

Spectroscopie RMN (Rouvessac + Skoog)

* C'est une méthode d'analyse extrêmement utilisée en chimie organique

↳ Elle permet de déterminer la structure des molécules et même les conformations.

* Pour pouvoir faire de la Spectroscopie RMN, il faut que les noyaux aient un spin nucléaire non nul (Z_X : il faut Z et A pas pairs)

* On va avoir des transitions entre les niveaux énergétiques créés par effet Zeeman

$$E_{\text{Zee}} = - \gamma \hbar B_0 m_I \Rightarrow \Delta E = h\nu = \gamma \hbar B_0 \quad (\text{si } m_I = \pm 1/2)$$

* On peut aussi avoir des couplages entre noyaux

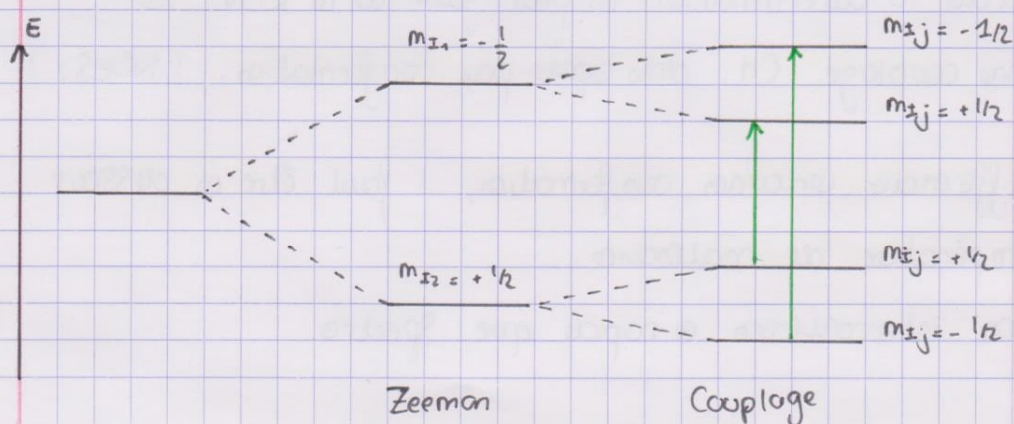
$$E_{\text{coup}} = \hbar J m_{I_i} m_{I_j}$$

avec J la constante de couplage en Hz.

* Ensuite l'environnement chimique change les niveaux Zeeman

↳ le déplacement chimique informe sur l'environnement chimique

$$\delta = \frac{\nu - \nu_{\text{ref}}}{\nu_{\text{op}}} \times 10^6 \quad (\text{cf "tableau RMN"})$$



* On peut avoir des transitions si $\Delta m_z = \pm 1$ $\Delta m_j = 0$

* Pour bien comprendre le lien entre les niveaux d'énergie et le spectre qu'on obtient, il faut regarder l'évolution de l'augmentation dans le temps

↳ cf fiche "LC 13 - Spectroscopie"

* Dans la pratique on crée un fort champ magnétique avec une bobine supraconductrice

• Il faut un champ homogène : bobine de Shim

• Il faut un champ stable : lock.

* Pour avoir un spectre on introduit l'échantillon dans le champ et on regarde la réponse.

* On obtient un grand nombre d'informations

• Le déplacement chimique : info sur l'environnement chimique

• L'intégration : le nombre de protons équivalents (cf énantiotopie etc)

• La multiplicité du signal : le nombre de protons voisins ($n+1$ uplets)

• Les couplages : la conformation et les voisins

↳ cf "Loi de Karplus"

↳ cf "Couplage cis-trans" (cf question VI.4, chimie 2011 Agrég)

* Pour aider la détermination on peut faire de la RMN 2D

↳ donne couplage CH, dans l'espace par conformation. (NOESY)

* Pour différencier certaines conformations, il faut être en dessous de la température de coalescence

↳ sinon interconversion trop rapide que Spectro