

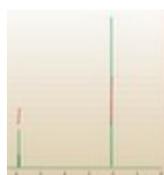


Extract of Le site Physique-Chimie de l'académie de Guyane

<https://physique-chimie.dis.ac-guyane.fr/NMRDB-Base-de-donnees-RMN.html>

NMRDB (Base de données RMN)

- Numérique - Les outils et les ressources -



Publication date: dimanche 13 novembre 2016

Copyright © Le site Physique-Chimie de l'académie de Guyane - Tous droits

réservés

Sur le site nmrdb.org vous pourrez à l'aide de quatre logiciels en ligne (RMN Simulator RMN Resurrector RMN Resurrector et RMN Predictor).

Une mise à jour de ce site propose une nouvelle présentation mais l'usage que l'on peut faire de cet outil reste le même ; Predictor se décline désormais en "[PREDICT 1H NMR](#)" et "[PREDICT 13C NMR](#)" et des exercices en ligne sont proposés.

The screenshot displays the NMR Predictor web interface. It features several panels:

- Molfile or SMILES:** A text input field with the placeholder "Paste or drop a molfile or SMILES".
- Draw a chemical structure to predict:** A drawing tool with a toolbar containing icons for drawing atoms and bonds, and a vertical list of elements (C, N, O, S, F, Cl, Br, I, P, X). A "Calculate spectrum" button is located at the bottom right of this panel.
- Chemical structure with hydrogen exploded:** A large empty area for displaying the chemical structure.
- NMRshiftDB predicted chemical shifts:** A table with two columns: "AtomID" and "Chemical shift".
- Superimpose exp. spectrum:** A text input field with the placeholder "Drop or paste a jcamp file" and a "clear 13C" button.
- 13C NMR spectra:** A large plot area for displaying the NMR spectrum, with a "Download 13C.jdx" link in the top right corner.

A yellow callout box on the left side of the interface contains the following text:

Draw a chemical structure and click on "Calculate spectrum". You may also DRAG / DROP a molfile ! You will get an interactive NMR spectrum.

La suite de cet article correspond à l'ancienne présentation du site mais elle reste utile pour comprendre les étapes d'utilisation du logiciel en ligne.

Prédicator, en particulier, permet de dessiner votre molécule, d'en obtenir le spectre RMN (H) puis de télécharger l'ensemble sur votre ordinateur.



1. Effectuer des requêtes impliquant des structures et / ou des propriétés RMN.
2. Utiliser un logiciel convivial facile d'accès pour l'analyse spectrale RMN. Il s'agit d'un outil web utilisant un applet java qui permet d'attribuer une structure chimique pour le spectre RMN correspondant simplement en traçant des lignes entre les atomes.
3. Recréer à partir des spectres RMN publiés en ligne des pièces expérimentales.

Les quatre logiciels de ce site sont le fruit de la collaboration entre Julien Wist (Université de Cali, Colombie), Andres Castillo (Université de Bogota, Colombie) et Luc Patiny (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse) :

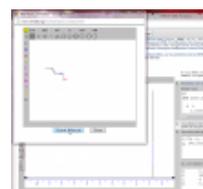
RMN Predictor : le "Prédicteur" permet de prédire le spectre de la structure chimique. Des outils placés sur la gauche de la fenêtre de ce logiciel permettent, en outre, de visualiser les valeurs des déplacements chimiques ainsi que les courbes d'intégration.

Voici une série chronologique de capture d'écran pour avoir une première idée de ce qu'il est possible de faire avec "**Predictor**" :

- Cliquer sur "Draw a molécule" pour dessiner une molécule (affichage de la fenêtre de dessin) :

- Réaliser la molécule souhaitée à l'aide des outils de dessin proposés :

- soumettre (valider) afin d'obtenir le spectre :



- visualiser le résultat qu'il est possible d'importer sur l'ordinateur localement :

RMN Simulator : avec le "Simulateur" vous pourrez entrer le système de spin dont vous souhaitez simuler le déplacement chimique ainsi que la constante de couplage.

RMN Resurrector : Le "Résurrector" permet à l'utilisateur de facilement importer ces descriptions dans les raies spectrales et crée une représentation qui peut être intégrée de façon transparente dans le processus d'attribution.

RMN assigner : permet de télécharger et d'attribuer des spectres RMN en ligne. L'attribution des spectres RMN peut être décomposée en 4 étapes :

- identification des signaux
- intégration et la détermination multiplicité
- affectation de chaque signal correspondant à l'atome de la molécule
- exportation des données de publication et / ou de stockage de base de données.