

Proposition de Stage M1 Chimie Paris Saclay 2023-2024

Nom et label de l'unité de recherche : [ICMMO, UMR CNRS 8182](#)

Nom et adresse de l'équipe de recherche : [RMN en Milieu Orienté, HM-1, BPC](#)

Nom et adresse du laboratoire : [ICMMO, Henri Moissan, UMR CNRS 8182, Université Paris-Saclay, 91460 Orsay.](#)

Nom, prénom de l'encadrant(e) du stage de M1 : [Philippe Lesot \(DR\)](#)

Courriel de l'encadrant(e) du stage : philippe.lesot@universite-paris-saclay.fr

Courriel du(de la) responsable de groupe : philippe.lesot@universite-paris-saclay.fr

Analyse Structurale et Configurationnelle par RMN 2D DANA

Description du projet :

L'équipe de RMN de l'ICMMO est reconnue internationalement pour ces développements méthodologiques en RMN du ^1H , ^{13}C ou ^2H (molécules marquées en ^2H ou en abondance naturelle) en milieu orienté (chiral), avec des applications variées en analyse structurale, stéréochimie ou isotopique. La richesse de cette approche repose sur l'analyse des observables anisotropes résiduelles comme l'anisotropie de déplacement chimique (RCSA), le couplage dipolaire (RDC) ou le couplage quadripolaire (RQC), qui sont en moyenne nulle dans les liquides isotropes.

Jusqu'à présent, seuls les RDC(^{13}C - ^1H ou ^1H - ^1H) puis les RCSAs(^{13}C) ont été utilisés abondamment dans le cadre de l'élucidation structurale de composés naturels complexes et de leur détermination configurationnelle. Un nouveau challenge analytique dans le domaine de l'analyse structurale de molécules naturelles/bioactives est l'utilisation des RQCs(^2H), sans enrichissement en deutérium. Cette approche offre l'avantage de données RMN associées aux RQCs(^2H) dont l'amplitude est de un à deux (voir trois) ordres de grandeur supérieurs aux magnitudes des valeurs des RDCs(^{13}C - ^1H) et des RCSAs(^{13}C), respectivement.

L'intérêt de la méthode a été mis en évidence avec des molécules de stéréochimie connue (la Strychnine et l'Artémisinine), avec un premier article publié dans la revue américaine « *Journal of Natural Products* » parue en 2020. Pour définir les possibilités, la robustesse mais aussi les limites de cette approche innovante, d'autres exemples utilisant des molécules modèles doivent être explorés, comme par exemple, la Cytisine, DHEA, la Santamarine ou avant d'explorer des molécules plus complexes ou d'intérêt.

Le travail de recherche proposé pendant ce stage de Master 1 présente un très fort caractère expérimental. Il consistera d'abord à se former aux techniques de RMN expérimentales avant d'entreprendre l'analyse structurale 3D de composés organiques chiraux.

Objectifs du stage :

- i) Préparation d'échantillons RMN à base cristaux-liquides chiraux polypeptidiques,
- ii) Formations aux techniques de RMN expérimentales (1D, 2D) ^2H isotropes et anisotropes développées dans l'équipe,
- iii) Analyse structurale et configurationnelle d'un (ou plusieurs) composé(s) organique(s).

Nous recherchons pour ce stage de trois mois un(e) étudiant(e) de niveau Master intéressé(e) par la spectroscopie RMN, la stéréochimie moléculaire et l'analyse structurale. Ce stage permettra à l'étudiant(e) d'acquérir des compétences en chimie analytique, et se former aux techniques de la spectroscopie RMN 1D et 2D moderne.

- DUREE DU STAGE ENVISAGEE :- **3 mois (ou plus)**
- DOMAINE(S) CONCERNE(S) :

- Théorie
- Expérience**
- Chimie organique
- Chimie inorganique
- Chimie physique**
- Matériaux
- Polymères
- Autres : (Analytique : RMN)**

Fiche à envoyer à christophe.bour@-psud.fr