

Mestrenova Handbuch

NMR-Daten importieren

- Drag and drop das zip-File in den Mestrenova Bildschirm
- **oder** gehe zum Kopfmnü und wähle: File > Open... > Select your zip-file

Spektrum phasieren und referenzieren



Automatic Phase Correction

Wenn Deine Baseline S-Kurven aufweist, klicke auf das Automatic Phase Correction icon und entweder:

- drücke **Automatic...**
- **oder**, wenn das nicht ausreicht, klicke auf **Manual Correction** (Shortcut: Shift+P), und ziehe mit der Maus auf dem blauen Bereich. Spiele mit der Maus rum und verwende zuerst die linke, dann die rechte Maustaste, bis die Baseline flach ist.



Automatic Phase Correction

Wenn die Baseline verwackelt aussieht, klicke auf das Baseline Correction icon und

1. klicke auf **Baseline Correction...** (Shortcut: B)
2. Wähle eine Methode (ich empfehle den **Whittaker Smoother**) und drücke Ok



Reference

Als nächstes wähle ein Referenzsignal für das Spektrum. Normalerweise wählt man das TMS-Signal, ganz rechts im Spektrum bei 0.00 ppm. Wenn Du andere Signale bei 0 ppm hast, kannst du alternativ auch das Lösungsmittelsignal wählen.

1. Drücke **Z** und zoome zum TMS-Signal
2. drücke **L** oder klicke das Reference Icon und wähle **Reference**

3. Gehe mit der Maus über das TMS-Signal. Ein rotes Fadenkreuz erscheint, klicke damit auf die Spitze des TMS-Signals.
4. Bei "New Shift: " gebe 0 ppm ein **oder** gehe zu "Solvents>>" und wähle "TMS"(wenn du auf das Lösungsmittel referenzierst, wählst du stattdessen das entsprechende Lösungsmittel aus). Drücke Ok

Daten prozessieren



Peak Picking

Jetzt, wo das Spektrum kalibriert wurde, müssen wir unsere Daten verarbeiten. Der erste Schritt besteht darin, alle relevanten Peaks auszuwählen.

1. Wenn du ein sehr simples und sauberes Spektrum hast, gehe zum Peak Picking Icon und wähle "Automatic" (nicht empfohlen)
2. Andernfalls, klick auf das Icon und wähle **Peak by Peak** (Shortcut: Cmd+K)
3. Wähle den Bereich, in dem du picken willst. Wenn du in einen Bereich zoomen musst, drücke **Z**, zoome in den ausgewählten Bereich, drücke **Cmd+K**, pick die Peaks, drücke **F** und wiederhole dies für die restlichen Peaks.
4. Wenn du einen Peak löschen willst, klicke auf das Icon und wähle **Delete Manually** (Shortcut: Shift+Cmd+K) und ziehe über die Peaks, die du löschen willst



Integration

Als nächstes müssen die Integrale integriert werden.

1. Zoom in den entsprechenden Bereich (**Z**)
2. Klicke auf das Integration Icon und **Manual** (Shortcut: I)
3. Ziehe über die Signale, die du integrieren möchtest. Mache dies für alle relevanten Signale
4. Um die Integrale zu integrieren, right-click den Integrationsbalken (über der ppm-Skala) und wähle **Edit Integral...**
5. Jetzt kannst Du entweder das ausgewählte Integral kalibrieren (ändere **Normalized**-Wert zu bspw. 3 für eine

- Methyl-Gruppe) oder ändere die Summe aller Integrale (ändere den **Total**-Wert zu der Anzahl an Protonen in deiner Verbindung, bspw. zu 8, wenn deine Verbindung Toluol wäre)
6. Wenn Du die Integrationskurven entfernen willst, klicke auf das Integration Icon und deselecte **Integral curves**



Select multiplets

Normalerweise muss die Kopplungskonstante jedes Multipletts im experimentellen Teil aufgelistet werden.

1. Klicke auf das Multiplet Icon und wähle **Manual** (Shortcut: J)
2. Ziehe über alle Multiplet-Peaks
3. Wenn du zwei überlappende Multiplets hast kannst du einen multiplet peak entfernen/ hinzufügen indem du auf das Multiplet icon klickst und **Add Multiplet Peak** auswählst

Exportiere das Spektrum

Das ganze Spektrum exportieren

Du exportierst immer das, was Du im Fenster siehst. Wenn du alles exportieren willst, drücke **F** und zoom in den relevanten Bereich (**Z**)

- Wähle das Spektrum aus, drücke **Cmd+c** und paste es in deine Word-Datei o.Ä.
- **oder** gehe zum Kopfmnü und gehe zu **File>Export to pdf...**

Daten auflisten

Wenn du eine Liste deiner Daten willst, gehe zum Kopfmnü und wähle

1. **View>Tables...**
2. Wähle die Daten, die du auflisten willst (beim **NMR**-Bereich)
3. Wähle bspw. **Multiplets** und **Peaks** aus und klicke auf Ok
4. Exportiere die Tabellen, indem du **Copy Multiplets/ Peaks** klickst