

LU3Ci041 : Analyse structurale

Responsable

✉ Dr Flavien Guenneau

LCMCP (UMR 7574)

Tour 44/43, 4^e étage, bureau 412

☎ 01 44 27 36 27

1. Descriptif

Volumes horaires : CM/TD 20 h, TP 10 h

Nombre de crédits : 3 ECTS

Barème /100 : contrôle continu /70 (évaluations réparties), TP /30 (pas d'examen de TP)

Parcours : mineure chimie

Période d'enseignement : P2

2. Présentation pédagogique

a. Objectifs

Maîtrise et mise en application des principes de spectrométrie de masse et Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) en vue de la caractérisation structurale de composés organiques, polymères et biomolécules. Au terme de l'UE, l'étudiant sera capable de :

- interpréter un spectre de masse (IE, IC, MALDI, ESI) et écrire les mécanismes de décomposition,
- analyser un ensemble de spectres RMN ^1H et ^{13}C , à une ou deux dimensions,
- identifier la structure développée d'un composé inconnu à partir de spectres RMN ou de masse,
- définir une stratégie d'analyse adaptée au type de molécule étudiée.

b. Thèmes abordés

Spectrométrie de masse : sources d'ionisation électronique (IE), chimique (IC), électrobulbion (ESI) et MALDI. Analyseurs : quadripôle (Q), temps-de-vol (TOF), pièges quadripolaires et hybrides Q/TOF. Mécanismes de fragmentation des ions.

Spectroscopie RMN : expériences de RMN ^1H et ^{13}C pour l'analyse de molécules organiques (découplage large bande, expérience 1D ^{13}C de tri par parité), RMN à deux dimensions (COSY homonucléaire et hétéronucléaire).

3. Prérequis

Notions de structure et réactivité : principales fonctions, polarité des liaisons, effets électroniques inductifs et mésomères, radicaux, ions, mouvements des électrons dans les réactions en chimie organique, tableau périodique des éléments (LU1Ci001 ou LU1Ci011, LU2Ci002).

Notions de base en spectroscopies RMN et IR, principes de la chromatographie en solution et en phase gazeuse (LU2Ci005).