

## Structure de petites molécules par techniques mixtes RMN et IR

**Objectif de la formation** : Initier à l'identification de petites molécules et à l'étude de leur structure par les spectroscopies RMN (liquide) et IR. Présenter des méthodologies d'investigation moléculaire par la combinaison de ces deux techniques d'analyse majeures.

**Programme** : Partir de la formule brute d'un composé organique pour arriver à déterminer sa structure suppose une stratégie d'investigations théorique et expérimentale. À l'aide d'exemples, il sera montré comment exploiter le potentiel des deux techniques RMN et IR pour résoudre une structure moléculaire. On verra comment les différentes étapes consistant à :

- analyser la molécule choisie à l'aide d'outils moléculaires (modèles),
- réfléchir à et élaborer une stratégie expérimentale,
- anticiper la mise en œuvre d'expériences,
- regrouper puis croiser les informations spectrales,

sont incontournables pour résoudre une structure moléculaire.

Ces stratégies d'identification pourront être étendues à des molécules inorganiques, selon les cas.

La formation se déroule sur 3,5 jours, du lundi après-midi au jeudi soir. Deux demi-journées seront consacrées à une partie pratique sur les spectromètres du laboratoire d'applications. La date est à convenir avec le responsable de la formation.

### Thèmes abordés au cours de la formation

- Bases avancées en IR :
  - Mode normal de vibration, Symétrie des modes normaux de vibration, fréquence de groupe, loi de Hooke
  - Analyse qualitative de spectres IR
  - Techniques d'analyses IR
- Bases avancées en RMN :
  - Principe du phénomène de résonance magnétique nucléaire : aimantation, excitation, relaxation / Séquence de base mono-impulsionnelle
  - Acquisition d'un signal et son traitement pour obtenir un spectre exploitable
  - Paramètres exploitables d'un spectre : déplacement chimique, couplage scalaire, le temps de relaxation
  - Séquences multi-impulsionnelles
  - Quelle expérience à deux dimensions pour quel problème ?
  - Description des expériences 2D de base (COSY, TOCSY, NOESY, HSQC...)
  - Problèmes spécifiques (suppression du signal de H<sub>2</sub>O, molécules chirales,...)
  - Analyse de spectres de RMN 2D

## Compétences couvertes par le stage

	Quelles compétences	Modalités d'évaluation	Services concernés
<b>Spectroscopie Vibratoire Concepts</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Comprendre les concepts de la spectroscopie vibrationnelle IR (et Raman)</li> <li>➤ Déterminer la symétrie d'une molécule</li> <li>➤ Prévoir les bandes caractéristiques d'un spectre</li> <li>➤ Identifier un composé moléculaire</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Evaluation par questions/réponses et exercices de compréhension</li> </ul>	R&D Laboratoire de fabrication Contrôle de production
<b>Analyse de spectres</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Savoir traiter et manipuler un signal IR-FT</li> <li>➤ Connaître les diverses méthodes d'acquisition d'un spectre</li> <li>➤ Préparer un échantillon pour une analyse IR selon la phase (solide, liquide, gazeux), la solvatisation, etc...</li> <li>➤ Repérer les bandes caractéristiques d'un spectre</li> <li>➤ Quantifier un composé seul ou dans un mélange</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Exercices pratiques</li> <li>➤ Démonstration et questions ouvertes devant le spectromètre</li> </ul>	R&D Laboratoire de fabrication Contrôle et suivi de production
<b>IR : aspects expérimentaux</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Savoir adapter les accessoires et méthodes d'enregistrement en fonction du type d'échantillon</li> <li>➤ Comprendre l'intérêt de l'ATR et maîtriser les points techniques</li> <li>➤ Etudier des matériaux complexes</li> <li>➤ Utiliser l'IR pour l'analyse de « polluants » (environnement et santé)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Exercices pratiques</li> <li>➤ Cas d'études</li> <li>➤ Démonstration et questions ouvertes devant l'appareil.</li> </ul>	R&D Laboratoire de fabrication Contrôle et suivi de production Qualité
<b>Spectroscopie RMN Concepts</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Comprendre les concepts du phénomène de RMN : magnétisme nucléaire, excitation et relaxation.</li> <li>➤ Connaître les paramètres mesurés en RMN : le déplacement chimique, le couplage scalaire, temps de relaxation.</li> <li>➤ Comprendre la séquence de base monoimpulsionnelle.</li> <li>➤ Connaître les paramètres importants relatifs à l'acquisition d'un signal RMN au traitement du signal brut et du spectre résultant.</li> <li>➤ Avoir des notions en RMN multiimpulsionnelle : écho de spin, expérience DEPT, etc.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Evaluation par questions/réponses et exercices de compréhension</li> </ul>	R&D
<b>Analyse de spectres expérimentaux</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Appliquer une stratégie efficace pour analyser un spectre de RMN-<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C et autres noyaux</li> <li>➤ Savoir repérer les signaux caractéristiques et savoir extraire les informations</li> <li>➤ Identifier un composé moléculaire</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Evaluation par questions/réponses et discussion de la pertinence des résultats issus d'un calcul.</li> <li>➤ Exercices d'identification de composés</li> </ul>	R&D Qualité
<b>RMN : aspects expérimentaux</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Mise en œuvre d'une expérience RMN : l'échantillon, le verrouillage du champ, la correction d'inhomogénéité magnétique</li> <li>➤ RMN du proton : expérience de base, découplage homonucléaire, présaturation</li> <li>➤ RMN du carbone 13 : expérience de base avec découplage des protons, DEPT</li> <li>➤ Etalonnage d'une impulsion radio fréquence</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Démonstration et questions ouvertes devant l'appareil.</li> </ul>	

**Public concerné :** Cette formation s'adresse à des techniciens ou techniciens supérieurs (niveau BTS ou licence scientifique) désireux d'approfondir leur expertise en analyse de spectres.

Sur demande, les techniques analytiques peuvent être découplées en deux formations distinctes. La durée des formations sera réduite et adaptée à la demande du client.

**Animateur et responsable** : [Christine Cordier](#), maître de conférences à l'Université Paris-Cité, spectroscopiste et forte d'une expérience d'enseignement de plus de 30 ans.

**Tarif** : 2500 € (TVA non applicable selon article 293B du CGI)