



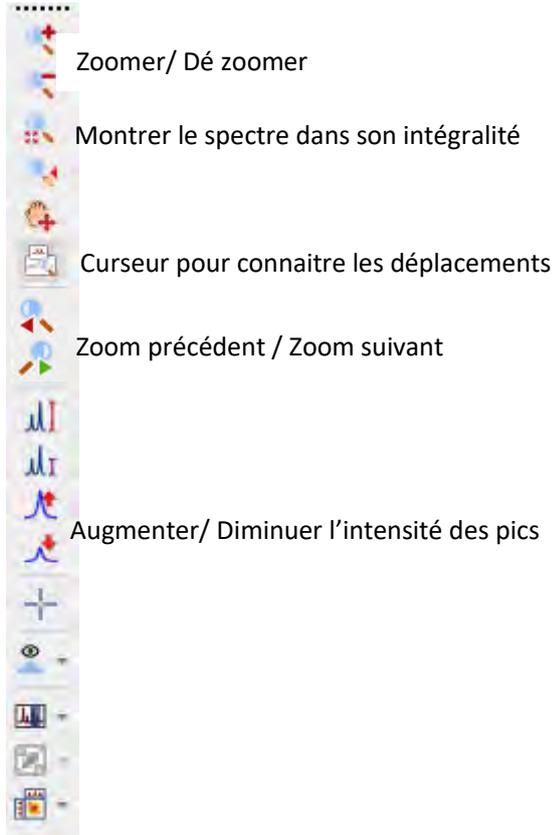
MNOVA

Notice simplifiée

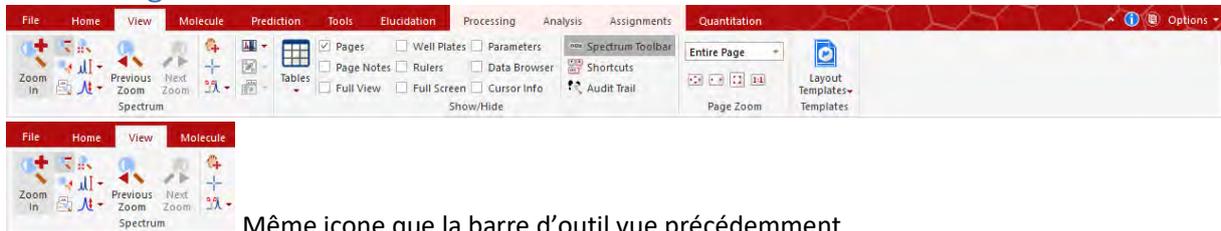
Sophie Bertaux
Margaux Cazenave
Projets CPE, juin 2019

Principaux éléments de la barre d'outils

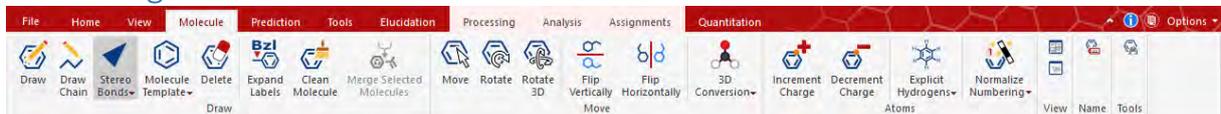
Dans la barre d'outil sur le côté (la barre apparaît lorsque vous ouvrez des spectres) :



Dans l'onglet « View » :



Dans l'onglet « Molécule » :



Permet de dessiner la molécule mais il est plus simple de l'importer.

Dans l'onglet « Prediction » :



 **1H Spectrum** : Simule le spectre proton

 **13C Spectrum** : Simule le spectre carbone



HSQC Spectrum : Simule le spectre HSQC

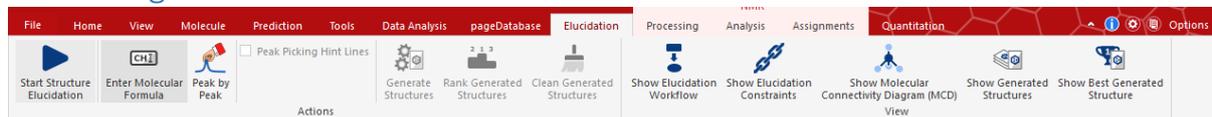


Prediction Options : Réglage des paramètres de simulation (fréquence, solvant, etc.)



Predict Compare : Simule le spectre proton et carbone en le superposant au spectre expérimental

Dans l'onglet « Elucidation » :



Start Structure Elucidation : Commencer l'élucidation



Enter Molecular Formula : Entrer la formule brute de la molécule



Show Elucidation Workflow : Afficher la fenêtre d'élucidation



Show Elucidation Constraints : Afficher la fenêtre des contraintes d'élucidation (type de carbone)



Show Molecular Connectivity Diagram (MCD) : Afficher la fenêtre du diagramme d'interaction de la molécule

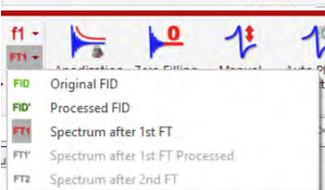
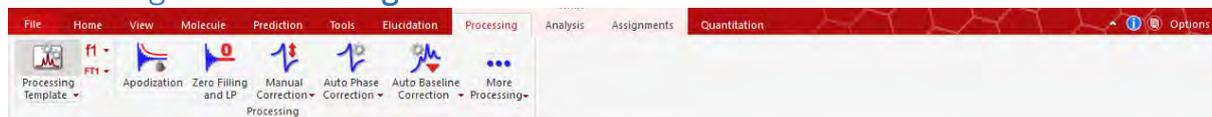


Show Generated Structures : Afficher les structures générées



Show Best Generated Structure : Afficher la meilleure structure générée

Dans l'onglet « Processing » :



: Afficher la FID



Manual Correction : Phasage manuel

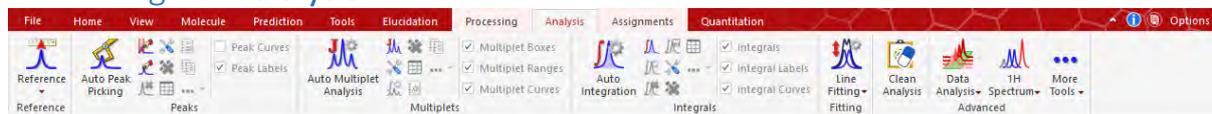


Auto Phase Correction : Phasage automatique



Auto Baseline Correction : Correction automatique de la ligne de base

Dans l'onglet « Analysis » :



Reference : Référencer le pic de solvant

 : Attribution automatique des déplacements chimiques

 : Attribution automatique des multiplets

 : Intégration automatique

 : Supprimer tous les traitements réalisés sur le spectre

Dans l'onglet « **Assignements** » :

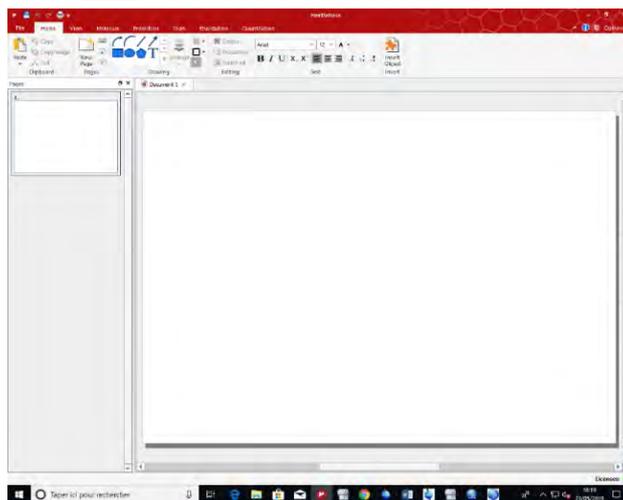


 : Attribution automatique des pics

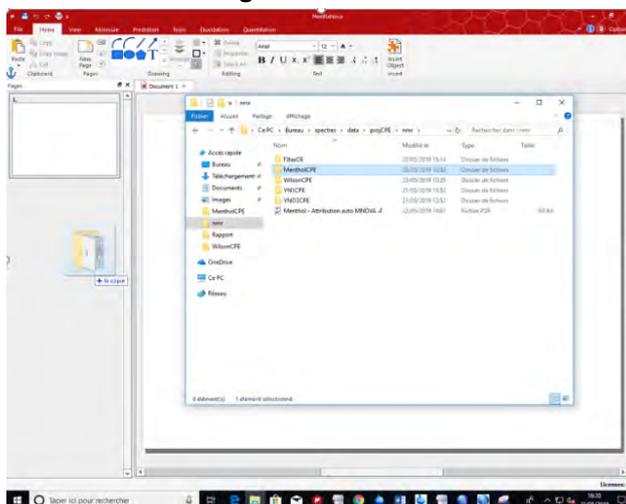
 : Attribution manuelle des pics

Traitement des spectres 1D

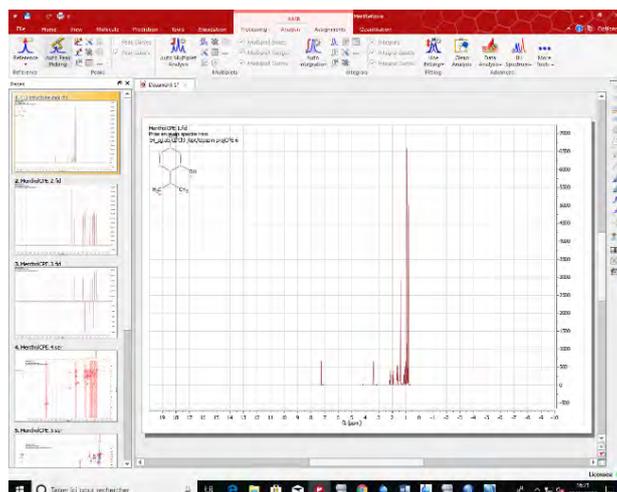
Ouvrir le logiciel en cliquant sur . La fenêtre ci-dessous s'ouvre :



Faire glisser votre dossier dans la fenêtre « **Pages** ».



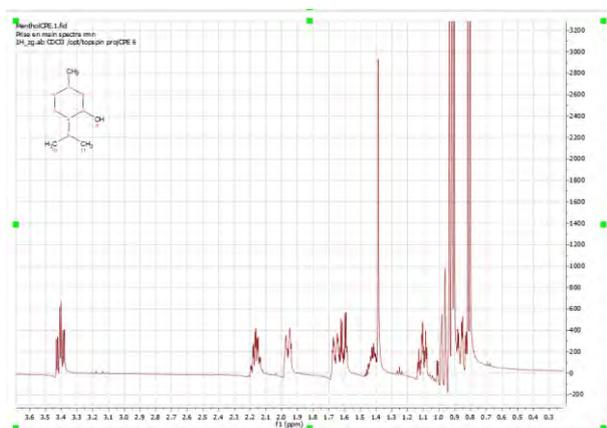
La fenêtre ci-dessous s'ouvre :



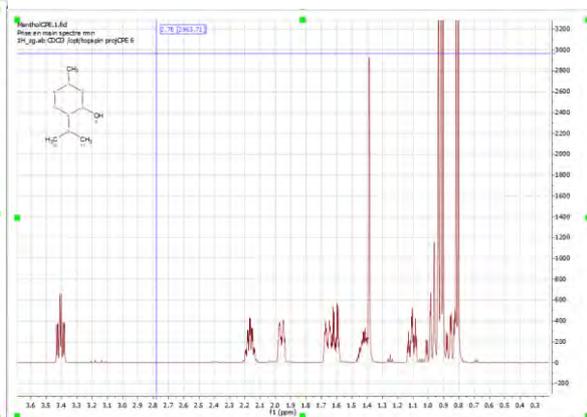
Phasage

Ouvrir l'onglet « **Processing** ».

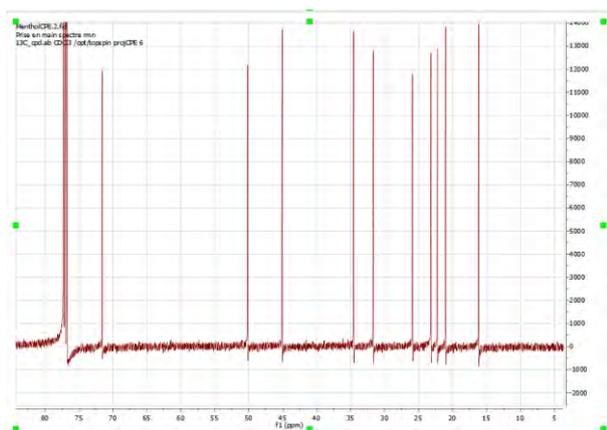
Cliquer sur « **Auto Phase Correction** » et sur « **Auto Baseline Correction** ».



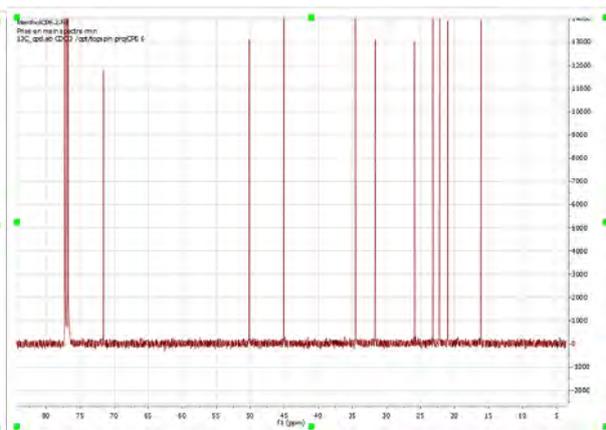
Avant phasage



Après phasage

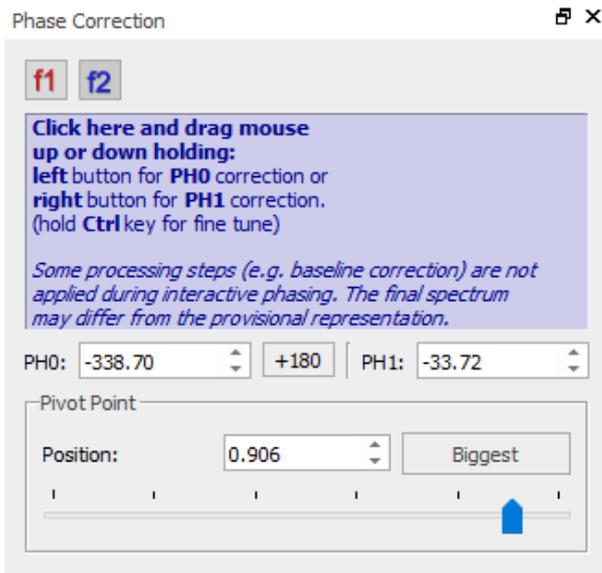


Avant phasage



Après phasage

Le phasage peut aussi se faire manuellement en cliquant sur  , dans l'onglet « **Processing** », et en modifiant le PH0 et PH1 sur la fenêtre qui s'affiche :

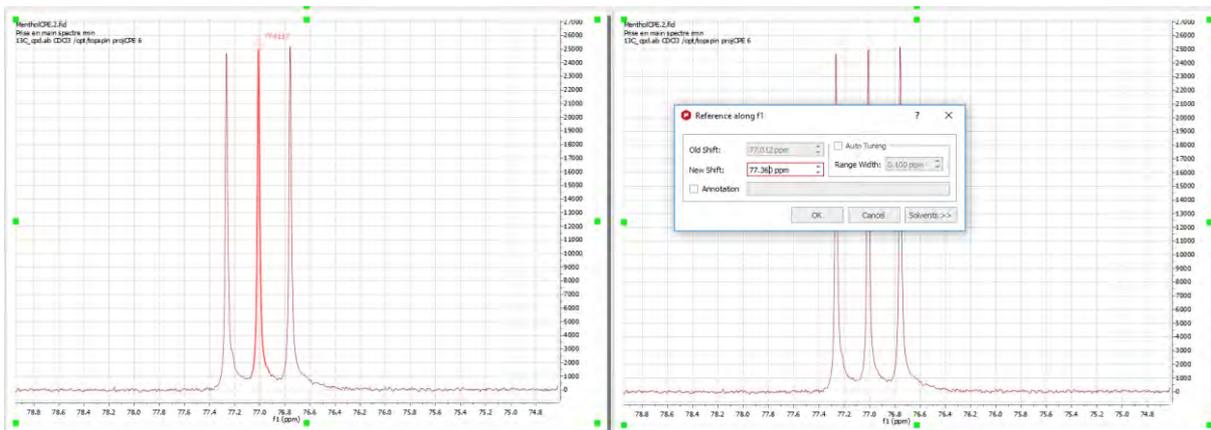
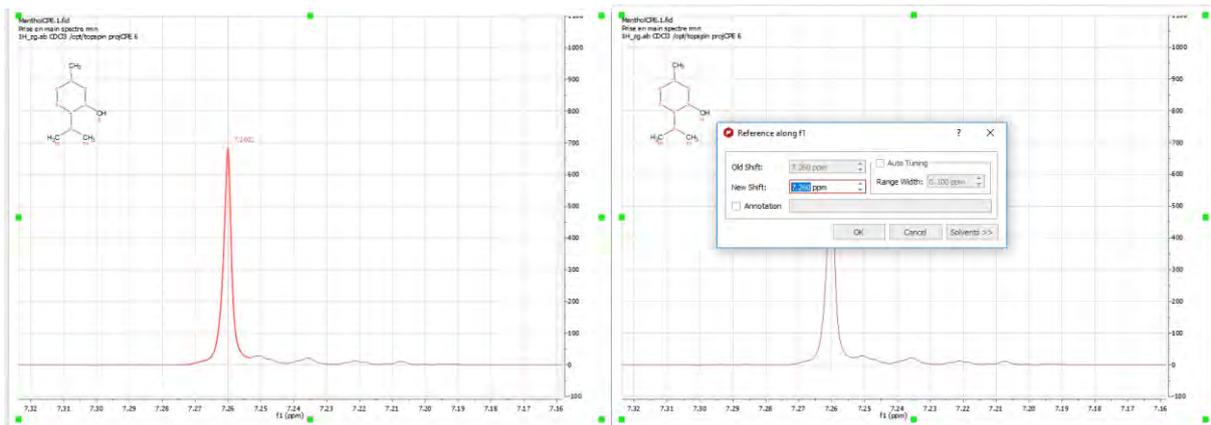


Calibrage

Ouvrir l'onglet « **Analysis** »

Zoomer sur le pic du solvant puis cliquer sur « **Reference** ». Sélectionner le pic du solvant, une fenêtre s'ouvre, inscrire le déplacement chimique de référence du solvant utilisé.

- **Spectre proton :**



Intégration

Cliquer sur « **Auto Intégration** ».

Pour les massifs, il est conseillé d'intégrer manuellement :

- Pour supprimer une intégrale, cliquer sur  et sélectionner la zone sur le spectre.

- Pour intégrer manuellement, cliquer sur  et sélectionner la zone sur le spectre à intégrer.

Peak Picking

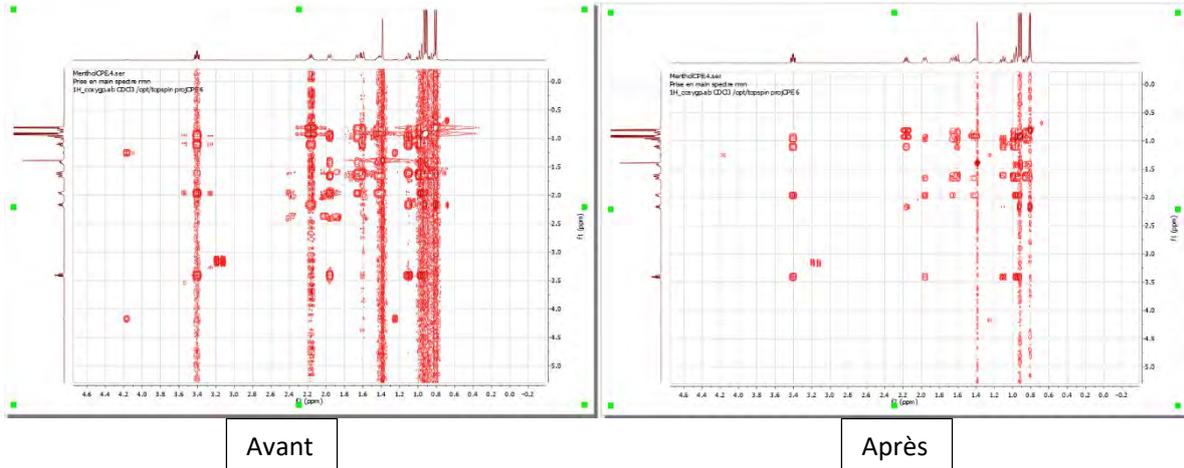
Il est possible d'attribuer manuellement les déplacements chimiques des pics souhaités en cliquant sur  et en encadrant la zone du pic ( : bien prendre le haut de chaque pic).

Pour attribuer automatiquement les déplacements chimiques des pics, cliquer sur  . Cependant, il est déconseillé de le faire pour le spectre proton car les pics du bruit sont détectés.

Traitement de spectre 2D

Aller sur le spectre 2D.

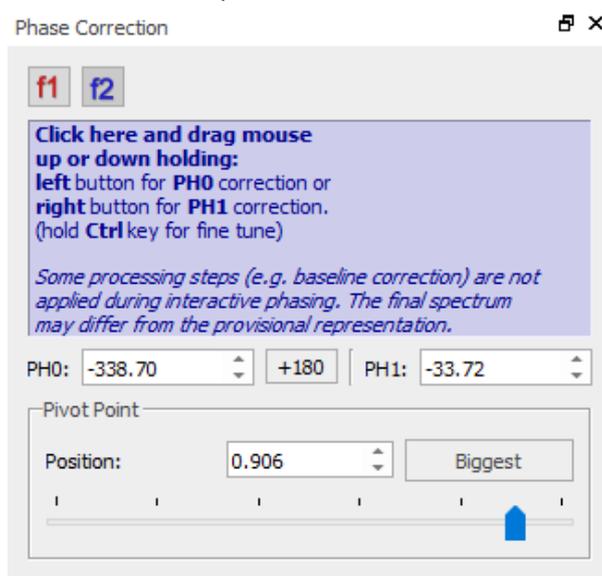
Supprimer le bruit à l'aide de la molette de votre souris.



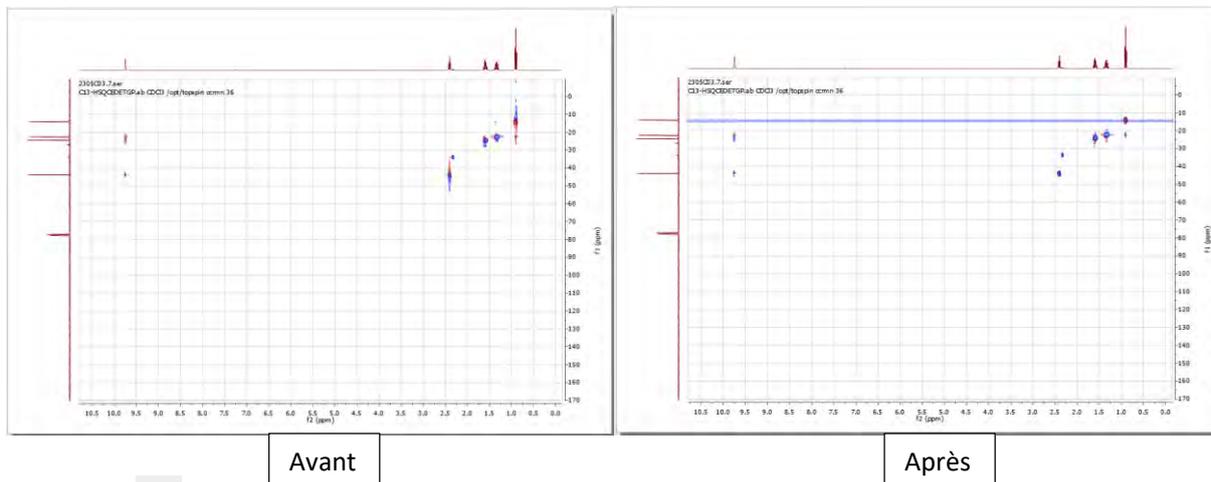
Aller dans l'onglet « **Processing** ».

Pour réaliser la correction automatiquement, cliquer sur  . Pour les spectres HSQC, HMBC, etc. cliquer sur « **Auto Phase Correction** ». Le faire pour chaque spectre.

Pour réaliser la correction manuellement, cliquer sur  . La fenêtre suivante s'ouvre.



Modifier les valeurs de PH0 et PH1 à l'aide de la molette ou des flèches sur l'axe F1 et F2.



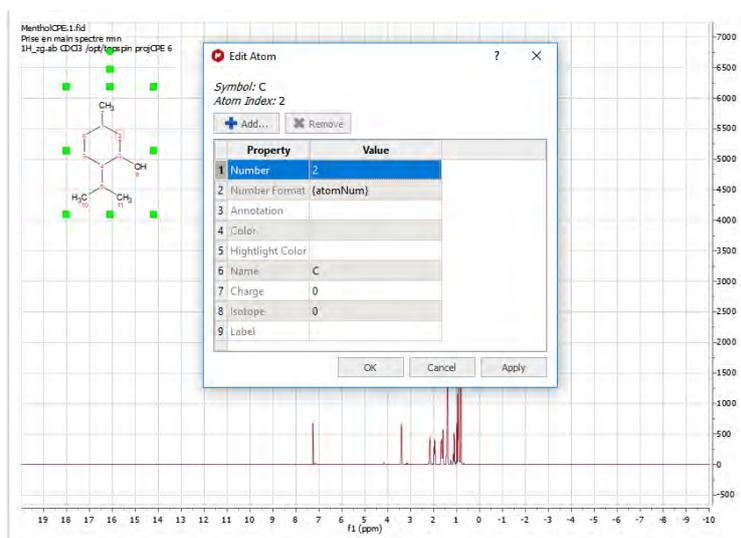
Cliquer sur  pour voir afficher un curseur permettant de faciliter le traitement du spectre.

Attribution

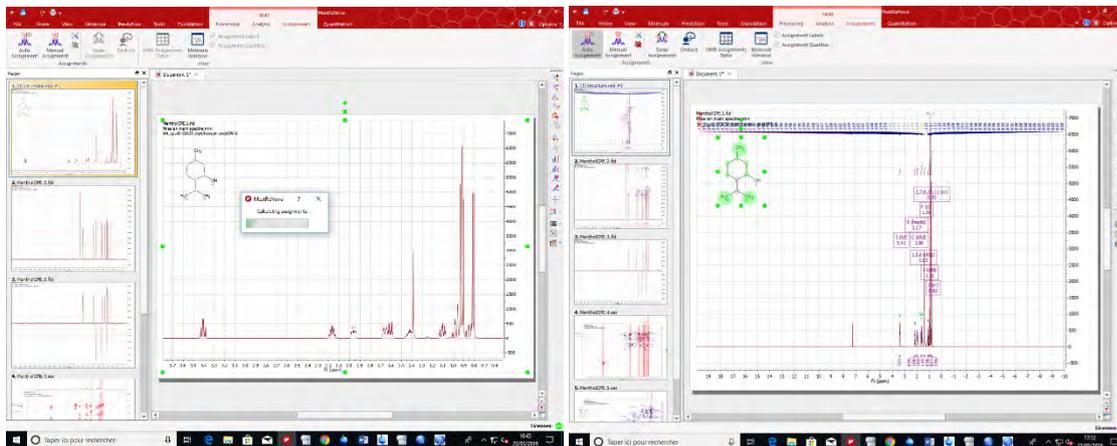
Ouvrir le logiciel en cliquant sur  et ouvrir le dossier contenant les spectres.

Pour faire une attribution automatique le logiciel nécessite un maximum de 4 spectres (par exemple : spectre proton, spectre carbone, cosy et HSQC).

Avant de lancer l'attribution, ajouter la molécule sur le spectre proton. Cette dernière est automatiquement numérotée mais il est possible de modifier cette numérotation. Pour cela, faire double clic sur l'atome à modifier. La fenêtre suivante apparaît :



Pour lancer l'attribution, se placer sur le spectre proton, aller dans l'onglet « **Assignments** » et cliquer sur « **Auto Assignment** ». Les fenêtres ci-dessous sont obtenues :



En cours d'attribution

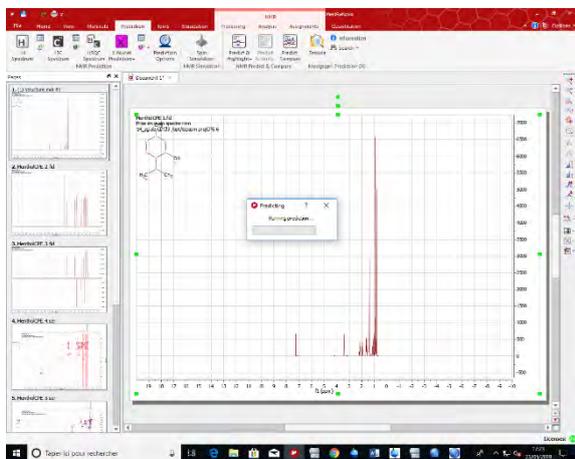
Après attribution

Simulation des spectres

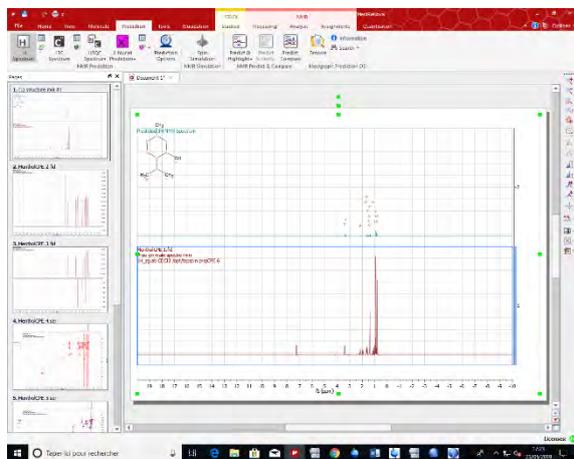
Note : La prédiction des spectres carbone, proton et HSQC sont possible.

Ouvrir le logiciel en cliquant sur . Ouvrir votre dossier contenant les spectres.

Pour faire une simulation et comparer les spectres théoriques et expérimentaux, la molécule doit être présente sur tous les spectres à prédire. Aller dans l'onglet « **Prediction** » et cliquer sur « **Predict compare** ». Les fenêtres ci-dessous sont obtenues :



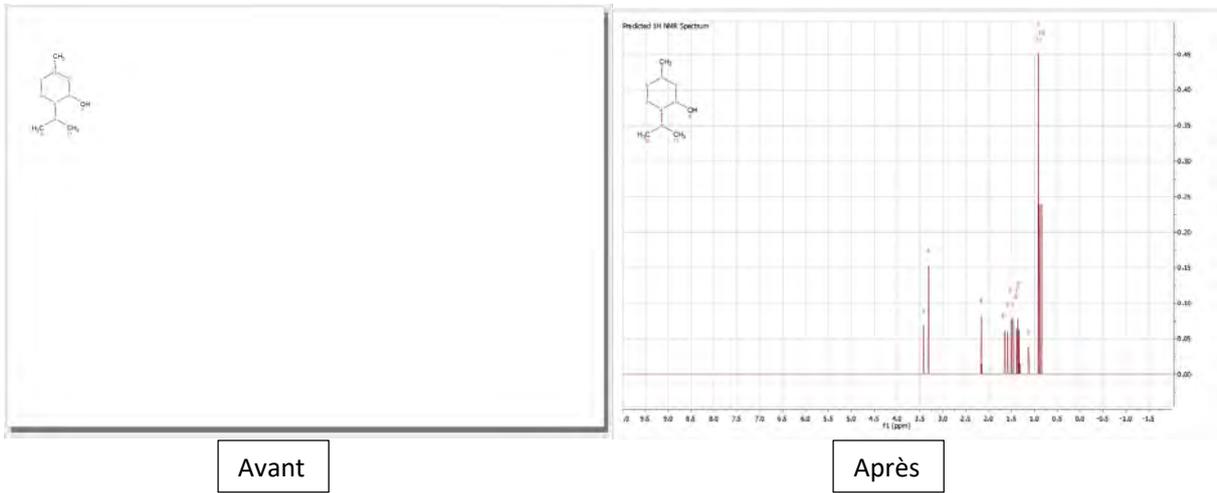
En cours de simulation



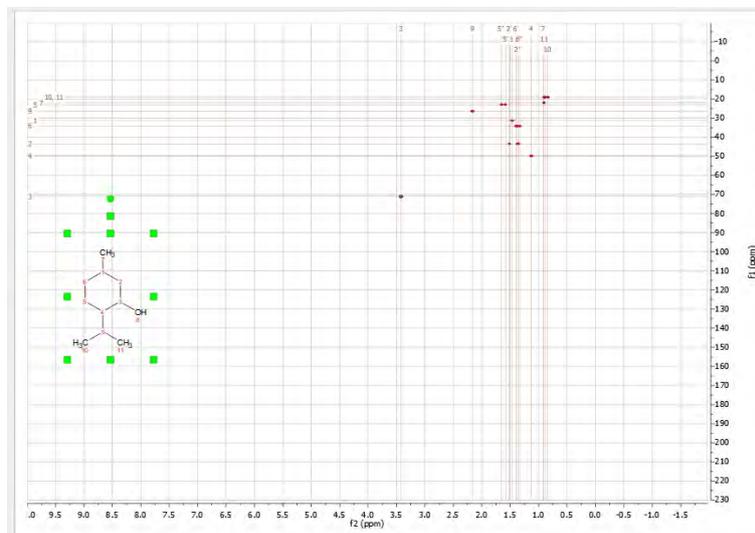
Après simulation

Pour faire une simulation qu'avec la structure de la molécule, la molécule doit être présente sur une feuille

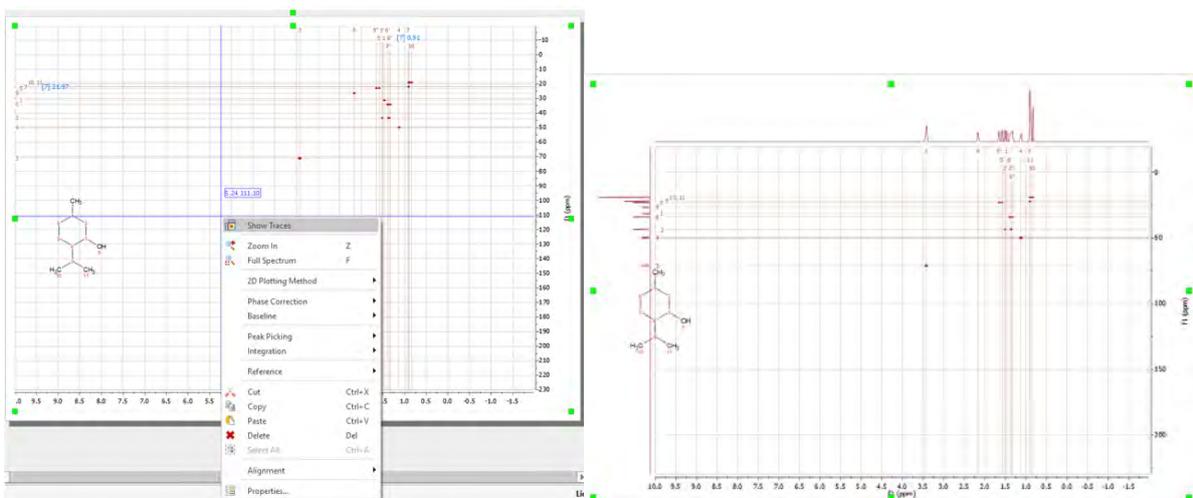
vierge. Aller dans l'onglet « **Prediction** » et cliquer sur  et/ou .



Pour la simulation du spectre 2D HSQC, mettre la molécule sur une feuille vierge et cliquer sur . Le spectre suivant est obtenu :



Pour ajouter les axes, faire clic droit sur le spectre et sélectionner « **Show Traces** ».



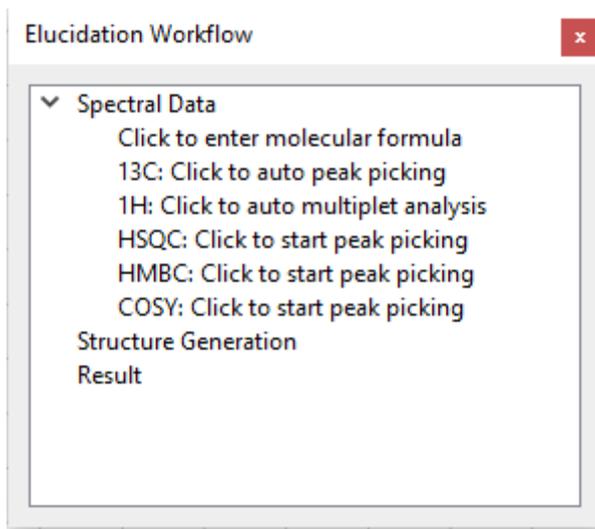
Déterminer la structure de la molécule à partir des spectres et de la formule brute

⚠ Pour déterminer la structure d'une molécule à partir de la formule brute, il faut utiliser la version 14 de Mnova !

Ajouter les fichiers des données spectrales. Ouvrir l'onglet « **Elucidation** » et cliquer sur « **Start Structure**

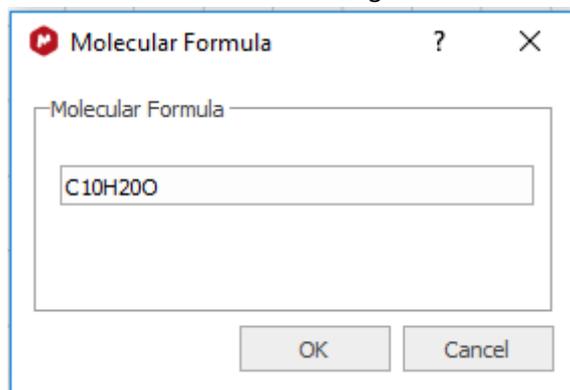


La fenêtre suivante s'ouvre :



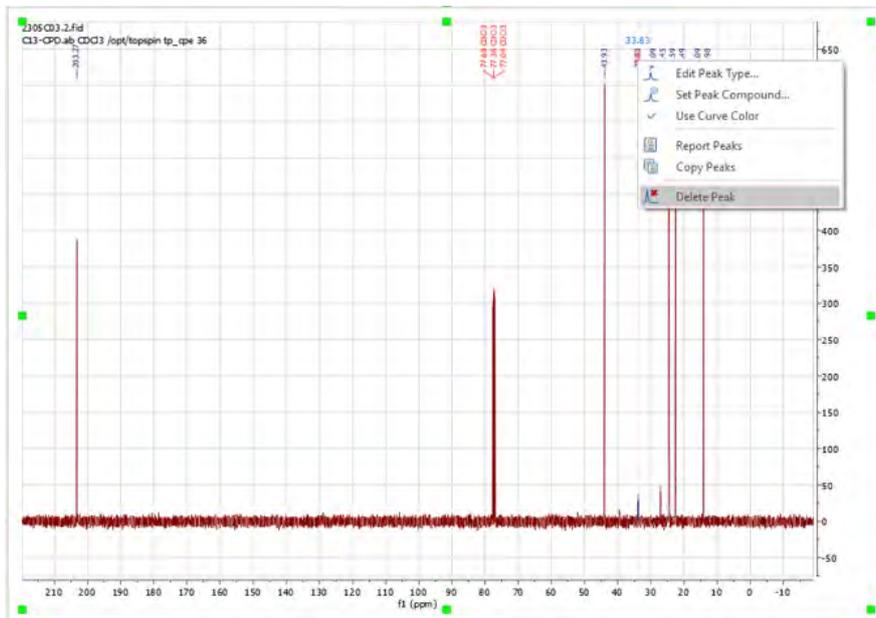
Suivre les étapes renseignées dans cette fenêtre :

1. Cliquer sur « **Click to enter molecular formula** » et renseigner la formule brute de la molécule.



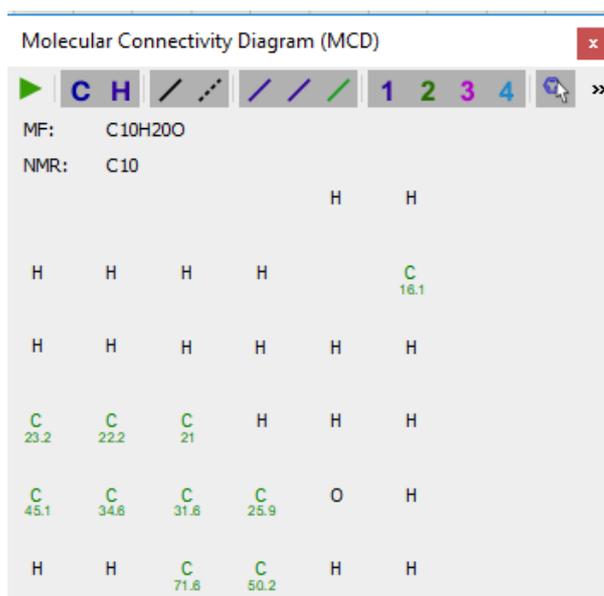
2. Cliquer sur « **13C : Click to auto peak picking** ».

Si le nombre de pics détectés excède le nombre de carbone de la formule brute, il faut supprimer les pics appartenant au bruit. Pour cela, faire clic droit sur le pic à supprimer et cliquer sur « **delete peak** ».



La fenêtre « **Molecular connectivity Diagram** » s'ouvre, elle permet de suivre l'attribution et les liaisons générées par le logiciel entre les atomes.

⚠ : Lorsqu'il y a un excès de proton ou de carbone un message en orange s'affiche sur cette fenêtre pour signaler l'erreur.

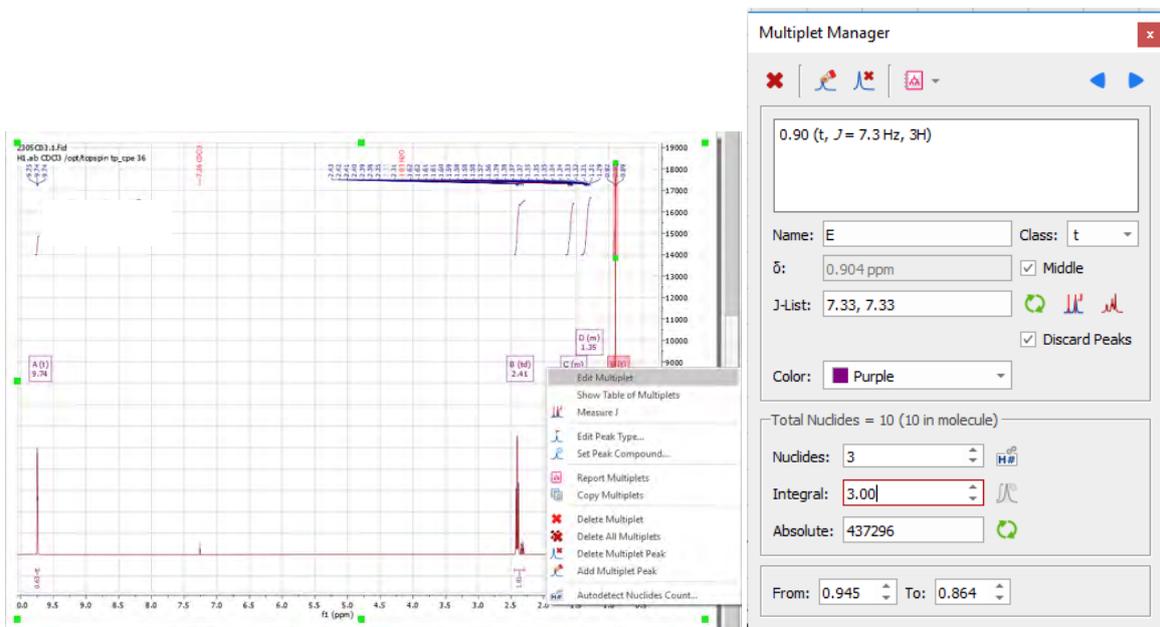


3. Cliquer sur « **1H : Click to auto multiplet analysis** ».

Si le nombre de pics détectés excède ou n'atteint pas le nombre de proton de la formule brute, il faut soit réintégrer le pic, soit ajouter ou supprimer une impureté/solvant.

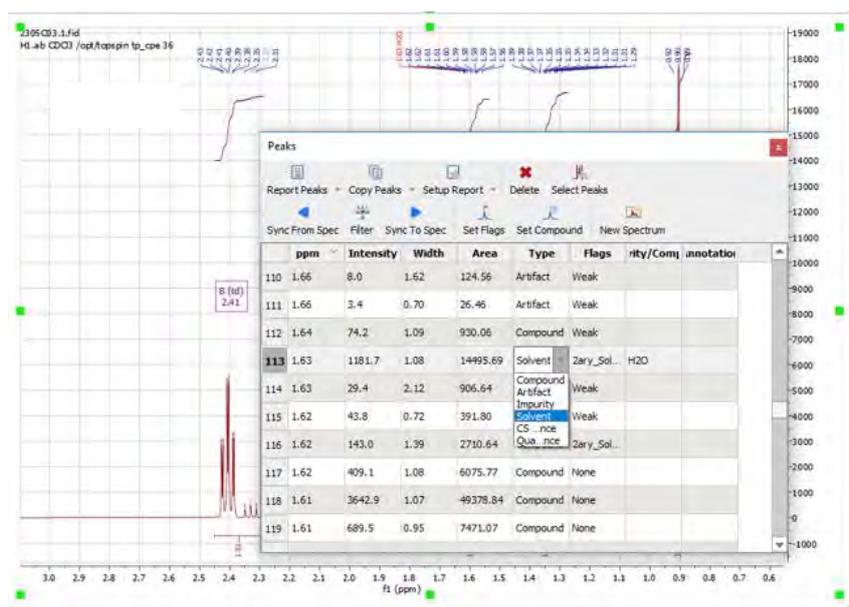
- Calibrage d'une intégrale :

Faire clic droit sur l'intégrale sélectionnée et cliquer sur « **Edit Multiplet** ». La fenêtre « **Multiplet Manager** » s'ouvre et il faut calibrer en renseignant le nombre de proton dans « **Integral** ».



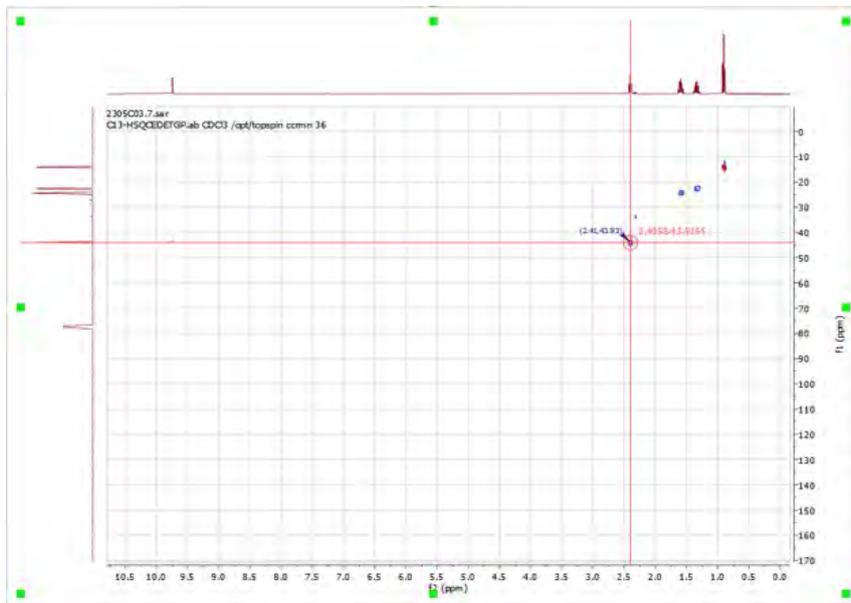
- Ajout ou suppression d'une impureté/solvant :

Double cliquer sur un pic, la fenêtre « **Peaks** » s'ouvre et il est possible de renseigner la nature du pic (composé, impureté, solvant, etc.) en double cliquant sur la case « **Type** » du déplacement chimique sélectionné (voir ci-dessous).



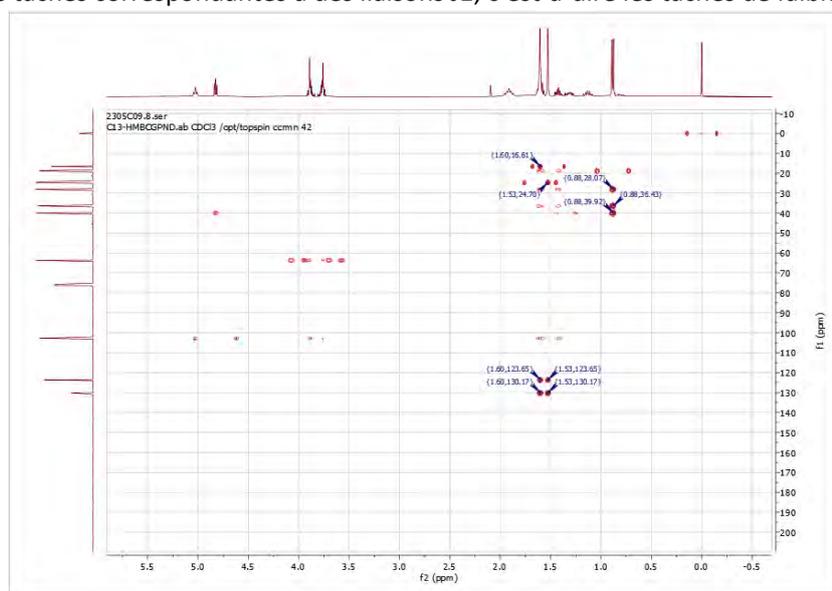
4. Cliquer sur « **HSQC : click to start peak picking** ».

Un curseur permet de sélectionner les tâches (voir ci-dessous).



5. Cliquer sur « **HMBC : Click to start peak picking** ».

Un curseur permet de sélectionner les tâches comme pour l'étape précédente. Cependant, seules les tâches de forte intensité sont à sélectionner car elles correspondent à des liaisons J3. (⚠ : il ne faut pas sélectionner des tâches correspondantes à des liaisons J1, c'est-à-dire les tâches de faible intensité).



6. Cliquer sur « **COSY : Click to start peak picking** ».

Un curseur permet de sélectionner les tâches comme pour l'étape précédente. (⚠ : il ne faut pas sélectionner des tâches sur la diagonale et les tâches en miroirs. Il faut sélectionner les tâches que d'un même coté).

7. Cliquer sur l'onglet « **Show Elucidation Constraints** »



La fenêtre suivante s'ouvre. Si des lignes sont surlignées en jaune il faut renseigner le type de liaison que le carbone fait. Ces lignes deviennent alors vertes.

Elucidation Constraints														Elucidation Constraints													
Atom	Shift	nH	CHn	C	CH	CH2	CH3	Atoms	hybridization	HSQC	HMBC	COSY	Atom	Shift	nH	CHn	C	CH	CH2	CH3	Atoms	hybridization	HSQC	HMBC	COSY		
1	O												1	O													
2	H 1.4	1.43	H		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1					2	H 1.4	1.43	H		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1						
3	H		H										3	C 71.6(3..	71.57	CH	CH	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1						
4	H		H										4	C 50.2(1..	50.17	CH	CH	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1						
5	H		H										5	C 45.1(0..	45.08	CH2	CH2	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1						
6	H		H										6	C 34.6(1..	34.56	CH2	CH2	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1						
7	H		H										7	C 31.6(1..	31.65	CH	CH	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1						
8	H		H										8	C 25.9(2..	25.87	CH	CH	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1						
9	C 71.6(3..	71.57	CH	CH	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1					9	C 23.2(1..	23.18	CH2	CH2	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1						
10	C 50.2(1..	50.17	CH	CH	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1					10	C 22.2(0..	22.20	CH3	CH3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1						
11	C 45.1(0..	45.08	CH2	CH2	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1					11	C 21.0(0..	21.00	CH3	CH3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1						
12	C 34.6(1..	34.56	CH2	CH2	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1					12	C 16.1(0..	16.12	CH3	CH3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1						
13	C 31.6(1..	31.65	CH	CH1,3	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1																			
14	C 25.9(2..	25.87	CH	CH	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1																			
15	C 23.2(1..	23.18	CH2	CH2	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1																			
16	C 22.2(0..	22.20	CH	CH1,3	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1																			
17	C 21.0(0..	21.00	CH	CH1,3	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1																			
18	C 16.1(0..	16.12	CH	CH1,3	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1																			

Avant

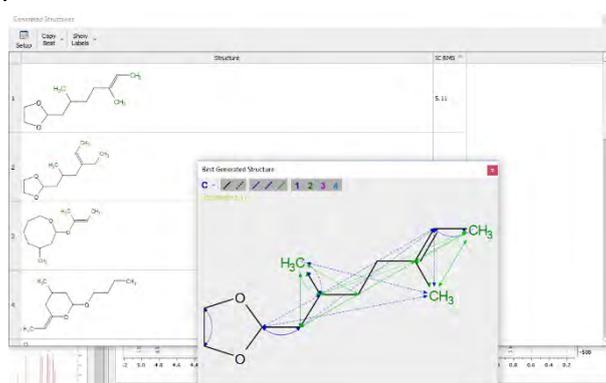
Après

Puis, cliquer sur « **Click to generate structures** ».

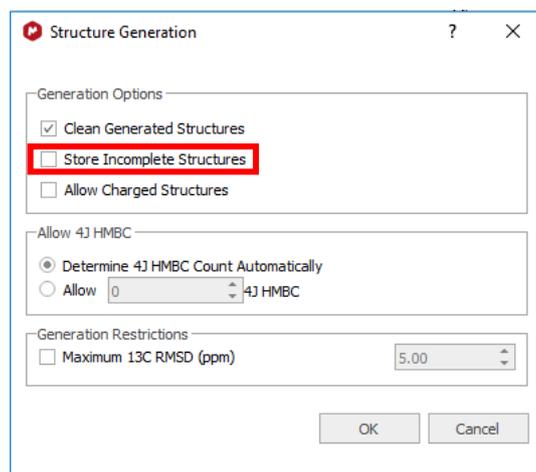
Elucidation Workflow

- Spectral Data**
 - MF: C₁₀H₂₀O
 - 13C: 10 peaks**
 - 1H: 12 multiplets
 - HSQC: 12 peaks
 - HMBC: 9 peaks
 - COSY: 7 peaks
- Structure Generation**
 - Click to generate structures**
- Result

Les différentes structures générées s'affichent. Le logiciel désigne la meilleure structure possible comme dans l'exemple ci-dessous.



Si aucune structure n'est générée cliquer sur de la fenêtre « **Molecular Connectivity Diagram** » et cocher « **Store Incomplete Structures** ». En appuyant sur « **Ok** » de nouvelles structures sont générées par le logiciel mais celles-ci sont incomplètes.



Il est possible de modifier les interactions entre les atomes faites par le logiciel dans la fenêtre « **Molecular Connectivity Diagram** » à l'aide des icônes :  (Permet de changer la position des atomes),  (permet de dessiner des interactions entre les atomes) et  (permet de supprimer des interactions entre les atomes).

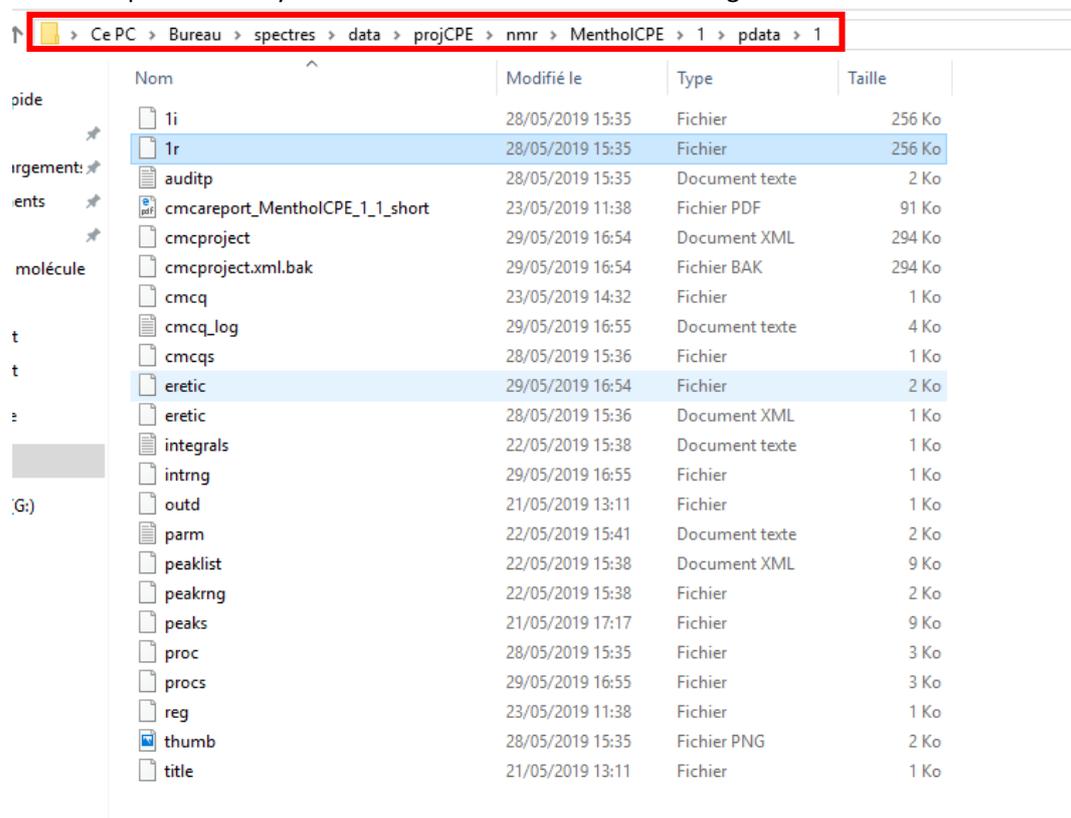
Astuces

Processing par défaut

Lors du traitement des spectres par Mnova, le logiciel modifie la FID. Il impose un Zero Filling de 32k alors que les spectres sont à l'origine de 64k.

Pour faire le traitement sur le spectre de 64k, il faut ouvrir le spectre sous le nom « **1r** ». Pour cela, cliquer sur « File », puis « open ».

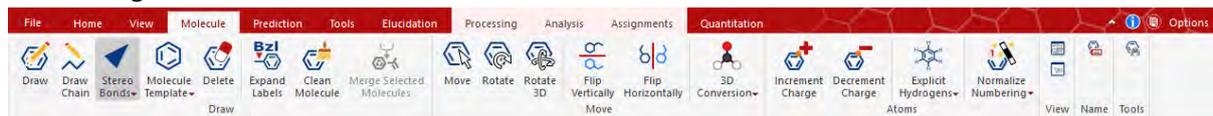
Sélectionner le spectre à analyser et suivre le chemin encadré en rouge :



Cliquer sur le fichier « **1r** ».

Dessiner une molécule

Ouvrir l'onglet « **Molécule** » :



Tout d'abord, dessiner la molécule qu'avec des carbones. Puis, pour changer un atome double cliquer sur l'atome à modifier. La fenêtre ci-dessous s'ouvre et dans « **Name** » indiquer l'atome souhaité.

