



Uso de software especializado para el tratamiento, análisis y presentación de datos (MestRenova, Origin, Imagej, GIMP, Olex2)

Profesorado: Dr. Luis Arturo Obregón Zúñiga, Dr. Israel Alejandro López Hernández y Dr. Eugenio Hernández Fernández (FCQ-UANL)

Modalidad: Presencial

Fechas: 9 al 11 de octubre de 2023

Cupo máximo: 30 personas

OBJETIVO GENERAL

- Generar gráficos y figuras para la presentación de resultados científicos que cumplan con los estándares de calidad para su publicación en revistas científicas de alto impacto.
- Llevar a cabo la resolución, refinamiento y terminación de estructuras de rayos x de monocristal mediante el uso del software Olex2.

OBJETIVOS PARTICULARES

- 1) Utilizar MestReNova para el análisis, interpretación y presentación de espectros de RMN de ^1H y ^{13}C .
- 2) Utilizar OriginPro para graficar espectros dos y tres ejes, gráficos de barras y curvas de calibración.
- 3) Utilizar ImageJ para la medición de elementos (partículas, células, fibras, etc.), identificación de proporciones, medición de ángulos en micrografías; además del proceso de reescado y su etiquetado.
- 4) Utilizar GIMP para la estructuración, etiquetado y redimensionamiento de figuras que incluyen más de un elemento (gráficas, micrografías, esquemas, etc.).
- 5) Utilizar Olex2 para la resolución, refinamiento, análisis e interpretación de estructuras de rayos X.

REQUISITOS Y ANTECEDENTES REQUERIDOS PARA LOS PARTICIPANTES

Estudiantes egresados y profesores de programas de Química y áreas afines.

Los requerimientos mínimos de cómputo son:

- Computadora portátil que cumpla con los requisitos de las últimas versiones de los siguientes programas MestReNova, OriginPro, ImageJ, GIMP, Olex2.
- Se recomienda descargar la versión de Windows.

CONSIDERACIONES IMPORTANTES

En las siguientes ligas encontraran los sitios para descargar los programas a utilizar:

<https://imagej.nih.gov/ij/download.html>

<https://www.originlab.com/try>

<https://www.gimp.org/downloads/>

<https://mestrelab.com/download/mnova/>

<https://www.olexsys.org/olex2/docs/getting-started/installing-olex2/>

Antes de inscribirse se les recomienda revisar la compatibilidad de estos programas con su computadora.

CONTENIDO TEMÁTICO

9 de octubre	Presentación del curso
	Introducción al software MestReNova
	Conceptos generales sobre la RMN y manejo de comandos clave
	Predicción de espectros de RMN de ^1H y ^{13}C
	Cómo referenciar de acuerdo con el disolvente utilizado
	Cómo eliminar y editar las escalas
	Cómo mostrar los desplazamientos químicos, integrar las diferentes señales y generar constantes de acoplamiento
	Cómo generar ampliaciones en un mismo espectro
	Cómo reportar los resultados para su divulgación
Dudas generales	
10 de octubre	Cómo generar graficas de dos ejes en OriginPro
	Cómo generar graficas en tres ejes en OriginPro
	Cómo generar graficas de barras en OriginPro
	Cómo representar una curva de calibración en OriginPro
	Cómo editar ejes en OriginPro
	Cómo editar líneas de trazado y puntos en OriginPro
	Cómo editar una acotación en OriginPro
	Cómo exportar una figura en OriginPro
	Cómo medir un elemento en ImageJ
	Cómo medir ángulos en ImageJ
	Cómo medir múltiples elementos en ImageJ
	Cómo fijar una escala en ImageJ
	Cómo reetiquetar una escala en ImageJ
	Cómo exportar una figura en ImageJ
	Cómo dimensionar un lienzo en GIMP
Cómo recortar, redimensionar y posicionar un elemento de una figura en GIMP	

	Cómo agregar etiquetas y ordenar capas en GIMP
	Cómo exportar en diferentes formatos, tamaños y resoluciones en GIMP.
11 de octubre	Introducción al software Olex2
	Conceptos clave
	Preparación de archivos de estructuras de monocristal para su resolución en Olex2
	Comandos básicos
	Refinamiento de estructuras
	Terminación de estructuras
	Cómo reportar los resultados para su divulgación
	Dudas generales y clausura

Dudas y comentarios escribir a: amqomexico@gmail.com

Contacto directo con el profesorado:

Dr. Luis Arturo Obregón Zúñiga

luis.obregonzn@uanl.edu.mx

Dr. Israel Alejandro López Hernández

Israel.lopezhr@uanl.edu.mx

Dr. Eugenio Hernández Fernández

eugenio.hernandezfr@uanl.edu.mx

Patrocina



INSTRUMENTOS CIENTÍFICOS
PARA UNA VIDA MEJOR

MERCK



Desarrollo de Especialidades Químicas

