

## Mnova 사용법 (in text)

### # 설치 방법

1. Mnova 를 설치한다.
  - A. Mnova 홈페이지에서 다운로드 받는다.
    - i. <http://mestrelab.com/software/mnova/download/>
    - ii. KAIST는 14.0.1 버전을 받는다. (해당 버전 이상에 대한 license 미보유)
  - B. 캠퍼스 라이선스 파일을 데이터 서버에서 다운로드 받는다.
    - i. 데이터 서버 접속 정보 : NMR실 processing 컴퓨터 모니터 상단에 기재
    - ii. 위치 : /opt/Mnova\_license/version\_14\_0\_1/ KAIST\_Campus\_License\_2018.zip
  - C. Mnova를 설치후에, 라이선스 압축 파일을 풀어다 붙인 후, 프로그램을 재시작한다.

## # 단축키

- FID 열기 : Ctrl + O
- 기본 상태 : ESC
- Apodization : W
- Baseline correction : B
- Phase Correction : Shift + P
- Referencing : L or R
- Zoom in : Z (가로/세로/2D)
- Full spectrum : F
- Peak picking : K or Ctrl + K
- Integration : I
- Multiplet analysis : J
- 서브 창 추가 : E
- 화면 줄임/복원 : X , V
- Cursor 정보 : C
- 새로운 page 추가 : Ctrl + M

## # 사용 방법

### 1. 파일 열기 (단축키 : Ctrl + O)

- A. Bruker의 1D 스펙트럼, Agilent(구 varian)의 경우 폴더 내 fid 파일을 연다.
- B. Bruker의 2D 스펙트럼일 경우 폴더 내 ser 파일을 연다.
- C. 탐색기에서 데이터가 있는 폴더째 끌어다 붙여도 됨

### 2. 환경설정

- A. 스펙트럼 에서 오른쪽 마우스를 클릭하여 'Properties'를 클릭한다.
- B. 원하는 화면 표시 설정을 설정한 후 OK 선택한다.

### 3. Processing

A. Mnova는 load시 바로 FT(Fourier Transform)을 하여 스펙트럼을 보여준다.

B. Apodization (단축키 : W) // 1D, 2D 모두 적용

i. 스펙트럼의 S/N를 강화하거나 Resolution을 강화시킨다.

1. Raw data에 만족할 경우, 적용하지 않아도 됨

2. Trade off : Sensitivity를 강화할 경우, Resolution이 나빠진다. (반대도 동일)

3. 2D의 경우 F2와 F1을 모두 적용하여야 한다.

ii. 추천하는 function

1. (1D) Exponential : S/N을 강화할 경우 많이 사용됨 (1D에서 많이 사용)

A. 일반적으로 (계산하지 않을 경우) 아래의 수치 이하를 많이 사용

i. 1D proton NMR일 경우에는 0.2Hz 이하 권장

ii. 1D Carbon일 경우에는 2 Hz 이하 권장

B. 최적화 할 경우에는 Matched filter →  $1/AQ$  를 계산하여 입력

i.  $AQ = TD / (2 * SW)$

2. (1D, 2D) Gaussian + Exponential 함수와 같이 사용

A. View에서 Full view를 켜놓고, 적용되는 함수를 확인하면서 적용

3. (2D) Sine Square : 75 또는 90 degree를 권장

A. 값이 90에 가까울수록 S/N이 좋아지고, 0에 가까울수록 resolution이 좋아진다.

B. 2D에서는 실험종류에 따라 적용하는 degree가 다름

i. Magnitude : 0 degree (예> COSY, HMBC)

ii. Phase-sensitive : 90 degree (예> NOESY, HSQC)

C.

C. Zero filling (2D만 적용)

i. Digital resolution을 강화하는 작업

1. FID의 말단에 0을 추가하여 peak shape을 좀 더 자연스럽게 한다.

- A. 장점 : peak의 형태가 더 자연스러워진다.
  - B. 단점 : 데이터의 용량이 증가한다.
  - ii. 권장 : Original size 보다 한단계 위 (보통 2배 사이즈)
- D. Linear prediction(2D만 적용. NUS 적용시에는 필수)
- i. Truncate된 FID 말단을 기존 패턴으로부터 예측하여 생성하는 작업
    - 1. Non-uniform sampling 적용시에는 반드시 적용해야 함
    - 2. 장점 : resolution이 증가한다.
    - 3. 단점 : 데이터의 용량이 증가한다.
  - ii. 권장 : Original size보다 한단계 위 (보통 2배 사이즈)
    - 1. To Spectrum size 를 선택한 후 'LP filling'을 적용하면 됨
- E. Phase correction (1D, 2D 공통)
- i. 스펙트럼의 phase를 조정하는 작업
  - ii. Mnova는 각 NMR컴퓨터에서 보정한 값을 그대로 가져온다. (기본 설정일 경우)
  - iii. 자동으로 보정된 phase가 만족스럽지 않을 경우에는 다음과 같이 한다.
    - 1. 자동으로 할 경우에는 'Auto Phase Correction'을 클릭한다.
    - 2. 수동으로 할 경우에는 아래와 같이 한다.
      - A. Manual Phase( Shift +P)를 선택한다.
      - B. 기준으로 삼을 peak를 고른다. (Pivot point에서 position을 움직여 결정)
        - i. 보통 가장 큰 peak를 선택하거나, 가장자리에 있는 peak를 선택
      - C. PH0을 조절하여 기준 peak를 대칭이 되게 조절
      - D. PH1을 조절하여 기준과 멀리 떨어져 있는 peak의 phase를 조절.
      - E. 만족스럽지 않을 경우, 기준 peak를 변경하여 다시 시도하여 반복
- F. Baseline correction(단축키 : B) (1D, 2D 모두 적용)
- i. Baseline을 보정하는 작업 (정확한 integral 계산)
  - ii. Polynomial Fit을 선택한 후 적당한 order을 입력한 후 OK 버튼을 클릭한다.
    - 1. 다항식 ( $ax+bx^2+cx^3+...$ )을 이용하여 보정하는 방식으로 interactive하게

보여지는 파란색 baseline을 보면서 결정한다.

A. 스펙트럼 가장자리의 절벽은 신경쓰지 않아도 된다.

B. Order를 변경하면서 맞춘다. (보통 0~3)

i. qNMR일 경우에는 0으로 설정

C. order만으로 맞추지 못할 경우 Filter를 조절하여 맞춘다.

D. (2D) F2, F1에 같은 설정을 적용하고 싶을 경우 Apply to All dimensions를 체크하고 적용한다.

iii. Whitaker smoother가 더 효율적으로 baseline을 다듬지만 broad한 peak를 없앨 수 있으므로, exchangeable proton(-OH, -NH)이 있을 경우에는 사용을 피한다.

1. Filter를 잘 조절할 경우, 더 정확한 baseline을 맞출 수도 있다.

2.  $^{19}\text{F}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{11}\text{B}$  등 Background signal이 있는 실험의 스펙트럼의 baseline에 효과적임

#### 4. Analysis

##### A. Referencing (단축키 : L 혹은 R)

- i. 기준점을 새로 설정하는 작업
  1. TMS를 넣은 경우에는 TMS의 peak를 0으로 설정
  2. Solvent를 기준으로 할 경우에는 온도에 따른 peak위치를 확인하고 설정

##### B. Peak picking (단축키 : K 혹은 Shift + K )

- i. Peak로 선택하는 작업
- ii. Automatic : Noise가 많지 않거나 간단하게 작업할 때
  1. Mnova는 noise 값을 자동으로 계산한다.
  2. Options : standard 에서 noise factor는 noise의 X배 이상의 signal만 peak로 picking하는 threshold임
- iii. Manual Threshold : 특정 위치만 peak picking할 때 영역을 drag하여 설정
- iv. Peak by peak : peak를 커서로 선택하여 지정할 때
- v. Table을 이용하여 peak정보를 쉽게 스프레드시트로 복사할 수 있다.

##### C. Integration (단축키 : I)

- i. Peak의 적분값을 구하는 작업
- ii. 적분을 원하는 영역을 drag한다.
  1. 첫번째 integration하는 영역은 1로 자동 normalize된다.
  2. 적분값이 적힌 곳 위에서 오른쪽 마우스를 클릭하여, 'Edit Integral'을 선택하여 적분값을 바꿀 수 있음
  3. Table을 이용하여 integral 표를 볼 수 있다.

##### D. Multiplet analysis (단축키 : J)

- i. J coupling을 측정하는 작업
- ii. 측정을 원하는 영역을 drag한다.
  1. 오른쪽 마우스를 클릭하여, 'Edit multiplet'을 선택하여 값을 바꿀 수 있음
  2. Table을 이용하여 j-coupling 표를 볼 수 있다. 논문형식 변경 가능

## 5. 화면 조작

A. Intensity : 마우스 휠로 intensity 조절

i. Fit to height : 단축키 H

B. Zoom : (단축키 : 화면확대 z, 화면 축소 : shift +z )

i. Z를 1번 누르면 drag한 가로로 화면 확대

ii. Z를 2번 누르면 drag한 세로로 화면 확대

iii. Z를 3번 누르면 drag한 박스로 화면 확대

iv. ESC를 누르면 zoom mode 해제됨

v. 화면축소도 위와 동일

C. 전체 화면 : 단축키 f

## 6. 화면 추가

A. Full spectrum view

i. 전체 스펙트럼을 별도로 보여주는 기능

ii. 메뉴 : View → Full view 체크후 생기는 박스를 스펙트럼 위에 drag하여 붙임

B. 부분확대 화면 추가 (단축키 : E)

i. 강조해야할 peak를 추가 화면으로 보여주는 기능

C. 스펙트럼 축소

i. 중간부분을 생략해서 보여줘야 할 때 사용하는 기능

ii. 화면 줄이기 : 단축키 X 누른후 사라지게 할 부분을 drag

iii. 화면 복원 : 단축키 V 누른 후에 사라졌던 부분을 drag



## 7. Stack Plot

- A. 겹칠 spectrum들을 processing하고 reference를 맞춘 후에 stack한다.
- B. 새로운 page를 만든후, (단축키 : Ctrl + M) Pages 패널에 새로생긴 페이지를 확인한다.
  - i. Pages 패널이 보이지 않을 경우에는 메뉴 View → Pages 체크
- C. Stack하기 원하는 페이지들을 선택한다.
  - i. Shift + 클릭, Ctrl + 클릭, Ctrl+A
  - ii. 페이지 순서대로 아래부터 stack되니 겹치기 전에 배열할 순서를 확인한다.
- D. 메뉴 Stack→ Stack Spectra를 클릭
- E. 메뉴 View → Table → Stacked Spectra를 선택하면 stacked spectrum의 table을 볼수 있다.
  - i. Multiply / Divide : 각각의 spectrum의 intensity 조절
  - ii. Show : 보여줄 스펙트럼 선택
  - iii. Select: 기능을 적용할 스펙트럼을 선택
  - iv. Invert : 역순으로 정렬한다.