

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
Heures	2 hebdo
Cours	1 hebdo
Exercices	1 hebdo
Nombre de places	

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.
- ¹H-RMN et ¹³C-RMN: déplacements chimiques (δ), 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 (¹H et ¹³C)
- 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.

Les exercices peuvent être en anglais et certains assistants ne sont pas francophones mais répondent en anglais.

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"