

## **Chim 523. Analyse structurale en chimie organique**

Ce cours, après un rappel développera les bases théoriques et les principales applications des techniques de RMN et de spectrométrie de masse à l'analyse structurale de molécules organiques.

### **Thème 1 : RMN : bases théoriques et principales applications à l'analyse structurale**

*par Denis Merlet, Professeur, Université Paris-Sud 11, ICMMO.*

Part I : Description de la base théorique de la RMN à l'aide du modèle vectoriel

Part II : Description succincte du modèle de l'opérateur densité

Part III : Description du modèle des opérateurs produits

Part IV : Application du modèle des opérateurs produits aux différentes séquences d'impulsions (1D ou 2D) utilisées en routine en chimie organique.

### **Thème 2 : Bases théoriques de la spectrométrie de masse organique.**

*par Guy Bouchoux, Professeur, Université Paris-Sud 11, Ecole Polytechnique.*

Part I: Généralités sur la formation des ions en spectrométrie de masse, particularités des ions isolés, thermochimie de l'ionisation et de la fragmentation, aspects cinétiques.

1. Formation des ions en spectrométrie de masse
2. Structure et stabilité des ions isolés
3. Thermochimie de l'ionisation
4. Energies potentielle, interne et cinétique d'une fragmentation

Part II: Description des principaux modes de fragmentations des ions positifs: simples dissociations, migrations d'hydrogènes, éliminations 1,2, cyclisations, complexes ion-neutre.

1. Fragmentations par simples dissociations
2. Fragmentations avec migrations d'hydrogènes
3. Fragmentations accompagnées de formations de liaisons

Supplément aux diplômes :

Maîtriser les bases théoriques des méthodes modernes de la RMN et de la spectrométrie de masse. Savoir les utiliser pour déterminer ou confirmer la structure de molécules organiques.

Pré requis :

Niveau au moins équivalent au parcours M1 Spécialité Chimie Organique d'Orsay en ce qui concerne les applications des méthodes physiques à la détermination des structures organiques (Chim 401 et 432).

Ouvrages de référence :

La RMN-Concepts et méthodes (Daniel Canet, InterEditions).