Open来打开FID文件
- ▶ 或者在Windows Explorer中将FID直接拉入Mnova
- ▶ 或者在Windows Explorer中选择多个含FID的文件夹,将它们 直接拉入Mnova (如下图)
- ▶ 如果谱图已经处理好, Mnova会将处理好的谱图读入; 如果没有处理过, Mnova会自动处理。







注:可用**Processing | Processing Template**命令来检查所有处理和分析参数



相位矫正(Phase Correction)

如果相位没有矫正好,可用

进行自动矫正,或进行 手动矫正。一般来说, 自动矫正足矣。





自动矫正中Options里面有三种 不同的矫正方式: Global适合一般氢谱和碳谱, Selective适合DEPT谱, Metabonomics适合代谢组学谱



8.5

8.0

7.5



图中所示是 调节Position) 放在某个 放在此对话 上下移动矫 点处的峰对 下移动,矫 个谱图得到



	Phase Correction
手动矫正对话框。先 把支点(蓝色竖线 峰上, 然后把鼠标 框中间, 按住左键 正零级相位, 直到支 称, 然后按住右键上 正一级相位, 直到整 满意的结果为止。	f2 f1 Click here and drag mouse up or down hol left button for P right button for (hold Ctrl key for rine tune) PH0: -219.24 PH1: -0.38 Pivot Point Position: 2.419 Biggest
ı. h. ıl	支点峰
7.0 6.5 6.0 5.5 5.0 4.5 4	4.0 3.5 3.0 2.5 2.0 1.5 1.0



基线矫正(Baseline Correction)

如果基线没有矫正好,可用 / 进行自动矫正,或手动矫正。

自动矫正:可选择三种 算法之一,观察拟合的 基线(绿色)是否正确 ,采用基线最吻合的算 法



手动矫正:可以随意选择基线点(在谱线上或之外),观察拟合的基线是否满意,如果满意,按绿钩加以采用。









谱图放大和缩小 🛛 🔍 🤇







0532 83625819





点击局部放大按钮,用鼠标选择需要放大的范围即可







va





www.tlwb.com.cn 0532 83625819

可以自动或手动一个一个地积分,如选用手动,鼠标会变成积分的形状,分别 对你感兴趣的信号进行积分,若某个地方的信号很密集,可以首先把这个区域 放大,然后再进行积分。积分信息用 View | Tables | Integrals显示,积分数据可 以进行复制、粘贴。







可以自动或手动一个一个地分析多重峰。分析的结果见View | Tables | Multiplets, 分析数据可以进行复制、粘贴。

如果某个多重峰结果不好,可双击该标记,在Multiplet Manager中间进行修 改



多重峰分析的结果报告





多重峰分析的结果见View | Tables | Multiplets。按Report Special,然后选择一种发表格式,再按OK,分析结果就会自动排版显示在谱图上。也可以按Copy Special,然后选择一种发表格式,排版结果可以粘贴到Word或其他文本中去。 0532 83625819





173

www.tlwb.com.cn 0532 83625819

9.0

18.5

18.0

17.5

17.0

16.5

16.0

15.5

15.0 14.5

fl (ppm)

13.5

14.0

13.0

12.5

12.0

11.5

11.0

10.1







0Va

多谱图的同时处理和分析



→ 用于改变单个谱图的顺序, 删除某些谱图等

▶用于调整某些谱图的强度

>用于选择对多谱图同时操作,或者只对当前谱图进行操作

如果处于对多谱图同时操作状态,那么处理或分析对所有 谱图同时进行,比如: 相位矫正,基线矫正,化学位移定标,积分等

有关多谱图的更多处理方法,参见Help | Contents



谱图的复制、粘贴



www.tlwb.com.cn 0532 83625819

处理好的谱图可以Copy-Paste到Word或PPT文本中,而且在Word或 PPT文本中可以随时双击谱图再进行处理。处理好的谱图可以用 File|Save As转换成pdf、jpg、tiff等格式。也可以将谱图以 ASCII形式将数据导出,用Excel打开。





二维谱图处理

导入数据:打开fid文件或者将多个文件夹拉入Mnova即可











选择二维谱图的显示模 式,如等高线图,堆积 图等

> 如果要改变等高线的颜 色,线与线之间的距离 等,可双击谱图,在 Properties对话窗中改 变有关参数

Spectrum	2D Spectrum 1D Spectrum Co	mmon
Scales	Legend Width: 4.23 Text Width: 12.7	mm 🔹
Integrals	Palette: Red-Blue Number of Positive Contours: Number of Negative Contours: Scaling:	10 10 10 10 2.000 10









右边的箭头,

Setup



💏 Setup Traces	?Х
Available 1D Spectra:	Horizontal Trace
	Vertical Trace
<	Internal Projection (Sum)
	OK Cancel

选择一维氢谱,再点击 横轴的绿钩, 该氢谱即 显示在横轴方向。 选择一维碳谱,再点击 纵轴的绿钩, 该碳谱即 显示在纵轴方向。



当将鼠标放在一维谱基线旁边,当鼠标变成"小手"时,可以上下拖动谱图。滑动鼠标滑轮,可以改变一维谱峰的强度。

www.tlwb.com.cn 0532 83625819



出来此对话框



填上化学位移 范围即可



放大后,选择View | Full View,可看全谱和当前放大区域







12 一维谱图预测和归属

- 1、将在ChemDraw、ISIS/Draw等画图工具上画好的分子结构 粘贴在Mnova上。
- 2、打开Molecule | Predict Options

出来此对话框,	在此双	讨话框
内可以设定预测	范围,	选择
氘代溶剂、频率	大小等	参数

	MAR Predictor	Options ? 🔀
	1H 13C 31P	19F 15N 170 29Si
对话框,在此对话框	From:	-2.00 ppm
设定预测范围,选择	To:	10.00 ppm 😂
剂、频率大小等参数	Number of Points:	32 K 👻
	Frequency:	500.13 MHz
	Line Width:	0.75 Hz
	Solvent:	Chloroform 💙
预测前选择此项	Minimum J Value:	0.30 Hz
	Predictor:	Modgraph NMRPredict Desktop 🗸
		Predictor Properties
		OK Cancel



www.tlwb.com.cn 0532 83625819

3、设定好参数后,点击

😭 Predict 1<u>H</u> Spectrum

即可预测一维氢谱,如下图所示



同理,可预测一维碳谱,对预测出的一维谱可进行前面介绍的 所有处理方式。查看预测谱的数据: View | Tablee | 1H Prediction (或者13C Prediction)





4、将预测谱和实验谱对比,处理方式有以下几种:

(1) 将打开的实验谱和预测谱复制、粘贴放在一起,手动调整图像大小

(2) 将打开的实验谱和预测谱全部选中进行堆积,方法前面已经介绍

(3) 打开的实验谱,将分子结构式粘在图上,然后选择Analysis | Prediction&Compare,预测的谱图会自动和实验谱堆积在一起:





5、峰归属

将鼠标放在H原子上,其对应的预测峰会用蓝色标记(见下图)如果认为预测谱与实验谱有出入,可在View|Tables|1H Prediction表中修改有关化学位移或偶合常数,预测谱会相应地更新。



峰归属步骤:选择Analysis|Assignment|1H,这时鼠标变成一个小的化学 分子式形状,然后先点要归属的基团,再将连线拖到相应的峰上点击即 可。提示:可以将基团归属到某个化学位移,化学位移范围,积分范围 ,或多重峰范围等





其他功能介绍



- 1. 打开一个测试数据,想了解做测试时的一些参数,点击View—Tables —Parameters,从表中可以看到测试时用出自哪个厂家的核磁仪器、 氘代试剂、脉冲、温度、时间等等。
- 2. 两峰距离测量:点击此按钮 🛶 鼠标变成图中样式,然后将鼠标

放在要测的一个峰上,按下鼠标左键,将鼠标拖向另一个峰,此时 出来一个对话框,对话框上显示两峰距离之差,可得到耦合常数





3. 编辑图谱: 在打开的页面上点击鼠标右键,出来一个对话框,点击 Properties,出来此对话框。

在此对话框里,可以对谱图、 坐标、峰值、积分值、多重峰 分析数值大小、颜色、字体 进行修改。如果以后每次打开 谱图,都想按照设定的样式 打开,那在第一次设定好时, 点击对话框左下角的 Set as Default,那么下次打开 Fid文件后就按照这次设定的 样式打开,可避免重复操作。

📅 Properties 🛛 👔	2×
Properties	
Set as Default Restore OK Cancel Apply	



4. 欲知更多的Mnova功能,请选择Help | Contents,阅读或搜索 Mnova的使用手册和教材,里面有最全面和详细的内容

















公司网址: <u>http://www.tlwb.com.cn</u> 电子邮件: sales@tlwb.com.cn 服务热线: 0532-8362 3059 传 真: 0532-83625679 客服QQ: 523812098