

Principe de la spectroscopie de RMN à 2 dimensions (1)

Succession de quatre intervalles de temps: préparation, évolution, mélange, et détection



Principe de la spectroscopie de RMN à 2 dimensions (2)



Le temps de préparation:

Préparation du système de spins à étudier pour l'expérience

(par exemple, création de l'état à mesurer à l'aide d'une impulsion radiofréquence, ou expérience de découplage)

Principe de la spectroscopie de RMN à 2 dimensions (2)

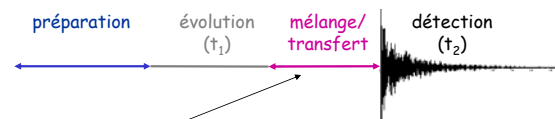


Le temps d'évolution:

Le système de spin évolue sous l'effet de divers facteurs, ceci étant fonction du déplacement et des couplages scalaires du noyau correspondant. Il y a modulation.

On parle de 'marquage'.

Principe de la spectroscopie de RMN à 2 dimensions (2)

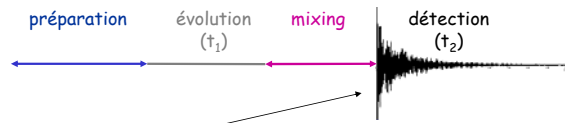


Le temps de mélange/transfert:

Réalisation de transferts d'aimantation ou de polarisation de manière à pouvoir corréler des spins entre eux.

transfert $A(\delta_A)$ \rightarrow $A(\delta_A)$ pic diagonal (homo)
 $A(\delta_A)$ \rightarrow $X(\delta_X)$ pic de corrélation entre A et X
 pic hors diagonal (homo)

Principe de la spectroscopie de RMN à 2 dimensions (2)



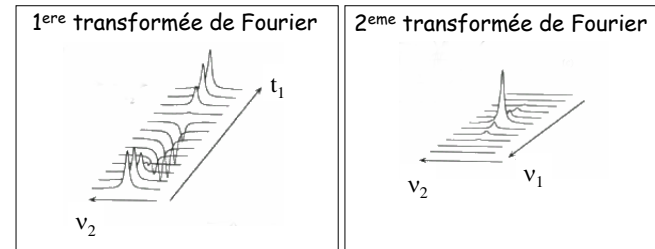
La détection:

Acquisition du signal modulé

Principe de la spectroscopie de RMN à 2 dimensions (3)

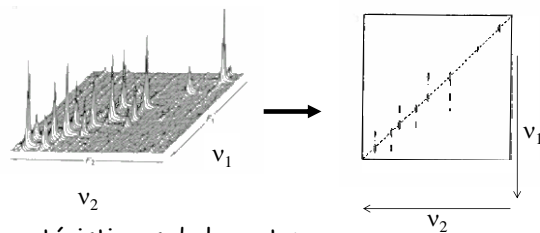
Expérience à 2 dimensions: 2 variables temporelles t_1 et t_2

➡ Double transformée de Fourier



Principe de la spectroscopie de RMN 2D (4)

La représentation en courbes de niveaux:



Caractéristiques de la carte:

La diagonale principale est occupée par le spectre conventionnel (2D homonucléaire).

Les informations de corrélation sont données par les pics hors diagonaux

La projection sur chacun des axes conduit à nouveau au spectre 1D conventionnel

Avantages/Inconvénients

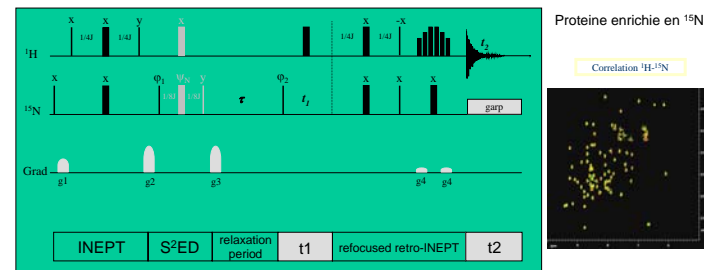
- visualisation directe des interactions
- Tri de l'information
- Dispersion de l'information sur n dimension
- temps d'expérimentation
- résolution spectrale

Directe/Inverse

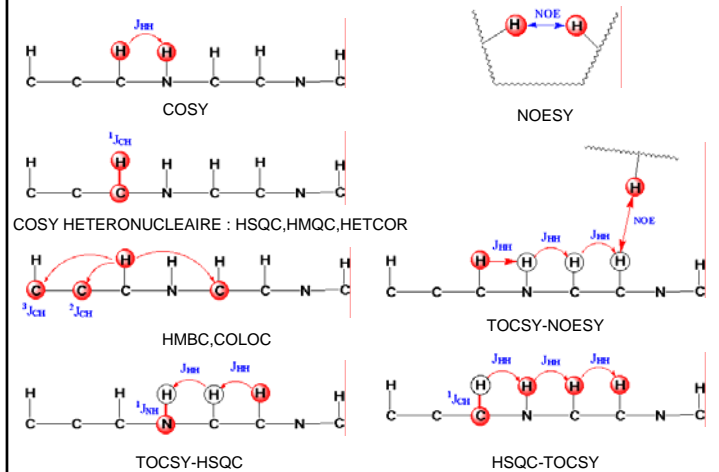
- Une expérience directe consiste à partir du spin A (sensible) a transféré son aimantation vers le spin X et a observé le spin X (moins sensible)
- Une expérience inverse consiste à observé X par le biais de A

RMN nD pratique

- Séquence d'impulsions RMN
 - Impulsions radiofréquences (agir sur les spins)
 - Application simultanée sur plusieurs isotopes
 - Application sélective à une fréquence précise
 - ...
 - Délais (laisser se développer les interactions)
 - Impulsions de gradient de champ statique



Exemples de Corrélations entre spins



Un exemple

- Substance Naturelle
- COSY
- HSQC
- HMBC
- HSQC TOCSY

