

CH-201

**Analyse structurale**

Patiny Luc

Cursus	Sem.	Type
Chimie et génie chimique	BA3	Obl.
UNIL - Sciences forensiques	H	Obl.

Langue d'enseignement	français
Crédits	2
Session	Hiver
Semestre	Automne
Examen	Ecrit
Charge	60h
Semaines	14
<b>Heures</b>	<b>2 hebdo</b>
Cours	1 hebdo
Exercices	1 hebdo
<b>Nombre de places</b>	

**Résumé**

L'objectif de ce cours est d'apprendre à identifier la structure de petites molécules organiques au moyen des techniques de spectrométrie de masse, spectroscopie infra-rouge et résonance magnétique nucléaire.

**Contenu**

- Spectre d'absorption infra-rouge : Loi de Hooke, énergie des vibrations d'élongation, effets isotopiques, de solvant.
- Spectrométrie de masse (MS) : modes d'ionisation, abondance isotopique naturelle, pic moléculaire, M-1, M+1, pic de base, exemples de fragmentations, spectres à haute résolution.
- <sup>1</sup>H-RMN et <sup>13</sup>C-RMN: déplacements chimiques ( $\delta$ ), couplage noyaux/ noyaux ( $J(X,Y)$ ), multiplicité, spectres du premier ordre. Effets de la structure et des fonctions sur les paramètres spectraux, effets de la géométrie, de la symétrie, de l'asymétrie (homotopie, diastéréotopie, énantiotopie).
- Détermination de structures de composés organiques simples par l'analyse de spectres combinés et données chimiques (*seulement spectres à une dimension*)

**Compétences requises****Cours prérequis indicatifs**

- Le cours nécessite les connaissances de: "Atomes, ions, molécules et fonctions I, II", "Equilibres et réactivité chimiques"

**Acquis de formation**

A la fin de ce cours l'étudiant doit être capable de:

- Déterminer la structure chimique de produits inconnus en se basant sur les spectres de masse, infra-rouge et RMN (<sup>1</sup>H et <sup>13</sup>C)
- Calculer le degré d'insaturation au départ de la formule brute
- Déterminer la formule brute au départ d'information de masse

**Méthode d'enseignement**

Cours ex-cathedra et exercices sur ordinateur.

**Méthode d'évaluation**

Examen écrit (2h)

## Ressources

### Bibliographie

"Identification spectrométrique des composés organiques", Silverstein, Basler, Morill, DeBoeck-Université, Paris, 1998

### Ressources en bibliothèque

- [Identification spectrométrique des composés organiques / Silverstein](#)

### Sites web

- <http://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=9431>
- <http://www.cheminfo.org/flavor/structuralAnalysis>
- <http://www.chemcalc.org>
- <http://www.nmrdb.org>

### Liens Moodle

- <http://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=9431>

## Préparation pour

"Fonctions & réactions organiques II", "Synthèse asymétrique", Target synthesis of building blocks", "Physical organic chemistry", "Advanced NMR and imaging"