

Conférence - CEISAM - UMR CNRS 6230

Mardi 27 janvier 2015
11h00 - Salle Marie Curie

Dr Nicolas GIRAUD

ICMMO - Université Paris Sud

RMN par Encodage Spatial en Fréquence : Vers une Spectroscopie de Corrélation Totalement Résolue

Au cours des dernières années, une nouvelle génération d'expériences de Résonance Magnétique Nucléaire, basées sur le principe d'une localisation du signal dans des « tranches » de l'échantillon, a vu le jour. De nombreux développements ont notamment été consacrés à l'acquisition d'expériences à l'issue desquelles le signal de chaque proton apparaît sous la forme d'un singulet, permettant de simplifier les spectres « pure shift » ainsi obtenus.[1,2] Il a aussi été démontré qu'il est possible de générer le long de l'échantillon une série d'échos de spin sélectifs permettant une édition complète en une seule acquisition de l'ensemble des couplages scalaires ou dipolaires d'un proton donné.[3] En dépit des avancées considérables accomplies dans ce domaine de la RMN haute résolution, l'ensemble du processus analytique conduisant à l'extraction des couplages proton-proton restent cependant encore très souvent long et difficile pour les chimistes, en raison de la complexité et de la quantité d'information qui est présente sur les spectres de molécules, y compris de petite ou de moyenne taille. Dans ce contexte, les résultats théoriques et expérimentaux récents que nous avons obtenus pour concevoir des expériences permettant de contrôler parfaitement la dynamique de spin qui se développe localement dans ce type d'expériences seront présentés. D'une part, un formalisme théorique permettant de simuler et décrire les caractéristiques essentielles de la RMN par encodage spatial fréquentiel telles que sa résolution spatiale ou sa sensibilité sera présenté. D'autre part, deux expériences récentes qui illustrent des stratégies originales pour générer le spectre de corrélation souhaité seront présentées. D'abord, l'expérience PCR-COSY permet de combiner des évolutions de spins en les encodant le long d'axes de gradients différents, afin d'obtenir un spectre de corrélation général donnant accès à une mesure et une attribution complètes de tous les couplages d'une molécule.[4] Enfin, l'expérience push-GSERF permet de combiner le potentiel analytique propre à la spectroscopie multi-dimensionnelle avec les améliorations de résolution rendues accessibles par les techniques « pure shift » et « J-éditées ». La robustesse de cette expérience, qui permet de résoudre complètement l'information de déplacement chimique dans la dimension directe du spectre, et de couplage spin-spin dans la dimension indirecte, sera évaluée sur des molécules de complexité structurale et spectrale croissantes.[5]

Références:

- [1] K. Zangger and H. Sterk, *J. Magn. Reson.*, 1997, 124, 486-489
- [2] N. H. Meyer and K. Zangger, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2013, 52, 7143-7146.
- [3] N. Giraud, L. Beguin, J. Courtieu and D. Merlet, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010, 49, 3481-3484. [4] N. Giraud, D. Pitoux, J. M. Ouvrard and D. Merlet, *Chem. Eur. J.*, 2013, 19, 12221-12224.
- [5] D. Pitoux, B. Plainchont, D. Merlet, Z. Hu, D. Bonnaffé J. Farjon, and N. Giraud, in press (2015)