



ACD LABS

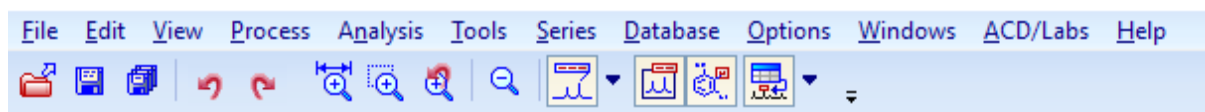
Notice simplifiée







Sophie Bertaux
Margaux Cazenave
Projets CPE, juin 2019

Principaux éléments de la barre d'outils

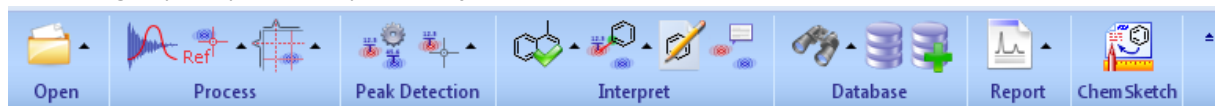
Logiciel ACD Spectrus Processor







Dans l'onglet principal en haut :



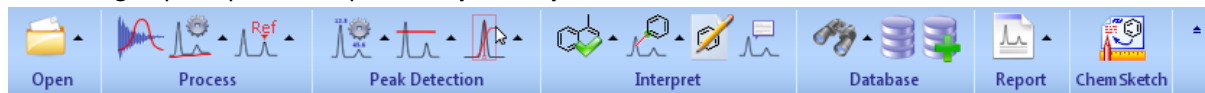
-  : Ouvrir un fichier
-  : Retour à l'action précédente
-  : Zoom horizontal
-  : Zoomer sur la zone sélectionnée
-  : Retour sur le zoom précédent
-  : Revenir au spectre en intégralité



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



AutoAssign : Attribution automatique des pics



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

Logiciel CNMR Predictor

Dans l'onglet principal :

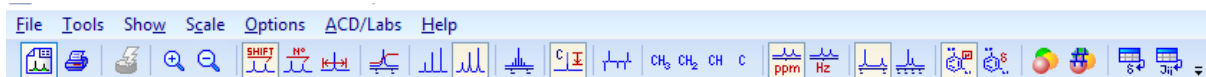
1-ChemSketch 2-Calc CNMR 3-Calc HNMR 4-CNMR Spectrum 5-HNMR Spectrum 6-History 7-Database 8-Search 9-Update DB

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



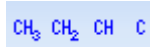
SHIFT : Afficher le déplacement chimique de chaque pic



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

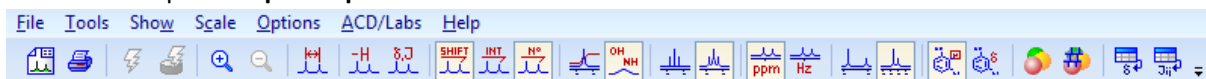


DEPT : Afficher le spectre DEPT



CH₃ CH₂ CH C : Afficher les pics correspondant au CH₃, CH₂, CH ou aux C quaternaires

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



SHIFT : Afficher le déplacement chimique de chaque pic



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



OH NH : 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



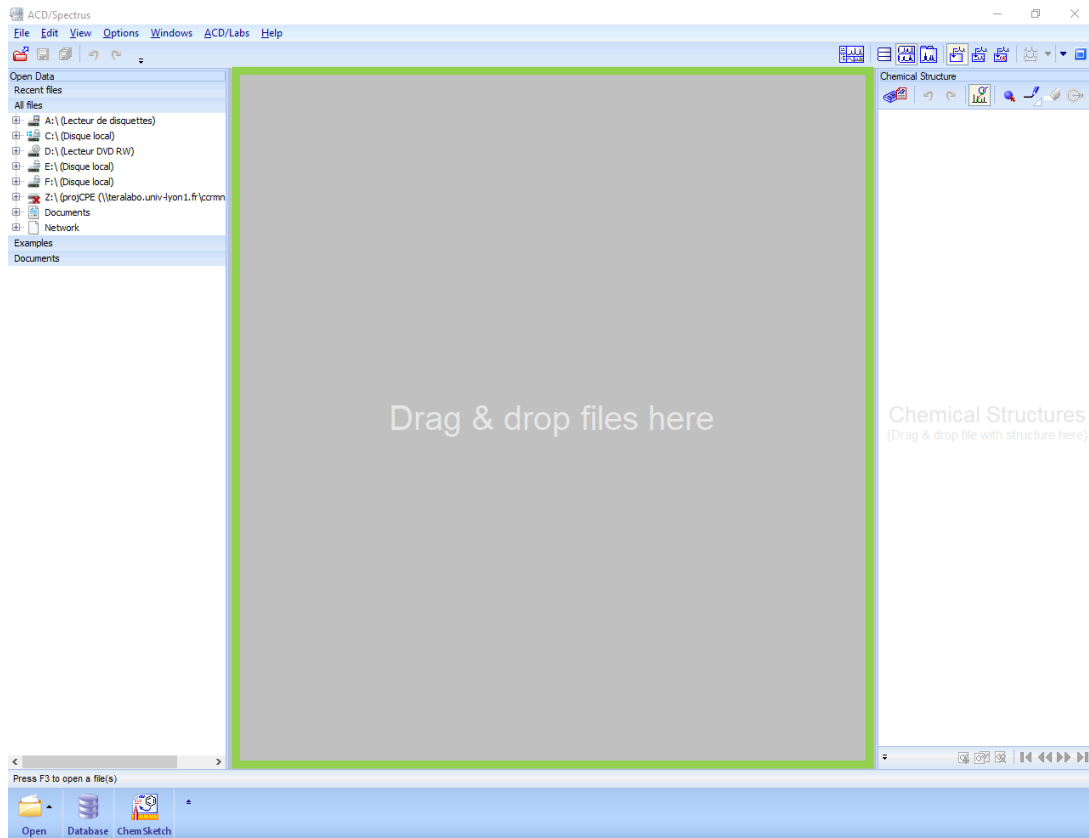
Modifier le solvant

Traitement de spectre

Traitement des spectres proton /carbone

Ouvrir le logiciel « **Spectrus Processor** » 

La fenêtre suivante s'ouvre :

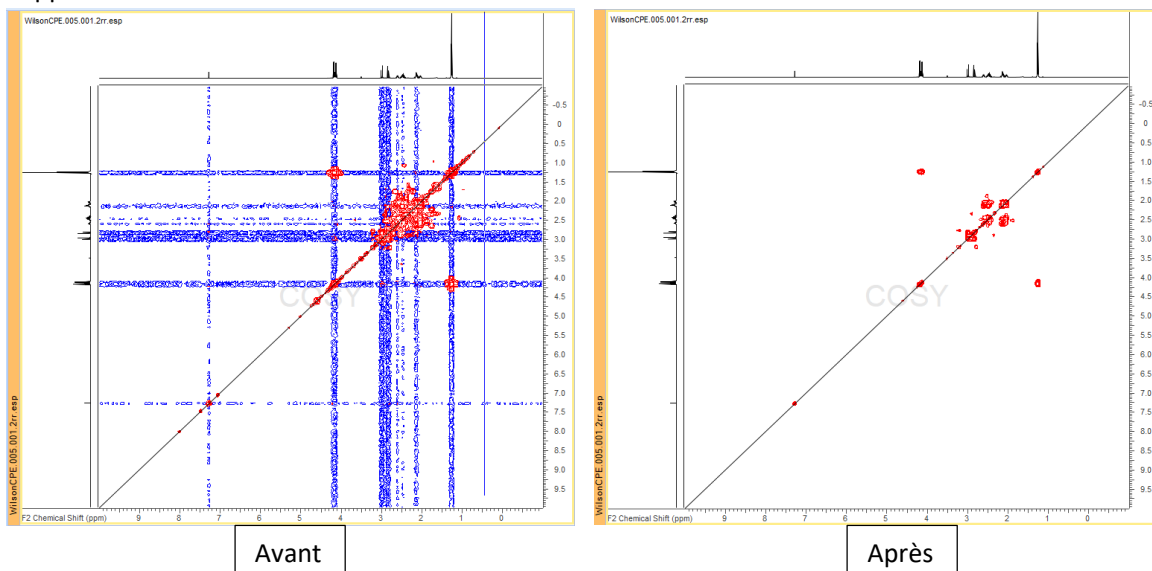


Sélectionner le spectre à analyser présent dans les documents et le glisser dans la zone encadrée en verte (voir image ci-dessus). Le spectre s'affiche.

Traitement de spectre 2D

Ouvrir le spectre 2D.

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

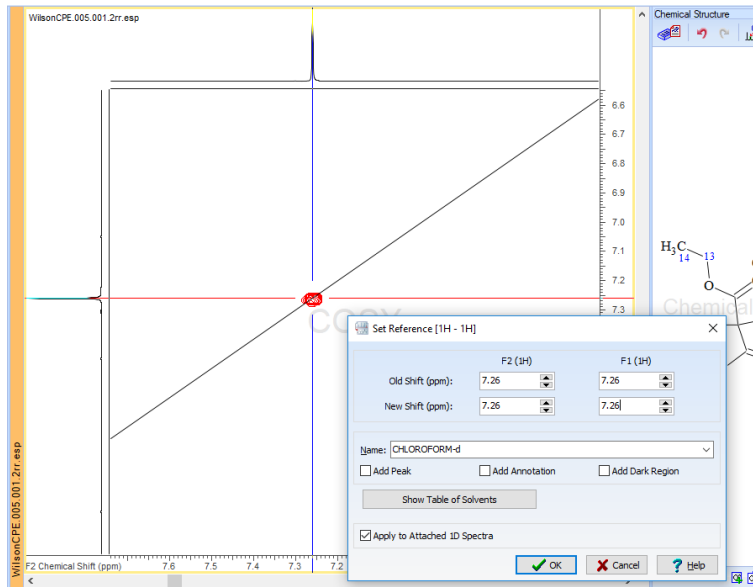


Calibrage

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.

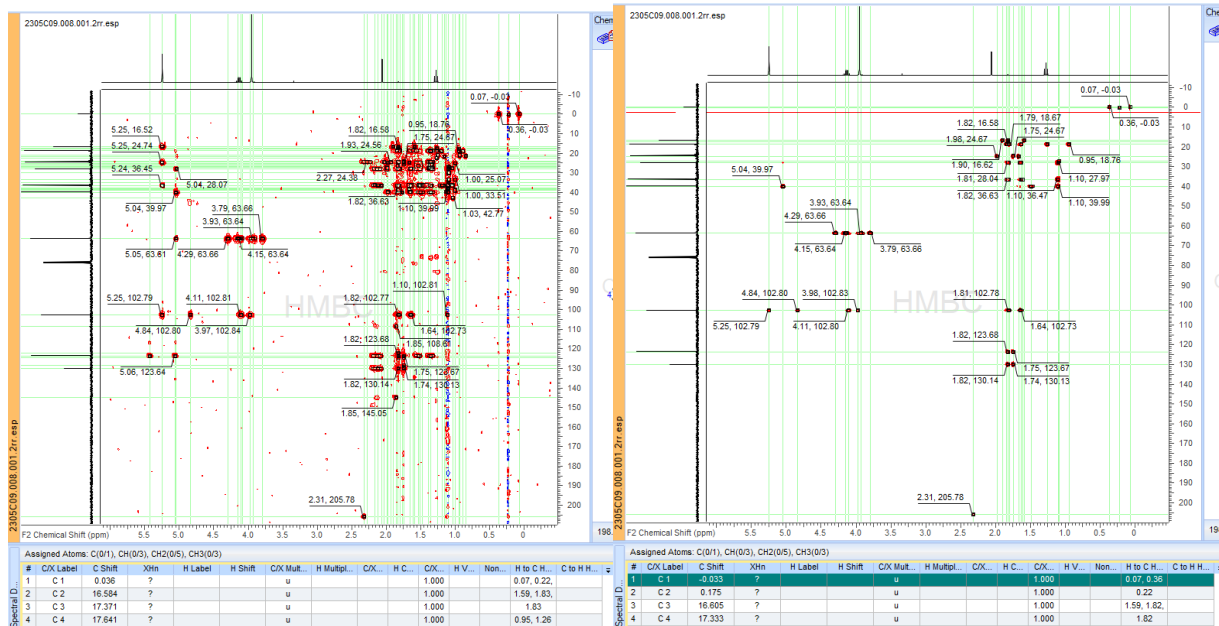


Peak picking

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




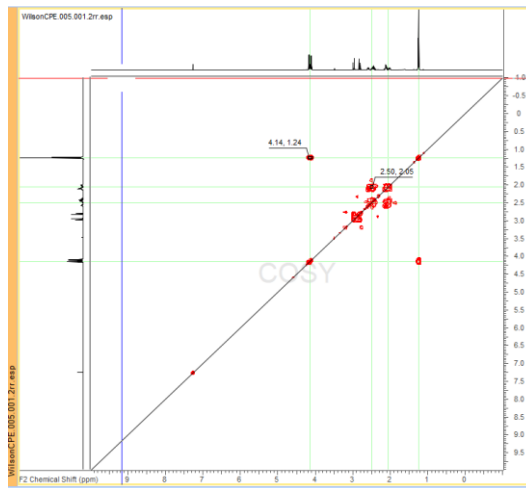
de la souris. Puis, cliquer sur . La fenêtre suivante est obtenue :




Avec le bruit

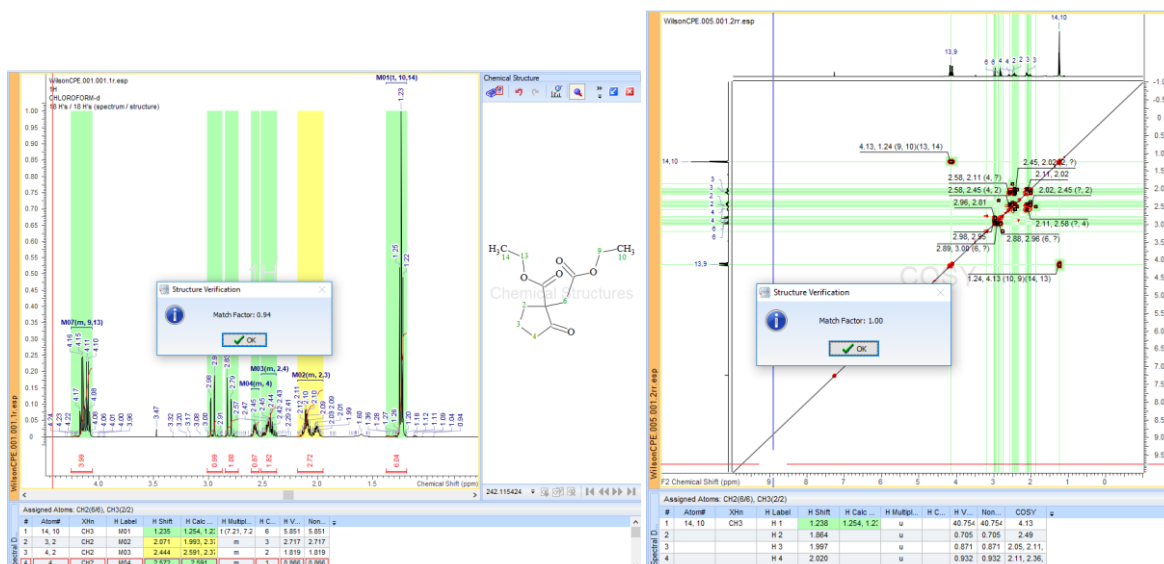
Sans le bruit

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 :




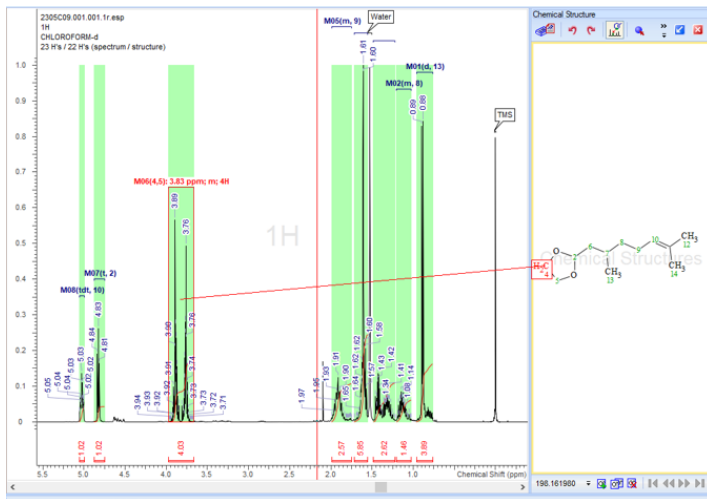
Attribution

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.

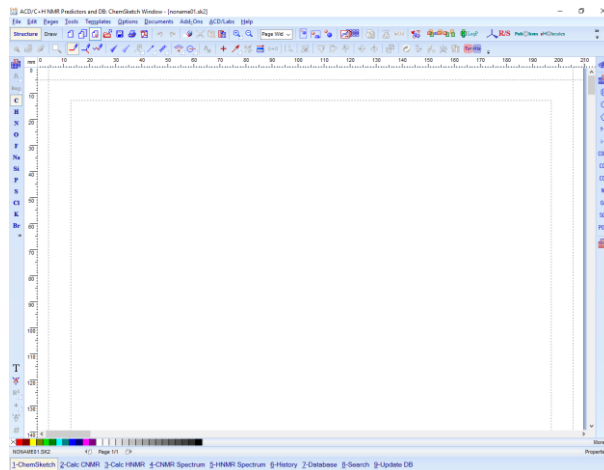
Pour attribuer manuellement les tâches aux atomes de la molécule, cliquer sur . Puis, cliquer sur l'atome et faire glisser la souris jusqu'au pic souhaité.




Simulation de spectre

Ouvrir le logiciel « CNMR Predictor » 

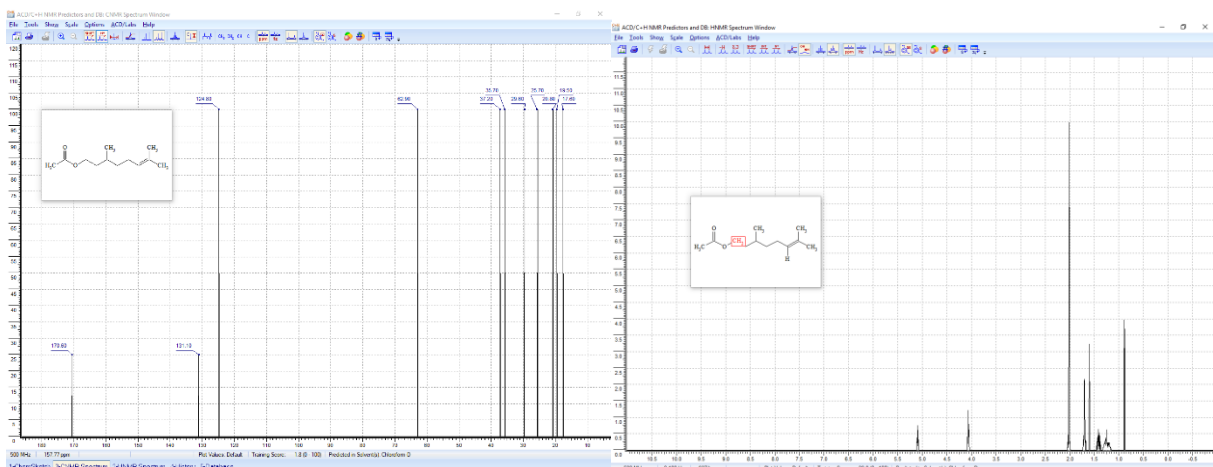
L'interface suivant s'ouvre :



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

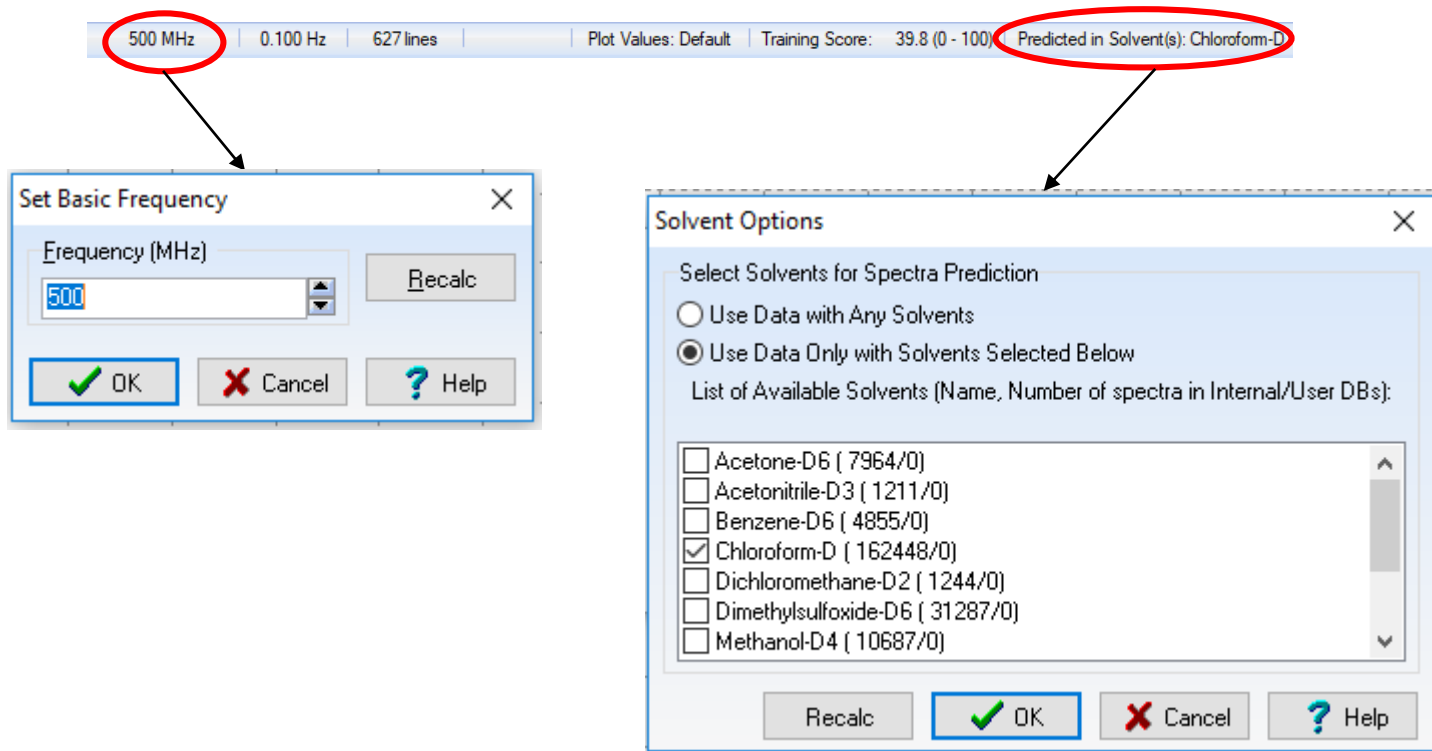
Spectre carbone simulé

Cliquer sur  pour numérotéer 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 :



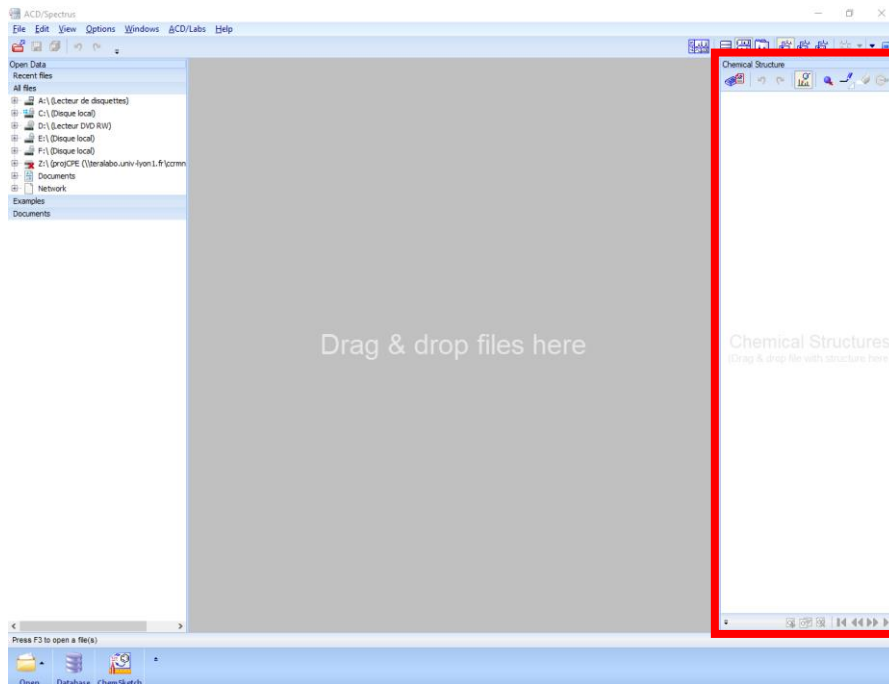
The screenshot shows a software interface with a status bar at the top. The status bar contains the following information: 500 MHz, 0.100 Hz, 627 lines, Plot Values: Default, Training Score: 39.8 (0 - 100), and Predicted in Solvent(s): Chloroform-D. Two red circles highlight the '500 MHz' and 'Predicted in Solvent(s): Chloroform-D' fields. Arrows point from these circles to two dialog boxes below. The first dialog box is titled 'Set Basic Frequency' and has a text input field for 'Frequency (MHz)' with the value '500'. It includes 'Recalc', 'OK', 'Cancel', and 'Help' buttons. The second dialog box is titled 'Solvent Options' and has two radio buttons: 'Use Data with Any Solvents' and 'Use Data Only with Solvents Selected Below'. Below the radio buttons is a list of available solvents with checkboxes: Acetone-D6 (7964/0), Acetonitrile-D3 (1211/0), Benzene-D6 (4855/0), Chloroform-D (162448/0), Dichloromethane-D2 (1244/0), Dimethylsulfoxide-D6 (31287/0), and Methanol-D4 (10687/0). The 'Chloroform-D' checkbox is checked. The dialog box also includes 'Recalc', 'OK', 'Cancel', and 'Help' buttons.

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 :

