

DESCRIPTIF SUCCINT DES ACTIVITES DE RECHERCHE

THEMES DE RECHERCHE (1992-2012)

- Thème 1** : Nouvelles méthodologies RMN dans les solvants orientés : applications pour l'analyse en chimie organique
- Thème 2** : Analyse énantiomérique par RMN dans les cristaux liquides lyotropes chiraux polypeptidiques : concepts et applications
- Thème 3** : Etude des phénomènes de reconnaissance moléculaire et de discrimination chirale dans les milieux orientés chiraux

PRINCIPAUX AXES DE RECHERCHE DEVELOPPES (1992-2012)

- * (1992) Développement de la méthodologie CRASY ("Correlated Random IAbel SpectroscopY") en milieu orienté
- * (1992-94) Simplification des spectres RMN anisotropes par réduction cohérente de l'Hamiltonien de spins : les expériences 2D SMI-COSY homonucléaires
- * (1994-98) Visualisation d'énantiomères par RMN ^{13}C en abondance naturelle dans les cristaux liquides lyotropes chiraux : développements analytiques
- * (1995) Calcul des paramètres d'ordre orientationnel d'énantiomères dissous dans un solvant orienté chiral
- * (1995-96) Discrimination et analyse de spectres d'énantiomères par RMN multidimensionnelle en milieu anisotrope chiral
- * (1996) Simplification des spectres RMN hétéronucléaires en milieu orienté : les expériences 2D SMI-COSY hétéronucléaires
- * (1996) Etude par RMN. du deutérium des effets hydrodynamiques dans les solvants cristaux liquides polypeptidiques
- * (1996-97) Détermination et analyse de l'ordre orientationnel de deux énantiomères semi-rigides dans un solvant orienté chiral : Etude des effets vibrationnels
- * (1997-01) Quantification de la discrimination faciale dans les cristaux liquides chiraux
- * (1997-01) Visualisation d'énantiomères par RMN ^2H en abondance naturelle dans les cristaux liquides lyotropes chiraux
- * (1997-01) Développement de nouvelles séquences RMN 2D deutérium en abondance naturelle dans les cristaux liquides lyotropes chiraux : les expériences QUOSY
- * (1999-00) Analyse stéréochimique d'isomères *thréo/érythro* par RMN 1D dans les milieux orientés chiraux et achiraux
- * (1999-02) Discrimination d'hydrocarbures chiraux cycliques et acycliques par RMN dans les milieux orientés chiraux
- * (1999-02) Analyse énantiomérique et énantiotopique de composés de symétrie C_3 et C_{3v} de type tribenzocyclononène par RMN du carbone-13 et du deutérium dans les cristaux liquides chiraux

- * (2000-01) Discrimination d'éléments énantiotopes dans des molécules ne présentant pas d'atome prostéréogène tétraédrique
- * (2000-01) Etude du potentiel analytique des cristaux liquides chiraux pour l'étude d'invertomères chiraux
- * (2000-02) Analyse de molécules prochirales dans les cristaux liquides chiraux : Conséquences et applications analytiques en stéréochimie
- * (2000-02) Développement et utilisation de nouveaux cristaux liquides chiraux polypeptidiques adaptés à l'analyse énantiomérique et énantiotopique
- * (2001-02) Analyse de la chiralité par RMN d'hétéronoyaux (sélénium-77)
- * (2000-01) Etude de la corrélation orientation-conformation dans les cristaux liquides
- * (2001-02) Applications en routine de la RMN 2D du deutérium en abondance naturelle dans un solvant cristal liquide chiral.
- * (2001-02) Nouvelles stratégies RMN 2D homo- et hétéronucléaires capables de simplifier l'analyse de spectres d'énantiomères perdeutérés orientés dans les cristaux liquides chiraux
- * (2001-02) Etude des facteurs influençant la discrimination de directions énantiotopes dans les molécules prochirales
- * (2001-02) Utilisation d'expériences de RMN 2D homonucléaires sélectives (SERF) dans les cristaux liquides
- * (2001-03) Analyse stéréochimique par RMN en milieu orienté chiral et achiral : Attribution des configurations relatives dans les molécules prochirales rigides
- * (2002-03) Développement méthodologiques de la RMN 2D hétéronucléaire carbone-deutérium pour l'analyse stéréochimique en milieux orientés
- * (2002-03) Utilisation d'expériences de RMN 2D hétéronucléaires sélectives (HETSERF) dans les cristaux liquides
- * (2002-03) Discrimination chirale par RMN 2D binucléaire dans un solvant orienté chiral
- * (2002-04) Etude de l'influence d'un environnement chiral sur la distribution conformationnelle de deux énantiomères «flexibles» :
- * (2003-04) Etude des mécanismes de discriminations énantiotopiques et énantiomériques dans les molécules prochirales et les molécules parentes de chiralité isotopique
- * (2003-04) Etude de l'influence d'un environnement chiral sur la distribution conformationnelle d'une molécule prochirale flexible : le 5CB
- * (2004-05) Mise au point et applications d'expériences RMN 3D d'autocorrélation deutérium phasée
- * (2004-05) Développement et applications d'outils par RMN 2D impliquant des transferts d'aimantation ^{13}C - ^2H dédiés à l'analyse spectrale dans les cristaux liquides
- * (2004-06) Réduction cohérente de l'interaction quadrupolaire dans un solvant orienté
- * (2005-06) Etude du phénomène d'isomérisme rotationnel par RMN ^2H en milieu orienté chiral : le cas des atropoisomères chiraux et des composés parents prochiraux
- * (2005-06) Etude par RMN de la dynamique moléculaire de nouveaux composés chiraux de type

cyclotrivéatrylène (CTV)

- * (2005-06) Stratégies analytiques pour analyser des mélanges de composés thréo/mésos par RMN 2D en milieux orientés
- * (2006-07) Tentative de détermination de la configuration absolue de molécules chirales de symétrie C_3 : Approche RMN et modélisation moléculaire
- * (2006-08) Etude de mélanges orientés contenant deux polypeptides chiraux : vers la quantification expérimentale des interactions « soluté-polypeptides »
- * (2006-08) Détermination empirique de la configuration absolue d'énantiomères par RMN 2H en abondance naturelle
- * (2007-08) Analyse théorique et expérimentale de la dynamique conformationnelle et orientationnelle par RMN ^{13}C et 2H abondance naturelle du 5CB dans sa phase nématique
- * (2007-08) Premières applications de la RMN 3D 2H en abondance naturelle dans les CLC
- * (2008-09) Etude de l'origine de la répartition non statistique en 2H au long des chaînes des acides gras
- * (2008-09) Analyse de l'effet d'appauvrissement en 2H observé sur les sites éthyléniques impairs d'acides gras naturels et entre les sites H-pro-(*R*) (riche) et le H-pro-(*S*) (pauvre)
- * (2008-09) Première analyse des teneurs en 2H dans l'acide vernolique sont en parfaite adéquation avec les mécanismes proposés pour sa biosynthèse
- * (2008-10) Analyse combinée d'acides gras insaturés non-conjugués complets par RMN 2D du 2H en abondance naturelle en milieu orienté
- * (2008-09) Etude conjointe de la désymétrisation de composés aromatiques et vinyliques halogénés prochiraux: Echange énantiosélectif halogène–lithium et reconnaissance prochirale dans une matrice cristal-liquide chirale
- * (2008-09) Analyse des étapes d'élongation et de désaturation d'acide gras C-18 issus du champignon *fusarium lateritium* par RMN 2D DAN anisotrope quantitative
- * (2008-09) Etude théorique et expérimentale du comportement conformationnel et orientationnel de composés cycliques flexibles par RMN du deutérium dans les CLC: Cas de la *cis*-décaline et du THF
- * (2008-09) Analyse théorique des phénomènes de discrimination énantiotopiques par RMN en milieu orienté chiral: Décomposition symétrique et anti-symétrique de la matrice d'ordre de Saupe : Etude de molécules modèles de symétrie C_s , C_{2v} , D_{2d} , S_4
- * (2008-10) Etude du comportement conformationnel d'un cristal liquide nématogène (I-22) dans sa phase orientée par RMN 2D multinoyau
- * (2009-10) Détermination complète des excès énantio-isotopomériques naturels dans le cas de l'acide linoléique par RMN 2D DAN dans une mésophase polypeptide
- * (2009-10) Optimisation des conditions de discrimination énantio-isotopomérique d'acides gras : Influence de la polarité du co-solvant, comportement orientationnel et premières applications à l'étude d'acides gras conjugués
- * (2010-11) Extension de la RMN 2D DAN dans les CLC pour l'analyse d'acides gras saturés
- * (2010-11) Première discrimination expérimentale spectrale d'éléments énantiotopes dans les molécules de symétrie S_4

- * (2010-11) Développement de l'approche NUS-Cov (non uniform sampling / Covariance) pour réduire les temps d'accumulation des expériences 2D QUOSY DAN.
- * (2010-11) Etude par RMN du deutérium dynamique de composés hexathia métacyclophaniques. Analyse des différents types d'échanges conformationnels
- * (2010-11) Simulation du comportement orientationnel d'acides gras saturés et insaturés par la méthode d'exclusion des volumes stérique (Collaboration avec l'Université de Padoue)
- * (2010-11) Analyse par RMN orientée de triglycérides homogènes saturés à courte et longue chaîne. Analyses des phénomènes de reconnaissance de forme.
- * (2010-12) Reconnaissance chirale et prochirale par RMN dans des mésophases à base d'ADN fragmentée

ACTIVITES DE RECHERCHE MENEES EN COLLABORATION

- * (1996-98) Etude par RMN 1D et 2D carbone-13 de la conformation de molécules mésogènes
- * (1997) Mise au point de stratégies et d'expériences RMN pour l'étude de matériaux hybrides
- * (1998-99) Evaluation de l'énantiosélectivité de réactions de déshydrofluorination asymétriques par RMN ^{13}C et ^{19}F dans un solvant cristal liquide chiral : Application à la synthèse de dérivés propargyliques fluorés chiraux
- * (1999) Mise au point d'expériences RMN pour la mise en évidence de changements de spin photoinduits dans des complexes de Fer (III)
- * (1999) Etude des effets de dédoublements cinétiques au cours de réactions de cycloadditions asymétriques [2+3] appliquées à la synthèse de β -lactones chirales par RMN du carbone-13 dans un solvant cristal-liquide chiral
- * (1999-01) Mesure d'excès énantiomériques et diastéréoisomériques de dérivés benzéniques chiraux par RMN du carbone-13 et par RMN 2D du deutérium en abondance naturelle dans un solvant cristal-liquide chiral
- * (2001-02) Etude du mécanisme de cyclisation d'esters γ -halogénés- α,β -insaturés catalysée par SmI_2 par RMN 2D ^2H dans les milieux orientés : Discrimination par RMN d'isomères *méso* et *d,l* cyclopropaniques
- * (2001-02) Analyse énantiomérique de dérivés phosphorés P-benzylés chiraux par RMN 1D carbone-13 couplé phosphore
- * (2002-04) Quantification des rapports isotopiques (D/H) d'un fragment d'acides gras insaturés (BPTH) par RMN 2D ^2H en abondance naturelle dans un solvant orienté
- * (2002-04) Mise au point de nouveaux systèmes amphiphiles chiraux dédiés à l'analyse énantiomériques de molécules hydrosolubles
- * (2004-05) Détermination par RMN de la stéréochimie d'imines chirales synthétisées par spectroscopie micro-ondes
- * (2004-05) Etude en RMN orienté de complexes de chrome chiraux ($\text{arène-}\eta^6$) tricarbonylés par RMN du carbone-13 et de leurs précurseurs

- * (2004-05) Analyse de molécules bioactives chirales
- * (2005-06) Détermination de la stéréochimie (*pro-R/pro-S*) des sites deutériums présentant un effet de déplétion isotopique (D/H) dans le BPTH
- * (2006) Analyse de l'énantiosélectivité de transferts d'hydrogénation asymétrique sur des composés acéthyléniques fluorés
- * (2006-07) Etude de la structure et de la dynamique de composés cycliques de de type oxothiomolybdène Mo₁₂ and Mo₁₆ contenant des dérivés téréphtalates
- * (2009-10) Etude par RMN isotrope de composés oxa- et thiahélicène : Premier résultat obtenu dans un CLC.
- * (2009-10) Etude par RMN isotrope de la géométrie d'oxazolidines trifluorométhylés
- * (2009-10) Analyse de complexes cationiques (arène- η^6) chiraux de manganèse tricarbonylés (η^6 -arene)Mn(CO)₃⁺. Apport de la RMN deuterium dans les CLC pour la détermination des excès énantiomériques dans le cas des complexes chargés
- * (2009-10) Etude de la résolution cinétique d' α -chloro, β -cétoesters par Hydrogenation Asymmetric à l'aide du Ru-DIFLUORPHOS. Contribution de la RMN du Carbone-13 dans les CLC à la compréhension des mécanismes mis en jeu.
- * (2010-11) Etude des différences mécanistiques de formation du vernoléate de méthyle à partir du linoléate de méthyle dans deux plantes par RMN DAN dans les CLC.
- * (2011-12) Analyse de lipides chiraux par RMN DAN dans les CLC