

# Prise en main de CCPNMR

## I. Prise en main de CCPNMR

### A. Création du projet

- Lancer CCPNMR : >analysis
- Aller à Projects>New
- Entrer le nom de votre projet ('ubi\_test')

### Chargement de la séquence de l'ubiquitine

- Charger la séquence de l'ubiquitine :
  - o Molecule>Molecules puis Add Sequence et ReadFile
  - o Charger le fichier 'ubi.seq'
  - o Taper Tidy puis Add Sequence
  - o Valider à toutes les invites

### B. Chargement du spectre <sup>15</sup>N HSQC

- Aller à >Experiment>Open Spectra
- Changer le format de fichier (file Format) à NMRPIPE
- Sélectionner le fichier hsqc\_3.ft2 (en haut à gauche choisir dans File format : NMRPipe, et en bas dans File type : NMRPipe (\*.ft\*))
- Valider (Open Spectrum) puis cliquer sur Commit dans la nouvelle fenêtre après avoir vérifié les calibrations.
- Le spectre 15NHSQC sera associé à Expt\_1.
- Dans la case 'Type synonym' choisissez '15N HSQC/HMQC' et dans External Name, entrer par exemple '15NHSQC'
- Enfin 'Close / All done'
- Le spectre HSQC s'ouvre automatiquement dans la fenêtre 1.
- Pour changer les niveaux, >Contours puis flèches (vertes) du haut ou du bas ou utiliser les raccourcis 'e' ou 'r'
- Pour afficher niveaux négatifs/positifs cliquer sur 'Pos/Neg'

## C. Utilisation de la fenêtre

### *Spectrum Manipulations*

Page Up	Zoom out
Page Down	Zoom in
Up	Move spectrum up within the window
Down	Move spectrum down within the window
Left	Move spectrum left within the window
Right	Move spectrum right within the window
Home	Zoom the slice range down
End	Zoom the slice range up
c	Centre the window where the mouse is
j	Scroll left orthogonally
k	Scroll right orthogonally
i	Increase the number of contours
o	Decrease the number of contours
e	Raise the contour level
r	Lower the contour level

### *Marks and Rulers*

h	Create a horizontal ruler
v	Create a vertical ruler
m	Create a mark

n Clear all marks and rulers

### *Pop-Ups*

- a Bring up the Assignment pop-up
- b Bring up the Browse Atoms pop-up
- u Bring up the right-click Mouse Menu
- s Show the selected peaks in a pop-up table

### *Peaks*

- p Move selected peak
- P Automatically centre the peaks on the closest maxima/minima
- q Move peak label
- w Automatically set the peak label positions such that they do not overlap
- W Reset the peak labels to their original positions
- l Unite peak positions
- s Show the selected peaks in a pop-up table

### *Other*

- S Save project

## II. Peakpicking des spectres

### A. Peakpicking du spectre HSQC

- Placer vous dans la fenêtre 1.
- Régler le niveau d'affichage afin de ne voir plus que les 'vrais' pics et sans voir le bruit.
- Allez dans >Peak>Peak finding
- Dans l'onglet Find parameters, vérifier que l'option 'positive only' est sélectionnée. Seuls les pics de signe positif seront piqués.
- Dans l'onglet 'Region peak finding', ajuster la boîte pour éviter de piquer les bandes d'eau aux bords 15N du spectre (à 100-129ppm)
- Cliquez sur 'Find peaks'
- Inspecter la qualité du peakpicking. Regarder la table (>Peak>Peak list puis Peak Table)