



# ACD LABS

## Notice simplifiée

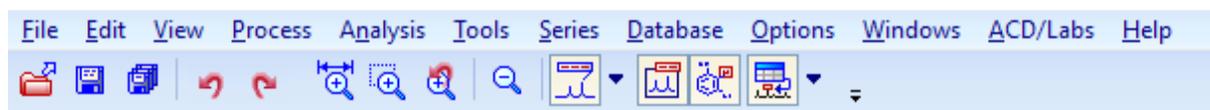
Sophie Bertaux  
Margaux Cazenave  
Projets CPE, juin 2019



# Principaux éléments de la barre d'outils

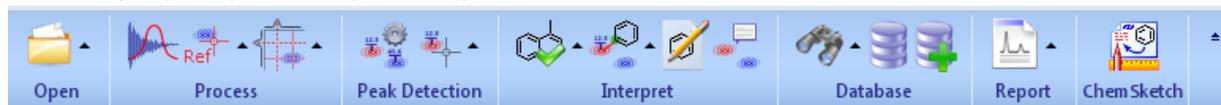
## Logiciel ACD Spectrus Processor

Dans l'onglet principal en haut :



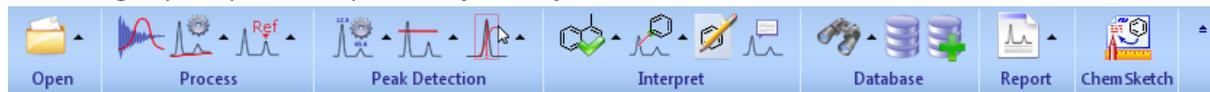
-  : Ouvrir un fichier
-  : Retour à l'action précédente
-  : Zoom horizontal
-  : Zoomer sur la zone sélectionnée
-  : Retour sur le zoom précédent
-  : Revenir au spectre en intégralité

Dans l'onglet principal en bas pour les **spectres 2D** :



-  : Ouvrir un fichier
-  : Calibrage manuel du pic de référence
-  : Analyse automatique du spectre
-  : Curseur indiquant les déplacements chimiques
-  : Attribution automatique des pics
-  : Attribution manuelle des pics correspondant aux atomes de la molécule

Dans l'onglet principal en bas pour les **spectres protons et carbones** :



-  : Corriger la ligne de base
-  : Calibrage manuel du pic de référence



Pea : Analyse automatique du spectre



Peak Detect : Donner les déplacements chimiques des pics sélectionnés



Integration : Intégration des pics sélectionnés



: Attribution automatique des pics



Interp : Attribution manuelle des pics correspondant aux atomes de la molécule

## Logiciel CNMR Predictor

Dans l'onglet principal :

1-ChemSketch 2-Calc CNMR 3-Calc HNMR 4-CNMR Spectrum 5-HNMR Spectrum 6-History 7-Database 8-Search 9-Update DB

1-ChemSketch : Onglet pour dessiner la structure de la molécule

2-Calc CNMR : Onglet pour simuler le spectre carbone de la structure précédemment dessinée

3-Calc HNMR : Onglet pour simuler le spectre proton de la structure précédemment dessinée

Barre d'outils pour le **spectre carbone** :



: Zoomer/Dézoomer



: Afficher le déplacement chimique de chaque pic



: Afficher le numéro de l'atome correspondant à chaque pic

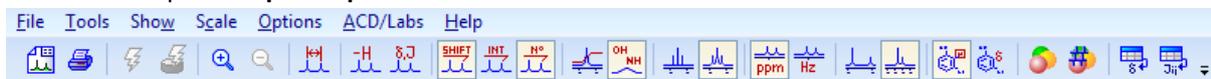


: Afficher le spectre DEPT



: Afficher les pics correspondant au CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, CH ou aux C quaternaires

Barre d'outils pour le **spectre proton** :



: Afficher le déplacement chimique de chaque pic



: Afficher le numéro de l'atome correspondant à chaque pic



: Afficher le pic des protons libres (-OH, -NH, etc.)

Barre d'outils en bas de chaque spectre :

500 MHz | 0.100 Hz | 627 lines | Plot Values: Default | Training Score: 39.8 (0 - 100) | Predicted in Solvent(s): Chloroform-D

Modifier la  
fréquence

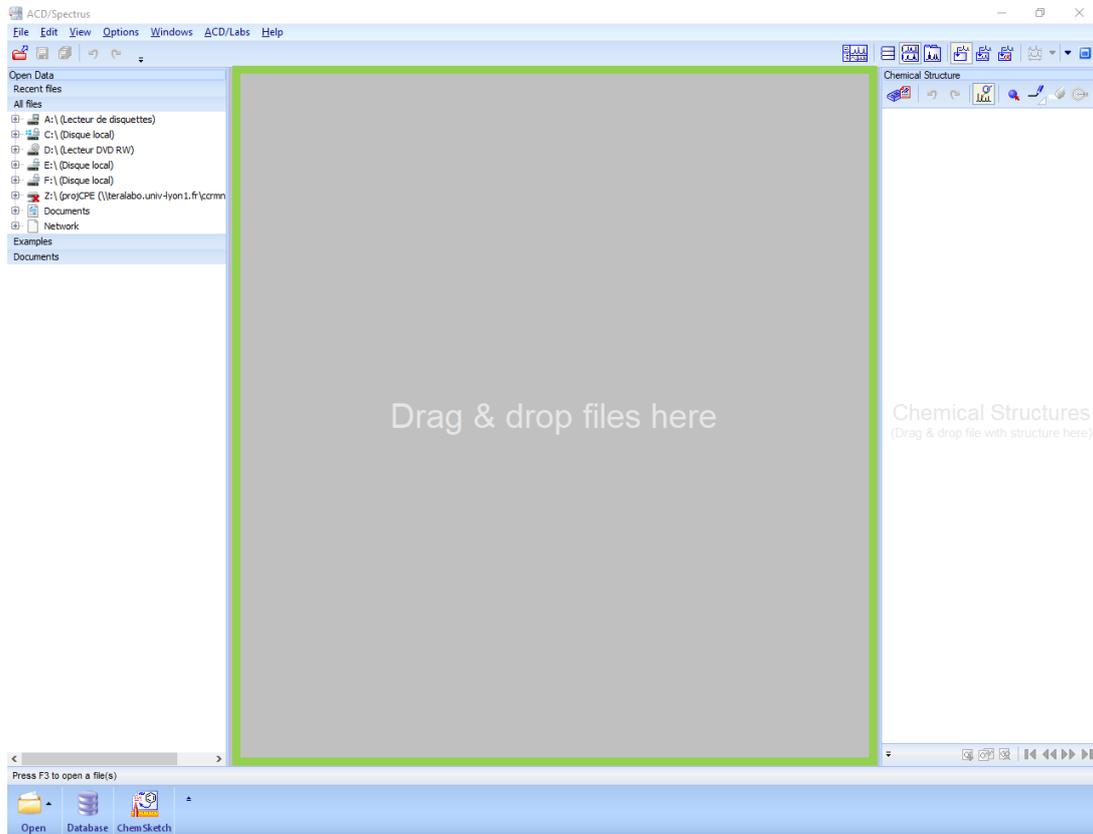
Modifier le  
solvant

# Traitement de spectre

## Traitement des spectres proton /carbone

Ouvrir le logiciel « **Spectrus Processor** » 

La fenêtre suivante s'ouvre :

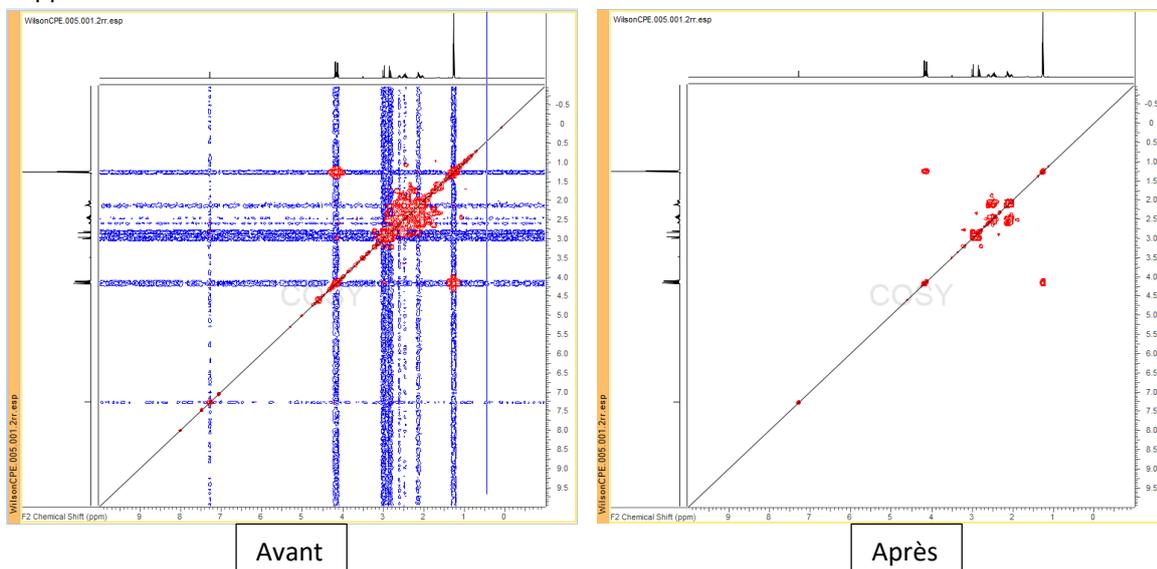


Sélectionner le spectre à analyser présent dans les documents et le glisser dans la zone encadrée en verte (voir image ci-dessus). Le spectre s'affiche.

## Traitement de spectre 2D

Ouvrir le spectre 2D.

Supprimer le bruit à l'aide de la molette de votre souris.

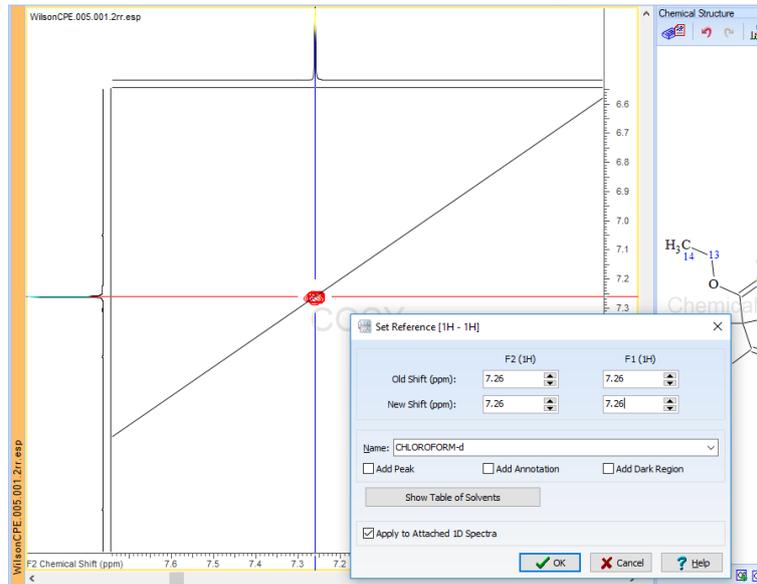


## Calibrage

Selon le solvant utilisé, noter sa fréquence de référence disponible dans les tables (par exemple : chloroforme : 7.26 ppm en proton et 77.36ppm en carbone). Zoomer sur la tache de solvant. Cliquer sur



et sélectionner la tache. La fenêtre suivante apparait et renseigner ses déplacements chimiques.

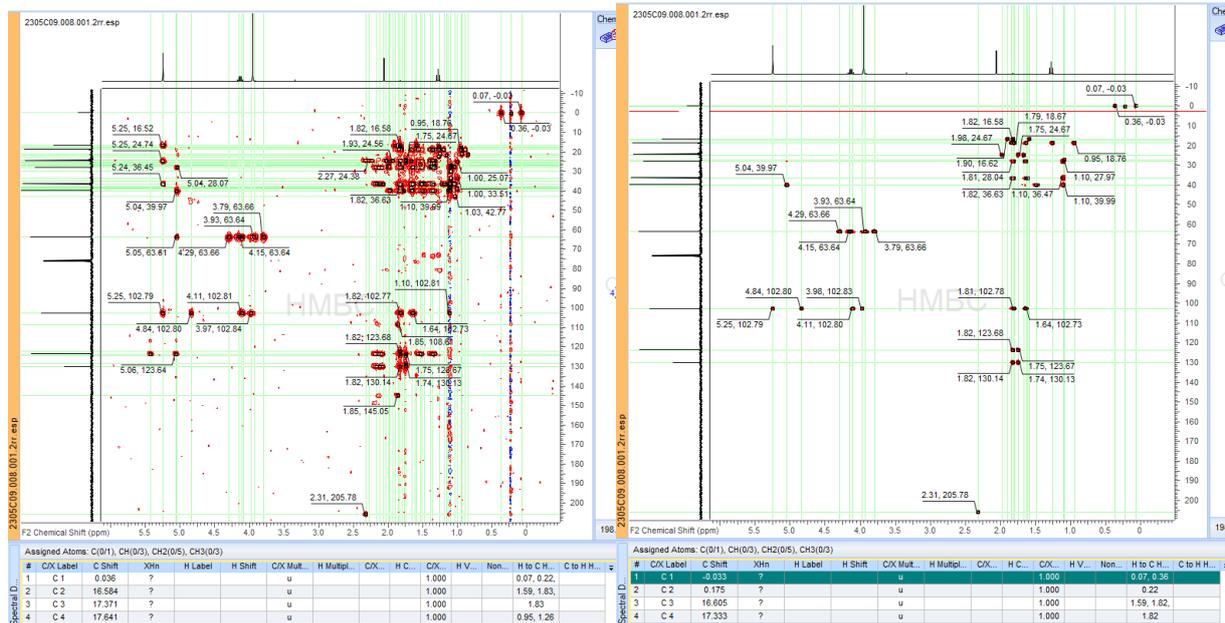


## Peak picking

Pour afficher automatiquement les déplacements chimiques des tâches, supprimer le bruit avec la molette



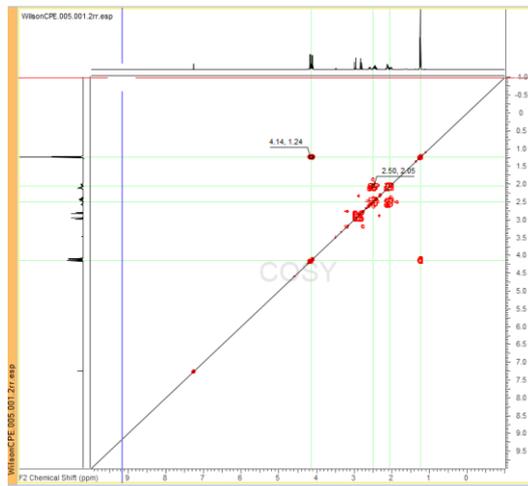
de la souris. Puis, cliquer sur . La fenêtre suivante est obtenue :



Avec le bruit

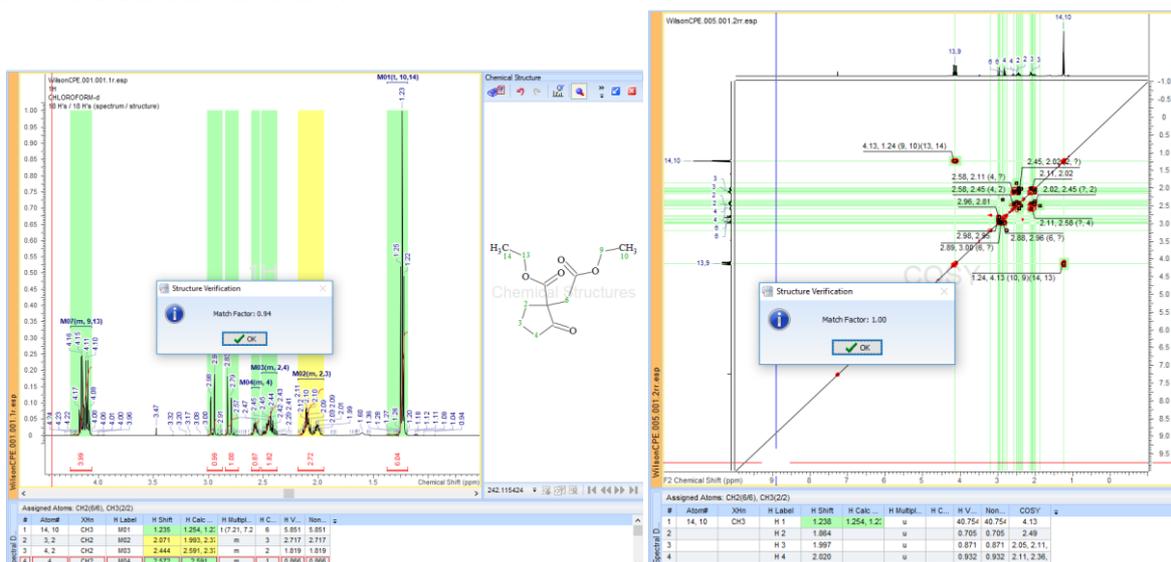
Sans le bruit

Pour afficher manuellement les déplacements chimiques des tâches, cliquer sur . Sélectionner les tâches à l'aide du curseur afin d'afficher son déplacement chimique. Voir photo ci-dessous :



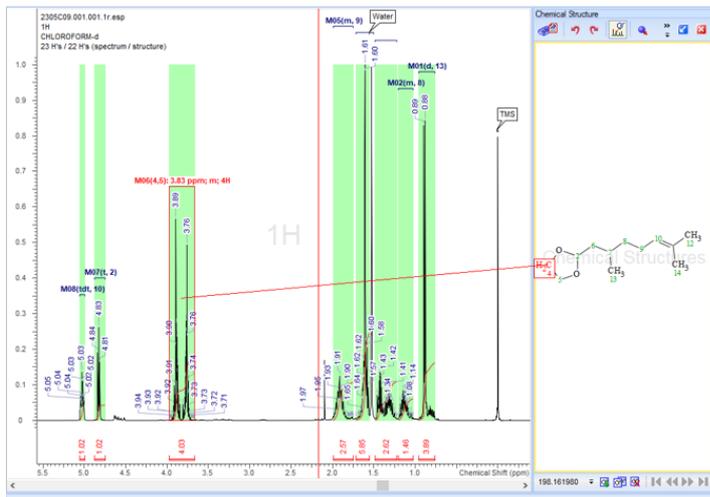
## Attribution

Pour attribuer automatiquement les pics ou les tâches aux atomes de la molécule, cliquer sur . Les fenêtres ci-dessous s'affichent :



Pour visualiser l'attribution, déplacer la souris sur les atomes de la molécule ou sur les tâches du spectre. Le logiciel calcule des probabilités pour l'attribution. Les pics surlignés en vert représentent une probabilité élevée et en jaune une probabilité plus faible.

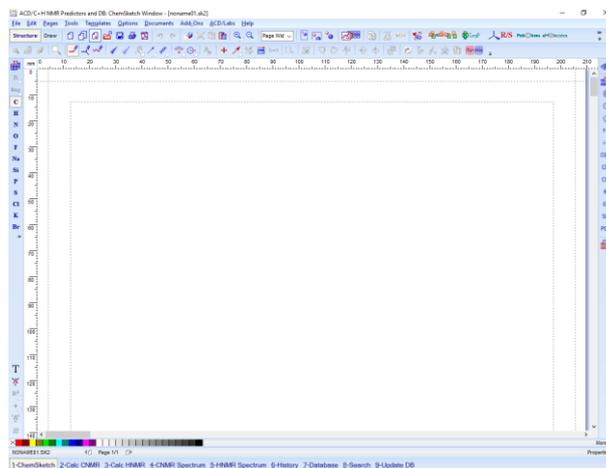
Pour attribuer manuellement les tâches aux atomes de la molécule, cliquer sur . Puis, cliquer sur l'atome et faire glisser la souris jusqu'au pic souhaité.



## Simulation de spectre

Ouvrir le logiciel « CNMR Predictor » 

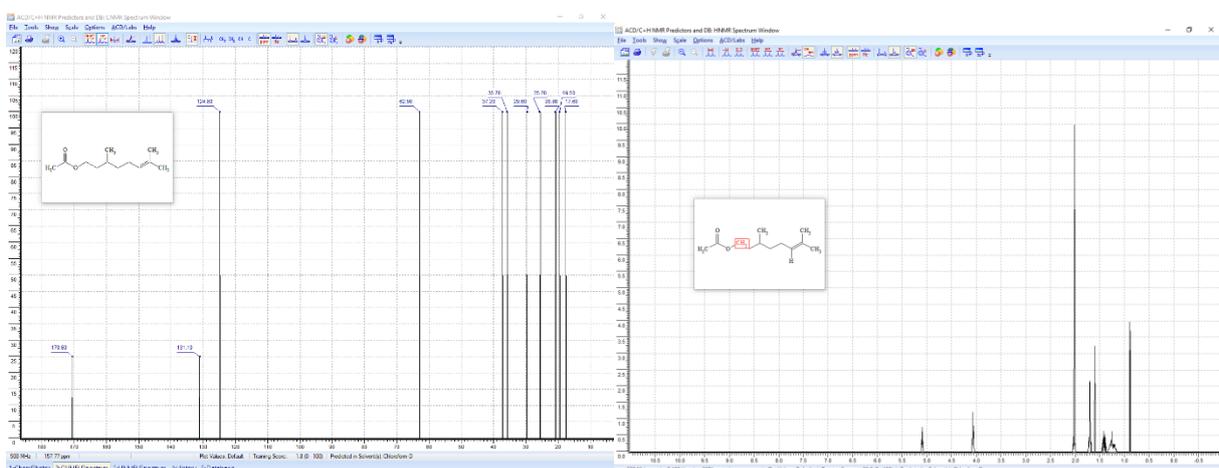
L'interface suivant s'ouvre :



Sur cette interface, il faut soit dessiner la molécule soit importer la molécule. Une fois la molécule présente, cliquer sur [2-Cal: CNMR](#) pour simuler le spectre carbone ou sur [3-Cal: HNMR](#) pour simuler le spectre proton.

 Il faut retourner sur l'onglet [1-ChemSketch](#) pour simuler un autre spectre !

Les fenêtres suivantes sont obtenues :



Spectre carbone simulé

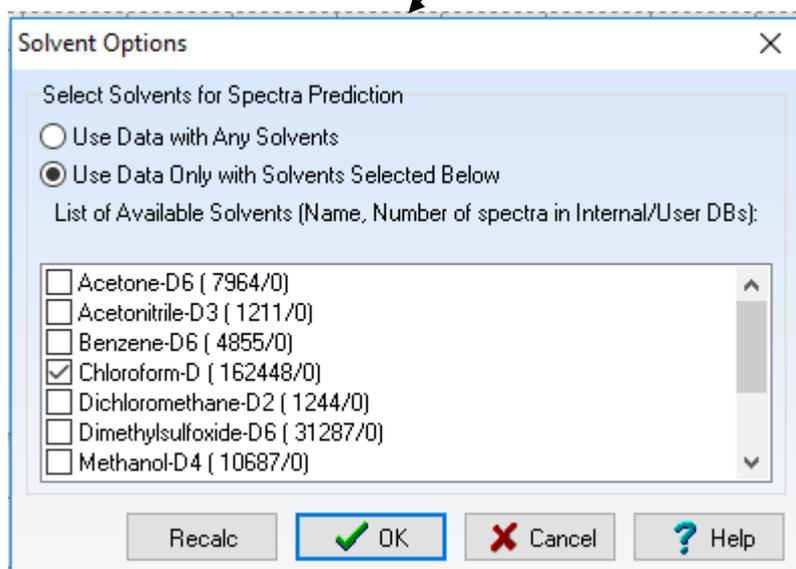
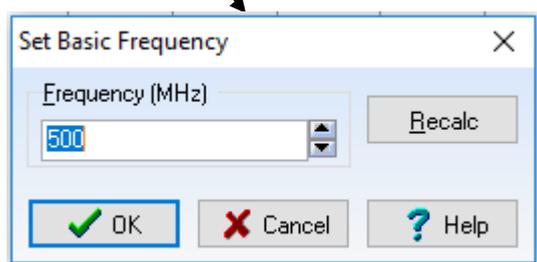
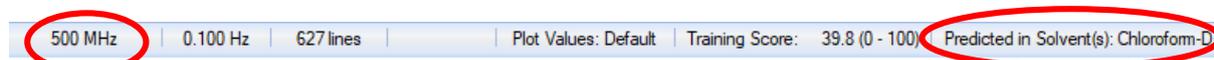
Spectre carbone simulé

Cliquer sur  pour numéroté la molécule et sur  pour afficher les déplacements chimiques.

Pour afficher le spectre DEPT à partir du spectre carbone simulé, cliquer sur .

Pour visualiser l'attribution, déplacer la souris sur les atomes de la molécule ou sur les pics du spectre.

Pour informer les conditions d'analyse (fréquence, solvant, etc.) cliquer sur la fréquence ou sur « **predicted in solvent(s)** ». Les fenêtres ci-dessous s'ouvrent :

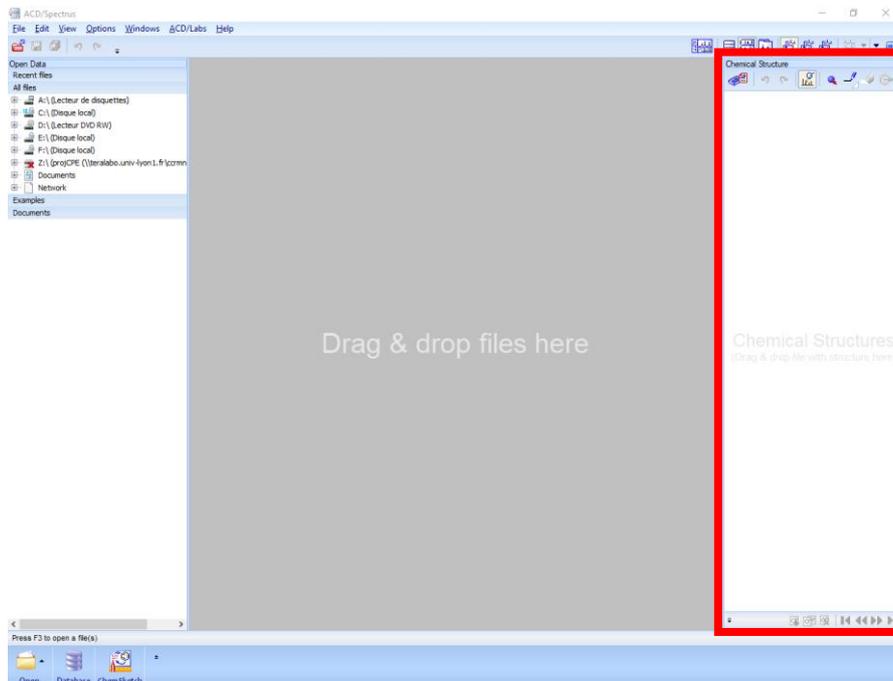


## Astuces utiles

Si le spectromètre détecte un pic proche de 0 ppm (par exemple de la graisse), ce pic sera automatiquement calibré à 0 ppm sur le spectre expérimental obtenu. Il est donc essentiel de recalibrer les spectres à partir des pics de solvant. Cependant, un décalage peut être observé pour les spectres 2D. Il faut également les recalibrer avant toutes études des spectres.

Il est conseillé de dessiner la molécule sur TopSpin et de l'enregistrer dans le dossier avec tous les spectres expérimentaux. Elle serait alors automatiquement reconnue dans les autres logiciels (Mnova, ACD Labs, CMC Assist, CNMR Predictor).

Ouvrir le logiciel « **ACD Spectrus** ». La fenêtre ci-dessous s'ouvre :



Cliquer sur  et dessiner la molécule comme l'exemple ci-dessous :

