

Mestrenova Manual

KAIST 화학과 NMR실

Rev 02.

Updated 2025.03.04

Mestrenova 설치

• Download Link

• 정식 버전 : 모든 NMR기능 사용가능

- <https://mestrelab.com/download/mnova/>
- Campus license : KAIST data 서버에서 다운로드 가능
 - Nmrchem.kaist.ac.kr의 Download 메뉴 참조
- 2025. 4월 8일까지
 - 최신 버전 사용가능
- 2025.4월 9일까지
 - 버전 15.1 이하로 다운로드 할것 (2025.4월 기준)

• Lite 버전 : 1D만 가능

- <https://mestrelab.com/download/mnova/nmr-lite/>
- Chemoffice v17이상 license 보유자만 사용가능
 - <https://mestrelab.com/news/new-mnova-lite-10-special-edition/>

| Mnova Lite Special Edition



Something you should know

You need to know that PerkinElmer® only includes Mnova Lite CDE for free with ChemOffice v17. Older versions such as ChemOffice v16 and lower do not include the free Mnova Lite license with your subscription. In the latter case, Mestrelab wants to help you with Mnova Lite Special Edition!

• Free software

- Topspin (학교/연구소 free. 사이트 등록 필요)
 - <https://store.bruker.com/products/topspin-for-processing-academic-government>
- NMRium
 - <https://www.nmrium.org/nmrium>

주요단축키

- 기본
 - 파일 열기 (Ctrl + O)
 - 기본 커서로 복원 (ESC)
 - Zoom in (Z)
 - Full spectrum(F)
 - Crosshair (C)
 - 화면 줄임(X)
 - 화면 복원(V)
 - 추가화면 (E)
- Processing
 - Apodization (W)
 - Phase Correction (Shift + P)
 - Baseline Correction (B)
- Analysis
 - Referencing (L)
 - Peak Picking (K)
 - Integration (I)
 - Multiplet (J)
 - Assignment (A)

The image displays the MestReNova software interface. At the top, a red ribbon menu contains tabs for File, Home, Advanced, View, Molecule, Prediction, Tools, Processing, Analysis, Assignments, Data Analysis, pageDatabase, and Options. A blue button labeled "메인 메뉴" (Main Menu) is positioned in the top right corner. Below the ribbon, a toolbar includes icons for Copy, Paste, Cut, New Page, Pages, Drawing, Editing, Text, Insert Object, and Add Signature. The main workspace shows a 2D NMR spectrum titled "2D_NMR.11.fid". The x-axis is labeled "f1 (ppm)" and ranges from 16 to -3. The y-axis ranges from -5,000,000 to 6,000,000. A blue button labeled "전체화면" (Full View) is located at the top left of the plot area. Another blue button labeled "스펙트럼" (Spectrum) is placed over the spectrum. A third blue button labeled "화면 조작" (Screen Manipulation) is located at the bottom right of the plot area. On the left side, a "Pages" panel shows a thumbnail of the spectrum with a blue button labeled "스펙트럼 선택" (Spectrum Selection) below it. At the bottom right, a blue button labeled "라이선스매니저" (License Manager) is visible. The status bar at the very bottom shows "Signature:" and "Licenses:" with icons.

화면조작

• Intensity 조절 및 화면 확대/축소

• 마우스 휠로 조절 가능

- Fit to Height (H)

• 화면 확대(Z)/축소(Shift+Z)



- Z 1번 클릭 → 가로 확대, 2번 클릭 → 세로, 3번 클릭 → 2D 확대

- ESC 누르면 확대 mode 해제

• Manual Zoom (M) : 확대할 범위 지정

• 전체 화면 (F)

• Expansion(E) :

- 확대한 보조 스펙트럼 화면 추가

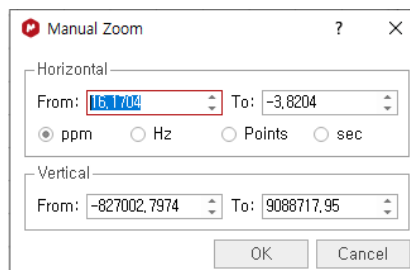
• 일부 범위 가리기 (가리기 X, 복원 V)

- X 클릭후 범وض지정하면 해당 범وض를 줄여서 보여줌

- V 클릭후 범وض지정하면 가려진 범وض를 복원하여 보여줌

• Cross Hair (C)

- 커서가 가르키는 정보를 보여줌



Cursor Info

Copy

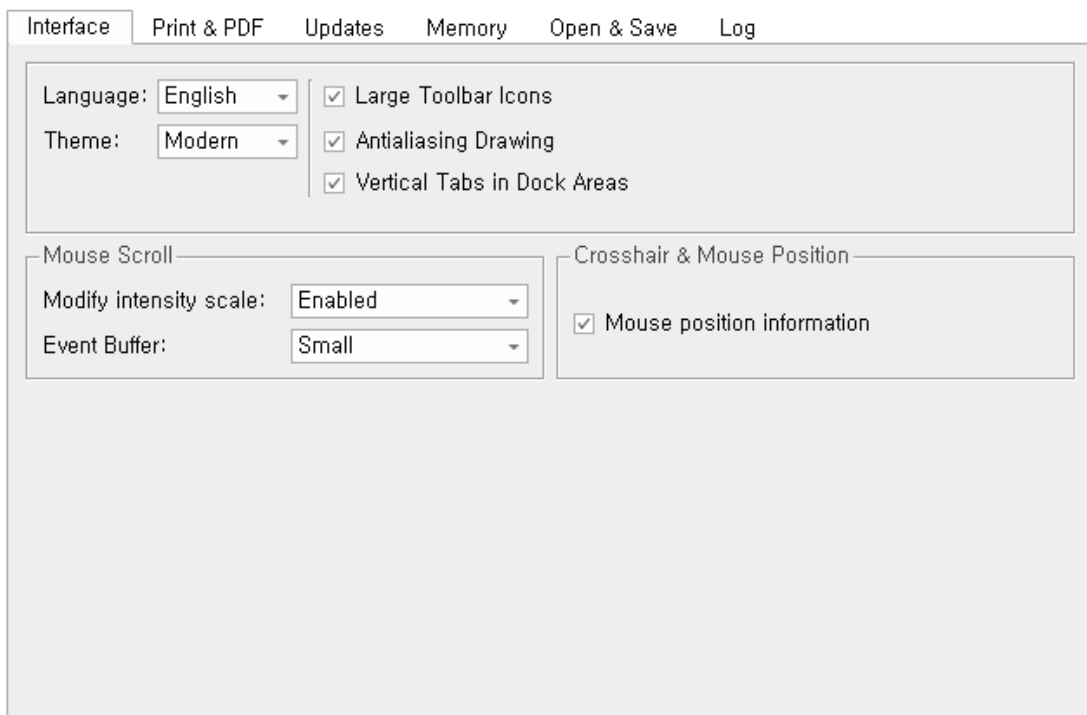
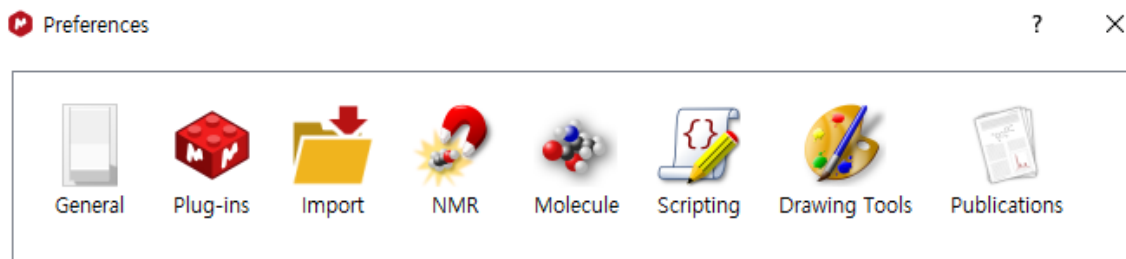
	ppm	Hz	pt
f1			
Now	-3.7675	-1884.61	65361.50
A	1.7131	856.93	47394.83
B	-1.8272	-914.04	59000.88
B-A	3.5403	1770.97	11606.05
Intensity			
Now	-230735		
A	4.853e+06		
B	3.85922e+06		
B-A	993780		
B/A	0.795224		
A/B	1.25751		

Spectrum Resolution

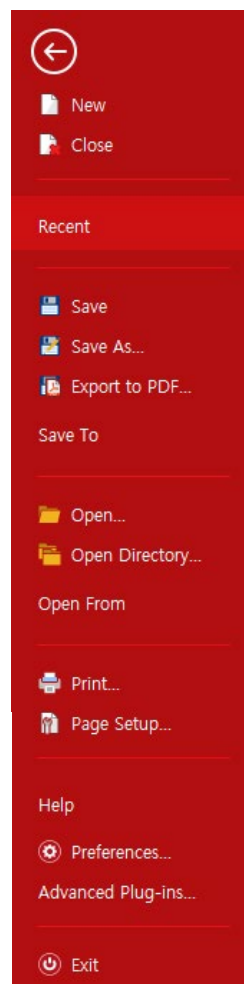
f1: 0.0003 ppm/pt

기본 환경 설정

- File → Preference
 - General → Interface
 - Language : 언어설정
 - Theme : Modern 권장
 - NMR → import
 - Raw data를 열 때 가져올 processing 파라미터 선택

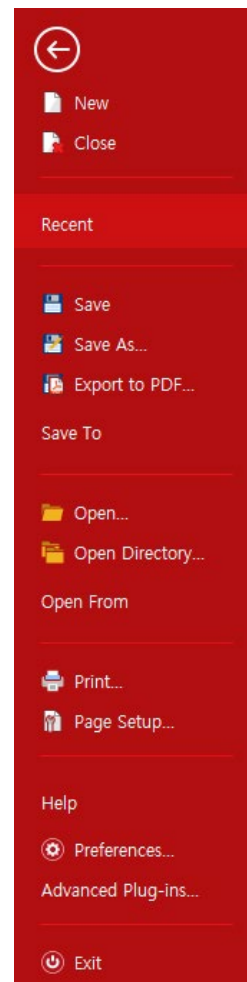


OK Save Load... Cancel



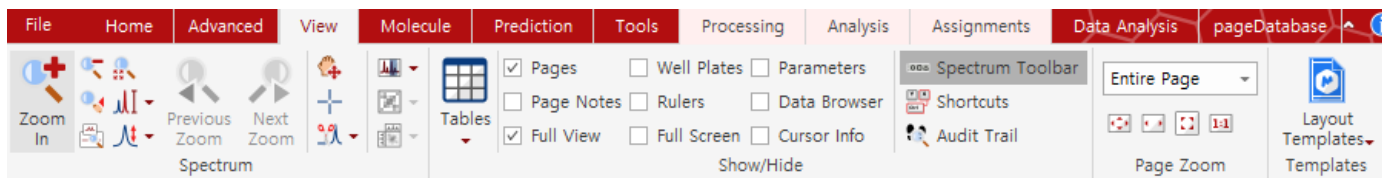
파일 열기

- 단축키 : Ctrl + O
- Open
 - Bruker 파일의 경우
 - 1D: FID 파일을 선택(raw data)
 - pdata\1r (processed spectrum)
 - 2D : SER파일을 선택
 - pdata\2rr (processed spectrum)
 - 그냥 folder째 drag-N- drop으로 열어도 됨
 - 압축파일을 그대로 붙여도 됨



- 주의 >
 - 구버전 (버전 8 이하) 를 쓰는 경우
 - NEO console(예>AVNEO400, AV500)에서 얻은 fid파일은 안열림
 - 1D의 경우, efp를 실행하여 pdata\1r 파일을 만들어서 가져가야 구버전의 mnova에서 파일이 보임
 - 2D의 경우에는 xfb 후 2rr

보기 설정



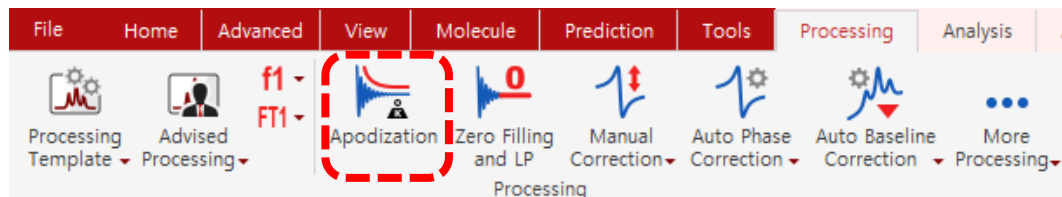
• View

- Tables : peaks, integrals, multiplets 등을 주로 사용
- Pages : 요약화면 보기 (side panel)
- Full View : 전체화면 요약해서 보여주기 (Navigation가능)
- Full screen : 전체화면 모드로 보여주기
- Parameters : 측정에 관련된 파라미터 확인 가능
- Cursor Info : 커서가 가르키는 정보 보여주기
- Spectrum Toolbar : 주로 사용하는 조회도구 (side panel)
- Shortcuts : 주로사용하는 단축키
- Audit Trail : 적용한 실행 log 보여주기

Processing 순서

- 1D 스펙트럼 processing
 - Apodization
 - 스펙트럼의 노이즈 레벨을 낮춤
 - Trade off 로 해상도가 낮아짐
 - Cf> SNR을 희생하여 digital resolution 향상도 가능
 - Phase correction
 - Peak의 모양을 In-phase로 나오게 조정
 - 보통 auto phase correction으로 충분
 - Paramagnetic 혹은 polymer 는 manual correction을 강하게 권장
 - Baseline correction
 - 스펙트럼의 baseline을 평평하게 조정
 - 일반적인 유기 물질을 정성적으로 분석할 때는 auto baseline correction도 무방
 - Broad peak 있거나 spectral width가 넓을 때는 manual correction 권장

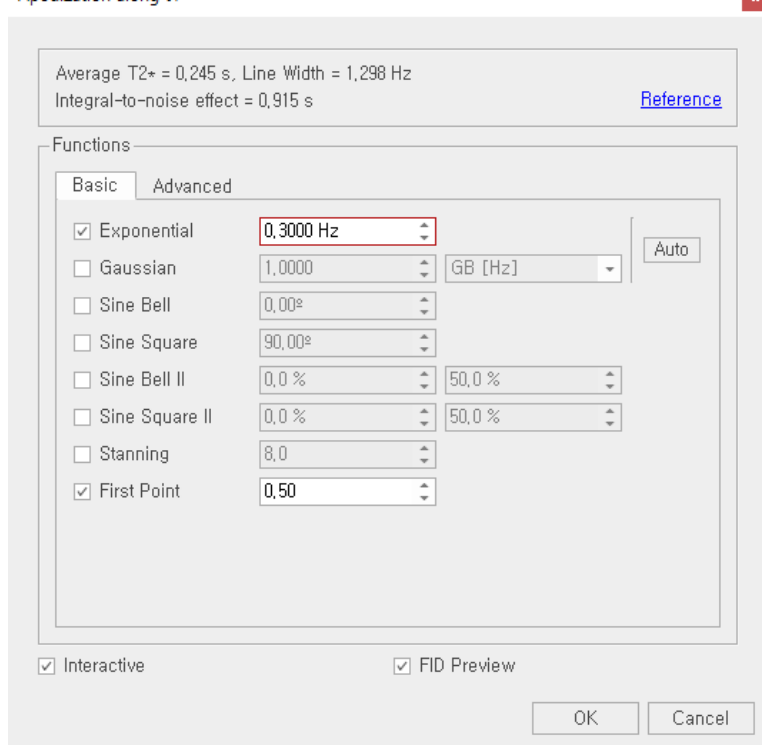
1D Processing (1)



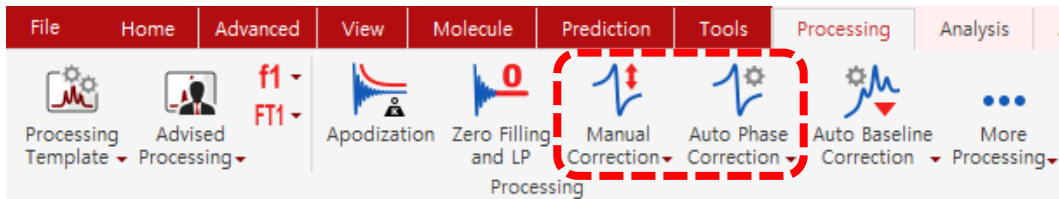
• Apodization (W)

- 노이즈 레벨을 낮춤
 - Trade off 로 해상도가 낮아짐
 - Cf> SNR을 희생하여 digital resolution 향상도 가능
- Exponential 사용
 - 1H는 0~ 0.3 Hz 권장
 - Resolution이 크게 문제되지 않은 경우에는 0~ 1Hz
 - Ex> 1D selective NOESY, CO2RR 정량분석
 - 13C는 0~2 Hz 권장
 - 타핵종은 상황에 따라 다름
- 주의사항
 - 너무 심하게 적용할 때는 Data Manipulation이 되니 주의
 - 반드시 apodization 적용 전 후의 스펙트럼을 비교하여 왜곡이 발생하는지 여부 확인할 것

Apodization along t1



1D Processing (2)

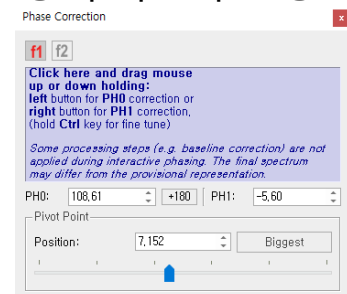
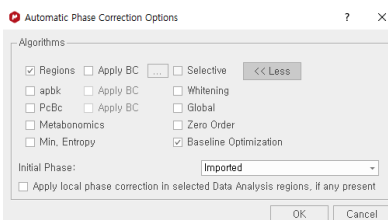


• Automatic Phase Correction

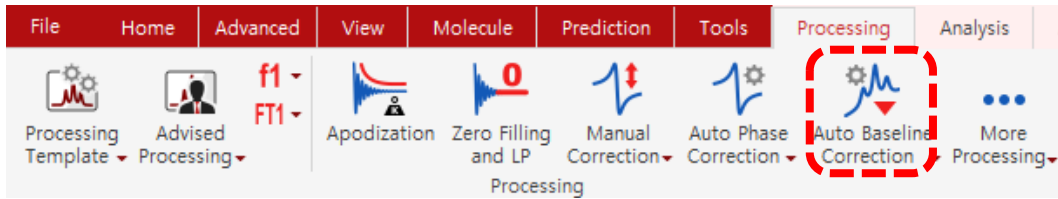
- 정성적으로 빠르게 분석하고 싶을 때 추천
- 적용후 peak가 대칭적이지 않은 부분이 있는지 확인
- Options
 - 일반적인 때 Global 권장
 - Baseline correction을 이용하면, phase와 baseline correction 을 같이 함
 - 19F, 29Si, 11B 같이 background signal이 나올 때 권장

• Manual Phase Correction(Shift+P)

- 정량 목적 또는 broad peak 있을 때, SW가 길 때
 - 예> qNMR, Polymer, paramagnetic NMR, heteronuclei
- 1차방정식으로 보정 ($ax+b$)
 - 0th order(global)
 - 모든 위치의 phase를 같은 각도로 조정
 - 1st order(gradient)
 - Pivot위치를 중심으로 linear하게 다른 각도로 조정
 - Pivot point
 - Gradient하게 phase를 다르게 할 때 설정하는 중심
- 조정 방법
 - 가장 구별이 잘되는 peak를 기준으로 pivot 위치를 설정
 - PH0으로 peak가 대칭인 모양이 되도록 조정
 - PH1으로 pivot에서 먼 위치의 peak들이 대칭인 모양이 되도록 조정
 - 한번에 안되면 pivot위치를 바꿔가면서 반복



1D Processing (3)



• Auto Baseline Correction

- 정성적으로 빠르게 분석하고 싶을 때 추천
- 적용 후 전체 스펙트럼 범위에서 Peak가 symmetric하게 나오는지 확인할 것

• Baseline Correction(B)

- 파란선이 스펙트럼 baseline에 맞도록 조정
- Method

• Polynomial Fit :

- 다항식으로 보정
- Filter : Autodetect 권장
 - Broad한 peak이 있을 경우에는 수동 설정
- Polynomial Order : 0 ~ 5 권장

• Whittaker Smoother

- Background signal이 있을 때 권장
- Broad peak이 사라질 수 있으니 주의

• Spines

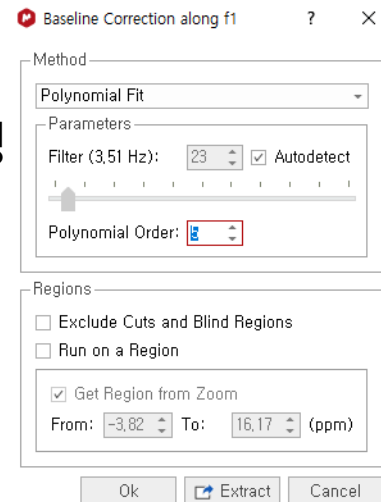
- Rolling이 있을 경우 권장
- Broad peak이 사라질 수 있으니 주의

• Run on a Region

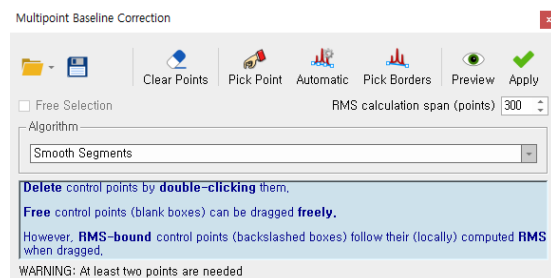
- 화면에 확대한 범위만 적용
- Solvent suppression 혹은 넓은 범위의 스펙트럼에 권장

• Multipoint Baseline Correction

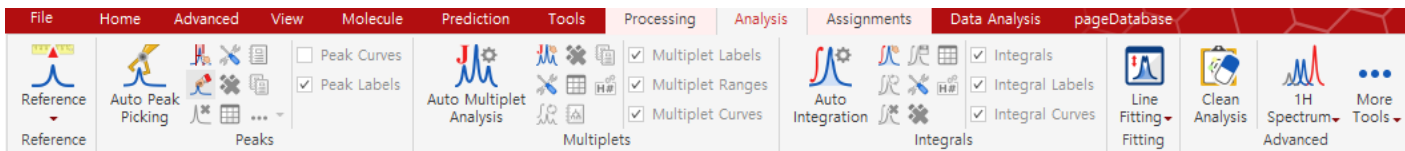
- 위의 방법으로도 안될 때 적용
- Pick Point로 baseline 선택후 apply



Whittaker Smoother
Polynomial Fit
Bernstein Polynomial Fit
Ablative
Splines
PCBC



1D 스펙트럼 분석



• Analysis

• Reference

- 정확한 chemical shift의 위치 보정
- IUPAC NMR Nomenclature (2001, revised 2008)
 - Pure Appl. Chem., 2001, Vol. 73, No. 11, pp. 1795–1818
 - Pure Appl. Chem., 2008, Vol. 80, No. 1, pp. 59-84
 - <http://dx.doi.org/10.1351/pac200880010059>

• Peak picking

- Peak 지정 및 annotation

• Multiplet Analysis

- J-coupling 계산 // Auto Assignment에 활용됨

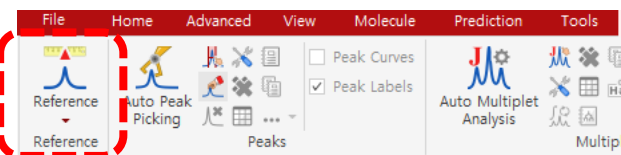
• Integral Analysis

- 정량 분석

• Line Fitting

- Deconvolution // overlap 심할 때 유용

1D 스펙트럼 분석(1)



	Reference	L
	Graphic Reference	R
	Reference By Solvent	
	Absolute Reference...	
	Auto Absolute Reference	
	Correct Xi value...	
	Xi Values...	
	Apply Saved Reference	
	Save Reference...	
	Edit Saved References...	

- Reference

- 정확한 chemical shift의 위치 보정
- Internal reference : 같이 넣어준 기준물질로 보정
- External reference : 별도의 NMR tube에 준비한 시료로 보정
- Absolute reference : 1H spectrum으로 타 핵종 보정

- 1H, 13C, 29Si

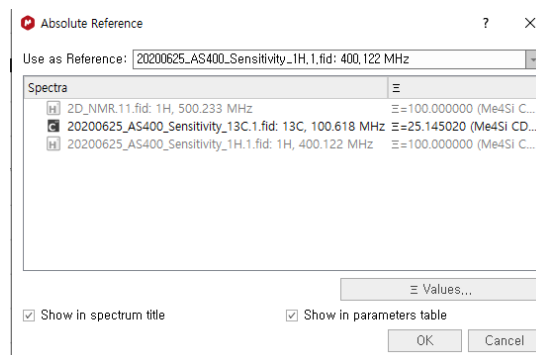
- 기준점 : 원칙적으로는 TMS의 1H, 13C를 0 ppm으로 설정
 - D₂O의 경우에는 DSS 또는 TSP를 0ppm으로 설정
 - TMS가 없을 경우에는 residual solvent peak으로 설정해도 됨

- 다른 nuclei

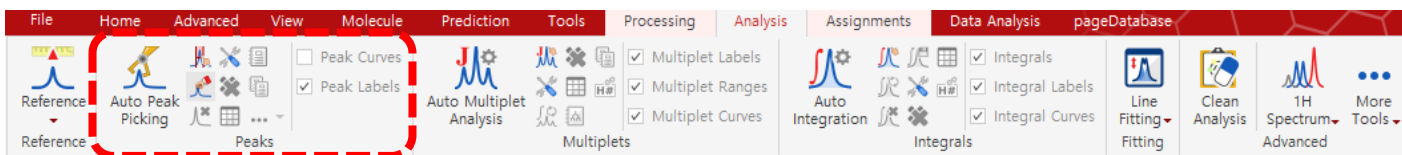
- External reference :
 - Ex> No-D NMR 혹은 coaxial NMR tube
- Absolute Reference : 1H 스펙트럼 기준으로 보정

- 방법

- Reference (L)
 - 특정 peak를 선택한 후 보정될 수치로 입력
- Graphic Reference (R)
 - 특정 peak를 선택한 후 보정되어야 하는 위치를 클릭
- Reference by Solvent
 - Residual solvent peak으로 보정
- Absolute Reference
 - Use as reference :
 - 사용할 1H 스펙트럼 선택하고 OK



1D 스펙트럼 분석(2)

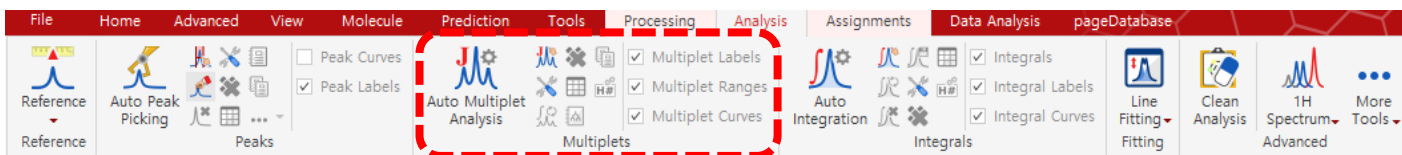


- Peak Picking

- Auto Peak Picking : 일반적으로 많이 사용
- Manual Threshold(K) : 선택한 box내의 peak를 지정
- Peak by peak (Ctrl+K): 선택한 위치의 peak를 지정
- Delete manually : 선택한 box내의 peak를 지정해제
- Delete All : 모든 peak정보 삭제
- Options : picking 선택사항
- Report peaks : peak들의 정보를 화면에 표시함
- Copy peaks : peak들의 정보를 클립보드로 복사함
- Tables
 - Intensity : peak의 높이, Width : peak의 넓이
 - Area : 높이와 넓이로 부터 계산한 넓이
 - GSD 분석으로 파악한 peak정보로 계산한 넓이로 integral값과 다름
 - Type : Compound, impurity, Artifact, Solvent, Reference 지정
 - Flags : Hidden, Weak, Satellite, Rotational, Labile등 지정 가능
 - Impurity/Compound
 - Annotation : 기재한 정보가 스펙트럼 peak위에 표시됨
 - 전체 선택 후 해당 정보를 스프레드시트(예>엑셀)로 복사 가능

	ppm	Intensity	Width	Area	Type	Flags	ity/Comp	Annotation
1	8.51	8451.0	3.88	340953.85	Impurity	Weak		
2	8.49	8356.9	4.08	350683.90	Impurity	Weak		
3	8.27	235097.0	2.98	716697...	Compound	None		
4	8.25	244275.9	3.02	750411...	Compound	None		
5	8.17	1534.7	2.37	36778.28	Artifact	Weak		
6	8.15	1571.0	2.80	43895.03	Artifact	Weak		

1D 스펙트럼 분석(3)

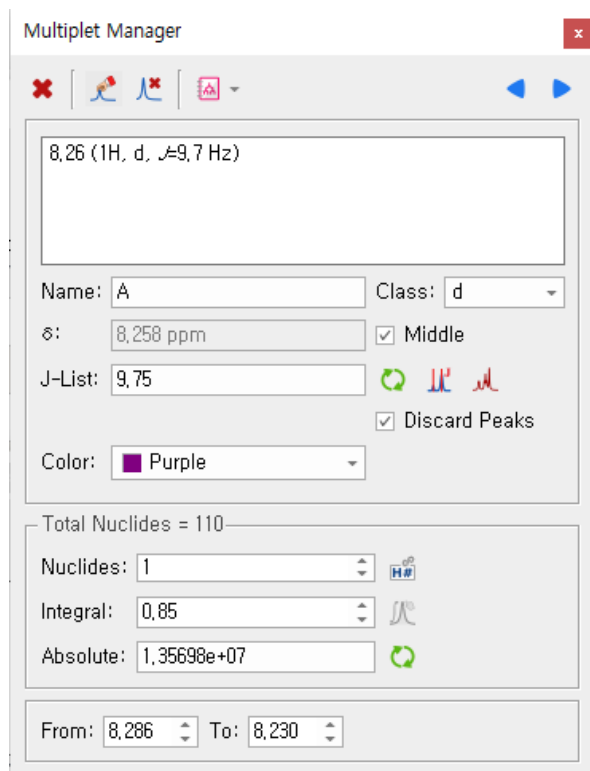


- Multiplet Analysis

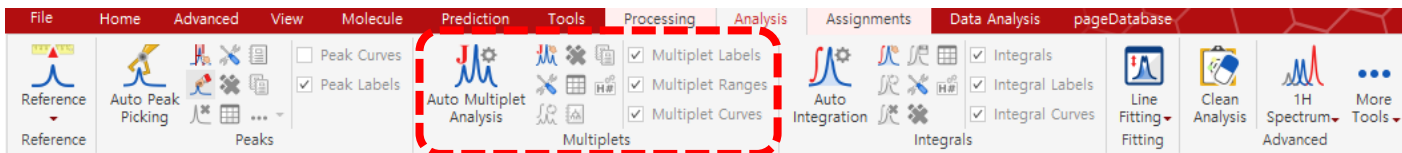
- Coupling constant와 multiplet 계산
 - integral도 같이 계산해줌
- Automatic Multiplet Analysis
 - Spectrum Quality가 나쁘지 않을 때는 권장 (topshim QF < 0.4이하)
- Manual (J) : 선택한 box내의 peak의 Coupling 상수 계산
- Options : integral 계산 방법 선택
 - Recalculate : 바꾼 설정으로 다시 integral 계산
- Delete All : 전체 정보 삭제
- Report : multiplet 정보를 화면에 표시
- Copy : multiplet 정보를 클립보드로 복사

- Multiplet Manager

- Name : 이름 표시
- Class : multiplet 정보 변경 가능
- J-List : coupling 상수 변경가능
- Color : 색 지정
- Nuclides :
 - 해당 peak에 nuclei 개수 지정
- Integral : 적분값
- From ~ To : 범위 변경 가능



1D 스펙트럼 분석(4)



- Multiplet Analysis

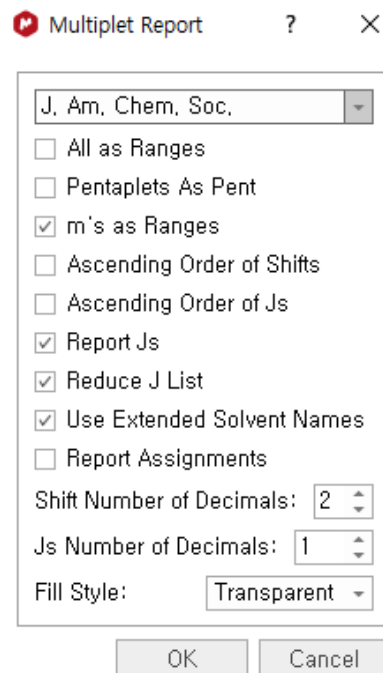
- Table

- Name : Multiplet 이름 (Class는 괄호안에 표시)
- Shift : multiplet의 중간 chemical shift 위치
- Range : multiplet 선택된 범위
- H's : 포함된 proton의 개수
- Integral : 적분값
- Class : Class 표시
- J's : Coupling constant 값들 표시

- Setup report

- 논문에 맞춰 표시 형식 선택 가능
 - Journal의 Author guide line 참조

- Text와 Table은 클립보드로 복사 가능



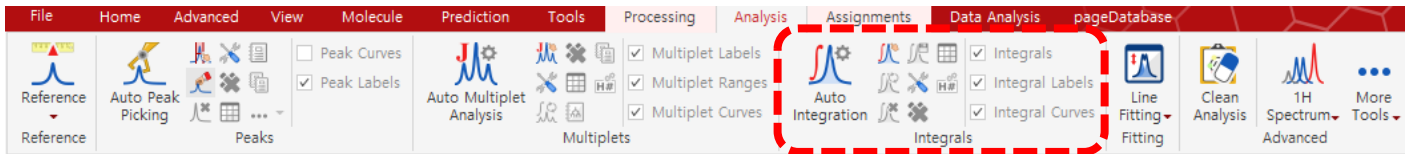
Multiplets

Report Multiplets - Copy Multiplets - Setup Report - Delete

δ_{H} (500 MHz, Benzene-*d*₆): 8.26 (1H, d, *J*=9.7 Hz), 7.97 (1H, d, *J*=7.3 Hz), 7.61 (1H, d, *J*=7.8 Hz), 7.45 (1H, d, *J*=8.7 Hz), 5.86 (1H, dd, *J*=10.8, 3.7 Hz), 5.72 (1H, d, *J*=7.5 Hz), 5.68 – 5.47 (3H, m), 5.38 (1H, dd, *J*=10.4, 5.5 Hz), 5.33 (1H, dd, *J*=8.5, 5.5 Hz), 5.25 (1H, d, *J*=11.0 Hz), 5.11 (1H, dt, *J*=9.7, 7.4 Hz), 4.92 – 4.75 (3H, m), 4.20 (1H, d, *J*=6.9 Hz), 4.00 (1H, d, *J*=13.8 Hz), 3.72 (3H, s), 3.22 (3H, s), 3.07 (3H, s), 2.97 (3H, s), 2.88 (6H, d, *J*=38.6 Hz), 2.73 – 2.59 (2H, m), 2.58 (3H, s), 2.41 (1H, ddd, *J*=13.8, 8.5, 5.2 Hz), 2.32 – 2.03 (8H, m), 1.83 – 1.71 (5H, m), 1.67 (3H, d, *J*=7.2 Hz), 1.61 – 1.51 (2H, m), 1.49 – 1.35 (2H, m), 1.34 – 1.20 (3H, m), 1.15 (15H, ddd, *J*=8.2, 6.7, 2.4 Hz), 1.08 – 0.79 (27H, m), 0.63 (3H, s)

	Name	Shift	Range	H's	Integral	Class	J's
1	Y (m)	2.21	2.32 .. 2.03	8	7.58	m	
2	X (ddd)	2.41	2.46 .. 2.37	1	1.06	ddd	5,22, 8,50, 13,81

1D 스펙트럼 분석(5)



- Integration

- Auto Integration

- 대략적인 정량일 때는 사용할 만함. (정량용도로는 추천 안함)

- Manual(I) : 선택한 box의 integral 계산

- Delete Manually : 선택한 integral 삭제

- Delete All : 전체 삭제

- Options : 설정 변경

- Sum : 전통적인 적분 방법 (선택한 범위를 직접 적분함)

- Peaks : GSD분석된 peak 형태를 기준으로 area를 계산

- Overlap이 심할 때 유용

- Recalculate : 변경된 설정값으로 다시 계산

- Integral Manager

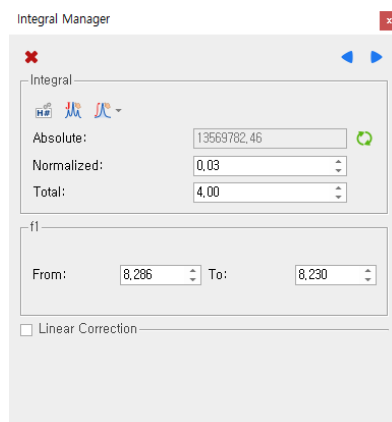
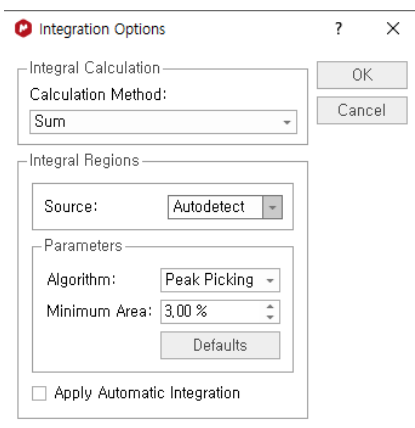
- Normalized : 기준값을 설정 가능

- Total : 전체 Nuclide의 수를 설정 가능

- F1 (Range) : 적분값을 계산할 범위 변경 가능

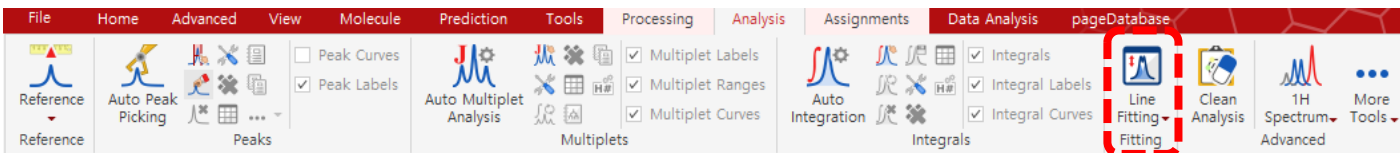
- Table

- 클립보드로 복사 가능



Integrals			
	Range	Normalized	Absolute
1	8.29 .. 8.23	0.03	13569782.46
2	8.01 .. 7.94	0.03	14432979.92
3	7.64 .. 7.59	0.03	14193537.43
4	7.48 .. 7.42	0.03	13823873.19

1D 스펙트럼 분석(6)



• Line Fitting (Deconvolution)

• Region

- New : Line fitting할 지역을 지정
- Edit : Line fitting할 지역을 편집
- Delete : Line fitting할 지역을 삭제

• Peak

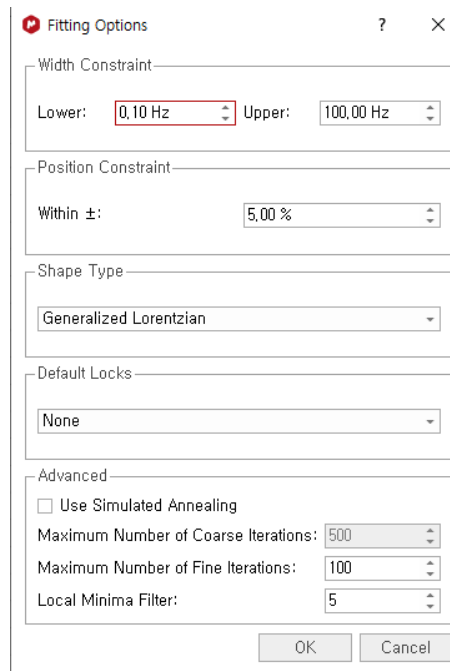
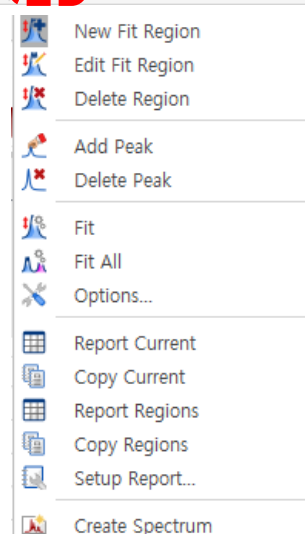
- Add : 선택한 위치에 peak를 추가
- Delete : 선택한 peak를 제거

• Fit

- 설정값에 맞춰 peak line fitting

• Options

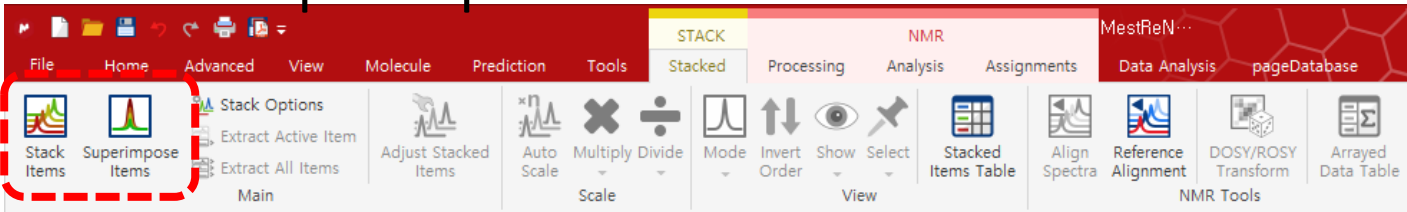
- Width Constraint :
 - Peak 폭의 하한치와 상한치 설정
 - Broad peak일 경우에는 Upper를 크게 설정
- Position Constraint
 - 위치 이동을 허용할 범위
 - 웬만하면 그냥 기본값 권장
- Shape Type
 - 웬만하면 Generalized Lorentzian
- Default Lock : 고정시킬 파라미터 지정
 - Shift : Chemical shift 위치
 - Height : peak 높이
 - Width : peak 폭
 - L/G : Lorentzian/Gaussian 비율
 - Area : peak 면적
- Simulated annealing
 - 좀더 나은 fitting 결과를 얻기 위해 SA 실행



	Shift(ppm)	Height	Width(Hz)	L/G	Area
1	7.3076	34249.29	3.95	0.04	1384561.767
2	7.1561	911083.63	1.33	1.00	10815184.655
3	7.1527	3495497.31	2.64	2.00	69614948.544
4	7.1510	2000976.18	2.25	0.59	42778458.992
5	7.1488	2016626.58	1.67	0.49	32334470.285
6	7.1467	686837.90	1.07	1.37	6188812.164
7	6.9913	34966.59	4.12	0.43	1399139.478

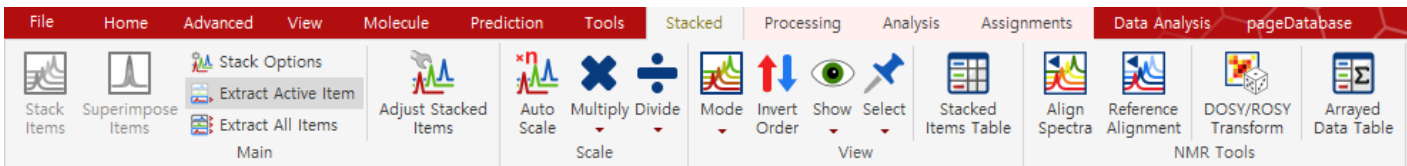
Residual Error: 1.11313e+09

Multiple spectrum



• Stacked

- Pages 탭에서 여러 개의 스펙트럼을 선택하면 보임
- Stack Item : 여러 층으로 쌓아서 비교
- Superimpose : 겹쳐서 비교



• Stack

- Options : 설정 (page properties에서 더 많은 설정 조정 가능)
- Extract : 겹쳐진 스펙트럼들을 분리해서 새 페이지 만듦

• Adjust : 스펙트럼의 좌우 위치 조정

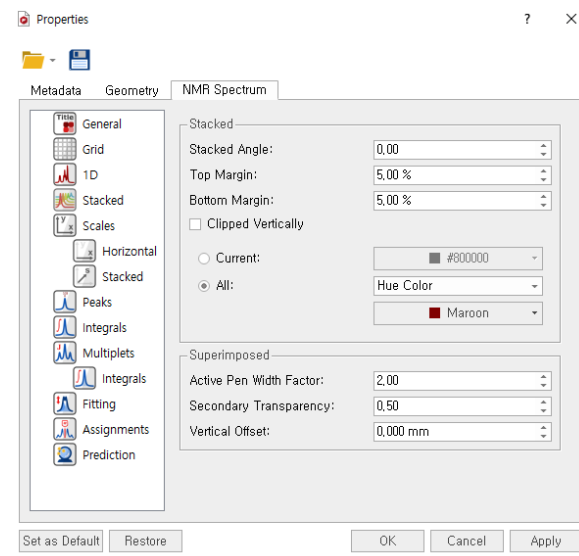
• Scale : 높낮이 조정

• View : 보기 설정

- Stacked Items Table

• 그외에...

- Properties : Stacked
- Data analysis



Other functions ...

- Signal suppression
- Reference Deconvolution
- Resolution Enhancement

