



# Spectroscopie RMN liquide et diffraction de rayons X



Niveau d'étude  
BAC +4



ECTS  
2 crédits



Composante  
Faculté des  
Sciences

## En bref

- › **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Méthode d'enseignement:** En présence
- › **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

## Présentation

### Description

*RMN :*

La RMN (Résonance Magnétique Nucléaire) en phase liquide est une méthode spectroscopique d'analyse incontournable pour le chimiste, permettant notamment de déterminer la structure de petites molécules organiques ou macromolécules en solution, l'étude des phénomènes dynamiques... Cette UE a pour objectif de comprendre les phénomènes mis en jeu dans cette technique et de les relier aux différentes informations structurales accessibles par cette méthode. Le but est d'être capable d'exploiter les données spectrales issues de cette analyse pour élucider la structure et la stéréochimie de molécules organiques ou les structures de polymères, ou encore, pour réaliser le suivi de réaction.

*Diffraction des rayons X :*

La diffraction des rayons X est une technique puissante et non-destructive de caractérisation de la structure cristalline des matériaux mais également, capable de fournir des informations cristallographiques et structurales comme les paramètres de maille et les positions des atomes. Ceci comprend tous les matériaux cristallisés comme les céramiques, les matériaux pour le stockage et la transformation de l'énergie et de l'information ainsi que les molécules organiques et les complexes métalliques (distances et angles interatomiques, stéréochimie (chiralité, stéréoisomérisation...), liaisons intra et intermoléculaires...). L'objectif de cette UE est une initiation à la cristallographie et à la diffraction, dont le but est de comprendre le fonctionnement et les caractéristiques d'un diffractomètre à rayons X, ainsi qu'interpréter des diagrammes de diffraction (analyse structurale, paramètres de maille).

Volumes horaires\* :

CM : 10

TD : 10

### Objectifs

*RMN :*

Parfaire les connaissances associées aux phénomènes mis en jeu dans une expérience RMN.

Etre capable d'analyser les données spectrales issues de spectres 1D <sup>1</sup>H et <sup>13</sup>C, de les mettre en relation avec la



structure/la stéréochimie pour des molécules organiques, des macromolécules ou des polymères

*Diffraction des rayons X :*

Initiation à la cristallographie (réseau, plans cristallins, symétrie) et à la résolution des structures cristallines (facteur de structure, intensités) ; fonctionnement d'un diffractomètre ; interprétation d'un diagramme de diffraction.

---

## Pré-requis nécessaires

*Diffraction des rayons X :*

Physico-chimie L3

*RMN :*

Maîtriser les concepts de base en chimie organique et en spectroscopie.

Chimie analytique niveau L3.

---

## Contrôle des connaissances

Le contrôle de connaissances se fera sous la forme d'un contrôle terminal.

---

## Syllabus

*RMN :*

Rappel des principes fondamentaux de la RMN (spin nucléaire, effet Zeeman, aimantation, couplage scalaire...)

RMN 1H : couplage et stéréochimie. Noyaux échangeables. Effet des équilibres chimiques sur les spectres. Phénomène de découplage.

RMN 13C : découplage large bande. Relaxation T1. Effet Overhauser Nucléaire (NOE). Techniques d'attribution : APT, DEPT.

*Diffraction X :*

Interaction rayons-X/matière, diffraction, indexation, diffractomètre à rayons-X, réseau de Bravais, systèmes cristallins, facteur de structure, analyse de phases, interprétation des diffractogrammes X,

---

## Informations complémentaires

Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

<https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/>

---

## Bibliographie

Jean Protas: Diffraction des rayonnements, Dunod

1. and C. McKie: Essentials of Crystallography, Blackwell Scientific Publications
2. Borchardt-Ott: Crystallography: an introduction, Springer
3. Als-Nielsen, D. McMorrow: Elements of Modern X-ray Physics, Wiley

---

## Infos pratiques



---

## Contacts

Responsable pédagogique

Werner PAULUS

✉ werner.paulus@umontpellier.fr

Responsable pédagogique

Sébastien CLEMENT

✉ sebastien.clement@umontpellier.fr

---

## Lieu(x)

› Montpellier - Triolet