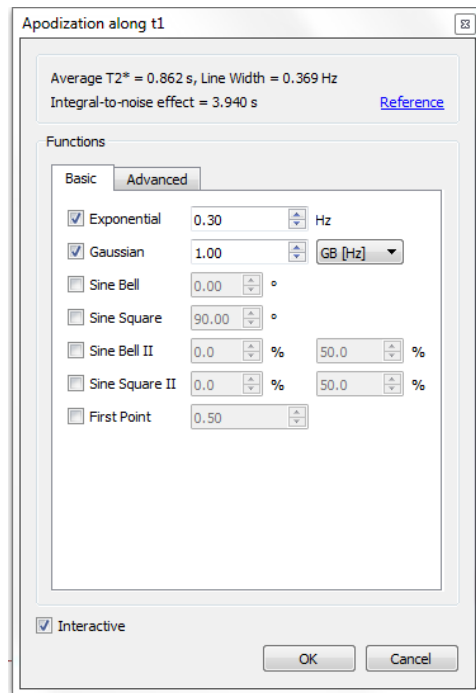
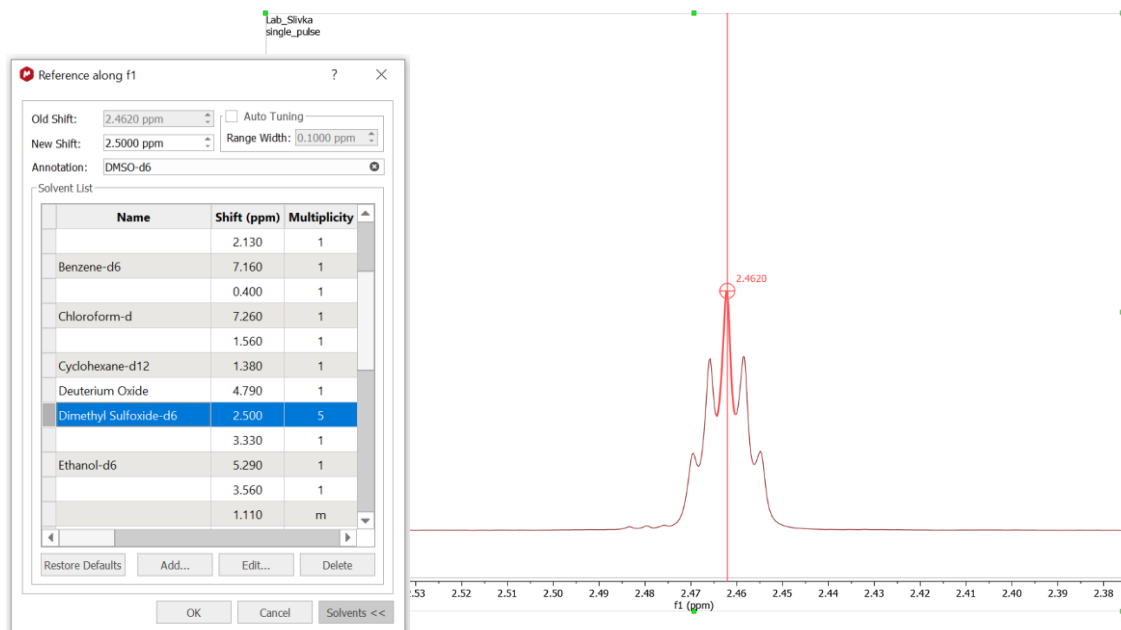


Postup při vyhodnocování naměřených 1D NMR spekter v programu Mnova

1. Naměřená NMR spektra otevřete v programu Mnova (nebo je můžete do otevřeného programu přetáhnout).
2. Zvýšení/snížení intenzity signálů v naměřených spektrech probíhá pomocí kolečka myši.
3. Spektrum upravte pomocí window funkcí: „W“ – nastavením hodnoty Exponential na 0,3 a Gaussian na 1,0 (nebo podobných hodnot v závislosti na rozlišení a kvalitě naměřených spekter).

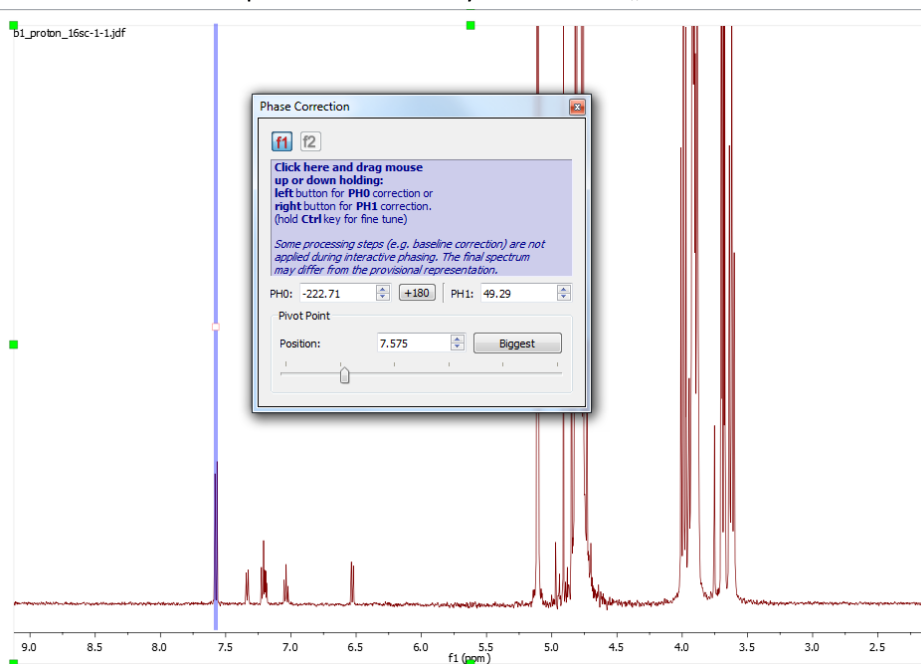


4. Reference signálů rozpouštědla: „L“ – vyberte signál dimethylsulfoxidu (DMSO, vybraný signál je červeně zvýrazněn) a klikněte na něj. Objeví se tabulka, kliknete na tlačítko „Solvents“ a vyberete dané rozpouštědlo a chemický posun jeho signálu.

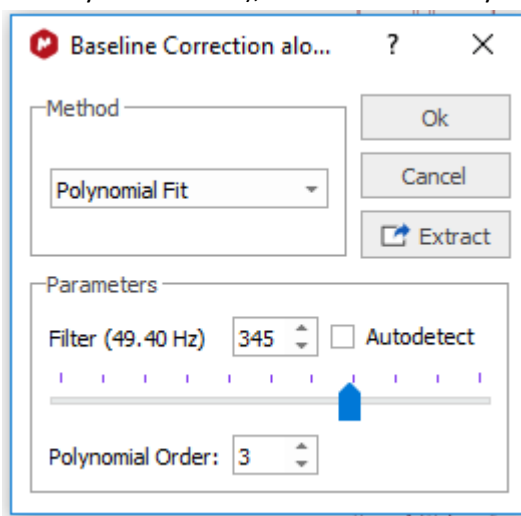


5. Spektrum sfázujte: „Shift+P“ – objeví se tabulka a pivot. Pivot posuňte do středu jednoho z krajních signálů. Tento signál sfázujte tak, aby byla jeho základní linie v rovině. Postup fázování:

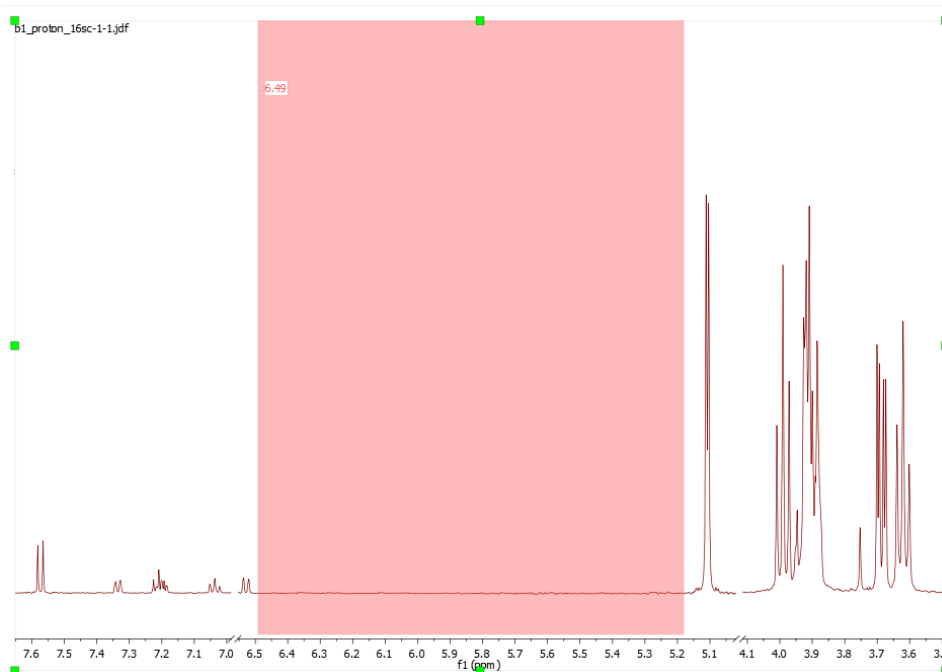
ve vyskakovací tabulce kliknete levým tlačítkem myši do fialového pole a táhnete myši na jednu či druhou stranu. Až bude signál pod pivotem vyrovnán, sfázujete druhou stranu spektra kliknutím pravého tlačítka myši do fialového pole a táhnutím na jednu či druhou stranu. Pro jemnější krok fázování držte spolu s tlačítkem myši stisknuté i „Ctrl“.



6. Korekce základní linie (baseline): „B“ – ve vyskakovacím okně vyberete metodu Polynomial Fit. V případě potřeby doladění akurátnosti základní linie můžete v okně Parameters měnit hodnotu Filter (políčko Autodetect musí být odškrtnuto), nebo hodnotu Polynomial Order.

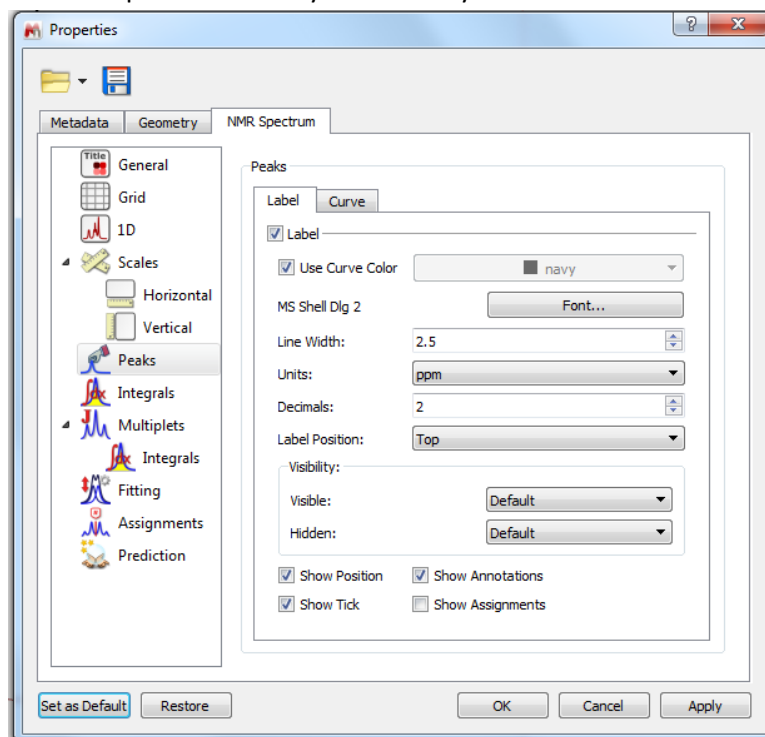


7. Integrace plochy píku: „I“ – myši vyberte plochu celého píku od začátku do konce. První integrální plocha píku má normalizovanou hodnotu 1, všechny další hodnoty integrálních ploch jsou poměrově vztaheny k této první ploše. Normalizovanou integrální hodnotu ploch píků je možné následně upravit v panelu „Integral Manager“, který je možné zobrazit přes „View“ – „Tables“ – a zvolíte políčko „Integral Manager“. Nastavení počtu zobrazených desetinných míst je možné po kliknutí pravého tlačítka myši na spektrum – „Properties“ – „Integrals“.
8. Ořez (odebrání) části spektra bez signálů: „X“ – myši vyberete plochu, která bude vyřiznuta ze spektra. Se spektrem se vám bude lépe pracovat. Pokud chcete zpětně zobrazit vyřiznuté oblasti spektra, stiskněte „V“ – pro zobrazení dané oblasti myši označte danou plochu spektra. Nebo kliknete na „View“ – „Cuts“ – „Restore all“ a tak se vám zobrazí celé původní spektrum.



9. Kótování signálů: „Ctrl+K“ – pomocí tohoto nástroje vyberete signály, pro které chcete znát hodnotu chemického posunu. V tomhle módu vybírá kurzor pouze vrcholy dobře oddělených signálů. Pro jemnější manipulaci stiskněte „Shift“ – v tomhle módu můžete kótovat jakýkoliv bod spektra.

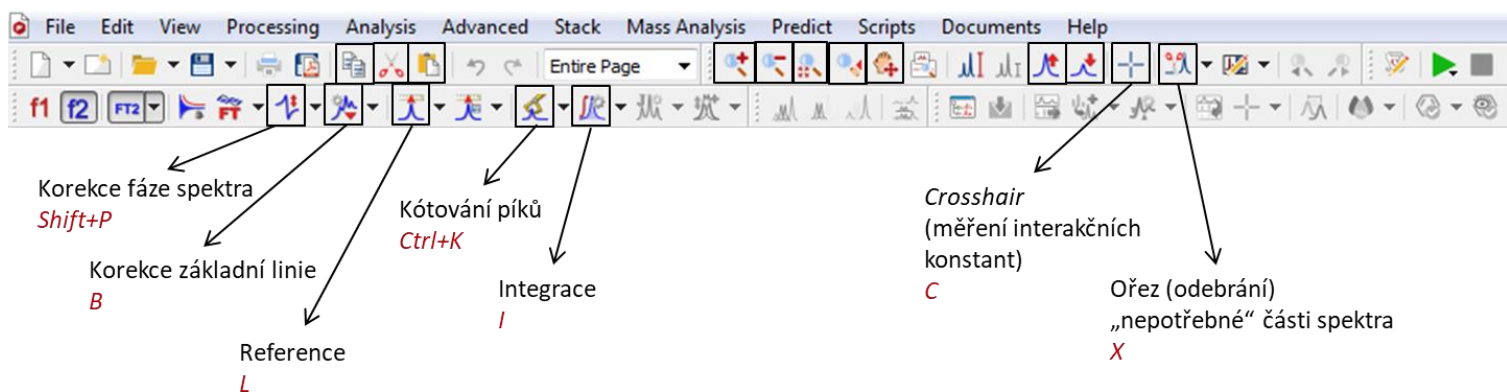
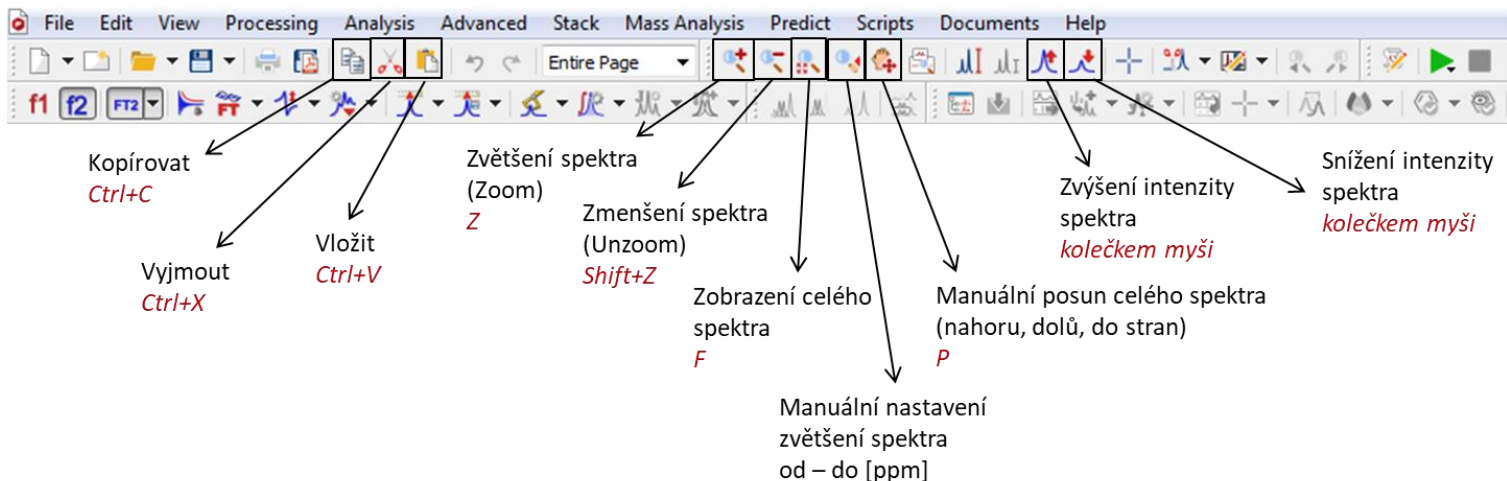
Nastavení zobrazení hodnot chemických posunů píků: Na spektrum kliknete pravým tlačítkem myši – vyberete „Properties“ – „Peaks“ – zde můžete přepínat mezi zobrazením v jednotkách Hertz a ppm a také měnit počet zobrazených desetinných míst.



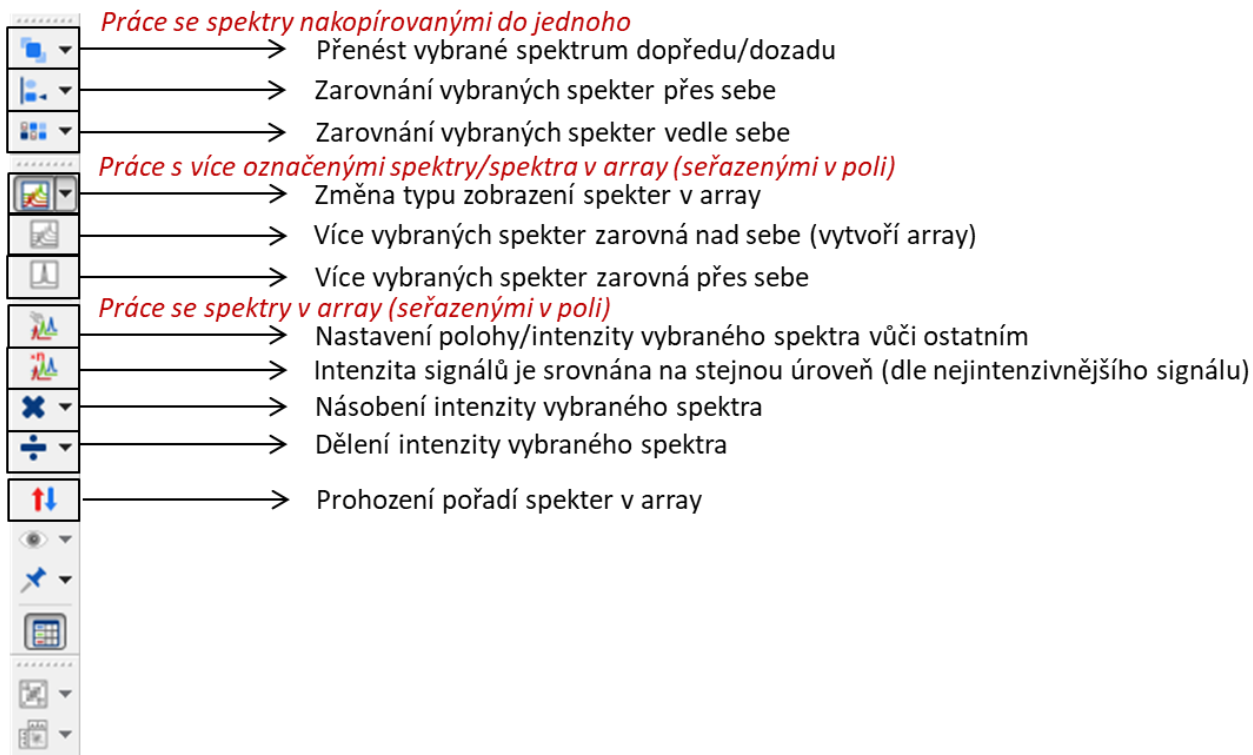
10. Zvětšení oblasti spektra (zoom): „Z“ a vyberete myší danou oblast
 11. Zobrazení celého spektra: „F“
 12. Z jakékoliv funkce je možné odejít stisknutím „Esc“.

Klasické zobrazení panelů nástrojů v programu Mnova

Popis nejčastěji používaných nástrojů v programu Mnova a jejich *klávesové zkratky*



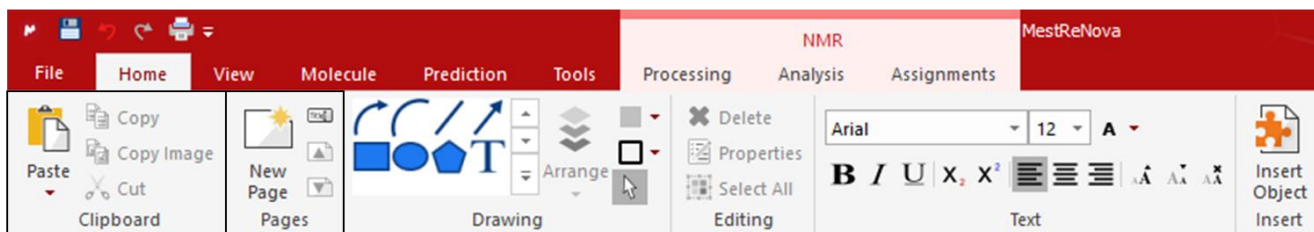
Popis nejčastěji používaných nástrojů v programu Mnova



Moderní zobrazení panelů nástrojů v programu Mnova

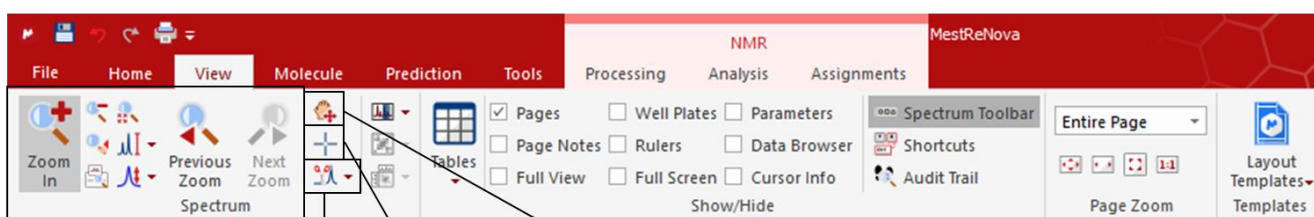
Nejčastěji používané nástroje a jejich *klávesové zkratky*

Záložka Home



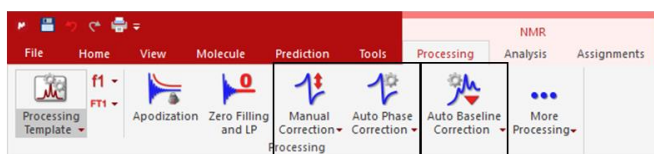
Funkce vyjmout *Ctrl+X*, kopírovat *Ctrl+C*, vložit *Ctrl+V* → Nová stránka *Ctrl+M*

Záložka View



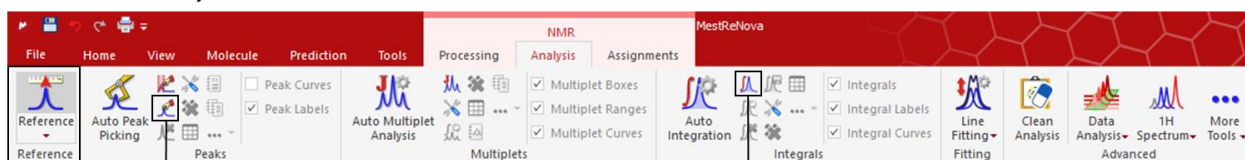
Posunutí celého spektra *P*
Funkce Crosshair (ukazatel chemického posunu dle polohy myši) *C*
Výřez spektra *X*
Funkce zvětšení *Z*, zmenšení *Shift+Z*

Záložka Processing



Fázová korekce *P* Korekce základní linie (baseline) *B*

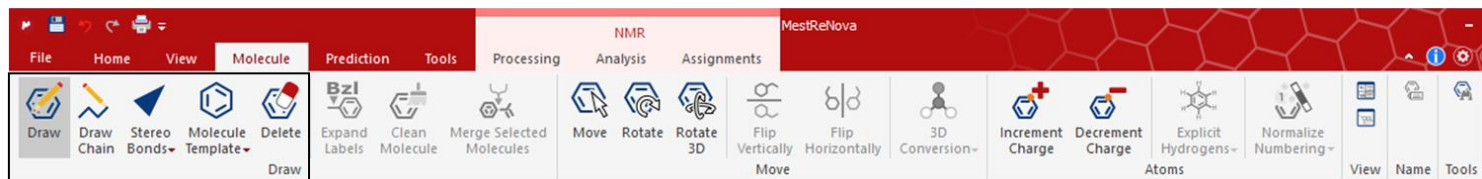
Záložka Analysis



Reference spektra *L*
Kótování píků *Ctrl+K*
Integrace *I*

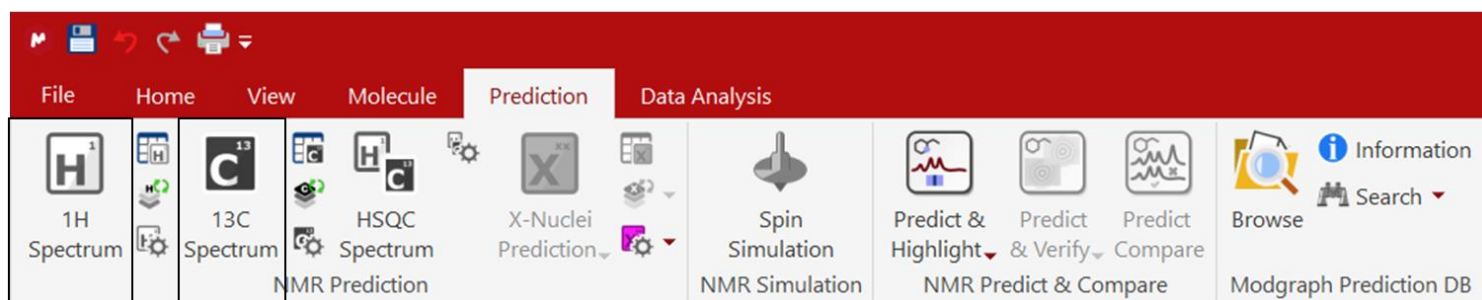
Predikce NMR spekter molekul

Záložka *Molecule*



Nástroje pro návrh molekulární struktury

Záložka *Prediction*



Predikce ^{13}C NMR spektra

Predikce ^1H NMR spektra