**LISTE COMPLETE DE LA PRODUCTION « ECRITE »**

**Liste complète et descriptif des publications par année (1992-18) :**

##### Légende : A.F. : Article de Fond (revue)

**A.V. :** Article de Vulgarisation scientifique (ou grand public)

**A.R. :** Article de Recherche

**C.L. :** Chapitre de Livre

**Proc. :** Proceedings

**R.C. :** Revue Critique de livre

**\* : «** Corresponding author **»**

**ISI / SCI :** Base de données (ISI Web of Science / Science Finder)

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **1.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Coherent Reduction of Dipolar Interactions in Molecules Dissolved in Anisotropic Media Using a New Multiple-pulse Sequence in a COSY Experiment**  P. LESOT, J.M. OUVRARD, B.N. OUVRARD, J. COURTIEU**\***  ***J. Magn. Reson.***, ***A*,** **107**, 141-150, **(1994)**.  DOI: 10.1006/jmra.1994.1061 | | | | | |
| **2.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Multiple-Pulse COSY NMR Spectroscopy of Oriented Molecules in Thermotropic Cholesterics**  P. LESOT, F. NIELSEN, J.M. OUVRARD, J. COURTIEU**\***  ***J. Phys. Chem. A***, **98**, 12849-12855, (**1994**).  DOI: 10.1021/j100100a009 | | | | | |
| **3.**  **(A.R)**  **ISI / SCI** | **Visualization of Enantiomers in a Polypeptide Liquid Crystal Solvent through Carbon-13 NMR Spectroscopy**  P. LESOT, D. MERLET, A. MEDDOUR, A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU**\***  ***J. Chem. Soc.*, *Faraday Trans*.**, **91**, 1371-1375, **(1995)**.  DOI: 10.1039/ft9959101371 | | | | | |
| **4.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Measurement and Analysis of the Molecular Ordering Tensors of Two Enantiomers Oriented in a Polypeptide Liquid Crystalline System**  P. LESOT, Y. GOUNELLE, D. MERLET, A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU**\***  ***J. Phys. Chem.******A***, **99**, 14871-14875, **(1995)**.  DOI: 10.1021/j100040a042 | | | | | |
| **5.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Discrimination and Analysis of the NMR Spectra of Enantiomers Dissolved in Chiral Liquid Cristal Solvents through 2D Correlation Spectroscopy**  P. LESOT, D. MERLET, J. COURTIEU**\***, J.W. EMSLEY  ***Liq. Crystals***, **21**, 427-435, **(1996)**.  DOI: 10.1080/02678299608032851 | | | | | |
| **6.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Proton-Decoupled Carbon-13 NMR Spectroscopy in a Lyotropic Chiral Nematic Solvent as an Analytical Tool for the Measurement of the Enantiomeric Excess**  A. MEDDOUR, P. BERDAGUÉ, A. HEDLI, J. COURTIEU, P. LESOT**\***  ***J. Am. Chem. Soc*.**, **119**, 4502-4508, **(1997)**.  DOI: 10.1021/ja964002o | | | | | |
| **7.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Calculation of the Molecular Ordering Tensors of (±)-3-Butyn-2-ol in an Organic Solution of Poly(-benzyl-*L*-glutamate)**  P. LESOT, D. MERLET, J. COURTIEU**\***, J.W. EMSLEY, T.T. RANTALA, J. JOKISAARI  ***J. Phys. Chem****. A*, **101**, 5719-5724,**(1997)**.  DOI: 10.1039/b002806l | | | | | |
| **8.**  **(A.R.)**  **ISI/SCI** | **Steric Hindrance Influence of a Diazo Link upon Mesogenic Properties of some Ligands and Related Copper Complexes**  P. LESOT, F. PEREZ, P. JUDEINSTEIN, J.P. BAYLE**\***, H. ALLOUCHI, M. COTRAIT  ***J. Chim. Phys****.*, **94**, 1695-1714, **(1997)**.  WOSUID: 000071141300001 | | | | | |
| **9.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Structural-Dynamical Relationship in Silica / PEG Hybrid Gels**  P. LESOT, S. CHAPUIS, J.P. BAYLE, J. RAULT, E. LAFONTAINE, A. CAMPERO, P. JUDEINSTEIN**\***  ***J. Mater. Chem****.*, **8**, 147-151, **(1998)**.  DOI: 10.1039/A704983H | | | | | |
| **10.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Quantitative Description of the Facial Discrimination of Molecules Containing a Prochiral Group Oriented in a Chiral Liquid Crystalline Solution**  D. MERLET, A. LOEWENSTEIN, W. SMADJA, J. COURTIEU, P. LESOT**\***  ***J. Am. Chem. Soc***., **120**, 963-969, **(1998)**.  DOI: 10.1021/ja9726466 | | | | | |
| **11.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Unusual Ordering of a Dioxyethylene Chain in Dialkoxy Laterally Substituted Nematogen as Evidenced by 13C NMR**  V. RAYSSAC, P. LESOT, J.P. BAYLE**\***, S. MIYAJIMA  ***J. Chim. Phys****.*,**95**, 973-986, **(1998)**.  DOI: 10.1051/jcp:1998225 / WOSUID : 000073634400005 | | | | | |
| **12.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Simplification of 19F NMR Spectra of Liquid Crystalline Samples by Multiple-pulse COSY experiments**  P. LESOT**\*** J.W. EMSLEY**\***, J.M. OUVRARD, E. CURZON  ***J. Magn. Reson.******A***, **133**, 166-172, **(1998)**.  DOI: 10.1006/jmre.1998.1452 | | | | | |
| **13.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **The Magnetohydrodynamics of a Chiral Nematic Liquid Crystal: The Existence of two Critical Speeds Revealed by Deuterium NMR**  P. LESOT, J.W. EMSLEY**\***, J. COURTIEU  ***Liq. Crystals***, **25**, 123-127, **(1998)**.  WOSUID: 000074528900014 | | | | | |
| **14.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Enantiomeric Visualisation using Proton-Decoupled Natural Abundance Deuterium NMR in Poly(**-benzyl-L-glutamate) Liquid Crystalline Solutions**  P. LESOT**\***, D. MERLET, A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU  ***Tetrahedron : Asymmetry***,**9**, 1871-1881, **(1998)**.  DOI : 10.1016/S0957-4166(98)00179-7 | | | | | |
| **15.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Analysis of the Natural Abundance Deuterium NMR Spectra of Enantiomers in Chiral Liquid Crystals through 2D Auto-correlation Experiments**  D. MERLET, B. ANCIAN, W. SMADJA, COURTIEU, P. LESOT**\***  ***Chem. Commun****.*, 2301-2302, **(1998)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1039/A805020A | | | | | |
| **16.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Two-dimensional Deuterium NMR Spectroscopy of Chiral Molecules Oriented in a Polypeptide Liquid Crystal: Application for the Enantiomeric Analysis through Natural Abundance Deuterium NMR**  D. MERLET, B. ANCIAN, J. COURTIEU,P. LESOT**\***  ***J. Am. Chem. Soc****.*, **121**, 5249-5258, **(1999)**.  DOI: 10.1021/ja9837699 | | | | | |
| **17.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **First Evidence of a Photoinduced Spin Change in an Fe(III) Complex Using Visible Light at Room Temperature**  A. SOUR**\***, M.L. BOILLOT, E. RIVIERE, P. LESOT  ***Euro. J. Inorg. Chem***., 2117-2119,**(1999)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1002/(SICI)1099-0682(199912)1999:12<2117::AID-EJIC2117>3.0.CO;2-P | | | | | |
| **18.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Double Diastereoselection in Asymmetric [2+3] Cycloadditions Reactions of Chiral Oxazoline N-Oxides and Application to the Kinetic Resolution of a Racemic *,*-Unsaturated **-Lactone**  O. DIRAT, C. KOUKLOVSKY, Y. LANGLOIS**\***, P. LESOT**\***, J. COURTIEU  ***Tetrahedron: Asymmetry***, **10**, 3197-3207,**(1999)**.  DOI : 10.1016/S0957-4166(99)00317-1 | | | | | |
| **19.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **The Relationship between Molecular Symmetry and Second-rank Orientational Order Parameters for Molecules in Chiral Liquid Crystalline Solvents**  D. MERLET, J.W. EMSLEY, P. LESOT, J. COURTIEU**\***  ***J. Chem. Phys.***, **111**, 6890-6896,**(1999)**.  DOI: 10.1063/1.479982 | | | | | |
| **20.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Highly Enantioselective Propargylic Monofluoration Established by Carbon-13 and fluorine-19 NMR in Chiral Liquid Crystals**  V. MADIOT, P. LESOT**\***, D. GRÉE, J. COURTIEU, R. GRÉE**\***  ***Chem. Commun.***, 169-170*,***(2000)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1039/A909012F | | | | | |
| **21.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Description of Natural Abundance Deuterium 2D NMR Experiments in Weakly Ordered Liquid Crystalline Solvents using a Tailored** **Cartesian Spin-Operator Formalism**  D. MERLET, M. SARFATI, B. ANCIAN, J. COURTIEU, P. LESOT**\***  ***Phys. Chem. Chem. Phys****.,* **2**, 2283-2290,**(2000)**.  DOI: 10.1039/b000834f | | | | | |
| **22.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Deuterium NMR Stereochemical Analysis of *Threo-Erythro* Isomers Bearing Remote Chiral Centres in Racemic and Non-Racemic Liquid Crystalline Solvents**  C. CANLET, D. MERLET, P. LESOT, A. MEDDOUR, A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU**\***  ***Tetrahedron: Asymmetry***, **11**, 1911-1918,**(2000)**.  DOI: 10.1016/S0957-4166(00)00125-7 | | | | | |
| **23.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **First Successful Enantiomeric Discriminations of Chiral Alkanes using NMR Spectroscopy**  M. SARFATI, J. COURTIEU, P. LESOT**\***  ***Chem. Commun*.**, 1113-1114, **(2000)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1039/b002806L | | | | | |
| **24.**  **(A.F.)**  **ISI / SCI** | **Theoretical and Experimental Aspects of Enantiomeric Differentiation using Natural Abundance Multinuclear NMR Spectroscopy in Polypeptide Liquid Crystals**  M. SARFATI, P. LESOT**\***, D. MERLET, J. COURTIEU**\***  ***Chem. Commun.***,2069-2081,**(2000)**. ***(Feature article / couverture)***  DOI: 10.1039/B006244H | | | | | |
| **25.**  **(A.V.)** | **Determining Enantiomeric Purity by NMR: Deuterium 2D NMR at Natural Abundance in Weakly Oriented Chiral Liquid Crystals**  P. LESOT**\***, M. SARFATI, D. MERLET, J. COURTIEU, B. ANCIAN, C. BREVARD  ***Bruker Report****,* **149***,* 29-33*,* **(2001)**.  (<http://www.bruker.de/analytic/nmr-dep/about/report/149/pdf/29-33.pdf>) ***(Article invité)*** | | | | | |
| **26.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Enantiomeric Recognition of Chiral Invertomers through NMR in Chiral Oriented Solvents: A Study of the *cis*-Decalin**  M. SARFATI, C. AROULANDA, J. COURTIEU, P. LESOT**\***  ***Tetrahedron: Asymmetry***,**12**, 737-744,**(2001)**.  DOI : 10.1016/S0957-4166(01)00103-3 | | | | | |
| **27.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Investigation of Enantioselectivity of Three Polypeptide Liquid-Crystalline Solvents using NMR Spectroscopy**  C. AROULANDA, M. SARFATI, J. COURTIEU, P. LESOT**\***  ***Enantiomer***, **6**, 281-287,**(2001)**.  ISSN: 1024-2430 | | | | | |
| **28.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **NMR Experimental Evidence of the Differentiation of Enantiotopic Directions in *Cs* and *C2v* Molecules Using Partially Oriented, Chiral Media**  C. AROULANDA, D. MERLET, J. COURTIEU, P. LESOT**\***  ***J. Am. Chem. Soc*.**, **123**, 12059-12066, **(2001)**.  DOI: 10.1021/ja011685l | | | | | |
| **29.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Routine Use of Natural Abundance Deuterium NMR in a Polypeptidic Chiral Oriented Solvent for determination of the Enantiomeric Composition of Chiral Building Blocks**  A. PARENTY, J.-M. CAMPAGNE**\***, C. AROULANDA, P. LESOT**\***  ***Org. Lett.***, **4**, 1663-1666,**(2002)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1021/ol020038b | | | | | |
| **30.**  **(C.L.)**  **SCI** | **Chiral Liquid Crystal NMR: a Tool for Enantiomeric Analysis**  J. COURTIEU, P. LESOT, A. MEDDOUR, D. MERLET, C. AROULANDA  "**Encyclopedia of NMR: Advances in NMR**", **1st print edition**, Eds. D.M. Grant & R.K. Harris, J. Wiley & Sons, Vol. 9, 497-505, **(2002)**.  ISBN: 978-0-471-49082-1 | | | | | |
| **31.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Enantiomeric and Enantiotopic Analysis of Cone-shaped Compounds with *C*****3 and *C*3v Symmetry Using NMR Spectroscopy in Chiral Anisotropic Solvents**  P. LESOT**\***, D. MERLET, M. SARFATI, J. COURTIEU, H. ZIMMERMANN, Z. LUZ\*  ***J. Am. Chem. Soc****.*, **124**, 10071-10082, **(2002)**.  DOI: 10.1021/ja020269d | | | | | |
| **32.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Investigation of SmI2 Mediated Cyclisation Process of **-iodo-****-Unsaturated Esters by Deuterium 2D NMR in Oriented Solvents**  H. VILLAR, F. GUIBE**\***, C. AROULANDA, P. LESOT**\***  ***Tetrahedron: Asymmetry***, **13**, 1465-1475,**(2002)**.  DOI: 10.1016/S0957-4166(02)00259-8 | | | | | |
| **33.**  **(A.V.)** | L'art de Discriminer des Enantiomères P. LESOT**\***  ***Plein Sud,* *Journal de l'Université de Paris-Sud (XI)****,* **51**, 18-19, **(2002)**. | | | | | |
| **34.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Enantiomeric Excess Measurements in Weakly Oriented Chiral Liquid Crystal Solvents through 2D 1H Selective Refocusing Experiments**  J. FARJON, D. MERLET, P. LESOT, J. COURTIEU**\***  ***J. Magn. Reson.***, **158**, 169-172, **(2002)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1016/S1090-7807(02)00070-8 | | | | | |
| **35.**  **(A.V.)** | **RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquide Chiraux: Franchir une Nouvelle Frontière dans l'Analyse de la Chiralité**  P. LESOT**\***  ***Lettre du Département des Sciences Chimique*s *du* *CNRS****,* Ed. CNRS, **78**, 13-17, **(2002)**. ***(Article invité)*** | | | | | |
| **36.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy in Polypeptide Liquid Crystals as a New and Incisive Means for Enantiodifferentiation of Chiral Hydrocarbons**  P. LESOT**\***,M. SARFATI, J. COURTIEU  ***Chem. Eur. J****.*,**9**,1724-1745, **(2003)**.  DOI: 10.1002/chem.20039019 | | | | | |
| **37.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Efficient Enantiodiscrimination of Chiral Monophosphine Oxide and Boranes** **by Carbon-13 NMR Spectroscopy in the Presence of Chiral Ordering Agents**  M. RIVARD, F. GUILLEN, J.-C. FIAUD**\***, C. AROULANDA, P. LESOT**\***  ***Tetrahedron: Asymmetry***, **14**, 1141-1152*,* **(2003)**.  DOI: 10.1016/S0957-4166(03)00202-7 | | | | | |
| **38.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **2D**-**NMR Strategy Dedicated to the Analysis of Perdeuterated Enantiomer Solutes in Weakly Ordered Chiral Liquid Crystals**  P. LESOT**\***, M. SARFATI, D. MERLET, B. ANCIAN, J.W. EMSLEY, B.A. TIMIMI  ***J. Am. Chem. Soc****.*, **125**, 7689-7695, **(2003)**.  DOI: 10.1021/ja021277x | | | | | |
| **39.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Structural Ambiguities in Bridged Ring Systems Resolved using Natural Abundance Deuterium NMR in Chiral Liquid Crystals**  C. AROULANDA, P. LESOT**\***,D. MERLET, J. COURTIEU  ***J. Phys. Chem. A****.*, **107**, 10911-10918,**(2003)**.  DOI: 10.1021/jp030137m | | | | | |
| **40.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **The Orientational Order and Conformational Distributions of the Two Enantiomers in a Racemic Mixture of a Chiral, Flexible Molecule Dissolved in a Chiral Nematic Liquid Crystalline Solvent**  J.W. EMSLEY\*, P. LESOT, D. MERLET  ***Phys. Chem. Chem****.* ***Phys****.*, **6**, 522-530,**(2004)**. ***( « hot article »)***  DOI: 10.1039/b312512b | | | | | |
| **41**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Exploring the Analytical Potential of NMR Spectroscopy in Chiral Anisotropic Media for the Study of the Natural Abundance Deuterium Distribution in Organic Molecules**  P. LESOT\*, C. AROULANDA, I. BILLAULT\*  ***Anal. Chem.***,76, 2827-2835,**(2004)**.  DOI: 10.1021/ac030385e | | | | | |
| **42.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **New Amino Acid based on Anionic Surfactants and their Use as Enantiodiscriminating Lyotropic Liquid Crystalline NMR Solvent**  K. BACZKO, C. LARPENT\*, P. LESOT\*  ***Tetrahedron: Asymmetry***, **15**, 971-982,**(2004)**.  DOI: 10.1016/j.tetasy.2004.01.022 | | | | | |
| **43.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Use of Two-dimensional Correlation between 2H quadrupolar splittings and 13C CSA’s for Assignment of NMR Spectra in Chiral Nematics**  O. LAFON, P. BERDAGUÉ, P. LESOT**\***  ***Phys. Chem. Chem. Phys****.*, **6**, 1080-1084, **(2004)**. ***(Couverture)***  DOI: 10.1039/b316488h | | | | | |
| **44.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Heteronuclear Selective Refocusing 2D-NMR Experiments for the Spectral analysis in Chiral Oriented Solvents**  J. FARJON, J.P. BALTAZE, P. LESOT, D. MERLET\*, J. COURTIEU  ***Magn. Res. Chem.***, **42**, 594-599, **(2004)**.  DOI: 10.1002/mrc.1399 | | | | | |
| **45.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Analysis of the 13C NMR Spectra of Molecules, Chiral by Isotopic Substitution, Dissolved in a Chiral Oriented Environment: Toward the Absolute Assignment of the pro-*R*/pro-*S* Character of Enantiotopic Ligands in Prochiral Molecules**  P. LESOT**\***, O. LAFON, J. COURTIEU, P. BERDAGUÉ  ***Chem. Eur. J.****,* **10**, 3741-3746, **(2004)**.  DOI: 10.1002/chem.200400065 | | | | | |
| **46.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Modified z-gradient Filtering as a New Mean to Obtain Phased Deuterium Autocorrelation 2D NMR Spectra in Oriented Solvents**  O. LAFON, P. LESOT**\***, D. MERLET, J. COURTIEU  ***J. Magn. Reson.****,* **171**, 135-142, **(2004)**.  DOI:10.1016/j.jmr.2004.08.010 | | | | | |
| **47.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **The Effect of a Chiral Nematic Solvent on the Orientational Order and Conformational Distribution of a Flexible Prochiral Molecule**  J.W. EMSLEY\*, P. LESOT, J. COURTIEU, D. MERLET  ***Phys. Chem. Chem. Phys.***, **6**, 5331-5337,**(2004)**.  DOI: 10.1039/b411203b | | | | | |
| **48.**  **(A.V.)**  **SCI** | **Développement et Applications de la RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux: Une autre Approche de l’Analyse en Chimie Organique**  P. LESOT**\***  ***Spectra Analyse****,* **242**, 37-42,**(2005)**. ***(Article invité, couverture)***  http://spectraanalyse.com/  http://www.pcipresse.com/spectraanalyse/wp-content/uploads/2012/05/SA242 37-42.pdf | | | | | |
| **49.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Deuterium Three-dimensional NMR Experiments for Analysing Weakly Aligned, Isotopically Enriched Molecules**  O. LAFON, P. LESOT**\***  ***Chem. Phys. Lett.****,* **404**, 90-94*,* **(2005)**. ***(Communication)***  [DOI:10.1016/j.cplett.2005.01.040](http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2005.01.040) | | | | | |
| **50.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Theoretical and Experimental Investigation of 13C Relayed 2H-2H-COSY 2D Experiments: Application to the Analysis of Weakly Aligned Solutes**  O. LAFON, P. LESOT\*  ***J. Magn. Reson.,* 174, 254-264, (2005**).  [DOI:10.1016/j.jmr.2005.02.011](http://dx.doi.org/10.1016/j.jmr.2005.02.011) | | | | | |
| **51.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Enantiomeric Analysis of Planar Chiral (6-Arene) Chromium Tricarbonyl Complexes using NMR in Oriented Solvents  O. LAFON, P. LESOT**\*,** M. RIVARD, M. CHAVAROT, F. ROSE-MUNCH\*, E. ROSE  ***Organometallics***,**24***,* 4021-4028,**(2005)**.  DOI: 10.1021/om050239u | | | | | |
| **52.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Study of Molecular Rotational Isomerism using Deuterium NMR in Chiral Oriented Solvents**  P. LESOT**\*,** O. LAFON, H.B. KAGAN, P. FAN  ***Chem. Commun.***, 389-391, **(2006)**. ***(Communication / «hot article»******)***  DOI: 10.1039/b514694a  **Article présenté sur le site «**[**http://www.spectroscopynow.com»**](http://www.spectroscopynow.com)http://www.spectroscopynow.com/details/ezine/sepspec11699ezine/NMR-to-excess.html?tzcheck=1 | | | | | |
| **53.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Assignment of Absolute Configuration of Natural Abundance Deuterium Signals Associated with (*R*)- and (*S*)-Enantioisotopomers in a Fatty Acid Aligned in a Chiral Liquid Crystal: Enantioselective Synthesis and NMR Analysis**  V. BAILLIF, R. ROBINS, I. BILLAULT\*, P. LESOT**\***  ***J. Am. Chem. Soc.****,* **128**, 11180-11187,**(2006)**.  DOI: 10.1021/ja0617892 | | | | | |
| **54.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Enantioselective Synthesis of Methyl-5-(*R*)-fluorohept-6-ynoate**  V.L. MANTHATI, A.S.K. MURTHY,F. CAIJO,D. DROUIN, P. LESOT, D. GRÉE,R. GRÉE\*  ***Tetrahedron: Asymmetry***, **17**, 2306-2310*,* **(2006)**.  DOI: 10.1016/j.tetasy.2006.08.010 | | | | | |
| **55.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Structure, Formation and Dynamics of Mo12 and Mo16 Oxothio Molybdenum Rings Containing Terephtalate Derivatives J.-F. LEMONNIER, S. FLOQUET**\***, J. MARROT, E. TERAZZI, C. PIGUET, P. LESOT,  A. PINTO,, E. CADOT\*  ***Chem. Eur. J.****,* **13**,3548-3557,**(2007)**.  DOI: 10.1002/chem.200601369 | | | | | |
| **56.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Analysis of Intramolecular Dynamic Processes in Enantiomeric Diaryl Atropisomers and Related Derivatives through 2H NMR in Polypeptide Liquid Crystals**  O. LAFON, P. LESOT\*, C.A. FAN, H.B. KAGAN  ***Chem. Eur. J.****,* **13**,3772-3786,**(2007)**.  DOI: 10.1002/chem.200601284 | | | | | |
| **57.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Synthetic Studies on Macrolactin A: Construction of C4-C27 fragment  M. GEORGY, P. LESOT, J.-M. CAMPAGNE**\***  ***J. Org. Chem*.**, **75**, 3543-3549,**(2007)**.  DOI: [10.1021/jo0701942](http://dx.doi.org/10.1021/jo0701942) | | | | | |
| **58.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Homo- and Heteronuclear 2D NMR Approaches to Analyse a Mixture of Deuterated *unlike/like* Compounds using Weakly Ordering Chiral Liquid Crystals**  K. BENALI, O. LAFON, H. ZIMMERMANN, E. GUITTET, P. LESOT**\***  ***J. Magn. Reson*.***,***187**, 205-215*,* **(2007)**.  [DOI: 10.1016/j.jmr.2007.04.007](http://dx.doi.org/10.1016/j.jmr.2007.04.007) | | | | | |
| **59.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Chiral Discrimination in the 13C- and 2H-NMR of the Crown and Saddle Isomers of Nonamethoxy-Cyclotriveratrylene in Chiral Liquid-Crystalline Solutions**  O. LAFON, P. LESOT**\***,H. ZIMMERMANN, R. POUPKO, Z. LUZ **\***  ***J. Phys. Chem. B****,* **111**, 9453-9467*,* **(2007)**.  DOI: 10.1021/jp070564q | | | | | |
| **60.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Empirical Determination of the absolute Configuration of Small Chiral Molecules using Natural Abundance 2H NMR in Chiral Liquid Crystals**  L. ZIANI, P. LESOT**\***, A. MEDDOUR, J. COURTIEU  ***Chem. Commun.***, 4737-4739*,* **(2007)**. ***(Communication / base de donnée «Prospect View» de CC)***  DOI: 10.1039/b711493a | | | | | |
| **61.**  **(C.L.)**  **version**  **électronique** | **Chiral Discrimination using Chiral Ordering Agents**  J. COURTIEU\*, P. LESOT, A. MEDDOUR, D. MERLET, C. AROULANDA  ***Encyclopedia of Magnetic Resonance***, Online edition, Eds. R.K. Harris, J. Wiley & Sons, Wiley, Vol. *1*, *pp.* 578-586, **(2007)**. | | | | | |
| **62.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **2H NMR Studies of Two-homopolypeptide Lyotropic Mesophases: Toward the Quantification of Solute-Fiber Interactions**  P. LESOT**\***, O. LAFON, C. AROULANDA, R. DONG  ***Chem. Eur. J.****,* **14***,* 4082-4092*,* **(2008)**.  DOI: 10.1002/chem.200701543 | | | | | |
| **63.**  **(A.V.)**  **SCI** | RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux : Evolutions Technologiques, Avancées Méthodologiques et Applications Analytiques  P. LESOT**\***  ***Spectra Analyse***, **260**, 16-22,**(2008)**. ***(Article invité, couverture)***  ISSN: 1255-2909 | | | | | |
| **64.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Combined Analysis of four C-18 Unsaturated Fatty Acids using Natural Abundance Deuterium 2D NMR Spectroscopy in Chiral Oriented Solvents**  P. LESOT**\***, V. BAILLIF, I. BILLAULT  ***Anal. Chem.***, **80**, 2963-2972*,* **(2008)**.  DOI: 10.1021/ac702443b | | | | | |
| **65.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **A Comparison of Proton-detected 13C Local Field Experiments with Deuterium NMR at Natural Abundance for Studying Liquid Crystals**  J.W. EMSLEY\*, P. LESOT, G. DE LUCA, A. LESAGE, D. MERLET, G. PILEIO  ***Liq. Crystals,*** **35**, 443-464*,* **(2008)**.  DOI:10.1080/02678290801935887 | | | | | |
| **66.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Enantiomeric Analysis using Natural Abundance Deuterium 3D NMR Spectroscopy in Polypeptide Chiral Oriented Media**  P. LESOT**\***, O. LAFON  ***Chem. Phys. Lett.****,* **458**, 219-222*,* **(2008)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1016/j.cplett.2008.04.065 | | | | | |
| **67.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Enantiodiscrimination in the Deuterium NMR Spectra of Flexible Chiral Molecules with Average Axial Symmetry Dissolved in Chiral Liquid Crystals. The case of** **Tridioxyethylenetriphenylene**  P. LESOT\*, O. LAFON, H. ZIMMERMANN, Z. LUZ\*  ***J. Am. Chem. Soc.***, **130**, 8754-8761*,* **(2008)**.  DOI: 10.1021/ja800957a | | | | | |
| **68.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Two Aspects of the Desymmetrization of Selected Prochiral Aromatic or Vinylic Dihalides: Enantioselective Halogen-Lithium Exchange and Prochiral Recognition in Chiral Liquid Crystals**  C.A. FAN, B. FERBER, H.B. KAGAN**\***, O. LAFON, P. LESOT**\***  ***Tetrahedron: Asymmetry***, **19**,2666-2677,**(2008)**.  DOI: 10.1016/j.tetasy.2008.12.003 | | | | | |
| **69.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Investigation of Fatty Acid Elongation and Desaturation Steps in *Fusarium lateritium* by Quantitative Two-dimensional Deuterium NMR Spectroscopy in Chiral Oriented Media**  V. BAILLIF, R. ROBINS, S. LE FEUNTEN, P. LESOT, I. BILLAULT\*  ***J. Biol. Chem.***, **284**, 10783-10792*,* **(2009)**.  DOI: 10.1074/jbc.M807826200 | | | | | |
| **70.**  **(A.F.)**  **SCI** | **Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy : Developments and Analytical Applications in Liquids, Liquid Crystals and Solid Phases**  P. LESOT\*, J. COURTIEU  ***Prog. Nucl. Magn. Reson Spectrosc.****,* **55**, 128-159*,* **(2009)**. ***(Article invité)***  [DOI: 10.1016/j.pnmrs.2009.01.001](http://dx.doi.org/10.1016/j.pnmrs.2009.01.001) | | | | | |
| **71.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Enantiodiscrimination of Flexible Cyclic Solutes using Deuterium NMR Spectroscopy in Polypeptide Chiral Mesophases: Investigation of *cis*-Decalin and THF  C. AROULANDA\*, O. LAFON,P. LESOT\*  ***J. Phys.*** ***Chem. B,* 113***,* 10628-10640*,* **(2009)**.  DOI: 10.1021/jp902233m | | | | | |
| **72.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Analysis of the Enantiotopic Discrimination in the NMR Spectra of Prochiral Solutes Dissolved in Chiral Liquid Crystals by Symmetry factorization of the Saupe Ordering Matrix**  P. LESOT**\***, C. AROULANDA, Z. LUZ\*  ***J. Chem. Phys.,* 131**, 104501/1-16*,* **(2009)**.  DOI: 10.1063/1.3197853 | | | | | |
| **73**.  **(C.L.)** | **Analytical Potentials of Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy In Achiral Thermotropics and Polypeptide Chiral Liquid Crystals**  P. LESOT\*, C. AROULANDA  ***NMR Spectroscopy of Liquid Crystals***,  Ed. R.Y. Dong, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, Chap. II, pp. 37-78, (2010).  ISBN 978-981-4273-66-4 | | | | | |
| **74.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **The Conformation of a 1,2-substituted Ethane Nematogenic Molecule (I-22) in Liquid-Crystalline Phases Studied by NMR Spectroscopy**  J.W. EMSLEY**\***, P. LESOT, G. DE LUCA, A. LESAGE, D. MERLET, G. PILEIO  *Phys. Chem. Chem. Phys.,* 12, 2895-2914, (2010).  DOI:10.1039/b915587b | | | | | |
| **75.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Regio-defined Amino-[5]oxa- and Thiahelicenes: a Dramatic Impact of the Nature of the Heteroatom on the Helical Shape and Racemization Barriers**  G. PIETERS,A. GAUCHER**\***, S. MARQUE,F. MAUREL,P. LESOT,D. PRIM**\***  ***J. Org. Chem****.,* **75**, 2096-2098,**(2010)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1021/jo1000127 | | | | | |
| **76.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Synthesis of 2-Trifluoromethyl-1,3-oxazolidines (Fox) as Hydrolytically Stable Pseudoprolines  G. CHAUME,O. BARBEAU,P. LESOT, T. BRIGAUD**\***  ***J. Org. Chem.,* 75**, 4135-4145,**(2010)**.  DOI: 10.1021/jo100518t | | | | | |
| **77.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Evolution of the Saupe Order Parameters of Enantiomers from a Non-chiral to a Chiral Liquid Crystal Solvent: an Original Light on the Absolute Configuration Problem**  J. COURTIEU**\***, C. AROULANDA, P. LESOT, A. MEDDOUR, D. MERLET  ***Liq. Crystals,*****37**, 903-912,**(2010)**. ***(Article invité / «Special issue for the Anniversary of Prof. A. Saupe»)***  DOI: 10.1080/02678291003784164 | | | | | |
| **78.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Dynamic Kinetic Resolution of -chloro -keto Esters and Phosphonates: Hemisynthesis of Taxotere® through Ru-DIFLUORPHOS Asymmetric Hydrogenation**  S. PREVOST, S. GAUTHIER, M. C. CAÑO DE ANDRADE, C. MORDANT, A. R. TOUATI, P. LESOT, P. SAVIGNAC, T. AYAD, P. PHANSAVATH, V. RATOVELOMANANA-VIDAL**\***, J.-P. GENET**\***  ***Tetrahedron : Asymmetry****,* **21**,1436-1446,**(2010)**. ***(Article invité / «Issue for the 80th Anniversary of H. Kagan»)***  DOI: 10.1016/j.tetast.2010.05.017 | | | | | |
| **79.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Complete Determination of Natural Site-Specific Enantio-isotopomeric Excesses in Linoleic Acid using Natural Abundance Deuterium 2D NMR in Polypeptide Mesophases**  Z. SERHAN, L. MARTEL, I. BILLAULT, P. LESOT**\***  ***Chem*. *Commun.,* 46**, 6599-6601,**(2010)**. ***(Communication)***  DOI:10.1039/C0CC01486A | | | | | |
| **80.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Cationic Planar Chiral (6-Arene)Mn(CO)3+ Complexes: Resolution, NMR Study in Chiral Oriented Solvents and Applications to the Enantioselective Syntheses of 4-Substituted Cyclohexenones and of (6-Phosphinoarene)Mn(CO)3+ Complexes**  A. ELOI, F. ROSE-MUNCH**\***,, E. ROSE, PILLE, P. LESOT**\***, P. HERSON  ***Organometallics****,***29**, 3876-3886,**(2010)**.  DOI: 10.1021/om.100564v | | | | | |
| **82.**  **(C.L.)** | **Rapport de Conjoncture du CoNRS 2010 (INC / Section 12**)  MC. ANDRAUD, J. ARDISSON, D. BOURISSOU, S.DJAOUI, E. DUNÃCH, J.C. GUILLEMIN, P. JAUFFRET, P. KAHN, H. KAROUI, S. LEGOUPY, J. LEGROS, P. LESOT, J. MADDALUNO, A. MAGGIANI, J. MARTINEZ, V. MICHELET, G. MIGNANI, D. PRIM, M. SALLÉ, J.L. SCHMITT, J. ZHU  **Chap. 12**, 231-242, ***CoNRS-CNRS, CNRS Editions*, Paris, France (2010)**.  ISBN: 978-2-271-07263-4  [http://www.cnrs.fr/comitenational/doc/rapport/2010/Rappconj 2010 interactif.pdf](http://www.cnrs.fr/comitenational/doc/rapport/2010/Rappconj_2010_interactif.pdf) | | | |  | |
| **83.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Recent Advances in the Analysis of the Site-specific Isotopic Fractionation of Metabolites such as Fatty Acids using Anisotropic Natural Abundance 2H NMR Spectroscopy: Application on Conjugated Linolenic Methyl Esters  P. LESOT**\*,** Z. SERHAN, I. BILLAULT  ***Anal. Bioanal. Chem.***, **399**, 1187-1200*,* (**2011**).  DOI: 10.1007/s00216-010-4394-0 | | | | | |
| **84.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Enantiotopic Discrimination in the Deuterium NMR Spectrum of Solutes with *S*4 Symmetry in Chiral Liquid Crystals**  C. AROULANDA**\***, H. ZIMMERMANN, Z. LUZ, P. LESOT\*  ***J. Chem. Phys.,* 134**, 134502-1/8*,* **(2011)**.  DOI: 10.1063/1.3554640 | | | | | |
| **85.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Fast and High-Resolution Stereochemical Analysis by Non-Uniform Sampling and Covariance Processing of Anisotropic Natural Abundance 2D 2H NMR Datasets**  O. LAFON**\***, B. HU, J.-P. AMOUREUX, P. LESOT\*  ***Chem. Eur. J.***, **17**, 6716-6724*,* **(2011)**. ***(Couverture)***  DOI: 10.1002/chem.201100461  présenté sur « Hotopic »: http://www.wiley-vch.de/util/hottopics/liquidcrystals/ | | | | | |
| **86.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Conformation and Dynamics of 18-membered Hexathia-metacyclophanes: The two Steps Chirality Averaging as Studied by Deuterium NMR in Chiral Liquid Crystalline Solutions**  P. LESOT**\***, C. AROULANDA, P. BERDAGUE, H. ZIMMERMAN Z. LUZ  ***J. Phys.*** ***Chem. B,* 115**, 11793-11804*,* **(2011)**.  DOI: org/10.1021/jp205958k | | | | | |
| **87.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Exploring the Enantiodiscrimination Potentialities of DNA-based orienting Media using Deuterium NMR Spectroscopy  P. LESOT\*, V. REDDY,N. SURYAPRAKASH\*  ***Chem. Commun.***, **47**, 11736-11738*,* **(2011)**. ***(Communication)***  DOI:10.1039/C1CC15097A. | | | | | |
| **88.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Analysis of NAD 2D-NMR Spectra of Saturated Fatty Acids in Polypeptide Aligning Media by Experimental and Modeling Approaches  Z. SERHAN, I. BILLAULT, A. BORGOGNO, A. FERRARINI\*, P. LESOT\*  *Chem. Eur. J.,* 18, 117-126, (2012). *(VIP paper) / Couverture)*  DOI: 10.1002/chem.2011027 | | | | | |
| **89.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Probing Substrate-Product Relationships by Natural Abundance Deuterium 2D NMR Spectroscopy in Liquid-Crystalline Solvents: The Case of The Epoxidation of Linoleate to Vernoleate by Two Different Plant Enzymes**  I. BILLAULT**\***, A. LEDRU, M. OUETRANI, Z. SERHAN, P. LESOT, R.J. ROBINS**\***  ***Anal. Bioanal. Chem.***, **402**, 2985-2998,**(2012)**.  DOI: 10.1007/s00216-012-5748-6 | | | | | |
| **90.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Experimental Detection of Achiral and Chiral Naturally Abundant 13C-2H Isotopomers by 2D-NMR in Liquids and Chiral Oriented Solvents  P. LESOT\*, O. LAFON  ***Anal. Chem.***, **84**, 4569-4573,**(2012)**. ***(Communication)***  DOI: dx.doi.org/10.1021/ac300667n  **Article présenté sous la forme d’un communiqué de presse CNRS-INC**  http://www.cnrs.fr/inc/communication/direct labos/lesot.htm | | | | | |
| **91.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Is the Determination of Absolute Configuration Possible by using Residual Dipolar Couplings from Chiral-Non-Racemic Alignment Media?– A Critical Assessment**  R. BERGER, J. COURTIEU, R.R. GIL, C. GRIESINGER\*, M. KÖCK, P. LESOT, B. LUY, D. MERLET, A. NAVARRO-VAZQUEZ, M. REGGELIN, U.M. REINSCHEID, C.M. THIELE, M, ZWECKSTETTER  ***Angew. Chemie, Int. Ed.,* 51**, 2-5, **(2012)**. **(*Critique internationale*)**  DOI: 10.1002/anie.201107626 | | | | | |
| **92.**  **(A.F.)**  **ISI / SCI** | La RMN en Chimie Organique  J. COURTIEU\*. N. GIRAUD, O. LAFON. P. LESOT, C. LOTHOIR, J.M. NUZILLARD  ***L’actualité Chimique***, **364-365**,30-41*,* (**2012**). P.  ***(Article invité / Numéro spécial «Danse avec les Spins: la RMN en Chimie»)***  ISSN: 0151 9093 / http://www.lactualitechimique.org/Lesot | | |  | |
| **93.**  **(Proc.)**  **ISI / SCI** | **Methodological Study of the Peptide Coupling of the N-desactivated Stable Proline Surrogate CF3-pseudoproline**  G. CHAUME, O. BARBEAU, C. CAUPENE, P. LESOT, D. FEYTEN, E. MICLET, T. BRIGAUD\*  ***Journal of Pept. Sci.***, **18**, S1, S183-S183, (**2012**). ***(Proceeding of 32nd European Peptide Symposium)***  DOI: 10.1002/psc.2449 / ISSN: 1075-2617 | | | | | |
| **94.**  **(A.V.)**  **SCI** | **Détection d’Isotopomères 2H-13C en Abondance Naturelle par RMN 2D Isotrope et Anisotrope, ou Comment Distinguer Expérimentalement une Molécule parmi 600 000?**  P. LESOT\*, O. LAFON  ***Spectra Analyse****,* **287**, 24-30*,* **(2012)**. *(****Article invité****)*  ISBN: 0125 2909 | | | | | |
| **95**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Analytical Contribution of NAD 2D-NMR Spectroscopy in Polypeptide Mesophases to the Investigation of Triglycerides**  P. LESOT\*, Z. SERHAN, C. AROULANDA, I. BILLAULT *Magn. Reson. in Chem.*, 50, S2-S11*,* (2012). (*Article invité / Special issue «NMR of Small Molecules in Anisotropic Media»)* DOI: 10.1002/mrc.3855 | | | | | |
| **97.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Chiral Solutes Can Seed the Formation of Enantiomorphic Domains in a Twist-bend Nematic Liquid Crystal**  J.W. EMSLEY\*, P. LESOT, G.R. LUCKHURST, A. MEDDOUR, D. MERLET  ***Phys. Rev. E*, 87**, 040501-1/4(R), **(2013)**. ***(Communication)***  DOI: 1103/PhysRevE.87.040501  **Article présenté dans la revue «Liquid Crystals Today–Research Highlights»**  <http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/1358314X.2013.813726> | | | | | |
| **98.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **‘****On-the-fly’ Kinetics of Enzymatic Racemization using Deuterium NMR in DNA-based, Oriented Chiral Solvents**  M. CHAN-HUOT\*, P. LESOT\*, P. PELUPESSY, L. DUMA, P. DUCHAMBON, G. BODENHAUSEN, M.D. TONEY, U.V. REDDY, N. SURYAPRAKASH  ***Anal. Chem.,*** **85**, 4694-4697, **(2013)**.  DOI: 10.1021/ac4004002  **Article** **présenté dans « *Chemical & Engineering News*» de l’ACS et sur le site « Spectroscopy Now»**  http://cen.acs.org/articles/91/web/2013/04/Watching-Enzymes-Change-MoleculesChirality.html  http://www.spectroscopyonline.com/spectroscopy/Magnetic+Resonance%2FNMR/Monitoring-Enzymatic-Transformation-with-NMR-Track/ArticleStandard/Article/detail/828360?topic=133   |  |  | | --- | --- | |  |  | | | | | | |
| **99.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Synthesis of a Mycobacterium tuberculosis Tetra-Acylated Sulfolipid Analogue and Characterization of the Chiral Acyl Chains Using Anisotropic NAD 2D-NMR Spectroscopy**  A. LEMETAY, Y. BOURDEUX, P. LESOT\*, J. FARJON, J.M. BEAU\*  ***J. Org. Chem.,* 78,** 7648−7657***,* (2013)**.  DOI: 10.1021/jo4012255 | | | | | |
| **100.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Mesogenic Ionic Liquid Electrolytes with Strong Anisotropic Behavior: An Innovative Material for the Next Generation of Lithium-Polymer Batteries?**  P. JUDEINSTEIN\*, S. EXIGA, P. LESOT  ***RSC Advance,*** **3,** 16604-16611*,* **(2013)**.  DOI: 10.1039/C3RA00025G | | | | | |
| **101.**  **(C.L.)**  **SCI** | **Deuterium NMR of Liquid-crystalline Samples at Natural Abundance**  P. LESOT\*  ***Encyclopedia of Magnetic Resonance (eMagRes)***, **2** (3), 315-334, **(2013)**. J. Wiley: Chichester, Ed. R.K. Harris ***(Chapitre invité)***  DOI: 10.1002/9780470034590.emrstm1318 *(25 Oct 2013)*  Online ISBN: 9780470034590  <http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/9780470034590/toc> | | | | | |
| **102**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | Synthesis of enones, Pyrazolines and Pyrrolines with *gem*-difluoroalkyl Side ChainsA. NASR EL DINE, A. KHALAF, D. GRÉE, O. TASSEAU, F. FARES, N. JABER, P. LESOT,A.HACHEM\*, R; GRÉE\* ***Beilstein J. Org. Chem.,* 9**,1943–1948**, (2013)**. ***(Letter* - *Thematic series on Fluorine / open access »)***  DOI: 10.3762/bjoc.9.230 | | | | | |
| **103.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Criteria for Sensitivity Enhancement by Compressed Sensing: Practical Application to Anisotropic NAD 2D NMR Spectroscopy**  K. KAZIMIERCZUK\*, O. LAFON, P. LESOT\*  ***Analyst*****,****1****39(11)**, 2702-2713,**(2014)**. ***( Hot article*** ***/ 4ième de couverture du journal)***  DOI: 10.1039/c4an00381k  http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/an#!issueid=an139011&type=current&issnprint=0003-2654 | | | | | |
| **104.**  **(A.F.)**  **ISI / SCI** | **NMR Discrimination in Non-Rigid Prochiral Solutes Dissolved in Chiral Liquid Crystal Solvents: Symmetry Considerations**  P. LESOT\*, Z. LUZ\*, C. AROULANDA, H. ZIMMERMANN  ***Magn. Reson. Chem****.*, **52**, 581-594, **(2014). *(Article invité / Special issue « NMR of Liquid Crystals»)***  DOI: 10.1002/mrc.4110  **Numéro spécial mise en avant dans la revue «SpectroscopyNOW.com»**  [**http://www.spectroscopynow.com/details/ezine/6822881/nmr of liquid crystals - mrc special issue.html**](http://www.spectroscopynow.com/details/ezine/6822881/NMR_of_Liquid_Crystals_-_MRC_Special_Issue.html) | | | | | |
| **105.**  **(A.F.)**  **ISI / SCI** | | Correlation 2D-NMR Experiments Involving both 13C and 2H Isotopes in Oriented Media: Methodological Developments and Analytical Applications  P. LESOT\*, O. LAFON, P. BERDAGUÉ  ***Magn. Reson. Chem****.*, **52**, 595-613, **(2014)**. ***(Article invité / Special issue « NMR*** ***of Liquid Crystals»)***  DOI: 10.1002/mrc.4118  **Numéro spécial mise en avant sur le site «SpectroscopyNOW.com»**  http://www.spectroscopynow.com/details/ezine/6822881/nmr of liquid crystals - mrc special issue.html | | | | | |
| **106.**  **(C.L.)** | | | **Rapport de Conjoncture du CoNRS 2014 (INC / Section 12**)  C. ANDRAUD , P. BELMONT, J.M. CAMPAGNE , G. CHOURAQUI , E. DERAT, S. DJAOUI , S. GIBERT, E. GRAS, F. LAMATY , F. LE BIDEAU J. LEBRETON, P. LESOT, F. LEROUX, A. MARINETTI, C. MEYER, F. MONNIER, O. OUARI ; L. ROBIN, C. TOKARSKI, L. VIGNAU, M.VITALE  **Chap. 12,** 255-274**, CoNRS-CNRS, CNRS Editions, Paris, France (2014)**.  ISBN: 978-2-271-08746-1  http://rapports-du-comite-national.cnrs.fr/rapport-conjoncture/rapport-de-conjoncture-2014 | |  | | | |
| **107.**  **(A.F.)**  **ISI / SCI** | **Enantiotopic Discrimination in the NMR Spectrum of Prochiral Solutes in Chiral Liquid Crystals**  P. LESOT**\***, C. AROULANDA, H. ZIMMERMANN, Z. LUZ  ***Chem. Soc. Rev.,*** **44**, 230-275*,* **(2015)**.  DOI: 10.1039/c4cs00260a | | | | | |
| **108.**  **(A.V.)**  **SCI** | **RMN 2D DAN dans les CLC: de Nouveaux Outils pour l’Etude du Fractionnement Isotopique Naturel (2H/1H) d’Acides Gras et de Triglycérides**  P. LESOT**\***  ***Spectra Analyse***, **299,** 62-72,**(2014)**. ***(Article invité)***  **ISSN: 1255-2909** | | | | | |
| **109.**  **(A.F.)**  **ISI / SCI** | **Fast Acquisition of Multidimensional NMR Spectra of Solids and Mesophases using Alternative Sampling Methods**  P. LESOT, K. KAZIMIERZUK, J. TREBOSC, J. AMOUREUX, O. LAFON\*  ***Magn. Reson. in Chem****.*, **53**,927-939, **(2015)**. ***(Article invité / Numéro spécial)***  DOI: 10.1002/mrc.4290 | | | | | |
| **110.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Synthesis and Stereochemical Assignment of Crypto-Optically Active 2H6-Neopentane**.  A. MASARWA, D. GERBIG, L. OSKAR, A. LOEWENSTEIN, H. P. REISENAUER, P. LESOT\*,P. R. SCHREINER\*, I. MAREK\*  ***Angew. Chem. Int. Ed.*,** **54,** 13106-13109, **(2015)**.  ***(Communication / VIP article)***  DOI: 10.1002/anie.201505349 | | | | | |
| **111.**  **(Divers)**  **ISI / SCI** | **Critical book review: « *NMR Spectroscopy in Liquid and Solids*» by V. I. Bakhmutov**  P. LESOT**\***  ***Anal. Bioanal. Chem***., **407**, 8625-8626,**(2015)**.  DOI: 10.1007/s00216-015-9061-z | | | | | |
| **112.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Multi-nuclear NMR of Axially Chiral Biaryls in Polypeptide Orienting Solvents: Spectral Discriminations and Enantiorecognition Mechanisms**  P. BERDAGUE, E. HERBERT-PUCHETTA, V. JHA, A. PANOSSIAN, F. LEROUX, P. LESOT**\***  ***New J. Chem.*,** **39**, 9504-9517*,* **(2015)** ***(Article accessible en open access)***  DOI: 10.1039/c5nj01434d | | | | | |
| **113.**  **(Divers)** | **Chronique Littéraire: « *NMR Spectroscopy in Liquid and Solids* » de V. I. Bakhmutov**  P. LESOT**\***  ***Spectra Analyse***, **306**, 16-16,**(2015)**.  ISSN: 1255-2909 | | | | | |
| **114.**  **(Proc.)** | **Chiral Imines on the Wave: Reactivity of *tert*-butyl Acrylate and Stereoselectivity Determination using NMR in Liquid Crystals**  L. VANDROMME , L. CHEN, L. WEI, F. LE BIDEAU, A.LOUPY, O. LAFON , P. LESOT, E.TRAN HUU DAU, P. CHAMINADE, F. DUMAS**\***  ***Mol2Net 2015***, In Proceedings of the MOL2NET, 5–15 December 2015; Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 1, 2015, sectA (paper a003), 1-18; **Section A (a003)**, http://sciforum.net/conference/MOL2NET-1/paper/3326  [DOI](http://sciforum.net/conference/mol2net-1/paper/3326%0D%0D1): [10.3390/MOL2NET-1-a003](http://dx.doi.org/10.3390/MOL2NET-1-a003" \t "_blank) | | | | | |
| **115.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Contribution of NAD 2D-NMR in Liquid Crystals to the Determination of Hydrogen isotope Profile of Methyl Groups in Miliacin**  P. BERDAGUE, P. LESOT**\***, J. JACOB, V.-J. TERWILLIGER, C. LE MILBEAU  ***Geochim. Cosmochim. Acta,* 173***,* 337-351*,***(2016)**.  DOI: 10.1016/j.gca.2015.10.004  **Article présenté sous la forme d’un communiqué de presse CNRS-INC/INSU et Paris-Sud**  http://www.cnrs.fr/inc/communication/direct labos/lesot2.htm  http://www.actu.u-psud.fr/fr/recherche/actualites-2016/dans-l-intimite-isotopique-des-molecules-fossiles.html | | | | | |
| **116.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Detection of Quadrupolar Nuclei by Ultrafast 2D-NMR: Exploring the Case of Deuterated Analytes Aligned in Chiral Oriented Solvents**  P. LESOT**\***, P. BERDAGUE, P. GIRAUDEAU**\***  ***Chem. Commun.***, **52**, 2122-2125*,* **(2016)**.  DOI: 10.1039/C5CC09409G | | | | | |
| **117.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | **Investigation of Solute-Fiber Affinity and Orientational Ordering of Norbornadiene Interacting with Two-polypeptide Chiral Liquid Crystalline Solvents by NAD NMR**  Z. SERHAN, C. AROULANDA, P. LESOT**\***  ***J. Phys. Chem.*** ***A***, **120**, 6076-6088,**(2016)**.  DOI: 10.1021/acs.jpca.6b04254 | | | | | |
| **118.**  **(C.L.)**  **ISI** | **Natural Abundance 2H NMR Spectroscopy**  P. LESOT**\***, O. LAFON  ***Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry***, *Eds.* Lindon, Tranter and Kopenaal, Elsevier / Academic Press. **3rd Ed., Vol. 3, pp. 1-14 (2017)**.  Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering, from EES (3rd Edition), 2017, DOI:10.1016/B978-0-12-409547-2.12110-9  http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780124095472121109  eBook ISBN: 9780128032251 / Book ISBN: 9780128032244 | | | | | |
| **119.**  **(A.V.)** | **RMN de Paillasse à Transformée de Fourier: Le Renouveau de la RMN à Bas Champ.**  E. AUGUSTE, E. LUCAS, L. POIGNEZ, D. RAMAURTHYG, H. VANEECKHOUTTE, P. LESOT\*  ***Spectra Analyse***, **315**, 32-62,**(2017)**.  ISSN: 1255-2909 | | | | | |
| **120**  **(C.L.)** | **Isotope Ratio Monitoring by NMR. Part 1: Recent Advances**  G. REMAUD, P. GIRAUDEAU, P. LESOT, S. AKOKA\*  ***Modern Magnetic Resonance*,** *Ed.* **G. Webb, Springer Int. Publishing, 2nd Ed., pp. 1-25, (2017).** (***Article invité)***  DOI:10.1007/978-3-319-28275-6 8-1 / ISBN: 978-3-319-28275-6 | | | | | |
| **121.**  **(C.L.)** | **Isotope Ratio Monitoring by NMR. Part 2: New Applications in the Field of Defining Biosynthesis**  R. ROBINS\*, G. REMAUD, I. BILLAULT, P. LESOT  ***Modern Magnetic Resonance*,** *Ed.* **G. Webb, Springer Int. Publishing 2nd Ed., pp. 1-26, (2017).** (***Article invité)***  DOI:10.1007/978-3-319-28275-6 9-1 / ISBN: 978-3-319-28275-6 | | | | | |
| **122**  **(Divers)**  **ISI / SCI** | **Integrated Computational Protocol for Analyzing Quadrupolar Splittings from Natural Abundance Deuterium NMR Spectra in (Chiral) Oriented Media**  A. NAVARRO-VAZQUEZ, P. BERDAGUE, P. LESOT\*  ***Cover profile, ChemPhysChem.,* 18***, 1219-1219,* **(2017).**  DOI: 10.1002/cphc.201700454 | | |  | | |
| **123.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | | **Integrated Computational Protocol for Analyzing QuadrupolarSplittings from Natural Abundance Deuterium NMR Spectrain (Chiral) Oriented Media**  A. NAVARRO-VAZQUEZ, P. BERDAGUE, P. LESOT\*  ***Article, ChemPhysChem.,* 18***, 1252-1266,* **(2017).** ***(VIP article)***  DOI: 10.1002/cphc.201601423 | | | | | |
| **124.**  **(Divers)** | | **La “39th FGMR Annual Discussion Meeting 2017”: La Spectroscopie Magnétique Franco-Allemande dans tous ses “Etats”!**  P. LESOT\*  ***Spectra Analyse***, **318**, *12-15*,**(2017)**.  ISSN: 1635-947X/ ISSN en ligne: 2556-0050. (*Article repris sur le site du GERM: http://www.germ.asso.fr)* | | | | | |
| **125.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | | **Analytical Contribution of Deuterium 2D-NMR in Oriented Solvents to 2H/1H Isotopic Characterization: the Case of Vanillin**  T. TEXIER-BONNIOT, P. BERDAGUE, R. ROBINS, G. REMAUD, P. LESOT\*  ***Flavour and Fragance Journal,*** 34, *217-229*, **(2018)**. ***(Article invité / Numéro spécial)***  DOI:10.1002/ffj.3441 | | | | | |
| **126.**  **(A.R.)**  **ISI / SCI** | | Ruthenium-Catalyzed Hydrogen Isotope Exchange of (Csp3)-H Bonds Directed by a Sulfur Atom  L. GAO, S. PERATO, S. GARCIA-ARGOTE, C. TAGLANG, L. MIGUEL MARTINEZ-PRIETO, C. CHOLLET, D. BUISSON, V. DAUVOIS, P. LESOT, B. CHAUDRET, B. ROUSSEAU, S. FEUILLASTRE, G. PIETERS\*  ***Chem. Commun.,* 54,** *2986-2989,* **(2018)**. ***(Communication)***  DOI: 10.1039/c8cc00653a | | | | | |
| **127.**  **(C.L.)**  **ISI / SCI** | | **NMR Spectroscopy-Applicable Elements | Hydrogen Isotopes: 2H NMR**  P. LESOT\*  ***Encyclopedia of Analycal Science, 3rd Ed.****,*1-16*,* **(2018)**. Ed. J. Lindon (***Chapitre invité),*** Elsevier.  DOI: 10.1016/B978-0-12-409547-2.14084-3  **Reference Module in Chemistry**, Molecular Sciences and Chemical Engineering, Elsevier, 2018, ISBN 978-0-12-409547-2. | | | | | |

**ARTICLES DE REVUE**

**NOMBRE D’ARTICLES DE FOND / REVUE (sur invitation) : 6**

|  |  |
| --- | --- |
| **1.** | **Theoretical and Experimental Aspects of Enantiomeric Differentiation using Natural Abundance Multinuclear NMR Spectroscopy in Polypeptide Liquid Crystals**  M. SARFATI, P. LESOT**\***, D. MERLET, J. COURTIEU**\***  ***Chem. Commun.***,2069-2081,**(2000)**. ***(«Feature Article», couverture)*** |
| **2.** | **Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy : Developments and Analytical Applications in Liquid, Liquid Crystalline and Solid Phase**  P. LESOT\*, J. COURTIEU  ***Prog. Nucl. Magn. Reson Spectrosc.****,* **55**, 128-159*,* **(2009)**. |
| **3.** | La RMN en Chimie Organique  J. COURTIEU, N. GIRAUD, O. LAFON. P. LESOT, C. LOTHOIR, J.M. NUZILLARD  ***L’actualité Chimique***, **364-365**,30-41*,* (**2012**). **(*Numéro spécial)*** |
| **4.** | Correlation 2D-NMR Experiments Involving both 13C and 2H Isotopes in Oriented Media: Methodological Developments and Analytical Applications  P. LESOT\*, O. LAFON, P. BERDAGUÉ  ***Magn. Reson. Chem.*, 52,** 595-613, (**2014**). ***(Special issue****)* |
| **5.** | **NMR Discrimination in Non-Rigid Prochiral Solutes Dissolved in Chiral Liquid Crystal Solvents: Symmetry Considerations**  P. LESOT\*, Z. LUZ\*, C. AROULANDA, H. ZIMMERMANN  ***Magn. Reson. Chem****.*, **52**, 581-594, **(2014).*****(Special issue)*** |
| **6.** | **Enantiotopic Discrimination in the NMR Spectrum of Prochiral Solutes in CLCs**  P. LESOT**\***, C. AROULANDA, H. ZIMMERMANN Z. LUZ  ***Chem. Soc. Rev.,*** **44**, 230-275, **(2015)**.***(Article sur proposition)*** |

**CHAPITRES DE LIVRE**

**NOMBRE TOTAL DE CHAPITRES DE LIVRE (sur invitation) : 10**

|  |  |
| --- | --- |
| **1.**  ***1ère édition***  ***papier*** | **Chiral Liquid Crystal NMR: a Tool for Enantiomeric Analysis**  J. COURTIEU\*, P. LESOT, A. MEDDOUR, D. MERLET, C. AROULANDA  ***Encyclopedia of NMR: Advances in NMR***, 1st printed edition, Eds. D.M. Grant & R.K. Harris, J. Wiley & Sons, Vol. 9, *pp.* 497-505, **(2002).** |
| **2.**  **Version**  **électronique** | **Chiral Discrimination using Chiral Ordering Agents**  J. COURTIEU\*, P. LESOT, A. MEDDOUR, D. MERLET, C. AROULANDA ***Encyclopedia of Magnetic Resonance***, Online edition, Eds. R.K. Harris, J. Wiley & Sons, Wiley, Vol. *1*, *pp.* 578-586, **(2007).** |
| **3.** | **Analytical Potentials of Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy In Achiral Thermotropics and Polypeptide Chiral Liquid Crystals**  P. LESOT\*, C. AROULANDA  ***NMR Spectroscopy of Liquid Crystals***, 1st Printed edition, Ed. R.Y. Dong, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd,Chap. II, pp. 37-78, **(2010).** |
| **4.** | **Rapport de Conjoncture du CoNRS 2010 (INC / Section 12**)  MC. ANDRAUD, J. ARDISSON, D. BOURISSOU, S.DJAOUI, E. DUNÃCH, J.C. GUILLEMIN, P. JAUFFRET, P. KAHN, H. KAROUI, S. LEGOUPY, J. LEGROS, P. LESOT, J. MADDALUNO, A. MAGGIANI, J. MARTINEZ, V. MICHELET, G. MIGNANI, D. PRIM, M. SALLÉ, J.L. SCHMITT, J. ZHU  **CoNRS-CNRS, CNRS Editions, Paris 16, France (2011).** |
| **5.** | **Deuterium NMR of Liquid-crystalline Samples at Natural Abundance**  P. LESOT\*  ***Encyclopedia of Magnetic Resonance (eMagRes)***, Online edition,  **2** (issue 3), 315-334, **(2013)**, J. Wiley: Chichester, Eds. R.K. Harris |
| **6.** | **Rapport de Conjoncture du CoNRS 2014 (INC / Section 12**)  C. ANDRAUD , P. BELMONT, J.M. CAMPAGNE , G. CHOURAQUI , E. DERAT, S. DJAOUI , S. GIBERT, E. GRAS, F. LAMATY , F. LE BIDEAU J. LEBRETON, P. LESOT, F. LEROUX, A. MARINETTI, C. MEYER, F. MONNIER, O. OUARI, L. ROBIN, C. TOKARSKI, L. VIGNAU, M. VITALE  **CoNRS-CNRS, CNRS Editions, Paris 16, France (2014).** |
| **7.** | **Natural Abundance 2H NMR Spectroscopy**  P. LESOT\*, O. LAFON  ***Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry (ESS)*,** **3rd Ed**., Vol. 3, pp. 1-14**, (2017)**. |
| **8.** | **Isotope Ratio Monitoring by NMR. Part 1: Recent Advances**  G. REMAUD, P. GIRAUDEAU, P. LESOT, S. AKOKA\*  ***Modern Magnetic Resonance*,** *Ed.* **G. Webb, Springer Int. Publishing, 2nd Ed., pp. 1-25, (2017).** |
| **9.** | **Isotope Ratio Monitoring by NMR. Part 2: New Applications in the Field of Defining Biosynthesis**  R. ROBINS\*, G. REMAUD, I. BILLAULT, P. LESOT  ***Modern Magnetic Resonance***,*Ed.* **G. Webb, Springer Int. Publishing, 2nd Ed., pp. 1-26, (2017).** |
| **10.** | **NMR Spectroscopy-Applic Elements | Hydrogen Isotopes: 2H NMR**  P. LESOT\*  ***Encylopedia of Analycal Science****,**3rd Ed.* **2nd Ed., pp. 1-16**, Elsevier **(2018).** |

**PARTICIPATION A D’AUTRES PRODUCTIONS ECRITES**

**CHRONIQUES LITTERAIRES (Revue critique de livres) : 2**

***-* Book review: *« NMR Spectroscopy in Liquid and Solids » by V. I. Bakhmutov***

P. LESOT***Anal. Bioanal. Chem****., 407, 8625-8626, (2015).*

***-* Revue littéraire*: « NMR Spectroscopy in Liquids and Solids » de V. I. Bakhmuthov***

P. LESOT ***Spectra Analyse,*****306**, 16*,* **(2015)**.

**VISIBILITE ET MISE EN VALEUR DE LA PRODUCTION SCIENTIFIQUE**

***●*** **Visibilité médiatique (Communiqués de presse) : 7**

|  |  |
| --- | --- |
| **1.** | **NMR to Excess**  Site du web du journal on-line « ***Spectroscopy Now (2006)***»  http://www.spectroscopynow.com/details/ezine/sepspec11699ezine/NMR-to-excess.html?tzcheck=1 |
| **2.** | **Plus Loin dans la Détection des Isotopes Naturellement Abondants**  Site web du CNRS (INC) «***En direct des laboratoires de l’INC (2012)*** »  http://www.cnrs.fr/inc/communication/direct labos/lesot.htm |
| **3.** | **Watching Enzymes Change Molecules’ Chirality** Site du web du journal on-line « ***Chemical & Engineering News***»  http://cen.acs.org/articles/91/web/2013/04/Watching-Enzymes-Change-MoleculesChirality.html |
| **4.** | **Monitoring Enzymatic Transformation with NMR: Tracking Alanine Racemase Conversion of Substrate Chirality**  Site du web du journal on-line « ***Spectroscopy Now***»  http://www.spectroscopyonline.com/spectroscopy/Magnetic+Resonance%2FNMR/Monitoring-Enzymatic-Transformation-with-NMR-Track/ArticleStandard/Article/detail/828360?topic=133 |
| **5.** | Chiral Solutions  Site du web du journal on-line « *Liquid Crystals Today* » 2013, Vol. 22, No. 1, 17–18.  http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/1358314X.2013.813726 |
| **6.** | **Dans l’Intimité Isotopique des Molécules Fossiles : de Nouvelles Clés pour étudier le Climat Passé**  -Site web du CNRS (INC) « ***En direct des laboratoires de l’INC*** »  http://www.cnrs.fr/inc/communication/direct labos/lesot2.htm  -Site web du CNRS (INSU) « ***Actualités Environnement*»**  http://www.insu.cnrs.fr/environnement/actualites |

- Communiqués de presse ***« Paris-Sud***»

http://www.actu.u-psud.fr/fr/recherche/actualites-2016/dans-l-intimite-isotopique-des-molecules-fossiles.html

|  |  |
| --- | --- |
| **7.**  **(Vidéo)** | **Interview vidéo lors des « JPFSA » (Marrakech)**  « La RMN dans les cristaux liquides »  -Site web du journal Specta Analyse |

<http://jpfsa.org/index.php/videos-jpfsa-2017/>

***●*** **Articles mis en valeur par choix de l’Editeur : 14**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | **N°article**  (Année) | ***Type de mise en valeur*** | |
| **1.** | | **24** (2000) | | *Couverture du Journal «Chem. Commun.**» (Feature article)* |
| **2.** | | **40** (2004) | | *Article retenu comme «****Hot article****» sur «Phys. Chem. Chem. Phys.»* |
| **3.** | | **43** (2004) | | *Couverture du journal sur «Phys. Chem. Chem. Phys*.*»* |
| **4.** | | **48** (2005) | | *Couverture du journal sur «Spectra Analyse*» |
| **5.** | | **52** (2007) | | *Communication retenue comme «****Hot article****» par « Chem. Commun. »* |
| **6.** | | **60** (2007) | | *Retenue dans la base de donnée «Prospect View» de Chem. Commun.* |
| **7.** | | **63** (2008) | | *Couverture du journal «Spectra Analyse*» |
| **8.** | | **85** (2011) | | *Couverture du journal «Chem. Eur. J.*»  Article présenté sur «**Hot topic**» de Wiley: <http://www.wiley-vch.de/util/hottopics/liquidcrystals/> |
| **9.** | | **88** (2012) | | *Couverture du journal «Chem. Eur. J.*»  Sélectionné comme «**Article VIP** (very important paper)» |
| **10.** | | **103** (2014) | | *4ième de couverture du journal «Analyst*»  Article mis en valeur par l’éditeur |
| **11.** | | **104/105** (2014) | | *Numéro spécial mis en valeur par le site WEB « spectroscopyNOW.com »*  « …it is a collection of articles that are written by experts to summarize recent advances in the field of NMR and in particular its applications to the liquid-crystal field ». |
| **12.** | | **110** (2015) | | Article mis en valeur par l’éditeur : «**Article VIP**» *par «Angew. Chem. Int. Ed.*» |
| **13.** | | **119** (2017) | | *Couverture du journal «Spectra Analyse*» |
| **14.** | | **123** (2017) | | *Article retenu comme «****VIP article****» sur «ChemPhysChem»* |

**SEMINAIRES INVITES**

***●*** **Liste des présentations orales de type « Séminaire » (1992-2018) : 23**

- Nombre de séminaires universitaires (à l’étranger) : 11

- Nombre de séminaires universitaires (France) : 12

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **1.**  **(S.F.)** | **RMN 1D et 2D dans les Cristaux Liquides Lyotropes Chiraux : Une Approche Originale de l'Analyse Enantiomérique en Chimie Organique**  Ecole Nationale de Supérieure de Chimie de Rennes, Rennes, Novembre **(1998)**. | |
| **2.**  **(S.F.)** | **La RMN dans les Cristaux Liquides Chiraux: Concepts, Développements Analytiques et Applications en Chimie Organique**  Faculté de Pharmacie de Chatenay-Malabry, Chatenay, Février **(2004)**. | |
| **3.**  **(S.F.)** | **Du Paramètre d’Ordre Orientationnel à l’Analyse Stéréochimique en RMN**  Université de Cergy-Pontoise, Cergy-Pontoise, Février **(2004)**. | |
| **4.**  **(S.F.)** | **Potentiels Analytiques de la RMN dans les Cristaux Liquides Chiraux : Applications en Chimie Organique**  Université Paul Sabatier, Toulouse, Mars **(2004)**. | |
| **5.**  **(S.F.)** | **Principaux Aspects Analytiques de la RMN dans les Cristaux Liquides Chiraux Polypeptidiques**  ICSN, Laboratoire de RMN à haut-champ, Gif-sur -Yvette, Décembre **(2005)**. | |
| **6.**  **(S.F.)** | **RMN 2H et Milieux Orientés Chiraux: une Autre Approche de l’Analyse en Chimie Organique**  Laboratoire d'Analyse Isotopique et Electrochimique des Métabolismes, Nantes, Février **(2007)**. | |
| **7.**  **(S.F.)** | **Potentiel Analytique de la RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les cristaux liquides via une Cryosonde Sélective 2H à 14.1 T**  CNRS, (Campus G. Mégie, Paris) lors de l’audit de la FR 2950, Février **(2007)**. | |
| **8.**  **(S.E.)** | | | **Natural Abundance Deuterium 1D and 2D NMR in Chiral Oriented Solvents: Development and Applications in Chemistry**  "Ecole Doctorale de Gottingen", Université de Paris-Sud, Orsay, Septembre (2007). | |
| **9.**  **(S.E.)** | | Natural Abundance Deuterium NMR in Weakly Orienting Chiral Liquid Crystalline Phases: Methodological Developments and Analytical Applications Technion Institute, Haïfa, Israël, Décembre **(2007)**. | |
| **10.**  **(S.E.)** | | **NMR Spectroscopy in Chiral Liquid Crystalline Solvents: Methodological Developments and Analytical Applications of the NAD NMR**  Weizmann Institute, Rehovot, Israël, Décembre **(2007)**. | |
| **11.**  **(S.F.)** | | **Récentes Applications de la RMN du Deutérium Abondance Naturelle dans les Systèmes Orientés Chiraux: Un nouvel outil en chimie analytique?**  IRCOF, Université de Rouen, IRCOF, Mai **(2008)**. | |
| **12.**  **(S.F.)** | | **RMN en Milieu Cristal Liquide Chiral: De l’Ordre Orientationel à la Configuration Absolue**  CEA" Saclay, Mai **(2009)**. | |
| **13.**  **(S.E.)** | | **Analysis of the Natural Isotopic Distribution in Fatty Acids revisited by NMR in Chiral Oriented Solvents: Application to Saturated and Unsaturated Compounds**  Indian Institute of Science (IISC)", Bangalore, Inde, Mars **(2010)**. | |
| **14.**  **(S.E.)** | | **Exploiting the Analytical Potential of NAD 2D NMR Spectrocopy in Polypeptide Mesophases: from the Molecular Orientational Ordering to the Natural Isotopic Fractionation Determination**  Université de Padova", Italie, Octobre **(2010)**. | |
| **15.**  **(S.E.)** | | **Exploring the Spectral Enantiodiscriminations of Chiral Amino Acids Using Lyomesophases: First Experimental Results Using 2H 1D/2D NMR of DNA-Based Oriented Solutions**  Indian Institute of Science (IISC), Bangalore, Inde, Février **(2011).** | |
| **16.**  **(S.E.)** | | Stereochemical Analysis by Anisotropic NMR: From Orientational Ordering to Bioanalytical Applications  University of Leipzig", Allemagne, Juin **(2012)**. | |
| **17.**  **(S.F.)** | | **RMN, Cristaux Liquides et (Pro)Chiralité: Proposer aux (Bio)chimistes de Nouvelles Approches Analytiques!**  Université de Versailles, Versailles, Février **(2013)**. | |
| **18.**  **(S.E.)** | | **NMR in Chiral Oriented Solvents: Principles, Challenges and Opportunities!**  Université de Giessen, Allemagne, Juin **(2013)**. | |
| **19.**  **(S.E.)** | | **Analytical applications of heteronuclear 2D-NMR Experiments in CLC: the interesting case of 13C-2H nuclei**  Indian Institute of Science (IISC), Bangalore, Inde, Janvier **(2014)**. | |
| **20.**  **(S.F.)** | | **RMN en Milieu Orienté et Stéréochimie : Principe, Challenges et Applications**  Séminaire à l’Institut de Chimie Radicalaire (UMR 7273), Marseille, Décembre **(2014)**. | |
| **21.**  **(S.F.)** | | **Pourquoi la RMN Orienté Chirale est un Outil Analytique Formidable?**  ICMR, Université de Reims, Avril **(2015)**. | |
| **22.**  **(S.E.)** | | Chirality, Prochirality and NMR in Chiral Oriented Solvents: Methodological Opportunities and Analytical Challenges  “KIT", Karlsruhe, Mai (2017). | |
| **23.**  **(S.E.)** | | Recent Achievements of NMR in Chiral Lyotropic Liquid Crystals: Methodological developments and Analytical Challenges  “TU of Darmstadt”, Darmstadt, Juillet (2018). | |

**CONFERENCES INVITEES**

***●* Liste des présentations orales de type « Conférence invitée » (1992-2018) : 33**

- Nombre de présentations Conf. invitées (à l’étranger): 19

- Nombre de présentations Conf. invitées (France): 14

|  |  |
| --- | --- |
| **1.**  **(C.F.)** | **RMN dans les Cristaux Liquides Chiraux : un Outil Puissant et Original pour l'Analyse Stéréochimique**  "GECO 43", Annecy, Septembre **(2002)**. «Conférencier invité» |
| **2.**  **(C.F.)** | **Potentiel Analytique de la RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans un Solvant Orienté Chiral**  "Journée Scientifique de la Société Française des Isotopes Stables, (SFIS)", Mai 2014, MNHN, Paris «Conférencier invité» |
| **3.**  **(C.E.)** | **Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy in Chiral Liquid-Crystalline Solvents: a Promising Challenge**  "1st Tropea Meeting on NMR in Liquid Crystals", Italie, Octobre **(2005)**. «Invited lecture» |
| **4.**  **(C.F.)** | **RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les Solvants Orientés Chiraux: Potentiel Analytique d’une Cryosonde Sélective 2H à 14.1 T**  "XXième Journées des Utilisateurs Bruker, France", Paris, Novembre **(2006)**. «Conférencier invitée» |
| **5.**  **(C.F.)** | **RMN du 2H en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux à l’aide d’une Crysonde 2H Opérant à 14 T: Quand l’Improbable Devient Réalité !**  "Inauguration de la Plateforme RMN 600 MHz", ICMMO Université de Paris-Sud, Orsay, Mai **(2007)**. |
| **6.**  **(C.E.)** | **Development and Applications of Natural Abundance 2H-NMR Spectroscopy In Chiral Oriented Solvents: an Original Analytical Tool for (Bio)Chemists**  "SMASH 2007", Chamonix, Septembre **(2007)**. «Invited lecture» |
| **7.**  **(C.E.)** | **Natural Abundance Deuterium NMR in Chiral Oriented Solvents using 2H Cryogenic Probes: to Cross New Analytical Frontiers!**  "2nd Tropea Meeting on NMR in Liquid Crystals", Tropéa, Italie, Octobre **(2007)**. «Invited lecture» |
| **8.**  **(C.F.)** | **Contribution de la RMN Anisotrope dans les Milieux Polypeptidiques Chiraux dédiée à l’Analyse Enantiomérique, Enantiotopique** **et** **Stéréochimique**  "1ère Journée de RMN appliquée à la chimie (bio)organique", ENS, Cachan, Mai **(2009)**. «Conférencier invité» |
| **9.**  **(C.F.)** | **Une Brève Histoire de la RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les C.L.C.: de l’Utopie à l’Application Analytique**  "Symposium de RMN, Orsay, 65th anniversary of Prof. J. Courtieu, Juin **(2009)**. «Conférencier invité» |
| **10.**  **(C.E.)** | Analysis of C-18 Unsaturated and C-14 to C-18 Saturated Fatty Acids using NAD 2D NMR in PBLG Mesophases : Study of the Isotopic Fractionation and the Molecular Ordering  "3rd Tropea Meeting on NMR in Liquid Crystals", Tropéa, Italie, Octobre **(2009)**. «Invited lecture» |
| **11.**  **(C.E.)** | **Applications of Natural Abundance Deuterium NMR in Chiral Oriented Solvents: From the stereochemical analysis to the Determination of Natural Isotopic (H/D) Distribution in Fatty Acids**  "16th National Conference of NMR Society", Lucknow, Inde, Février **(2010)**. «Invited lecture» |
| **12.**  **(C.E.)** | **Various Aspects of Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy in Liquid Crystals**  "IISC NMR Workshop 2010" (Indian Institute of Science), Bangalore Inde, Mars **(2010)**.«Invited lecture» |
| **13.**  **(C.E.)** | **Opportunities and Challenges in NMR Spectroscopy using Polypeptide Oriented Systems as Enantiodiscriminating Matrices**  "Darmstadt University Symposium: NMR and Chirality", Darmstadt, Allemagne, Mai **(2010)**. «Invited lecture» |
| **14.**  **(C.E.)** | **Analysis of the Site-specific (D/H) Isotopic Fractionation of C-18 Fatty Acids using Natural Abundance Deuterium NMR in Chiral Aligned Media: Toward a New Analytical Concept in the Field?**  "5th ISI 2010 Conference", Amsterdam, Pays-Bas Juin **(2010)**. «Invited lecture» |
| **15.**  **(C.E.)** | **NAD 2D NMR in CLC : A new Analytical Method for investigating the Site-specific (D/H) Isotope Ratios in Fatty Acids: from the Myristic Acid to Triglycrides**  "17th National Conference of NMR Society", Amritsar, Inde, Mars **(2011)**.«Invited Lecture» |
| **16.**  **(C.E.)** | **Opportunities and Challenges of NAD NMR in Orienting Solvents for Investigating the Natural (D/H) Isotopic Fractionation: Application to (Un)saturated Fatty Acids**  "Hydrogen Isotope and environmentals recorders Conference", Orleans, Septembre **(2011)**. «Invited Lecture» |
| **17.**  **(C.F.)** | **Revisiting the (D/H) Isotopic Fractionation Analysis of (Un)saturated Fatty acids and Triglycerides: What NAD 2D NMR Spectroscopy in Aligned Media Can Do for You?**  "SMASH 2011", Chamonix, Septembre **(2011)**. «Invited talk» |
| **18.**  **(C.E.)** | **Evaluating the Spectral Enantiodiscrimination Potential of DNA-based Orienting Medium using Deuterium 1D and 2D NMR Spectroscopy**  "18th National Conference of NMR Society", Bangalore, Inde, Février **(2012)**. «Invited lecture» |
| **19.**  **(C.E.)** | **Investigation of (Un)saturated Fatty Acids and Triglycerides using NAD 2D NMR Spectroscopy in Aligned Media**  "NMR workshop à l’University of Karslruhe", Allemagne Mai **(2012)**. «Invited lecture» |
| **20.**  **(C.E.)** | Multinuclear NMR Spectroscopy in Chiral Mesophases: A fascinating Journey through Stereochemical Analysis  "VIIth Symposium: NMR in Chemistry, Physics and Biological Sciences", University of Varsovie, Pologne, Septembre **(2012)**. «Plenary lecture» |
| **21.**  **(C.E.)** | Contribution of (Chiral) Anisotropic NMR to the Stereochemical Analysis: From Orientational Ordering to Bioanalytical Applications  "Doctoral Workshop", Cetrato, Italy, Septembre **(2012)**. «Plenary lecture» |
| **22.**  **(C.F.)** | **Détection Experimentale d’isotopomères-(2H-13C) Naturellement Abondants par RMN 2D Isotrope et Anisotrope … ou Comment Observer Une Molécule Sur 600 000!**  "4ième Réunion des utilisateurs, TGIR-RMN", Lille, Novembre **(2012)**. «Communication invitée» |
| **23.**  **(C.E.)** | Development and Application of 2H/13C Heteronuclear Correlation 2D Experiments in chiral anisotropic media : from Enriched Molecules to Natural Abundance Level  "Workshop à l’University of Darmstadt", Allemagne, Décembre **(2012)**. «Invited lecture» |
| **24.**  **(C.E.)** | **Recent Achievements of NMR in Chiral Anisotropic Media: Methodology and Applications**  "SMASH 2013", St Jacques de Compostel, Espagne, Septembre **(2013)**. «Invited talk» |
| **25.**  **(C.E.)** | **New Challenges in Chiral Anisotropic NMR: Methodology and Applications**  "4th Tropea Meeting on NMR in Liquid Crystals", Tropea, Italie, Octobre **(2013)**. «Invited talk» |
| **26.**  **(C.E.)** | **NMR using Chiral Anisotropic Solvents: Recent Methodological Advances**  **and new Analytical Applications**  "19th National Conference of NMR Society", Tezpur, Inde, Février **(2014)**. «Invited talk» |
| **27.**  **(C.F.)** | **RMN, Cristaux Liquides Chiraux et (Pro)Chiralité : Aborder l’énantiodiscrimination autrement ?**  "XXième Journées de la SCF - Section Bretagne-Pays de la Loire, Nantes, Mai **(2015)**. «Conférence plénière» |
| **28.**  **(C.F.)** | NMR Spectroscopy, Chiral Oriented Media and isotope (D/H) Intramolecular Composition: two Illustrative Examples  "JACC", Lyon, Octobre (2015). «Keynote invitée» |
| **29.**  **(C.F.)** | RMN, Chiralité et Systèmes Orientés  "1ère Journée de Résonance Magnétique de Paris-Saclay, Versailles, Mai (2016). «Conférence invitée» |
| **30.**  **(C.F.)** | Chirality Revisited by NMR in Chiral Oriented Solvents: Analytical Opportunities and Challenges  “Journée du GDR CHIRAFUN", Rennes, Mai (2016). «Conférence invitée» |
| **31.**  **(C.F.)** | **Apport de la RMN 2H Isotrope/Anisotrope à l’Etude du Fractionnement Isotopique Naturel (D/H) Site-spécifique**  “Ecole Thématique MISTRAMO”, Sèvre, Mars (2017). «Conférence plénière» |
| **32.**  **(C.F.)** | Molecular Analysis Revisited by NAD 2D-NMR in Aligned Media: from Vanillin to Natural products  "3ième Journée de Résonance Magnétique de Paris-Saclay, Saclay, Avril (2018). «Conférence invitée» |

**COMMUNICATIONS ORALES ET PAR AFFICHE**

***●*** **Etat des présentations orales / affiches (1992-2018) : 118**

- Nombre de communications orales : 62 [19]

- Nombre de communications par affiche : 56 [21]

- Nombre de proceedings : 2

***●*** **Liste exhaustive**

|  |  |
| --- | --- |
| **1.**  **(C.O.)** | **Visualisation d'Enantiomères par RMN du Carbone-13 en Abondance Naturelle dans un Solvant Cristal Liquide Polypeptidique**  **P. LESOT**, P. BERDAGUE, A. MEDDOUR, D. MERLET, A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU  "SECO XXXII", Université de Lyon I, Villeurbanne, Juin **(1995)**. |
| **2.**  **(C.O.)** | **NMR Measurements of Chiral Solutes in a Polypeptidic Liquid Crystal**  A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU, A. MEDDOUR, I. CANET, P. LESOT, J.M. PECHINE  "VII International Symposium on Magnetic Resonance in Colloid and Interface Science", Madrid, Septembre **(1995)**. |
| **3.**  **(C.O.)** | **Visualisation of Enantiomers Oriented in Chiral Crystal Solvents using NMR Spectroscopy**  **P. LESOT**, D. MERLET, A. MEDDOUR, J. COURTIEU  "Liquid Crystals Symposium", University of Southampton, Southampton, Novembre **(1995)**. |
| **4.**  **(C.O.)** | **Enantiomeric Analysis by NMR Spectroscopy**  A. LOEWENSTEIN, A. MEDDOUR, P. LESOT, J. COURTIEU  "ENC XXXVII", Asilomar, Californie, Mars **(1996)**. |
| **5.**  **(C.A.)** | **Visualization of Enantiomers in a Polypeptide Liquid Crystal Using NMR Spectroscopy: Study of the Differential Ordering Effect**  **P. LESOT**, P. BERDAGUÉ, A. MEDDOUR, D. MERLET, A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU  "EENC XIII", Paris la Villette, Mai **(1996)**. |
| **6.**  **(C.A.)** | **Visualisation d'Enantiomères et de Diastéréoisomères par RMN en Milieu Cristal Liquide Chiral**  C. CANLET, A. MEDDOUR, P. BERDAGUE, D. MERLET, P. LESOT, A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU  "Ecole thématique RMN haute résolution liquide", Figeac, Septembre **(1996)**. |
| **7.**  **(C.A.)** | **Quantification of the Differential Ordering Effect of two Enantiomers Dissolved in a Chiral Polypeptide Liquid Crystal**  D. MERLET, P. LESOT, J.W. EMSLEY, J. JOKISAARI, A. LOEWENSTEIN, J. COURTIEU  "12th Annual Conference of the British Liquid Crystal Society", University of Southampton, Southampton, Mars **(1997)**. |
| **8.**  **(C.A.)** | **Shape Recognition through NMR in Chiral Liquid Crystal Solvents**  **P. LESOT**, A. MEDDOUR, C. CANLET, J. COURTIEU  "7th Chianti Workshop on Magnetic Resonance", San Miniato, Italie, Mai **(1997)**. |
| **9.**  **(C.O.)** | **RMN 2D 2H en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux : Une Nouvelle Approche dans l'Analyse Enantiomérique**  D. MERLET, P. LESOT, J. COURTIEU  "SECO XXXV", Dourdan, Mai **(1998)**. |
| **10.**  **(C.A.)** | **Enantiomeric Analysis by NMR in a Chiral Liquid Crystal**  A. LOEWENSTEIN, P. LESOT, D. MERLET, A. MEDDOUR, J.M. PECHINE, J. COURTIEU  "29th Ampere - 13th ISMAR International Conference on Magnetic Resonance and Related Phenomena", Berlin, Août **(1998)**. |
| **11.**  **(C.O.)** | **Natural Abundance Deuterium 2D NMR in Chiral Liquid Crystals: A New Approach in the Enantiomeric Visualization**  D. MERLET, P. LESOT, J. COURTIEU  "14th annual Conference of the British Liquid Crystal Society", Mars, UK **(1999)**. |
| **12.**  **(C.O.)** | **NMR using Chiral Liquid-Crystalline Solvents: a Powerful Tool for Enantiomeric Visualisation**  D. MERLET, P. LESOT, A. MEDDOUR, C. CANLET, J.W. EMSLEY, J. COURTIEU  "International School of Liquid Crystals", Erice, Italie, Mai **(1999)**. |
| **13.**  **(C.A.)** | **Enantiomeric Analysis through Natural Abundance Deuterium 1D and 2D NMR in Chiral Liquid Crystal Solvents**  **P. LESOT**, D. MERLET, M. SARFATI, B. ANCIAN, J. COURTIEU  "8th Chianti Workshop on Magnetic Resonance", San Miniato, Italie, Juin **(1999)**. |
| **14.**  **(C.O.)** | **Symétrie et Paramètres d'Ordre dans les Cristaux Liquides Chiraux : Application en Chimie Organique**  **P. LESOT**  "Journées Scientifiques de l'ICMMO", Université de Paris-Sud XI, Orsay, Décembre **(1999)**. |
| **15.**  **(C.A.)** | **Visualisation de Noyaux, Groupements, Directions Enantiotopes et Faces Prochirales par Spectroscopie RMN en Milieu Cristal-Liquide Chiral**  C. Aroulanda, D. Merlet, P. LesoT\*, J. Courtieu  "5ième Journées Francophones des Jeunes Physico-Chimistes", Ecole Polytechnique, Palaiseau, Mai **(2000)**. **Prix du meilleur poster** |
| **16.**  **(C.A.)** | **Différenciation Enantiomerique d’Alcanes Chiraux par Spectroscopie RMN en Milieu Cristal-Liquide**  M. SARFATI, P. LesoT\*, J. Courtieu  "5ième Journées Francophones des Jeunes Physico-Chimistes", Ecole Polytechnique, Palaiseau, Mai **(2000)**. |
| **17.**  **(C.O.)** | **Différenciation Enantiomérique d’Hydrocarbures Chiraux par RMN**  M. SARFATI, P. LESOT\*, J. COURTIEU  "SECO XXXVII", Houffalize, Belgique, Mai **(2000)**. |
| **18.**  **(C.A.)** | **Enantiomeric Analysis using 1D and 2D Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy in Polypeptide Liquid Crystalline Solvents**  **P. LESOT**, M. SARFATI, D. MERLET, J. COURTIEU, B. ANCIAN, C. BREVARD  "2nd French-Italian Symposium on Organic Chemistry, Stereocontrol and New Targets", Strasbourg, Novembre **(2000)**. |
| **19.**  **(C.O.)** | **Différenciation Enantiomérique par RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux**  **P. LESOT**, M. SARFATI, D. MERLET, J. COURTIEU  "1ère Journées Francaises des Isotopes Stables", Nancy, Décembre **(2000)**. |
| **20.**  **(C.O.)** | **La RMN dans les Milieux Partiellement Orientés Chiraux : un Outil Original pour la Stéréochimie**  C. AROULANDA,P. LESOT\*, D. MERLET, M. SARFATI, J. COURTIEU  "SECO XXXVIII", Annecy, Mai **(2001)**. |
| **21.**  **(C.A.)** | **Enantiomeric Analysis of Chiral Hydrocarbons using 1D and 2D Natural Abundance Deuterium NMR Spectroscopy in Polypeptide Liquid Crystalline Solvents**  **P. LESOT**, M. SARFATI, J. COURTIEU  "9th Chianti Workshop on Magnetic Resonance", Pise, Italie, Juin **(2001)**. |
| **22.**  **(C.O.)** | **Développement de la RMN du Deuterium en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux : Differenciation d'Hydrocarbures Chiraux**  **P. LESOT**, M. SARFATI, J. COURTIEU  "10ième Colloque Francophone sur les Cristaux Liquides", Toulouse, Septembre **(2001)**. |
| **23.**  **(C.A.)** | **Contribution de la RMN en Milieu Cristal Liquide Faiblement Orienté à l'Analyse Enantiotopique de Molécules de Symétrie *C*s, *C*2v, *D*2d, *S*4**  C. AROULANDA,P. LESOT, D. MERLET, J. COURTIEU  "JCO 2001", Ecole Polytechnique, Palaiseau, Septembre **(2001)**. |
| **24.**  **(C.O.)** | **Application d'Experiences de RMN Sélectives pour l'Analyse Enantiomérique en Milieu Cristal Liquide Chiral**  J. FARJON,D. MERLET, P. LESOT, J. COURTIEU  "SECO XXXIX", St Jean de Monts, Mai **(2002)**. |
| **25.**  **(C.A.)** | **NMR in Chiral Oriented Solvents: a Powerful Analytical tool in Organic Chemistry**  **P. LESOT**, D. MERLET, C. AROULANDA, J. COURTIEU  "2nd Pan-European Younger Chemists’ Conference", Heidelberg, Allemagne, Octobre **(2002)**. |
| **26.**  **(C.A.)** | **Recent Advances of the NMR Spectroscopy in Weakly Ordering, Chiral Liquid Crystals**  **P. LESOT**, C. AROULANDA, D. MERLET, J. COURTIEU  "10th Chianti Workshop on Magnetic Resonance", San Miniato, Italie, Juin **(2003)**. |
| **27.**  **(C.A.)** | **Progress in NMR Spectroscopy using Weakly ordering, Chiral Liquid Crystals**  **P. LESOT**, C. AROULANDA, J. FARJON, D. MERLET, J. COURTIEU  "3ième Alpine Conference on Solid-State NMR", Chamonix, Septembre **(2003)**. |
| **28.**  **(C.A.)** | **Récents Développements de la Spectroscopie RMN dans les Cristaux Liquides Chiraux Faiblement Orientant**  **P. LESOT**, C. AROULANDA, D. MERLET, J. COURTIEU  "10ième Colloque Francophone sur les Cristaux Liquides", Dunkerque, Septembre **(2003)**. |
| **29.**  **(C.A.)** | **Développement et Applications d'Outils RMN 2D Impliquant des Transferts d’Aimantation Carbone-deutérium Dédiés à l'Analyse Stéréochimique dans les Cristaux Liquides Chiraux**  O. LAFON, P. LESOT\*  "2ième RCO, SFC", Versailles, Mars **(2004)**. |
| **30.**  **(C.O.)** | **Applications de la RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux**  **P. LESOT**  "Journée Spectroscopie", ICMMO, Univ. Paris XI, Orsay, Mai **(2004)**. |
| **31.**  **(C.A.)** | **Contribution de la RMN du 13C dans les Cristaux Liquides Chiraux pour l'attribution du Caractère Pro-*R*/Pro-*S* de Ligands Enantiotopes**  O. LAFON, P. LESOT\*, J. COURTIEU  "JCO 2004", Ecole polytechnique, Palaiseau, Septembre **(2004)**. |
| **32.**  **(C.A.)** | **Nouvelles Phases Lyotropes Chirales et leurs Applications en RMN**  K. BACZKO, C. LARPENT, **P. LESOT**  "JCO 2004", Ecole polytechnique, Palaiseau, Septembre **(2004)**. |
| **33.**  **(C.A.)** | **Recent Advances of Natural Abundance Deuterium NMR in Polypeptide Liquid Crystals**  **P. LESOT**, C. AROULANDA, J. COURTIEU  "EENC XVII", Lille, Septembre **(2004)**. |
| **34.**  **(C.A.)** | **Chiral Imines and Microwaves : Alkylation of Ter-Butyl Acrylate and Determination Determination of Stereoselectivity using Chiral Liquid Crystals**  K. JEAN-CHARLES, F. DUMAS, A. LOUPY, P. LESOT, O. LAFON  "Microwaves in Chemistry Conference", Londre, Septembre **(2004)**. |
| **35.**  **(C.O.)** | **Couplages Asymétriques Croisés de Nitrone d’(6-arène)Cr(CO)3 : la chiralite planaire pour un controle total de la daistéréosélectivité**  M. CHAVAROT, M. RIVARD, F. ROSE-MUCH, E. ROSE, S. PY, O. LAFON, P. LESOT  "J. de la Division de Chimie de Coordination de la SFC", Palaiseau, Janvier **(2005)**. |
| **36.**  **(C.O.)** | **Du Paramètre d’Ordre Orientationnel à l’Analyse Stéréochimique en RMN**  O. LAFON, P. LESOT\*  Réunion de RMN du GBP, Février **(2005)**. |
| **37.**  **(C.O.)** | **NMR using Chiral Liquid Crystalline Solvents: A Powerful Tool for Enantiomeric Visualization**  D. MERLET, P. LESOT, A. MEDDOUR, J. COURTIEU  "International Networking for Young Scientists on Chirality in Molecular Physics", British Council, Paris, Mars **(2005)**. |
| **38.**  **(C.O.)** | **Expériences RMN Tridimensionnelles Deutérium Dédiés à l’Analyse Stéréochimiques de Soluté Perdeutérés dans les Solvants Polypeptidiques**  O. LAFON, P. LESOT  "RCO 2005", Ecole polytechnique, Palaiseau, Mars **(2005)**. |
| **39.**  **(C.A.)** | **2H Cryoprobe : Outstanding Possibilities for Deuterium Studies**  Poster présenté par la Societé «Bruker Biospin»  "ENC 47th" Asilomar, CA, USA, Avril (**2006**). |
| **40.**  **(C.O.)** | **Développement et Applications Analytiques de la RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les Milieux Orientés**  **P. LESOT**  "Symposium de Chimie organique", ICMMO, Univ. Paris XI, Orsay, Mai **(2005)**. |
| **41.**  **(C.A.)** | **New Deuterium Multi-dimensional NMR Experiments in Chiral Anisotropic Solvents**  **P. LESOT**, O. LAFON  "4ième Alpine Conference on Solid-State NMR", Chamonix, Septembre **(2005)**. |
| **42.**  **(C.O.)** | **First Asymmetric SmI2-induced Cross-coupling of Cr(CO)3 Aromatic Nitrone Complexes with Carbonyl Compounds**  M. CHAVAROT, M. RIVARD, F. ROSE-MUCH, E. ROSE, O. LAFON, P. LESOT  Congrès SFC-Eurochem, Nancy, Août **(2005)**. |
| **43.**  **(C.O.)** | **New Deuterium Multidimensional NMR Experiments for Analysing Weakly Aligned, Isotopically Enriched Solutes**  O. LAFON, P. LESOT\*, J. COURTIEU  "1st Tropea Meeting on anisotropic NMR", Italy, Octobre **(2005)**. |
| **44.**  **(C.A.)** | **Study of Conformational Dynamics using Deuterium NMR in Polypeptide Oriented Solvents**  P. LESOT\*, O. LAFON, H. KAGAN, C. FAN  "Symposium on Spectroscopy and Dynamics of Molecular Coils and Aggregates", Göttingen, Allemagne, Mars **(2006)**. |
| **45.**  **(C.A.)** | **Analysis of Intramolecular Dynamic Processes in Diaryl Derivatives through Deuterium NMR in Polypeptide Liquid Crystals**  **P. LESOT**, O. LAFON, H. KAGAN, C. FAN  "GERM XX", Blankenberge, Belgique, Mars **(2006)**. |
| **46.**  **(C.O.)** | **Nouvelles Applications de la RMN dans les Solvants Orientés Chiraux dédiées à l’Analyse Stéréochimique**  O. LAFON, P. LESOT\*  "SECO 43", Fréjus, Mai **(2006)**. |
| **47.**  **(C.A.)** | **Développements Analytique de la Spectroscopie RMN dans les Cristaux Liquides Chiraux**  **P. LESOT**, O. LAFON  "JMC 10", Toulouse, Septembre **(2006)**. |
| **48.**  **(C.O.)** | **Nouvelles Expériences RMN Multidimensionnelles Deutérium en Milieu Orienté**  O. LAFON, P. LESOT\*  "Réunion de travail sur RMN haute-résolution dans les solides", La BAUME, Novembre **(2006)**. |
| **49.**  **(C.A.)** | **Vers une Détermination Empirique de la Configuration Absolue par RMN en Milieu Orienté Chiral**  L. ZIANI, P. LESOT, D. MERLET, J. COURTIEU  2ième RCO, Université de Paris-Sud, Orsay, Mars, **(2007)**. |
| **50.**  **(C.A.)** | **Determination by 2H NMR of Fatty Acid Isotopic Fractionation in a Micro-Organism Grown in Controlled Medium**  V. BAILLIF, R. ROBINS, I. BILLAULT, P. LESOT  "50 Years of the Phytochemical Society of Europe", Churchill College, Cambridge, UK, Avril **(2007)**. |
| **51.**  **(C.A.)** | **Determination by 2H NMR of Fatty Acid Isotopic Fractionation in a Micro-Organism Grown in Controlled Medium**  V. BAILLIF, R. ROBINS, I. BILLAULT, P. LESOT  "Journée SFC - BPL", st Leonard des Bois, France, Mai **(2007)**. |
| **52.**  **(C.O.)** | **Deuterium NMR in Liquid and Chiral Liquid Crystal: Novel Approaches to the Study of Fatty Acid Metabolism**  I. BILLAULT, P. LESOT, V. BAILLIF, R. ROBINS  Isotopes 2007: 5th International conference on Isotopes and Isotope Effects in Chemistry and Biology, Benicassim Castello, Espagne, Juin **(2007)**. |
| **53.**  **(C.A.)** | **First Empirical Determination of the Absolute Configuration of Enantiomers Using Natural Abundance Deuterium NMR in Chiral Oriented Solvents**  **P. LESOT**, L. ZIANI, J. COURTIEU  "11th Chianti Workshop on Magnetic Resonance", Vallambrosa, Italie, Juin **(2007)**. |
| **54.**  **(C.O.)** | **Detecting Conformational Pathways Through NMR In Weakly Ordering Liquid Crystals : A Challenging Task**  C. AROULANDA, P. LESOT, O. LAFON, J. COURTIEU, Z. LUZ  "2nd Tropea Meeting on NMR in Liquid Crystals", Tropéa, Italie, Octobre **(2007)** |
| **55.**  **(C.O.)** | **Récentes Applications de la RMN du Deutérium Abondance Naturelle dans les Systèmes Orientés Chiraux**  **P. LESOT**  "Réunion RMN du GBP", Le Mans, Janvier **(2008)**. |
| **56.**  **(C.O.)** | **Study of the Isotopic Fractionation of C-18 Unsaturated Fatty Acids Using Natural Abundance Deuterium 2D NMR Spectroscopy in Chiral Oriented Solvents**  **P. LESOT**, V. BAILLIF, I. BILLAULT  "JESIUM 2008", Presqu’île de Giens, Septembre **(2008)** |
| **57.**  **(C.A.)** | **Natural Abundance Quantitative 2D Deuterium NMR In Chiral Oriented Media for the Study of Isotopic Fractionation in Fatty Acids**  P. LESOT, Z. SERHAN, I. BILLAULT, R. ROBINS  "ISOTOPES 2009", Cluj-Napoca, Roumanie, Mai, **(2009)**. |
| **58.**  **(C.O.)** | **Insights into the Mechanisms of Fatty Acid Modifying Reactions by Quantitative 2D Deuterium NMR in Chiral Oriented Media**  I. BILLAULT, V. BAILLIF, R. ROBINS, P. LESOT  "ISOTOPES 2009", Cluj-Napoca, Roumanie, Mai, **(2009)**. |
| **59.**  **(C.A.)** | **Analyse Isotopique d'Acides Gras Saturés et Insaturés par Spectroscopie RMN 2H en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux**  Z. SERHAN, P. LESOT\*, I. BILLAULT  "Journées de l’école doctorale", Orsay, Septembre **(2009)**. |
| **60.**  **(C.A.)** | **Quantification of Solute-Fiber Affinities in Two-polypeptide enantiodiscriminating Liquid Crystals: Theory and Experimental 2H NMR Studies**  **P. LESOT**, O. LAFON, C. AROULANDA, R. DONG  "6ième Alpine Conference on Solid-State NMR", Chamonix, Septembre **(2009)**. |
| **61.**  **(C.A.)** | **Etude d’Acides Gras Saturés et Insaturés (C-18) par RMN 2D du Deuterium en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux**  Z. SERHAN, P. LESOT, I. BILLAULT  "JACC 2009", Dinard, France, Octobre **(2009)**. |
| **62.**  **(C.O.)** | **Exploiter la Chiralité des Cristaux Liquides pour l’Analyse Enantiomérique et Enantiotopique**  **P. LESOT**, C. AROULANDA, O. LAFON  "JACC", Dinard, France, Octobre **(2009)**. |
| **63.**  **(C.O.)** | **Enantiotopic Discrimination in Chiral Liquid Crystals**  P. LESOT, C. AROULANDA, Z. LUZ  "3rd Tropea Meeting on NMR in Liquid Crystals", Tropéa, Italie, Octobre **(2009)**. |
| **64.**  **(C.O.)** | **Study of Solute-Fibers Affinities in Two-Polypeptide Chiral Liquid Crystals:**  **Application** **to Enantiodiscrimination Revealed by Deuterium NMR**  P. LESOT, O. LAFON, C. AROULANDA, R. DONG  "3rd Tropea Meeting on NMR in Liquid Crystals", Tropéa, Italie, Octobre **(2009)**. |
| **65.**  **(C.O.)** | **Analyse et Optimisation des Conditions d’Enantiodiscrimination Spectrale d’Acides Gras Polyinsaturés par RMN du Deuterium en Abondance Naturelle en Milieu Orienté Chiral**  Z. SERHAN, P. LESOT\*  "Journée des Doctorants", ICMMO, Université Paris-Sud 11, Orsay, Mai **(2010)**. |
| **66.**  **(C.A.)** | Enantiodiscrimination in Oriented Solutions of PBLG: Where Does it Come from?  A. BORGOGNO, C. AROULANDA, P. LESOT\*, A. FERRARINI  "Joint EUROMAR 2010 and 17th ISMAR Conference", Florence, Italie, Juin **(2010)**. |
| **67.**  **(C.O.)** | **Experimental Evidences and Analysis of Orientational Inequivalence of Enantiotopic Directions in *S*4 Symmetry Rigid Molecules Dissolved in Chiral Oriented Environments**  C. AROULANDA, P. LESOT, H. ZIMMERMANN, Z. LUZ  "NMRCM 10", Saint-Petersbourg, Fédération de Russie, Juin **(2010)**. |
| **68.**  **(C.A.)** | **RMN du Deutérium en Abondance Naturelle dans les Cristaux Liquides Chiraux: Premières Applications à l’Analyse de Triglycérides d’Acides Gras**  Z. SERHAN, P. LESOT\*  "Journée de l’Ecole Doctorale", Université Paris-Sud, Orsay, Septembre **(2010)**. |
| **69.**  **(C.A.)** | **General and Efficient NMR Methodology for the Determination of the Site-Specific (D/H) Isotope Ratios at pro-*R*/pro-*S* Sites in C-18 Fatty acids: from the Stearic Acid to the **-Eleostearic Acid**  Z. SERHAN, I. BILLAULT, P. LESOT\*  "SFIS 2010", Toulouse, Octobre **(2010)**. |
| **70.**  **(C.A.)**  ***(Proceeding)*** | **CF3-Pseudoprolines: Synthesis and Conformational Study of Hydrolytically Stable Proline Surrogate Containing Dipeptides**  O. BARBEAU, C. CAUPENE, D. FEYTENS, G. CHAUME, P. LESOT, E. MICLET, T. BRIGAUD\*  "31th European Peptide Symposium (EPS)", Copenhagen (Denmark), Septembre **(2010)**. |
| **71.**  **(C.A.)** | **Poly-unsaturated Fatty Acids Investigated using NAD 2D-NMR in Polypeptide Mesophases: Optimisation of Spectral Enantiodiscrimination Conditions and** **Application to the Analysis of Conjugated Fatty acids**  Z. SERHAN, I. BILLAULT, P. LESOT\*  "8ième Rencontres de chimie Organique" (RCO 2010), Paris, Octobre **(2010)**. |
| **72.**  **(C.O.)** | **Apport de la RMN du Deuterium en Abondance Naturelle en Milieu Orienté Chiral à l’Analyse du Fractionnement Isotopique d’Acides Gras Saturés et Insaturés**  Z. SERHAN, I. BILLAULT, P. LESOT\*  "Réunion RMN du GBP", CEA, Saclay, Janvier **(2011)**. |
| **73.**  **(C.O.)** | **How can we Decrease the Duration of NMR Experiments?** O. LAFON, M. ROSAY, F. AUSSENAC, J. TREBOSC, B. HU, P. LESOT, J.-P. AMOUREUX  "Réunion RMN du GBP", CEA, Saclay, Janvier **(2011)**. |
| **74.**  **(C.O.)** | CF3-Pseudoprolines: Synthesis and Conformational Study of Hydrolytically Stable Proline surrogate containing dipeptides T. BRIGAUD, G. CHAUME, O. BARBEAU, C. CAUPENE, D. FEYTENS, E. MICLET, P. LESOT  "17ème congrès du Groupe Français des Peptides et des Protéines", Aussois, 30 Janvier (2011). |
| **75.**  **(C.A.)** | Fast Two-Dimensional NMR Spectroscopy of Solids and Mesophases by Combining Sparse Sampling and Suitable Spectral Reconstruction  O. LAFON, J. TRÉBOSC, B. HU, P. LESOT, J.-P. AMOUREUX  "52nd ENC", Asilomar, USA, Avril **(2011)**. |
| **76.**  **(C.O.)** | Fast Multidimensional Solid-state NMR Spectroscopy  O. LAFON, J. TREBOSC, P. LESOT, J.-P. AMOUREUX  "1st French-Mexican workshop on solid-state NMR spectroscopy", Mexico (Mexique), avril (**2011**). |
| **77.**  **(C.A.)** | **Last Advances in the Analysis of Saturated and Unsaturated Fatty Acid Methyl Esters By NAD 2D NMR Spectroscopy in Oriented Solvents: Experimental Results and Computational** **Modelling**  Z. SERHAN, P. LESOT\*, I. BILLAULT, A. BORGOGNO, A. FERRARINI  "Isotopes 2011", Aix-en-Provence, Juin **(2011)**. **Prix du meilleur poster** |
| **78.**  **(C.O.)** | **Vernoleic Acid Biosynthesis : Can Different Mechanisms be Distinguished from Deuterium Isotope Effects Measured at Natural Abundance Deuterium by 2D-NMR in Chiral Liquid Crystals?**  I. BILLAULT, A. LEDRU, M. OUETHRANI, P. LESOT, Z. SERHAN, R. ROBINS  "Isotopes 2011", Aix-en-Provence,Juin **(2011)**. |
| **79.**  **(C.A.)** | **Last Advances in the Analysis of Fatty Acids in CLC by NAD NMR: Optimisation of Mesophases and Applications of Combined NUS-Cov Approaches**  **P. LESOT**, O. LAFON, J.-P. AMOUREUX  "EUROMAR 2011", Frankfurt, Août **(2011)**. |
| **80.**  **(C.O.)** | **Natural Deuterium Isotope Fractionation in Fatty Acids: Underlying Causes and Mechanistic Interpretations**  R. ROBINS, V. BAILLIF, I. BILLAULT, P. LESOT  "Hydrogen Isotope and Environmentals Recorders Conference", Orleans, Septembre **(2011)**. |
| **81.**  **(C.O.)** | **Why Wait Hours to Acquire NMR Spectra? High-field DNP and Non-uniform Sampling**  O. LAFON, F. AUSSENAC, M. ROSAY, A. THANKAMONY, X. LU, J. TRÉBOSC, H. VEZIN, P. LESOT, J.-P. AMOUREUX  "NMRS 2012”, Bangolore, India, Février **(2012)**. |
| **82.**  **(C.O.)** | **Methodological Study For The Peptide Coupling of the N-Deactivated Stable Proline Surrogate CF3-Pseudoproline.**  G. CHAUME, D. FETEYNS, P. LESOT, P, E. MICLET, E.; S. LAVIELLE, G. CHASSAING, T. BRIGAUD  "Prolines & Co.". Montpellier, Avril **(2012)**. |
| **83.**  **(C.O.)** | **Evaluation du Potentiel Enantiodiscriminant de Mésophases Chirales à Base d’ADN par RMN du Deutérium**  P. LESOT, V. REDDY,N. SURYAPRAKASH  "Réunion RMN du GBP", Versailles, Juin **(2012)**. |
| **84.**  **(C.A.)** | **The Twist-bend Chiral Nematic Phase: Characterisation and Domain Seeding**  L. BEGUIN, J.W. EMSLEY, M. LELLI, A. LESAGE, P. LESOT, G. R. LUCKHURST, A. MEDDOUR, D. MERLET  "24th International Liquid Crystal Conference(ILCC 2012)", Mainz, Allemagne, Septembre **(2012)**. |
| **85.**  **(C.A.)**  ***(Proceeding)*** | **Methodological Study of the Peptide Coupling of the N-deactivated Stable Proline Surrogate CF3-pseudoproline**  G. CHAUME, O. BARBEAU, C. CAUPENE, P. LESOT, D. FEYTEN, E. MICLET, T. BRIGAUD  "32nd European Peptide Symposium (32 EPS)",Athène, Grèce, Septembre (**2012**). |
| **86.**  **(C.A.)** | **RMN du Deutérium en Abondance Naturelle : Un Outil Original et Innovant**  **P. LESOT**  Colloque annuel du «LabEx LERMIT» 2012, Gif-sur-Yvette, Décembre (**2012**). |
| **87.**  **(C.O.)** | **Kinetics of Enzymatic Racemization using 2H NMR in DNA-based,Oriented Chiral Solvents**  M. CHAN-HUOT, P. LESOT\*, L. DUMA, P. PELUPESSY, BODENHAUSEN, M.D. TONEY, N. SURYAPRAKASH  "Réunion RMN du GBP", Orléans, Janvier (2013). |
| **88.**  **(C.O.)** | Experimental NMR Detection of Highly Dilute Spin Systems in Isotropic and Anisotropic Media: the Case of 2H-13C Isotopomers at Natural Abundance Level  P. LESOT, O. LAFON  "Réunion du GBP", Orléans, Janvier **(2013)**. |
| **89.**  **(C.O.)** | Following Enzymic Racemization of Alanine by NMR in Chiral Liquid Crystals Made of DNA Fragments  M. CHAN-HUOT, P. LESOT\*, L. DUMA, P. PELUPESSY, P. DUCHAMBON, M.D. TONEY, U.V. REDDY, N. SURYAPRAKASH, G. BODENHAUSEN  "54th ENC", USA, Asilomar, Californie, Avril (**2013**). |
| **90.**  **(C.A.)** | Following Enzymic Racemization of Alanine in Chiral Liquid Crystals Made of DNA Fragments  M. CHAN-HUOT, P. LESOT\*, L. DUMA, P. PELUPESSY, P. DUCHAMBON, M.D. TONEY, U.V. REDDY, N. SURYAPRAKASH, G. BODENHAUSEN  "54th ENC", USA, Asilomar, Californie, Avril (**2013**). |
| **91.**  **(C.A.)** | Detection of Low Naturally Abundant (Enantio)-isotopomers by 2D-NMR in Liquids and Chiral Oriented Solvents: the Interesting Case of 2H-13C Pairs  **P. LESOT**, O. LAFON  "EUROMAR 2013", Grèce, Hersonisos (Crête), Juin, (**2013**). |
| **92.**  **(C.A.)** | **Enhanced Sensitivity for anisotropic Natural Abundance Deuterium 2D-NMR Spectroscopy by Combining Non-uniform Sampling and Compressed Sensing**  K. KAZIMIERCZUK, O. LAFON, P. LESOT  "EUROMAR 2013", Grèce, Hersonisos (Crête), Juin (**2013**). |
| **93.**  **(C.O.)** | **Electrolytes Liquides Ioniques Fortement Anisotropes**  P. JUDEINSTEIN, P. LESOT, M. ZEGHAL L. NOIREZ, P. BARONI  16ème Colloque sur les Systèmes Anisotropes Auto-Organisés (CFCL13)”, Strasbourg, Septembre, (2013). |
| **94.**  **(C.A.)** | Hydrogen Isotope Profile of Methyl Groups in Miliacin (Olean-18-En-3ΒOL Me) by Natural Abundance Deuterium 2D-NMR Spectroscopy in Liquid Crystals  P. BERDAGUE, P. LESOT, J. JACOB, V.-J. TERWILLIGER, C. LE MILBEAU  "IMOG 2013", Tennerife, Spain, Septembre, (**2013**). |
| **95.**  **(C.O.)** | **Molecular Origin of the Enantiodiscrimination by NMR Spectroscopy in Ordered Chiral Media**  A. BORGOGNO, C. GRECO, A. FERRARINI, Z. P. BERDAGUÉ, P. LESOT\*, G. R. LUCKHURST  "4th Tropea Meeting on NMR in Liquid Crystals", Tropea, Italie, Octobre **(2013)**. |
| **96.**  **(C.O.)** | **Oriented ionic Liquid Electrolytes with Strong Anisotropy: Toward a New Generation of Electrolytes for Batteries?**  P. JUDEINSTEIN, P. LESOT, P. NOIREZ, P. BARONI  ILMAT 2013, Montpellier, Novembre (**2013**). |
| **97.**  **(C.O.)** | **Contribution of Anisotropic NAD-NMR to the Measurement of Isotope Compositions:** **Advances and prospects**  **P. LESOT**  SIBAE 2013-INTRA Workshop on Intramolecular Isotopic Fractionation, Nantes, Octobre (**2013**). |
| **98.**  **(C.O.)** | **Les Liquides Ioniques: des Fluides Nanostructurés**  P. JUDEINSTEIN, P. LESOT, S. HUET, P. ALLOUIN, M.L. PHUNGE LE  "Réunion RMN du GBP", Orsay, Avril (2014). |
| **99.**  **(C.O.)** | **Two Complementary Methods to Improve NMR Sensitivity: Dynamic Nuclear Polarization and Non-Uniform Sampling**  O. LAFON, F. POURPOINT,J. TRÉBOSC, T. KOBAYASHI, D. CARNEVALE, F. AUSSENAC, G. BODENHAUSEN, H. VEZIN, K. KAZIMIERCZUK, P. LESOT, M. PRUSKI, J.-P. AMOUREUX  "56th Rocky Mountain Conference on NMR", Colorado, USA, Juillet (**2014**). |
| **100.**  **(C.O.)** | **Contribution de la RMN 2D DAN Anisotrope à la Détermination du Profil Isotopique (D/H)i de Biomarqueurs: Etude de la Miliacine**  **P. LESOT**, P. BERDAGUE, J. JACOB, V.-J. TERWILLIGER, C. LE MILBEAU  "Colloque RMN du GBP-IdF", Gif-sur-Yvette, Mai (2015). |
| **101.**  **(C.A.)** | **Selective Deprotection of **-Hydroxybenzyl Ether by an Intramolecular Hydrogen Atom Transfer**  D. URBAN, A. ATTOUCHE,Y. BOURDREUX, P. LESOT, J.-M. BEAU  "ESOC 19th", Lisbonne, Juillet (2015). |
| **102.**  **(C.A.)** | Anisotropic NAD 2D-NMR of Biomarkers: from the Site-specific Isotopic Fractionation (D/H) to the Understanding of Biosynthetic Pathway  P. LESOT, P. BERDAGUE, J. JACOB, V.-J. TERWILLIGER, C. LE MILBEAU  "EUROMAR 2015”, Prague, Juillet (2015). |
| **103.**  **(C.O.)** | **Miliacin From Broomcorn Millet – A Fossil Molecule of Multiple Interests for Archaeologists and Paleoenvironmentalists**  J. JACOB, A. SIMONNEAU, N. BOSSARD, C. LE MILBEAU, M.E. LAVRIEUX, G. MOTUZAITE-MATUCEVICIUTE, V.-J. TERWILLIGER, P. LESOT, B. POISSONNIER, Y. BILLAUD  "ORIMIL Conference", Aix-en-Provence, Novembre (2015). |
| **104.**  **(C.A.)** | Analysis of Axially Chiral Biaryls Compounds by Multinuclear NMR Spectroscopy in Chiral Liquid Crystals  P. BERDAGUE, J. HERBERT-PUCHETA, V. JHA, A. PANOSSIAN, F. LEROUX, P. LESOT  “JCO 2016”, Palaiseau, Septembre (2016). |
| **105.**  **(C.O.)** | Determination of the Molecular (D/H)Isotopic Profile by Anisotropic NAD 2D-NMR: Exploiting the Analytical Wealth of Oriented Solvents!  P. LESOT, P. BERDAGUÉ, J. JACOB  "ISI 2016", Nantes, Octobre (2016). |
| **106.**  **(C.O.)** | **Conditions environnementales, Biosynthèses, Diagénèses: Contribution Analytique de la RMN du 2H en milieu anisotrope**  P. BERDAGUE, J. JACOB, C. LE MILBEAU, V.-J. TERWILLIGER,P. LESOT  "Journées Scientifiques Climat et Impacts", Orsay, Novembre (2016). |
| **107.**  **(C.O.)** | An Integrated Protocol for Natural Abundance Deuterium NMR in Chiral oriented phase  P. NAVARRO-VAZQUEZ, P. BERDAGUE, P. LESOT  “Chiroptics 2017”, Munich, Avril (2017). |
| **108.**  **(C.O.)** | **Hyphenated Computational Protocol for Analyzing 2H-RQC from Natural Abundance 2H NMR in (Chiral) Oriented Solvents**  P. NAVARRO-VAZQUEZ, P. BERDAGUE, P. LESOT  “SMASH 2017”, Italy, Septembre (2017). |
| **109.**  **(C.A.)** | Natural Abundance Deuterium NMR in Anisotropic Matrices: from the Study of Isotopic Profile to the Analysis of 2H-RQCs by an Integrated Computational Protocol  **P. LESOT,** P. BERDAGUE, T. TEXIER-BONNIOT, P. NAVARRO-VAZQUEZ,  “39th FGMR Annual Discussion Meeting”, Bayreuth, Septembre (**2017**). |
| **110.**  **(C.A.)** | **Study of Vanillin by anisotropic Deuterium 2D-NMR: Contribution of polypeptide Liquid Crystals to Isotope Analysis**  T. TEXIER-BONNIOT, P. BERDAGUE, R. ROBINS, G. REMAUD, P. LESOT\*  “Journée des Doctorants de l’ICMMO”, Orsay, Septembre (**2017**). |
| **111.**  **(C.O.)** | **Contribution of Deuterium NMR Spectroscopy in Liquid Crystals to the Isotopic Analysis: the Interesting case of Vanillin**  T. TEXIER-BONNIOT, P. BERDAGUE, R. ROBINS, G. REMAUD, P. LESOT\*  “SFIS, Journée Jeunes Chercheurs”, Nantes, Octobre (**2017**). |
| **112.**  **(C.A.)** | **Selective Suppression of the Quadrupolar Doublets of Solvent in 2H 2D-NMR Experiments in Lyotropic Liquid Crystals**  T. TEXIER-BONNIOT, P. BERDAGUE, B. LUY, P. LESOT  “Journée de l’école doctorale de Paris-Saclay”, Orsay, Novembre (**2017**). |
| **113.**  **(C.O.)** | **RMN 2H, Ordre orientationnel, Stéréochimie et Isotopie!**  **P. LESOT**  “Journées Scientifiques de l’ICMMO, 2017”, Orsay, Novembre (**2017**) |
| **114.**  **(C.O.)** | Recent Achievements of the Anisotropic NAD 2D-NMR: from the Isotopic Analysis to Structural Studies  **P. LESOT**, T. TEXIER- BONNIOT, P. BERDAGUE, A. NAVARRO-VAZQUEZ  "Journée RMN GBP", Orléans, Mars (**2018**). |
| **115.**  **(C.A.)** | **Methodological Developments of Natural Abundance 2H 2D-NMR of Organic Molecules in Oriented Solvents**  T. TEXIER-BONNIOT, P. BERDAGUE, P. LESOT\*  “16ième RCO, 2018”, Paris Avril (2018). |
| **116.**  **(C.O.)** | **Tritium and Deuterium Labelling of Bioactive Molecules Catalyzed By Ruthenium Nanoparticles**  V. PFEIFER, S. FEUILLASTRE, S. GARCIA-ARGOTE, E. MARCON,AD. BOUZOUITA, P. LESOT, B. CHAUDRET, G. PIETERS  “13th ISS (Synthesis and applications of isotope and isotopically labeled compounds)”, Prague, Juin (**2018**). |
| **117.**  **(C.A.)** | **Determination of the Biotechnological or Natural Origin of Vanillin by Deuterium 2D-NMR in Lyotropic Liquid Crystals: a new Analytical Tool for Fighting Against Counterfeigting?**  T. TEXIER-BONNIOT, P. BERDAGUE, R. ROBINS, G. REMAUD, P. LESOT\*  “Euromar 2017”, Nantes, Juillet (**2018**). |
| **118.**  **(C.O.)** | **Revisiting the Isotope Analysis of Vanillin by Anisotropic 2H NMR: an Original Tools against the Counterfeighting of Food Aroma?**  T. TEXIER-BONNIOT, P. BERDAGUE, R. ROBINS, G. REMAUD, **P. LESOT**  “MRFOOD 2018”, Rennes Septembre (**2018**). |

**IMPACT SCIENTIFIQUE DES PUBLICATIONS**

***●*** **Articles retenus comme « Hot ou VIP articles » par un journal : 4**

**- Integrated Computational Protocol for Analyzing Quadrupolar Splittings from Natural Abundance Deuterium NMR Spectra in (Chiral) Oriented Media**

A. NAVARRO-VAZQUEZ, P. BERDAGUE, P. LESOT\*, ***ChemPhysChem.,* 18***,* 1252-1266*,* **(2017)**.

**- Probing the Limits of NMR and VCD Spectroscopy in the Stereochemical Assignment of Chiral 2H6-Neopentane**

A. MASARWA, L. OSKAR,A. LOEWENSTEIN,H. P. REISENAUER, D. GERBIG,P. LESOT**\***, R. SCHREINER**\***, I. MAREK**\*, *Angew. Chem. Int. Ed****.*, 54, 13106-13109, (**2015**).

**- Study of Molecular Rotational Isomerism using Deuterium NMR in Chiral Oriented Solvents**

P. LESOT\*, O. LAFON, H.B. KAGAN, P. FAN, ***Chem. Commun****.***, 4,** 389-391**, (2006)**.

**-** **The Orientational Order and Conformational Distributions of the Two Enantiomers in a Racemic Mixture of a Chiral, Flexible Molecule Dissolved in a Chiral Nematic Liquid Crystalline Solvent**

J.W. EMSLEY**\***, P. LESOT, D. MERLET, ***Phys. Chem. Chem****.* ***Phys****.*, **6**, 522-530,(**2004**).

Commentaire de l’Editeur: «During the month of February, 2004, this article was one of the three highest-accessed PCCP papers»

***●* Chapitre de livres répertoriant les travaux réalisés de 1992 à 2017 : 6**

- « **Differentiation of Enantiomers II** » Chap. I, T. Wenzel, Springer, (**2013**). Ed. V. Schurig. Nombre de références citées: 19

- « **Multidimentional NMR Methods for the Solution State**» A. Kumar, N Suryaprakash, John Wiley and Sons Ltd., (**2010**). Nombre de références citées: 11

- « **Discrimination of Chiral Compounds using NMR Spectroscopy**» T. J. Wenzel, Wiley Interscience, (**2007**). Nombre de références citées: 29

- **Encyclopedia of Analytical Science**, 2nd edition, Chap : **NMR Spectroscopy –Applicable Elements,**» T. J. Wenzel, Elsevier, pp. 245-250, (**2005**). Nombre de références citées: 2

- « **NMR of Ordered Liquids** », Chap. III et Chap. VII, Kluwer, Academic Publisher, (**2003**).

Eds by E.E. Burnell et C.A. de Lange. Nombre de références citées: 4

- « **Solid-State NMR Spectroscopy**», Chap. XI, Blackwell, (**2002**).

Nombre de références citées: 2

***●* Citation dans SCITOPICS : 1**

A formidable advance of recent times in NMR has been the use of chiral liquid crystals - stemming from Snyder’s pioneering work - for determination of the ee, or even for absolute identification of the enantiomorphs. Dramatic differences in favourable cases have even enabled the successful analyses of (fluoro)hydrocarbon enantiomers and enantiomers chiral by virtue of isotopic substitution. Success lies in the strong response by various order-dependent parameters to the small differences between the enantiomers in the chiral environment based on their orientation to the field; though differential orientation of enantiomers by other, field-independent media is also possible.

**Dr Karel Klika**, University of Turku.

*http://www.scitopics.com/index.jspEnantiodifferentiation by NMR, modelling, and other applications*

***●*** **Articles ayant fait l’objet d’une présentation en couverture d’un journal : 10**

- A. NAVARRO-VAZQUEZ, P. BERDAGUE, P. LESOT\**,* ***ChemPhysChem****.,* 18*, 1252-1266,* (**2017**).

- E. AUGUSTE, E. LUCAS, L. POIGNEZ, D. RAMAURTHYG, H. VANEECKHOUTTE, P. LESOT\* ***Spectra Analyse***, 315, 32-62,**(2017)**.

- K. KAZMIERCZUK, O. LAFON, P. LESOT\*, ***Analyst***,139, 2702-2713,(**2014**).

- Z. SERHAN, I. BILLAULT, A. BORGOGNO, A. FERRARINI\*, P. LESOT\*, *Chem. Eur. J.,* 18, 117-126, (2012).

- J. COURTIEU\*, N.GIRAUD, O. LAFON, P.LESOT, C.LORTHIOIR, J.M.NUZILLARD, *Chem. Eur. J.,* 18, 117-126, (2012).

- O. LAFON\*, B. HU, J.-P. AMOUREUX, P. LESOT\*, ***Chem. Eur. J.***, 17, 6716-6724*,* (**2011**).

- P. LESOT\*, ***Spectra Analyse***, 260, 16-22,(**2008**).

- P. LESOT\*, ***Spectra Analyse****,* 242, 37-42,(**2005**).

- O. LAFON, P. BERDAGUÉ, P. LESOT\*, ***Phys. Chem. Chem. Phys****.*, 6, 1080-1084, (**2004**).

- M. SARFATI, P. LESOT\*, D. MERLET, J. COURTIEU\*, ***Chem. Commun.***, 2069-2081,(**2000**).

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **2017** | **2017** | **2014** | **2012** | **2012** |
| **2011** | **2008** | **2005** | **2003** | **2000** |

***●*** **Principales revues (Journaux) répertoriant les travaux réalisés de 1992 à 2018 : 41**

- *Angew. Chem. Int. Ed*, **57**, 1758-84, **(2018)** *-323 réfs.-*

- *J. of Pharm. and Biomed. Anal.*, 147, 323-340,**(2018)**  *-130 réfs.-*

- *Molecule.*, **22**, 247-268, **(2017)**  *- 91 réfs.-*

- *Progress NMR Spectroscopy*, **90-91**, 92-122, **(2015)** *-290 réfs.-*

- *J. of Mol. Structure*, **1069**, 23-49, **(2014)** *-458 réfs.-*

- *J. of Mol. Structure*, **1069**, 3-22, **(2014)** *-356 réfs.-*

-*Nuclear Magnetic Resonance*, **42**, 535-572, **(2013**) *-293 réfs.-*

- *Topic in Current Chemisty 341, Diff. of Enant. II*, Chap. 1,1-68, **(2013)** *-248 réfs.-*

*- Annual Rev. of Earth & Planetary Sciences,* **40**, 221-249,**(2012)** *-128 réfs.-*

- *Encyclopedia of Analytical Chemistry, online*, 1-35, **(2012)**   *-245 réfs.-*

- *Nuclear Magnetic Resonance*, **40**, 432-471 **(2011)**  *-170 réfs.-*

- *Pure & Applied Chemistry*, **83**, 67-94, **(2011)** *-230 réfs.-*

*- Chirality*, **23**, 190-214, **(2011)** *-251 réfs.-*

- *Progress in NMR Spectroscopy*, **59**, 1-63, **(2011)** *-462 réfs.-*

*- J. of the Indian Institute of Science,* **90(1)**119-131**(2010)***-105 réfs.-*

- *Trends in Analytical Chemistry,* **28**, 483-493, **(2009)** *- 68 réfs.-*

- *Chirality*, **21**, 51-68, **(2009)** *-120 réfs.-*

*- Specialist Periodical Reports*: *NMR*, **37**, 357-388, **(2008)** *-356 réfs.-*

- *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 14840-14852, **(2008)** -*144 réfs.-*

- *Eur. J. Org. Chem.*, 5673-5685, **(2008)** *-102 réfs.-*

*- Chem. Rev.,* **108**, 1943-1981, **(2008** *-108 réfs.-*

- *Annual Reports on NMR Spectrosc.*, **63**, 23-48, **(2008)** *-193 réfs.-*

- *Concepts In Magnetic Resonance*, **32A**, 201-218, **(2008)** *-73 réfs.-*

*- Concepts In Magnetic Resonance*, **32A**, 168-182, **(2008)** *-130 réfs.-*

*- Annual Report on NMR Spectrosc.,* **24***,* 283-293,**(2007)** *-34 réfs.-*

*- Chem. Soc. Rev.,* **36**, 2033-2045, **(2007)** *-98 réfs.-*

*- Current Organic Chemistry*, **11**, 61-106, **(2007)** *-188 réfs.-*

*- Chirality,* **19**, 658-682, **(2007)** *-396 réfs.-*

*- Angew. Chem. Int. Ed.,* **46**, 7744-7765, **(2007)** *-275 réfs.-*

*- Progress in NMR Spectroscopy*, **48**, 85-107, **(2006)** *-165 réfs.-*

*- Current Pharmaceutical Design*, **12**, 4023-4045, **(2006)** *-162 réfs.-*

*- Magn. Reson. Chem.* **43***,* 53-64,**(2005)** *-102 réfs.-*

*- Tetrahedron,* **61***,* 10377-10441,**(2005)** *-557 réfs.-*

*- Magn. Reson. Chem.,* **42***,* 919-930,**(2004)** *-211 réfs.-*

*- Acc. Chem. Research,* **53***,* 175-181,**(2004)** *-376 réfs.-*

*- Chirality,* **15**, 256-270, **(2003)** *-137 réfs.-*

*- Progress in NMR Spectroscopy*, **41**, 171-186, **(2002)** *-130 réfs.-*

*- Enantiomer*, **5**, 457-471, **(2001)** *-140 réfs.-*

*- Indian J. of Chem. B,* **39**, *646-673*, **(2000)**  *-88 réfs.-*

*- Current Organic Chemistry*, **4**, 85-103, **(2000)** *-136 réfs.-*

*- Concepts in Magnetic Resonance,* **10**, 167, **(1998)**  *-83 réfs.-*

***●*** **Examples de citations dans la litérature**

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| …. | ..... |
|  |  |
| ***Multidimentional NMR Methods for the Solution State***, Chapter 30 pg. 402-432      ….    …… |  |
| **NMR Spectroscopy in Liquid Crystalline and Ordered Phases**  *Encyclopedia of Analytical Chemistry*, Online,1-35, (2012)  DOI: 10.1002/9780470027318.a9297  With the availability of high-field supercons and cryoprobes in NMR instrumentations, natural abundant DNMR has become a practical means to study small and larger organic molecules.*(*239*)*  Studies of small organic molecules dissolved in a weakly ordered medium, such as homopolypeptide chiral lyotropic LCs of poly-γ-benzyl-L-glutamate (PBLG) and chloroform (CHCl3), have shown to give enantiorecognition and their RDCs and/or quadrupolar splittings can solve numerous sterochemical issues.*(*240*,*241*)* |
| **Enantiodifferentiating Properties of the Alignment Media PELG**  **andPBLG–AComparison** DOI: 10.1002/ejoc  Eur. J. Org. Chem. 2016, 1324–1329 | **The new face of isotopic NMR at natural abundance**  Magn. Reson. Chem. **2017**, 55, 77–90 ; DOI 10.1002/mrc.4548 |
|  | |

**BILAN DE LA PRODUCTION SCIENTIFIQUE**

***●*** **Bilan quantitatif de la production scientifique (5 périodes) :**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Type de production**  (au 01/ 09/ 2018) | **Périodes de référence** | | | | |
|  | **2014-18**  (Vague 4 ans) | **1992-18**  (Total) | **2008-18**  (DR) | **1998-07**  (CR) | **1997-92**  (Thèse,  P.-D., ATER) |
| **Production écrite totale c** | **25** | **127** | **66** | **53** | **8** |
| **Chapitres de livre** | **5** | **10** | **8** | **2** | **0** |
| *Livres scientifiques (livre, encyclopédie ….)* | 4 | 8 | 6 | 2 | 0 |
| *Autre (Bilan & prospective)* | 1 | 2 | 2 | 0 | 0 |
| **Articles dans des journaux de rang A****(ACL)a** | **14** | **103** | **48** | **47** | **8** |
| *Communication (short paper)* | 3 | 18 | 9 | 9 | 0 |
| *Article (research paper / review)* | 9 | 83 | 37 | 38 | 8 |
| *Divers (cover profile, critique de Livre)* | 2 | 2 | 2 | 0 | 0 |
| **Articles dans des journaux de rang B** | **3** | **11** | **7** | **4** | **0** |
| *Article de (semi)-vulgarisation scientifique (ACL)* | 2 | 4 | 4 | 1 | 0 |
| *Article « à visée grand-public » (SCL)***b** | 0 | 3 | 0 | 3 | 0 |
| *Divers (Chronique littéraire, Reportage scientifique)* | 1 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| **Proceedings / Articles conférence** | **1** | **3** | **3** | **0** | **0** |
| **Nb. total d’articles en visibilité** | **5** | **24** | **17** | **7** | **0** |
| *Couverture du journal* | 2 | 10 | 6 | 4 | 0 |
| *Sélection de l’Editeur (VIP/ Hot papers)* | 1 | 6 | 4 | 2 | 0 |
| *Reprise médiatique (Extérieur au journal)* | 3 | 8 | 7 | 1 | 0 |
| **Nb. total de présentations invitées** | **13** | **56** | **39** | **17** | **0** |
| *Plénière/ conférence/ keynote (Internationale)* | 2 | 19 | 16 | 3 | 0 |
| *Plénière/ conférence/ keynote (Nationale)* | 6 | 14 | 10 | 4 | 0 |
| *Séminaire universitaire (à l’étranger)* | 3 | 11 | 8 | 3 | 0 |
| *Séminaire universitaire (en France)* | 2 | 12 | 5 | 7 | 0 |
| **Nb. total de communicationsc** | **21 [10]** | **118 [40]** | **64 [19]** | **46 [17]** | **8 [4]** |
| *Oral sur sélection* (*en France & à l’étranger*) | 13 | 62 [19] | 37 | 21 | 4 |
| *Affiche*  (*en France & à l’étranger*) | 8 | 56 [21] | 27 | 25 | 4 |

*aACL: Avec comité de lecture, value en accord avec ISI Web of Science (articles, revues & proceedings). bSCL: Sans comité de lecture.  cX [Y]: Nbre de présentation (nbre de fois comme présentateur ou orateur); N.B.: La priorité est donnée aux étudiants depuis 1997.*

***●*** **Liste des journaux scientifiques (1992-2018) : 38**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Journaux** | **Pays / Publisher** | **Nb. d’art.** | | | | **CL** | | | **IF\* (2017)** | | |
| **IF: > 10 (nb = 11)** | | | | | | | |
| ***Chem. Soc. Rev.*** | UK / RCS | **1** | | | oui | | | **40.180** | |
| ***J. Am. Chem. Soc.*** | USA / ACS | **8** | | | oui | | | **14.357** | |
| ***Angew. Chem. Int. Ed.*** | GER / Wiley | **2** | | | oui | | | **12.102** | |
| **IF : 6 – 10 (nb = 1)** | | | | | | | |
| ***- Prog. NMR Spectrosc.*** | Elsevier | **1** | | | oui | | | **6.011** | | |
| **IF : 5 – 6 (nb = 23)** | | | | | | | | | | |
| ***- J. Mater. Chem.*** | UK / RCS | **1** | | | oui | | | **6.626\*\* (****JMC A,B,C)** | | |
| ***- Organic Letters*** | USA / ACS | **1** | | | oui | | | **6.492** | | |
| ***- Chem. Commun.*** | UK / RCS | **10** | | | oui | | | **6.290** | | |
| ***- Anal. Chem.*** | USA / ACS | **4** | | | oui | | | **6.042** | | |
| ***- Chem. Eur. J*** | GER / Wiley | **7** | | | oui | | | **5.160** | | |
| **IF: 4 – 5 (nb = 13)** | | | | | | | | | | |
| ***- J. Org. Chem.*** | USA / ACS | **4** | | | oui | | | **4.805** | | |
| ***- Geo. Cosmo. Acta.*** | USA / Elsevier | **1** | | | oui | | | **4.690** | | |
| ***- Organometallics*** | USA / ACS | **2** | | | oui | | | **4.051** | | |
| ***- J. Biol. Chem.*** | USA / ACS | **1** | | | oui | | | **4.010** | | |
| ***- PhysChemChemPhys.*** | UK / Owner | **5** | | | oui | | | **3.906** | | |
| **IF: 3 – 4 (nb = 10)** | | | | | | | | | | |
| ***- Analyst*** | UK / RSC | **1** | | | oui | | | **3.864** | | |
| ***- Anal. Bioanal. Chem.*** | Springer | **3** | | | oui | | | **3.307** | | |
| ***- New J. Chem.*** | UK / RSC | **1** | | | oui | | | **3.201** | | |
| ***- J. Phys. Chem. B*** | USA / ACS | **3** | | | oui | | | **3.146** | | |
| ***- J. Chem. Phys.*** | USA / AIP | **2** | | | oui | | | **2.843** | | |
| **IF: 2 – 3 (nb = 33)** | | | | | | | | | | |
| ***- ChemPhysChem.*** | GER / Wiley | **2** | | | oui | | | **2.947** | | |
| ***- RSC Adv.*** | UK / RSC | **1** | | | oui | | | **2.936** | | |
| ***- J. Phys. Chem. A*** | USA / ACS | **5** | | | oui | | | **2.836** | | |
| ***- Liquid Crystals*** | UK / T. & F. | **4** | | | oui | | | **2.636** | | |
| ***- Eur. J. Inorg. Chem.*** | GER / Wiley | **1** | | | oui | | | **2.507** | | |
| ***- J. Magn. Reson.*** | Elsevier | **6** | | | oui | | | **2.586** | | |
| ***- Beilstein J. Org. Chem.*** | UK /Beilstein | **1** | | | oui | | | **2.330** | | |
| ***- Phys. Rev. E.*** | Elsevier | **1** | | | oui | | | **2.284** | | |
| ***- Tet: Asymmetry*** | Elsevier | **10** | | | oui | | | **2.126** | | |
| ***- Chem. Phys. Lett.*** | Elsevier | **2** | | | oui | | | **1.686** | | |
| **IF: 1 – 2 (nb = 8)** |  |  | | |  | | |  | | |
| ***- J. Pept. Science.*** | EPS-Wiley | **1** | | | oui | | | **1.969** | | |
| ***- Flag. Flav. Journal*** | UK / Wiley | **1** | | | oui | | | **1.950** | | |
| ***- Faraday Trans. II*** | UK / RCS | **1** | | | oui | | | ***1.848\*\* (*** ***NJC)*** | | |
| ***- Magn. Reson. Chem.*** | UK / Wiley | **5** | | | oui | | | **1.776** | | |
| **IF: < 1 (nb = 10)** | | | | | | | | | | |
| ***- Enantiomer*** | UK / T. & F. | | **1** | oui | | | | | ***0.955\*\* (Disparu)*** | | |
| ***- J. Chim. Phys.*** | Elsevier | | **2** | oui | | | | | ***0.451\*\* (*** ***PCCP)*** | | |
| ***- Actualité Chimique*** | F / SCF | **1** | | | oui | | **0.086\*\*** | | | |
| ***- Spectra Analyse*** | F / Eds. PCI | **5** | | | oui | | **-** | | | |
| ***- Mol2net 2015*** | Suisse / MDPI | **1** | | | oui | | **-** | | | |

\* Source : <https://www.scijournal.org/chemistry-journal-impact-factor-list.shtml/>.; \*\* Dernier IF connu.

***DESCRIPTION DES TRAVAUX DE RECHERCHE***

Ci-dessous sont présentés les principaux travaux de recherche réalisés depuis 1992, en suivant le plan de la fiche résumé. Compte tenu de la diversité des résultats, le plus souvent obtenus de front et de manière concomittante, le choix de les regrouper sous huit rubriques -thèmes récurrents ou axes spécifiques- a été adopté. Pour chaque thème, les faits marquants et l’enchaînement chronologique des avancées sont décrits, sans pour autant vouloir être un résumé exhaustif de l’ensemble des résultats publiés. Les références visibles dans le texte correspondent aux articles listés dans la section « Production écrite », (pages 19-32). Les résultats les plus significatifs sont illustrés par des Figures.

***●*** **Description thématique des travaux (1992-2018) :**

**I-Préambule.**

Initiés pendant ma Thèse (1992-95) et deux années post-doctorales (**1995-97**) dont un stage à l’étranger (Angleterre) et un ATER (France), les travaux de recherche depuis mon entrée comme chercheur au CNRS (CR-2 (**1997-00**), CR1 (**2000-07**) puis DR-2 (**2007-18**)) au sein de l’ICMMO, UMR 8182 (Equipe « RMN en milieu orienté ») portent majoritairement sur le développement de la RMN dite « **anisotrope** » et la promotion de cette approche analytique originale auprès de la communauté des chimistes. En exploitant la **richesse analytique** des **solvants orientés** tels que les cristaux liquides chiraux **(CLC**), l’idée directrice est de concevoir et d’utiliser de nouveaux outils **RMN** pour analyser de « petites » molécules en chimie organique, et répondre ainsi aux problématiques rencontrées par les chimistes. En effet, et contrairement à la RMN « liquide », la RMN en milieu orienté permet d’accéder à des **interactions RMN anisotropes** résiduelles spécifiques (anisotropie de déplacement chimique (**RCSA**), couplages dipolaires (**RDC**) et couplages quadrupolaires (**RQC**)) qui sont en moyenne nulles dans un environement isotrope, et par conséquent inaccessibles directement sur les spectres classiques.

Compte tenu des objectifs, la majorité des travaux réalisés impliquent des **activités synergiques** en chimie organique (analyse spectrale, stéréochimie, élucidation structurale), en chimie des matériaux (structuration) ou en bio/géochimie (fractionnement isotopique) dont le fil conducteur est la RMN (méthodologie et applications dédiées). Ils sont souvent de nature interdisciplinaire et menés en **collaboration** avec des **groupes de recherche internationaux** reconnus (au Weizmann Institute et au Technion (Israel), au IISC (Inde), à l’Université de Southampton (UK), de Oulu (Finlande), de Padoue (Italie), de Varsovie (Pologne), de Giessen (Allemagne), de Récife (Brésil), …, mais aussi des l**aboratoires nationaux,** comme le ENSR (Rennes), LLB (CEA de Saclay), le CEISAM (Nantes), l’ISTO (Orléans), l’ENS (Paris), l’ICSN (Gif-sur-Yvette), le LCM (Univ. de Strasbourg), …, et finalement au sein même de l’**ICMMO** (LCM, LSB).

**II-Formation à la recherche** (10 articles)**.**

Au cours de ma Thèse, soutenue en **1995**, sous la direction du **Pr. J. Courtieu** à l’Université de Paris-Sud XI, trois résultats majeurs ont été obtenus et publiés. D’une part, nous avons abordé la **simplification de spectres 1H** anisotropes complexes dans les cristaux liquides nématiques thermotrope (systèmes fortement orientant) en combinant la RMN 2D de corrélation homonucléaire (FF-16 COSY) et réduction de l’amplitude des interactions, RDC(1H-1H) et RCSA(1H), par la manipulation de **l’Hamiltonien de spin moyen** (**cf. Fig. 1a**) [**1,2**]. D’autre part, en utilisant des **phases polypeptidiques** lyotropes chirales (peu orientantes), nous avons démontré la possibilité de discriminer les signaux 13C d’énantiomères sur la base d’une différence de RCSA(13C) et RDC(13C-1H) par RMN 1D 13C couplé et découplé des protons (*article cité 55 fois*) [**3**]. Une revue élargissant les possibilités de ces outils a ensuite été publiée au JACS en 1997 (article cité 89 fois) [**6**]. Enfin, a été décrit la première quantification de la différentiation orientationnelle d’énantiomères de petites molécules chirales en déterminant les **angles d’Euler** (,,) entre les **axes propres d’orientations** des deux isomères ((Sx’, Sy’, Sz’)*S* et (Sx’, Sy’, Sz’)*R*). Ce travail pionnier dans le domaine à l’époque, publié en 1995, a été repris par de nombreux groupes par la suite [**4**].

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| (a) | (b) |  |
| **Figure 1. (a)** Carte 2D FF-16 COSY 1H-1H montrant lasimplification du spectre du 2-cyanofuran (système ABC) en dimension *F*1 dans une phase cholestérique [**2**]. **(b)** Spectre 2D HETCOR 13C-1H de l’acide (±)-2-bromoacétique dans PBLG [**5**]. | | |

L’expertise acquise durant ces trois années de Thèse (**1996-97**) a été complétée par une année postdoctorale très fructeuse à l’Université de Southampton sous la direction du **Pr. J.W. Emsley**, un des pionniers (avec le **Pr. A Loewenstein** (Technion) ou le **Pr.** **Z. Luz** du Weizmann) de la RMN dite « anisotrope ». En particulier, la mise au point et l’application d’une version hétéronucléaire de la séquence 2D FF-16 COSY [**12**], mais surtout le développment et l’utilisation d’expériences 2D **hétéronucléaires 13C-1H** pour simplifier l’analyse en milieu anisotrope chiral, point de départ de développements méthodologiques RMN variés (**cf. Fig. 1a**) [**5**]. Complétant les premiers travaux dans le domaine, une seconde étude sur la quantification de l’ordre différentiel énantiomèrique, le cas du (±)-3-butyn-2-ol (**cf. Fig. 2a**), a été réalisée en prenant en compte les **corrections vibrationnelles** (collaboration avec l’Université d’Oulu) (*article cité 69 fois*) [**7**]. D’un point de vue plus physico-chimique, nous avons également étudié le comportement hydrodynamique de phases lyotropes polypeptidiques (PBLG) sous **contraintes mécaniques rotationnelles** dans le champ magnétique B0 (**cf. Fig. 2b**). Les résultats nous ont permis de mieux comprendre la physique des phases lyotropes par rapport aux systèmes thermotropes nématiques en mettant notamment en évidence une seconde vitesse critique de rotation (c) pour laquelle le **directeur n** de la phase ne s’aligne plus sur l’axe de rotation de l’échantillon [**13**]. Cet effet a été confirmé en 2005 par un autre groupe

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 2. (a)** Représentation des axes principaux d’orientation du 3-butyn-2-ol permettant la quantification de la différenciation énantiomérique (*R*/*S*) [**7**]. **(b)** Exemple de variation temporelle du directeur de la phase polypeptide (signal 2H du chloroforme-d1) après un basculement de 90° de l’échantilon [**13**]. | |

De retour en France, j’ai réalisé un ½-ATER (**1996-97**) à l‘Université de Paris-Sud, dont la partie en recherche a porté, d’une part, sur l’analyse et la description qualitative de la discrimination énantiotopique [**10**], mais aussi les premières mises au point des expériences 1D deutérium en abondance naturelle (DAN) dans les phases polypeptiques [**14**]. Ces deux axes pionniers ont été à l’origine des problématiques de recherche qui ont jalonnées mes activités au CNRS jusqu’à aujourd’hui, avec des applications analytiques variées et insoupsonnées à l’époque. Par ailleurs, en collaboration avec les chimistes du laboratoire, nous avons etudiés par RMN, les propriétes et le rôle des chaînes flexibles dans des systèmes mésogènes thermotropes [**8,11**].

**III-RMN multinucléaire dans les milieux chiraux polypeptide et ses diverses applications en pour la chimie asymétrique** (35 articles et 2 chapitres de livre)**.**

Dédié initialement à l’étude de la chiralité en synthèse asymétrique, nous avons montré que tous noyaux magnétiquement actifs (1H, 13C, 2H, 19F, 31P, 77Se, …) sont des **sondes nucléaires** potentielles exploitables pour discriminer spectralement des énantiomères ou des éléments énantiotopes dans les molécules prochirales si des cristaux liquides chiraux (CLC) lyotropes, notamment de type polypeptidique (PBLG, PELG, PCBLL) sont utilisés comme milieu énantiodiscriminants. Le concept de la RMN multinucléaire dans les CLCs a fait l’objet d’un « Feature Article » dans *Chem. Commun*. en 2000 (*article cité 167 fois*) [**24**].

Différents outils/expériences RMN 1D/2D (homo- et hétéronucléaires) ont été développés pour simplifier l’analyse des spectres anisotropes de ces différents noyaux (seul ou couplés) afin d’extraire l’information moléculaire recherchée par les chimistes (stéréochimie, excès énantiomériques [**3,5,6,15,16,18,37,80**], phénomène d’isomérismes et détérmination des énergies d’activation (barrières de rotation) [**52,56,59,86**], séparer des mélanges de composés prochiraux/chiraux de type « *méso/thréo*») [**22,58,105**]). A titre d’exemples, on pourra citer les premières expériences de simplification des spectres 1H et 13C par **refocalisation sélective** de couplages scalaires/dipolaires homonucléaires 1H-1H (Expérience 2D SERF) [**34**] et hétéronucléaires 13C-1H (Expérience 2D HETSERF) [**44**].

En collaboration avec différents chimistes de l’ICMMO (LCM, LSB) mais également d’autres Institutions/Universités françaises (ENSCR (UMR 6052), Paris VI (UMR 7611), ENSCP (UMR 7223), BIOCis (UMR 8076, …), nous avons pu explorer et illustrer les potentialités analytiques de ces outils innovants pour **déterminer la pureté énantiomérique** de divers composés chiraux et tester l’énantiosélectivité de nouvelles réactions asymétriques. On pourra, par exemple, citer les études portant

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 3.** Exemples de discrimination chirales par RMN 1D 13C-{1H} et 19F-{1H} permettant de quantifier les *ee* en série enrichie dans le cas de **(a)** dérivés acétyléniques fluorés propargyliques [**20**] et **(b)** de complexes de chrome chiraux [**51**]. | |

sur l'énantiosélectivité de diverses réactions chimiques : i) synthèse de**-lactones *,*-insaturées asymétriques [**18**] ; ii) réaction de déshydrofluorination asymétriques pour synthétiser des dérivés propargyliques fluorés chiraux (**cf. Fig. 3a**) [**20,54**] ; iii) cyclisation par le di-iodure de Samarium (SmI2) d’esters **,** insaturés chiraux iodés [**32**], iv) synthèse d’oxydes de phosphine et de boranes chiraux [**37**] ; v) synthèse de complexes chiraux de chrome et de manganèse cationiques tricarbonylé (6-Arene) (**cf. Fig. 3b**) [**51,80**] ; vi) étude des mécanismes mis en jeu lors de la résolution cinétique d’-chloro,**-cétoesters par hydrogénation asymmetrique à l’aide de complexes de ruthénium (Ru-DIFLUORPHOS) [**78**]. Plus récemment, une étude sur la discrimination RMN nD multinucléaire (13C, 31P, 2H) de composés biaryls chiraux a été réalisée en collaboration avec le LCM (UMR 7509) de l’Université de Strabourg [**112**]. La RMN 1D 13C-{1H} anisotrope a également été utilisée pour étudier des imines chirales synthétisées sous microondes, et notamment comprendre la réactivité de l’acrylate de tert-butyle [**114**].

Historiquement explorée au laboratoire dès 1989, la RMN 1D deutérium découplé des protons (2H-{1H}) sur des molécules ((pro)chirales) monodeutérées régiosélectivement dans des solvents orientés chiraux conduisent à l’observation de doublets quadrupolaires (DQ(2H)) différenciés pour une paire d’énantiomères ou d’éléments énantiotopes. L’utilisation des RQC(2H) (*I* = 1) s’est révélée être un outil extrêmment élégant et puissant pour mesurer des excès énantiomériques (*ee*) et donc contrôler la **stéréochimie des réactions** asymétriques [**53**], mais aussi pour analyser simplement des **processus intramoléculaires** **dynamiques** (dynamique conformationelle) mettant en jeu des molécules chirales ou des éléments énantiotopes dans le cas de composés prochiraux (**cf.** **Section VI**). Ce potentiel analytique a été décrit pour la première fois en étudiant le cas de la *cis-*décaline perdeutérée (d18) en fonction de la température en 2001 (**cf. Fig. 4a**) [**26**], ce qui nous a permis de determiner ensuite les tenseurs d’ordre orientationel de ses deux énantiomères [**71**].

Dans un autre contexte, nous avons étudié le comportement dynamique de composés prochiraux [**52**] puis chiraux [**56**] de type atropoisomères (famille des (méthylephényl)naphtylène mono- et dideutérés) pour lesquels la simulation des spectres 1D 2H a permis de déterminer les **vitesses d’échange** mais aussi les paramètres thermodynamiques d’**activation** associés (H, S,G(T)) (**cf. Fig. 4b**). La simplicité des spectres 1D 2H-{1H} est un avantage significatif pour étudier et comprendre le comportement dynamique et conformationel de molécules chirales complexes comme les cyclotrivératrylène (précurseurs des cryptophanes) [**31**], les tridioxyéthylènetriphenylènes [**67**] ou les hexathia-métacyclophanes [**86**].

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 4. (a)** Spectres 1D 2H de la *cis*-décaline à BT et HT dans PBLG [**26**]. **(b)** RMN dynamique 2H du 1-(2’,6’-dideutero-4’-méthylphényl)naphtalène dans PBLG *vs* la température, permettant observer la température de coalescence (245 K) [**52**]. | |

Au delà des articles de recherche classiques, différents articles de semi-vulgarisation ont été publiés dans différents média (Journal de l’Université, du Département de Chimie du CNRS, de la Société Bruker, Spectra Analyse, …) afin de promouvoir les possibilités analytiques de la RMN anisotrope, auprès d’un public scientifique étendu [**25,33,35,48,63,92,93,108**].

**IV-Exploiter la RMN multidimensionnelle (nD) deutérium en abondance naturelle (DAN)** (34 articles et 6 Chapitres de livre)**.**

Parmi les noyaux magnétiquement actifs de la classification périodique, le deutérium (second isotope de l’hydrogène) joue un rôle particulier, compte tenu de sa **nature quadrupolaire** (*I* = 1) et de son **abondance naturelle** (1,5 × 10-2 %) qui le rend, *de facto*, unique en milieu orienté car spectralement détectables et présents dans tous les composés organiques par définition. La preuve de principe de la discrimination énantomérique par RMN DAN a été publiée dès 1998 (*article cité 65 fois*) [**14**], en utilisant un spectromètre RMN opérant à 5.8 T (250 MHz) (**cf. Fig. 5a**), débutant ainsi une aventure passionnante [**25,35**]. Un travail méthodologique important et innovant a ensuite été mené depuis 1997

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **(c)** | **(d)** |
| **Figure 5. (a)** Spectre 1D DAN historique (1998) du (±)-2-phénéthyl alcool enregistré à 5.8 T [**14**]. **(b)** Spectre 2D Q-COSY DAN du (±)-2-hept-2-3 diène(allène chiral) dans PBLG à 9.4 T [**36**]. **(c)** Spectre 3D DAN du (±)-3-heptyn-2-ol à 14.1 T **(**sonde cryogénique)[**66**]. **(d)** Premier spectre 2D heteronuclaire 2H-13C en abondance naturelle (exp. 2D *R*-NASDAC) de l’alcool benzylique obtenu à 21 T **(**sonde cryogénique)[**90**]. Tous les spectres DAN ont été enregistrés dans une phase PBLG. | |

autour de la **RMN nD** 2H pour exploiter toute la richesse analytique de ce noyau pour étudier des molécules poly- ou perdeutérées puis en abondance naturelle, l’objectif étant de répondre aux problèmatiques rencontrées par les chimistes. Dans une première étape, nous nous sommes intéréssés à la conception de séquences 2D d’impulsions homonucléaires 2H, non phasables initialement (expériences ***Q*-COSY**, ***Q*-résolue**, ****-résolue**,***Q*-DQD**) (**cf. Fig. 5b**) [**15,16**], puis phasables avec l’incorporation d’un « **Filtre gradient z**» juste avant l’acquisition du signal (expériences ***Q*-COSY-Fz**, ***Q*-résolue-Fz**) [**21,46**]. Le principe de ces expériencces (d’autocorrélation) a été étendu à la RMN 3D (expérience 3D **Q-DQD** exploiant la cohérence double quantum des noyaux 2H, par exemple) (**cf. Fig. 5c**) [**49,66**], débouchant ainsi à la classe d’expériences notée « **QUOSY** » (QUadrupole Ordered SpectroscopY). Afin de bénéficier d’une plus grande dispersion spectrale de l’information 2H et donc faciliter l’analyse des spectres DAN et l’attribution des DQ(2H)s, nous avons également mis au point et exploiter des expériences de type hétéronucléaires (13C-2H) dérivées de la séquence « **HETCOR** » (expérience 2D **CDCOM**) [**38,43**] sur des molécules enrichies en 2H, puis en abondance naturelle (expériences 2D **NASDAC** et ***R*-NASDAC**) [**90,93,105**]. Un exemple de spectre 2D NASDAC avec refocalisation des (2H) en dimension spectrale *F*1 est présenté sur la **Figure 5d**. La séquence a été conçue afin d’éliminer tous les isotopomères 12C-2H et 13C-1H, ce qui revient expérimentalement à **filtrer et détecter** 1 molécule (isotopomère 13C-2H) sur 600 000. De façon inattendu mais logique, la comparaison des **(13C) mesurés sur les isotopomères 13C-2H et 13C-1H nous a permis de quantifier directement **l’effet isotopique 2H** sur les **(13C) sans modifier isotopiquement le composé étudié. La preuve de concept de la détection des isotopomères 13C-2H en milieu isotrope et anisotrope a été publié dans AC en 2012 [**90**], et a fait l’objet d’un communiqué de presse CNRS (« **La vie des Labo** »).

L’intérêt de la RMN nD DAN réside dans la détection simultanée de tous les isotopomères monodeutérés sans enrichissement isotopique, mais cette approche est peu sensible. Compte tenu de l’intérêt de cette approche, le financement (multi-tutelle) d’un spectromètre de RMN (Avance II) de 600 MHz équipé d’une cryosonde 2H sélective a été octroyé en 2007, augmentant ainsi par un facteur 5-7 la sensibilité de nos expériences (comparée à un spectromètre de 9.4 T muni d’une sonde standard). Cette instrumentation a ouvert de nouveaux horizons en termes de potentiel analytique et d’applications de la RMN DAN. Plus récemment, nous avons montré la possibilité de gagner en sensibilité et résolution en utilisant le principe de l’échantillonage non uniforme (NUS) en dimension indirecte *t*1 des expériences 2D de type QUOSY, combiné avec une reconstruction des données par la méthode dite de « Covariance » (Cov) [**85**] et de « Compressed Sensing » (CST) pour des matrices spectrales bidimensionnelles symmétriques et non symétriques, respectivement [**92,103,109**].

En 2016, nous avons, en collaboration avec le CEISAM (**Univ. de Nantes**), mise au point les premières experiences 2D de type « **Ultrafast 2H**» dans les CLCs (notée **ADUF**) [**116**]. Compte tenu du principe d’acquisition (issu de l’imagerie), cette approche n’est pas encore utilisable pour une détection 2H en abondance naturelle exploitable, mais ces expériences offrent la possibilité de suivre des réactions chimiques de réactifs deutérés qui seraient réalisées dans les cristaux liquides (**cf. V**) [**98**].

Autour de la RMN 2D DAN, diverses applications ont été développées touchant de multiples domaines de la chimie. D’un point de vue analytique, nous avons montré le formidable potentiel de cet outil pour discriminer spectralement les énantiomères d’hydrocarbures chiraux, en particulier le (±)-3-methylhexane, composé totalement apolaire qui n’avait jamais été discriminé par RMN [**23**], puis étendu à toutes les familles d’hydrocarbures chiraux (rigides, flexibles, polaires, apolaires) avec ou sans centre stéréogène (**cf. Fig. 5b**) (*article cité 78 fois*) [**36**]. Dans un autre domaine, nous avons pu valoriser cette approche pour extraire les éclatements quadrupolaire 2H et analyser le comportement orientationel de molécules chirales et prochirales avec la possibilité de discriminer des directions énantiotopes qui sont, du point de vue de la RMN DAN, associées aux énantio-isotopomères monodeutérés de molécules prochirales (**cf. Fig. 6b**) (*article cité 59 fois*) [**28**].

En collaboration avec des chimistes organiciens de l’ICSN mais aussi de l’ICMMO, utilisant la synthèse asymétrique pour atteindre des cibles moléculaires énantiopures, cet outil a été exploité efficacement déterminer la pureté énantiomérique de synthons chiraux impliqués dans la synthèse totale de molécules bioactives complexes comme les macrolactines (dolastatine) [**29,57**] ou impliqués dans la synthèse d’analogues sulfolipidiques tetra-acylés utilisables contre la tuberculose (**cf. Fig 8c**) [**99**].

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **(a)** | **(b)** | **(c)** |
| **Figure 6.** Exemples d’énantiodiscriminations observées sur des cartes 2D QUOSY DAN (spectres 2D Q-COSY): **(a)** Doublets quadrupolaires DAN des méthyles du (*P*/*M*)-nonamethoxy-CTV [**28**]. **(b)** Signaux DAN du quadricyclane (symétrie *C*s) révélant la discrimination des sites énantiotopes [**59**]. **(c)** Doublets quadrupolaires DAN des groupes méthyles du (±)-*tert*-butyle 2-méthyle octadécanoate [**99**]. | | |

La détermination expérimentale de la **configuration absolue** (CA) des petits synthons chiraux mis en jeu dans la synthèse asymétrique est un défi continu pour les spectroscopistes RMN. Attribuer la configuration absolue (*R*/*S*) des signaux anisotrope 2H en série racémique est difficile et ne peut être réalisée par le calcul des paramètres d’ordre orientationel [**91**]. Dans ce contexte, nous avons proposé une approche empirique basée sur la similitude orientationelle d’analogues chiraux, en comparant l’amplitude des RQC(2H) mesurés sur le spectre 2D DAN d’un composé de CA inconnue avec ceux de composés chiraux analogues de CA connue (*article cité 39 fois*) [**60**]. Cette approche, quoique relativement académique, s’est relévée robuste (deux exemples étudiés). Le principe de « l’emprunte spectrale » est un concept important qui est relié à la problématique de la reconnaissance de forme dans les phénonèmes d’orientation et d’énantiodiscrimination. Une question importante associée à cette approche est la définition des critères permettant d'établir le degré d'homologie moléculaire (structure et/ou effets électroniques) entre deux composés, afin de choisir correctement les analytes de référence.

D’autres applications concernant, en autre, la mesure du **fractionnement isotopique** naturels intramoléculaires (2H/1H)i, la **lutte contre la contrefaçon**, et **l’élucidation structurale/configurationelle** seront présentées dans les **sections VII,** **VIII** et **IX**.

Au total, plus de 34 productions écrites (*avec un total de 640 citations*) dont 6 chapitres de livre [**70,73,101,118,119,120**]) se rapportant spécifiquement à cette thématique originale et ses applications dédiées ont été publiés depuis 1998. Reconnus à l’échelle internationale, ces travaux ont fait l’objet de nombreuses invitations (séminaires/conférences) et présentations orales sur sélection.

**V-Etude de nouveaux systèmes orientant chiraux, leurs applications, et compréhension des mécanismes d’énantiodifférentiation** (15 articles).

Proposer de nouvelles phases orientées chirales énantiodiscriminantes efficaces et couvrant un large spectre de composés est un enjeu incontournable permettant d’une part d’enrichirl’arsenal des CLCs utilisables (compatibles avec des composés organo/hydrosolubles) et développer les possibilités de la RMN orientée, et d’autre part corréler la structure moléculaire des CLC polymériques hélicoïdaux à leur potentiel énantiodiscriminant. Différents résultats ont été obtenus dans le domaine des polymères organosolubles. Nous avons ainsi reporté des 2001, l’utilisation de phases polypeptidiques, alternatives aux mésophases PBLG, et ayant des chaînes latérales de longueur et de nature chimique très différente comme le PELG (éthyl glutamate) ou le PCBLL (carbobenzyl lysine) [**27**]. Ce travail a été cité 79 fois. En 2007, nous avons montré qu’il était également possible de préparer des systèmes homogènes, orientants et énantiodisciminants à partir d’un mélange de deux polypeptides (PBLG et PCBLL). Ce type de système permet un contrôle des effets d’orientations et de discrimination en fonction de la proportion

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 7. (a)** Variation du spectre 2H-{1H} du l’alcool benzylique dideutéré dans un mélange de polypeptide *vs* le % PBLG [**62**]. **(b)** Suivi réactionel enzymatique (alanine racémase) *in situ* dans une mésophase d’ADN par RMN 1D 2H-{1H} [**98**]. | |

d’unités peptides (**cf. Fig. 7a**) [**62**]. A l’image des systèmes achiraux de type PBG ou PCBL obtenu par compensation des deux énantiomères [**22**], nous avons montré qu’un mélange de deux polypeptides de nature chimique différente et leurs énantiomères respectifs (L/D) conduisait également à un système achiral non discriminant [**117**].

En collaboration avec l’**IISC de Bangalore** (Inde), nous avons exploré et testé le potentiel analytique de polymère chiraux hélicoidaux à base de **polynucléotide**, en utilisant des fragments d’**ADN** (hélice contenant entre 100 - 300 paires de base) dans des solutions tampons aqueuses adaptées [**87**]. Les capacités d’énantiodiscrimination de ces phases cholestériques ont permis de discriminer une large série de **d’acide aminés** chiraux et prochiraux mono- ou polydeutérés par RMN 1D 2H sur la base d’une différence de RQC(2H). L’analyse des résultats nous a permis de mieux comprendre les phénomènes d’énantiodiscriminations mis en oeuvre dans ces systèmes hélicoïdaux particuliers.

Une application inattendue utilisant ces mésophases cholestériques a été publiée en 2013 en collaboration avec des chercheurs de l’**ENS** **Paris** [**98**]. Elle consiste à suivre *in situ* et en temps réel l'état d'avancement de l’interconversion de la L- et D-alanine-d3 par une enzyme spécifique (l'alanine racémase de Bacillus Stéarothermophilus) par RMN 1D 2H-{1H} dans ces phases ADN (**cf. Fig. 7b**). L’analyse de la variation des quantités d’énantiomères (par déconvolution des signaux) en fonction du taux d’avancement de la réaction a permis la détermination des **paramètres cinétiques** de l’enzyme (Kcat-L et Kcat-D) à l'aide du modèle « Michaelis-Menten ». L’intérêt de ce travail qui constitue un changement de paradygme dans le domaine de la biochimie a fait l’objet d’un comptre-rendu dans **« C&EN de l’ACS**» et « **Spectroscopy Now**».

En marge des systèmes lyotropes polymériques chiraux, nous avons montré que des systèmes micellaires classiques à base de surfactants anioniques de type amino-acide possédaient des propriétés énantiodiscriminantes [**42**].

Comprendre et rationaliser les phénomènes d’orientation et de discrimination associés aux **effets/paramètres électroniques** et **l’anisotropie de forme** moléculaire (phénomène de reconnaissance de forme moléculaire) dans différentes phases chirales est une étape incontournable pour prédire le comportement orientationnel des solutés en interaction avec une mésophase chirales lyotropes et prédire les effets de discrimination énantiomérique [**112**]. Ce travail fourni des données indispensables pour valider des modèles utilisables en dynamique moléculaire, seul solution pour une détermination « non-empirique » de la configuration absolue de petites molécules chirale [**60,91**]. Ces éléments de compréhension des phénomènes de reconnaissance de forme, par exemple, sont indispensables pour concevoir de nouveaux systèmes hélicoïdaux orientants dont les capacités d’énantiorésolution seraient optimales.

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 8.** Deux exemples de discrimination énantiotopique par RMN 2D 2H: **(a)** Cas du 1,2-diiodoferrocène prochiral de symétrie *C*s en moyenne (RMN DAN) [**68**]. **(b)** Cas de l’icosane octodeutérée (position aza) de symétrie *S*4 [**84**]. | |

**VI-Prochiralité, énantiotopie et discrimination spectrale** (11 articles)**.**

Concommitament à l’analyse de la chiralité, plusieurs projets et travaux ont été consacrés à l’analyse du concept de prochiralité moléculaire et d’énantiotopie, examinés du point de vue de la RMN en milieu orienté chiral, ainsi que leurs descriptions en termes ordre orientationel [**10,19,28**]. Nous avons ainsi montré théoriquement (à partir d’arguments issus de la théorie des groupes) l’influence de la chiralité des phases orientées sur le comportement orientationel (notamment, l’abaissement du groupe de symétrie pour des molécules rigides de symétrie ***C*s**, ***C2v***, ***D*2d** et ***S*4**), l’origine de la discrimination de leurs éléments énantiotopes et les conséquences spectrales associées en RMN dans les CLCs [**19,28**]. Par exemple, cinq et trois paramètres d’orientationnel (et non trois et deux comme dans une phase orientée achirale) sont nécessaires pour décrire correctement le comportement orientationnel de molécules de symétrie *C*s et *C*2v [**10,39**]. Pour ces quatre symétries, nous avons trouvé un ou plusieurs exemples expérimentaux simples (norbornène (*C*s), norbornenadiene (*C*2v), quadricyclane (*C*2v), acenapthene (*C*2v), ou plus complexe comme le ferrocènedihalogéné, (*C*s) (**cf. Fig. 8a**), le spiropentane (*D*2d), …), validant ainsi les prédictions théoriques. Trouver un exemple de molécule de symétrie *S*4 s’est révélée être beaucoup difficile, compte tenu de la rareté et la complexité de ce type de molécules. En 2011, le challenge a été relévé par l’étude d’un dérivé « icosane » (1,3,5,7-tetraazapentacyclo-[3.3.2.49,10.411,12]-icosane) (**cf. Fig. 8b**) [**84**]. Le cas de molécules flexibles a été examiné dans une deuxième étape. Il a été ainsi démontré que les directions internucleaires énantiotopes de molécules prochirales flexibles n’appartenant pas à ces quatre groupes de symétrie peuvent également être discriminées par RMN dans les CLCs si elles adoptaient des conformères chiraux spectralement discriminables pendant leur parcours conformationnels [**31, 104**]. En collaboration avec le **Weizmann Institute** (Israel), nous avons montré que l’analyse de la discrimination énantiotopique observée sur les spectres RMN de solutés prochiraux dissous dans un CLC pouvait être réalisée par une **factorisation symétrique et antisymétrique** de la matrice d’ordre de Saupe [**72, 104**]. Une revue générale (45 pages, 199 références) sur la discrimination énantiotopique dans les cristaux liquides chiraux a été publiée dans le prestigieuse revue « Chemical Socitey Review » en 2015 (article cité 35 fois) [**107**].

**VII- Compréhension des mécanismes enzymatiques/chemin réactionnel par analyse du fractionnement isotopique (2H/1H) naturel** (10 articles)**.**

La mesure du rapport isotopique moléculaire (2H/1H)mol par GC-irMS est une méthode puissante permettant,entre autre, la détermination de l’origine géographique/botanique de composés naturels. Cependant, elle ne donne accès qu’à une valeur moléculaire globale. En revanche, le spectrométrie

|  |  |
| --- | --- |
| RMN 2H quantitative (**méthode SNIF-NMR®)** donne accès à la mesure des rapports isotopiques naturels site-spécifiques, (2H/1H)i. Cette information permet, par exemple, d’étudier les mécanismes enzymatiques, notamment au travers de la détermination des **effets isotopiques cinétiques** (EIC).  Combiner à la RMN 2Dn dans les cristaux liquides chiraux lyotropes, il est alors possible d’accéder à la mesure des rapports isotopiques (2H/1H)pro-*R*/pro-*S*, tout en bénéficiant d’une plus grande distribution des signaux 2H via l’interaction quadrupolaire 2H, ce qui compense partiellement la faible dispersion chimique des noyaux 2H. En collaboration avec des biochimistes du CEISAM (**UMR 6230**) de l’Université de Nantes, la preuve de concept a été publié en 2004 avec l’étude du BPTH, un fragment prochiral d’un méthyle linoléate, **ML**, (**5**), **acide gras essentiel** insaturé ( [**41**], puis étendu à l’analyse de quatre esters de méthyle d’acides gras mono- et polyinsaturés ( à (**4**, **5** et **6**) et un AG chiral (le vernoléate de méthyle) [**64**] puis d’acides gras (poly)insaturés conjugués (-3 à -5) comme l’acide α-éléostéarique (9*Z*, 11*E*,13*E*) (**7a**) et punicique (9*Z*,11*E*,13*Z*) méthylé (**7b**) (**cf. Fig. 9**) [**83**]. Après optimisation des conditions expérimentales (choix du co-solvent organique, proportion massique, température), | **Figure 9.** Structure et numérotation des AG méthylés étudiés. |

nous montré que cette approche permetttait de séparer tous les isotopomères et énantio-isotopomères monodeutérés du **ML**, conduisant à la détermination du profl isotopique (D/H) complet de cette molécule pour la première fois, mais aussi à la mesure des excès énantio-isotopmérique *(eie*) pour chaque groupement CH2 de cette molécule (**cf. Figs. 10a/10b**) [**79**]. Avec un tel outil, nous avons pu confirmer et valider expérimentalement, par exemple, l’origine des hydrogènes dans le processus enzymatique et affiner les phénomènes de désaturation (9,12) d’acides gras (poly)insaturés, en accédant pour la

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 10.** Variation des **(a)** rapports isotopiques (2H/1H) site-pécifiques du méthyle linoléate et des **(b)** excès énantio-isotopomériques (*eei*) associés aux positions énantiotopes des groupements methylènes du ML [**79**].  première fois à des informations sur la stéréosélectivité des enzymes. Ce travail a été publié dans JBC en 2010 [**69**]. Dans une autre étude appliquée, nous nous sommes intéréssés à l’époxydation enzymatique du **ML** conduisant au vernoléate de méthyle dans deux plantes (*Euphorbia lagascae* et *Vernonia galamensis)* [**89**]. L’analyse des résultats a montré que les déterminants globaux de la distribution isotropique du vernoléate sont l'encombrement de la poche active du site enzymatique et les contraintes de réajustement conformationnel pendant la transformation de linoléate en vernoleate.  Compte des résultats 2D DAN obtenus pour des AG insaturés (AGI), le cas plus difficile des AG saturés (**1**, **2**, **3**) a ensuite été examiné (**cf. Fig. 9**). Pour ces exemples, nous avons été en mesure de visualiser les discriminations énantiotopiques sur environs 60-70 % des sites. En collaboration avec le département des Sciences Chimique de **l’Université de Padoue** (Italie), nous avons pu confirmer l’attribution expérimentale des RQC(2H) de ces trois AGS mesurés dans une phase orientée achirale (PBG/Pyridine) en utilisant un modèle prédictif des paramètres d’ordre (SC-D) basé sur la répulsion stérique entre les AG et les fibres de polypeptides modélisé comme des cyclindre solides (**cf. Fig. 10c**). Ce travail a fait l’objet de la couverture du numéro 18(1) de CEJ [**88**].  Pour terminer ce travail sur l’analyse isotopique d’AGI et d’AGS, nous avons cherché à explorer les limites de la RMN 2D DAN dans les systèmes chiraux et achiraux polypeptidiques appliquée à l’étude de **triglycérides homogènes** à chaîne alkyle courte et longue identiques: la tributyrine (TB) (**cf. Fig. 10d**) et la trimyristine (TM) [**95**]. Si tous les isotopomères monodeutérés de la **TB** ont pu être spectralement discriminés, les résultats obtenus avec la **TM** sont plus mitigés. Ils ont montré les limites des mécanismes de reconnaissance de forme lorsque les différences de volume persistant entre la chaîne centrale et les chaînes latérales deviennent insuffisantes, c’est-à-dire pour des chaînes alkyles longues. | |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 11.** **(a)** Comparaison entre les RQC(2H) expérimentaux et théoriques des de trois acide gras linéaires saturé (méthyl- myristate, palmitate, stérate) dans la phase achirale PBG [**88**]. **(b)** Spectres 1D DAN du tributyrine dans PBLG [**95**]. | |

Conservant la même méthodologie, nous avons étendu le domaine applicatif de la RMN DAN anisotrope dédiée à la mesure des rapports isotopiques (2H/1H)i à des molécules d’intéret utilisées par d’autres « communautés de chimistes » comme les géochimistes. En collboration avec des géochimistes de l’ISTO (UMR 7327) de l’**Université d’Orléans**, nous avons étudié le cas de la miliacine, une molécule triterpénique pentacyclique chirale énantiopure issue de la graine de millet, et présent dans les sédiments terrestres depuis son exploitation par l’homme, il y a 3000 ans (âge du bronze). En effet, l’étude du rapport isotopique global de ce **géo-biomarqueur** par GC-irMS permet aux géochimistes de suivre les évolutions climatiques terrestres (**cf. Fig. 12a**). Utilisant la RMN 2D DAN anisotrope, il a été possible de déterminer le profil isotopique des groupements méthyles à partir de la déconvolution des DQ(2H), et montrer, pour la première fois, de grandes variations dans les valeurs des rapports intramoléculaire (2H/1H)Mei ou δDMei. L’analyse du profil isotopique (tracé atypique en forme de

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 12.** **(a)** Variation des rapports isotopiques (2H/1H) des neuf groupements méthyles de la miliacine. **(b)** Chemin réactionnel menant à la miliacine [**115**]. | |

cloche) nous a permis de confirmer le chemin réactionnel conduisant à la formation de la miliacine (**cf. Fig. 12a**) [**115**]. En effet, seul le couplage de deux unités farnésyle pyrophosphates permet de comprendre la variation en cloche des rapports (2H/1H)Mei. *A priori*, cette approche possède également le potentiel pour évaluer/prédire le fractionnement isotopique pendant la **diagénèse** (ensemble des processus biochimiques et physico-chimiques intervenant dans les sédiments après leur dépôt et affectant toutes molécules organiques). Ce travail a fait l’objet d’un communiqué de presse CNRS (« **La vie des Labo**»).

**VIII-Elucidation structurale par RMN 2D DAN anisotrope** (2 articles)**.**

Les spectroscopies RX sont techniques redoutable lorsque le produit à analyser est cristalisable. Dans le cas contraire, des solutions alternatives doivent donc être adoptées. Ainsi, les méthodes d’élucidation structurale par RMN dans les solvants isotropes est généralement basée sur l’analyse combinée des **couplages scalaires** homo- ét hétéronuclaires, nJ, et des **effets nOe** (exp. NOESY). Quoique très utilisés, ces paramètres ne permettent pas toujours de discriminer entre deux structures. Dans ce cas, un changement de solvant s’impose ! Dans les cristaux liquides, il existe une relation univoque entre les observables RMN anisotropes résiduelles (RCSA, RDC ou RQC), les paramètres d’ordre orientationnel (définissant l’ordre d’un analyte) et la géométrie moléculaire. Les RDC(13C-1H) puis plus récemment les RCSA(13C) ont été utilisés dans le cadre de la détermination structurale, parfois couplé avec les données de type nOe.

En 2001, puis en 2009, nous avons montré que les RQC(2H) extraits des spectres 2D DAN anisotropes pouvaient être utilisés pour analyser la structure 3D et le comportement orientationnel de petites molécules (chirales / prochirales) [**39, 71**]. Cependant, le protocol appliqué utilisait des tableaux « Excel » peu pratiques et générateurs d’erreurs, ainsi qu’une modélisation des structures de type semi-empirique (AM1, PM2). Pour contourner ces problèmes, nous avons mis au point, en collaboration avec l’**Université de Récife**, (Brésil) un **protocol informatique intégré** (le programme « **MSpin-RQC**» dérivé du programme MSpin-RDC/RSCA, MestReLabResearch), qui repose notamment sur la détermination *ab-initio* de la géométrie moléculaire (DFT) et des constantes de couplages quadrupolaires 2H (QCC) utilisant la **fonctionnelle de densité « B3LYP »** avec une base relativement étendue « 6-31G(df,3p) » [**123**]. La **Figure 13a** présente une partie de l’interface graphique montrant différents modules du programme (structure moléculaire 3D, données RMN, paramètres d’ordre). La

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 13.** **(a)** Exemple d’interface du programme MSpin-RQC. (b) Représentation des axes propres d’orientation (Sx’, Sy’, Sz’) et d’inertie (Ix’, Iy’, Iz’) pour les deux énantiomères de la fenchone [**122**]. | |

robustesse du protocol a été testée sur une molécule chirale et prochirale rigide (la fenchone et norbornène).

Le programme permet de visualiser les axes propres d’orientation (*S*x’, *S*y’, *S*z’) et d’inertie (*I*x’, *I*y’, *I*z’) d’une molécule (**cf. Fig. 13b**). La validité de la structure (en accord avec l’attribution des RQC(2H)) est évaluée en comparant les valeurs expérimentales des RQC (RQC(2H)exp et recalculées (RQC(2H)calc) à partir du tenseur d’alignement en calculant le facteur de **qualité de Cornilescu**, *Q*, l’accord parfait correspondant à une valeur de *Q*minimale (**cf. Fig. 14**). La représentation graphique des tenseurs d'alignement principaux et d'inertie, ainsi que la détermination des **angles "5D" inter-tenseurs** permet de quantifier l’importance des interactions stériques (phénomène de reconnaissance de forme) dans le processus d’orientation et de discrimination. Ce travail moderne a fait l’objet de la couverture du numéro 18(10) de *ChemPhysChem* [**122**].

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **(a)** | **(b)** | |
| **Figure 14.** **(a)** Diagramme gravimétrique des données RQC(2H) recalculées et expérimentales pour la (*S*)-(+)-FCH. **(b)** Valeurs des angles « 5D » entre les tenseurs principaux d’orientation et les tenseurs d’inertie [**122**]. | |

**IX-RMN anisotrope et lutte contre la contrefaçon de molécules d’intérêt économique** (1 article en 2018).

Ce dernier thème, qui vient de débuter, s’inscrit dans un registre de recherche plus appliquée avec pour objectif affiché **la lutte contre la contre-façon** de molécules d’intérêt économique (aliments / arômes alimentaires) ou pharmacologiques en utilsant le profilage isotopique par RMN DAN anisotrope.

Il est connu que le profil isotopique (2H/1H) site-spécifique (donc multi-site) fournit une « **emprunte isotopique** » moléculaire fiable et unique capable de discriminer l’origine géographique et/ou botanique de composés naturels, mais aussi le mode de synthèse de composés d’intérêt économique (synthèse en laboratoire, via des approches biotechnologies ou naturelles). Longtemps adossé à la RMN 1D DAN isotrope (protocol RMN-FINS®), nous avons montré en 2018 que la RMN 2D DAN anisotrope quantitative pouvait contourner les limites/inconvénients de la RMN isotrope (faible dispersion chimique des signaux 2H) et donc fournir de nouveaux outils pour lutter contre la contrefaçon *via* l’analyse des rapports isotopiques mesuré à partir des DQ(2H) (**cf. Fig. 15a**).

A titre de premier exemple, nous sommes intéréssés au cas de la **vanilline** dont la RMN 1D DAN isotrope ne permet pas de séparer les trois isotopomères deutérés aromatiques sur la base des **(2H)iso. Ce problème disparaît en milieu anisotrope puisque nous accédons aux RQC(2H). Après optimisation de la phase lyotrope, nous avons ainsi pu démontré expérimentalement qu’il était possible de discriminer la vanilline naturelle et celle obtenue par des voies biotechnologiques (beaucoup moins onéreuses), à partir de l’analyse des trois rapports isotopiques (2H/1H)a,b,c du cycle aromatique [**125**]. Nous avons ainsi mis en évidence que les trois **coefficients relatifs de distribution isotopique** (k’(2Ha), k’(2Hb) et k’(2Hc) avec k’(2Hi) = Ai / [(Ai)] et k’(2Ha) + k’(2Hb) + k’(2Hc) = 100%) suivaient des tendances différentes pour les deux types de vanilline (**cf. Fig. 15b**).

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 15. (a)** Spectre 1D DAN isotrope et 2D Q-resolue Fz DAN anisotrope (PBLG/CH2Cl2/CCl4) de la vanilline. (**b)** Variation des coefficients de distribution du déuterium sur les trois hydrogènes aromatiques permettant de discriminer la vanille d’origine naturelle (N) et de synthèse (S) [**125**]. | |

**X-Conclusion et bilan.**

A l’interface entre la RMN isotrope et la RMN du solide, la RMN en milieu orienté bénéficie des avantages de ces deux techniques (**observables anisotropes et fluidité des solvants**). Elle est donc à la fois « riche » et « versatile ». Longtemps délaissée par les chimistes compte tenu de la complexité des spectres obtenus avec les mésophases thermotropes, elle a pris aujourd’hui toute sa place au sein des techniques analytiques utilisables par les chimistes, notamment depuis l’avènement des phases faiblement orientantes. Combinée à un environnement chiral, elle peut s’adapter à **divers champs disciplinaires** en répondant efficacement aux problématiques analytiques rencontrées par la communauté des chimistes.

La diversité des partenariats intra- et inter-universitaires illustrent l’intérêt et l’originalité de ces activités qui ont données lieu à une production totale de: i) **120** publications (Chap. de livres, ACL, ASCL, semi-vulgarisation, vulgarisation, …) dont **102** dans des revues internationales de rang A variées (JACS, ACIE, CEJ, CC, AC, JOC, JMR, JPC, JCP, ...) pour un total de **1658** citations dans **849** articles (sans autocitations) avec un h-index de **31** et un IF moyen de **4.96** (102 articles); ii) **32** conférences invitées et **23** séminaires; iii) **118** communications orales et par affiche. Voir aussi ORCID ID:0000-0002-5811-7530 / Researcher ID: M-3390-2017, ainsi que les portails "Google Scholar” et “Researchgate” (P. Lesot)) ou encore le site https://scinapse.io/authors/331715751.

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 16.** Histogramme de la production annuelle écrite **(a)** et des présentations **(b)**. | |

***●*** **Présentation chronologique des travaux effectués (1992-2018) :**

**AXES DE RECHERCHE (THEMES PRINCIPAUX)**

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  **(2018-20)** | Etude de la structure de molécules complexes par RMN 2D DAN anisotrope (***Coll. avec l’Univ. de Recife et l’Univ de Pittsburg***). | | | | | |
|  **(2017-20)** | Exploration du potentiel analytique de phase orientées lyotrope polyacétylènique (***Coll. avec l’Univ. de Darmstadt***). | | | | | |
|  **(2016-18)** | Lutte contre la contrefaçon de composés d’intérêt économique (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | | | | |
|  **(2017-18)** | Méthodologie de saturation des signaux 2H en milieu orienté combinée à l’approche NUS (***Coll. avec le KIT***). | | | | | |
|  **(2015-17)** | Mise au point d’une interface informatique pour les calculs des paramètres d’ordre via l’analyse des couplages quadrupolaires résiduels. (***Coll. avec l’Univ. de Recife***). | | | | | |
|  **(2016-18)** | Mise au point de nouvelles expériences QUOSY DAN optimisées: les expériences 2D **-résolue phasées et leurs applications. (***Coll. avec l’Univ. de Lille***). | | | | | |
|  **(2015-16)** | Mise au point d’expériences RMN ultrafast (UF) de noyaux quadrupolaires en milieu orienté: les expériences "ADUF". (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | | | | |
|  **(2014-16)** | Analyse RMN multinoyaux anisotrope de composés biaryls chiraux. Compréhension des phénomènes de discrimination énantiotopique et énantiomérique. (***Coll. avec le Technion Inst. et l’Univ. de Giessen***). | | | | | |
|  **(2013-16)** | Analyse (qualitative et quantitative) du comportement orientationel de soluté prochiraux en présence d’un CLC di-homopolypeptide. | | | | | |
|  **(2013-15)** | Etude multi-spectroscopique du néopentane: configuration absolue  (***Coll. avec l’Univ. d’Orléans et du Kansas***). | | | | | |
|  **(2013-16)** | Mesure la distribution isotopique de biomarqueurs géologiques (Miliacine) par RMN 2D DAN anisotrope pour l’étude de la diagénèse. (***Coll. avec l’Univ. d’Orléans et du Kansas***). | | | | | |
|  **(2013-16)** | Etude des propriétés dynamiques d’acides aminés dans des mésophases à base d’ADN fragmentée: rôle des effets diffusionnels dans les phénomènes de discriminations énantiotopiques et énantiomériques. (***Coll. avec l’IISC de Bangalore***). | | | | | |
|  **(2013-15)** | Application des théories NUS et CST à l’analyse des spectres 2D DAN anisotropes. (***Coll. avec l’Univ. de Lille et de Varsovie***). | | | | | |
|  **(2012-13)** | Utilisation de mésophases à base d’ADN fragmentée pour l’analyse et le suivi de réactions enzymatiques *in situ* (Alanine racémase). (***Coll. avec l’ENS Paris et Inst. Curie***). | | | | | |
|  **(2012-13)** | Analyse de la formation de domaines énantiomorphes d'un état cristal-liquide nématique twisté. (***Coll. avec l’Univ. de Southampton***). | | | | | |
|  **(2011-12)** | Analyse de lipides chiraux à longue chaînes par RMN DAN dans les CLC. (***Coll. avec l’Univ. de Padoue***). | | | | | |
|  **(2011-12)** | Détection d’isotopomères 13C-2H par RMN 2D hétéronucleaire en milieu liquide et anisotrope chirale. (***Coll. avec l’Univ. de Lille***). | | | | | |
|  **(2010-12)** | Reconnaissance chirale et prochirale par RMN dans des mésophases à base d’ADN fragmentée. (***Coll. avec le Indian Inst. of Science***). | | | | | |
|  **(2010-11)** | Etude des différences mécanistiques de formation du vernoléate de méthyle à partir du linoléate de méthyle dans deux plantes par RMN DAN dans les CLC. (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | | | | |
|  **(2011-12)** | Analyse par RMN orientée de triglycérides homogènes saturés à courte et longue chaîne. Analyses des phénomènes de reconnaissance de forme et conséquences orientationnelles. | | | | | |
|  **(2010-11)** | | | Simulation du comportement orientationel d’acides gras saturés et insaturés par la méthode d’exclusion des volumes stérique. (***Coll. avec l’Univ. de Padoue***). | | |
|  **(2010-11)** | | Etude par RMN du deutérium dynamique de composés hexathia métacyclophaniques. Analyse des différents types d’échanges conformationnels. (***Coll. avec le Weizmann Inst. & Max Planck Inst.***). | | |
|  **(2010-11)** | | Développement de l’approche NUS-Cov (non uniform sampling / Covariance) pour réduire les temps d’accumulation des expériences 2D QUOSY DAN. (***Coll. avec l’Univ. de Lille***). | | |
|  **(2010-11)** | | Etude des différences mécanistiques de formation du vernoléate de méthyle à partir du linoléate de méthyle dans deux plantes par RMN DAN dans les CLC. (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | |
|  **(2010-11)** | | Première discrimination expérimentale spectrale d’éléments énantiotopes dans les molécules de symétrie *S*4. (***Coll. avec le Weizmann Inst. & Max Planck Inst.***). | | |
|  **(2010-11)** | | Extension de la RMN 2D DAN dans les CLC pour l’analyse d’acides gras saturés. (***Coll. avec l’Univ. de Padoue***). | | |
|  **(2009-10)** | | Optimisation des conditions de discrimination énantio-isotopomérique d’acides gras: Influence de la polarité du co-solvant, comportement orientationnel et premières applications à l’étude d’acides gras conjugués. | | |
|  **(2009-10)** | | Etude de la résolution cinétique d’-chloro,-cétoesters par hydrogénation asymmetrique à l’aide du Ru-DIFLUORPHOS. Contribution de la RMN du Carbone-13 dans les CLC à la compréhension des mécanismes mis en jeu. (***Coll. avec l’ENSCP, Paris***) | | |
|  **(2009-10)** | | Analyse de complexes cationiques (arène6) chiraux de manganèse tricarbonylés (**6-arene)Mn(CO)3+. Apport de la RMN deuterium dans les CLC pour la détermination des excès énantiomériques dans le cas des complexes chargés. (***Coll. avec l’Univ. de Paris VI***) | | |
|  **(2009-10)** | | Détermination complète des excès énantio-isotopomériques naturels dans le cas de l’acide linoléique par RMN 2D DAN dans une mésophase polypeptide. | | |
|  **(2008-10)** | | Etude du comportement conformationnel d’un crystal liquide nématogène (I-22) dans sa phase orientée par RMN 2D multinoyau.(***Coll. avec l’Univ. de Southampton***). | | |
|  **(2008-09)** | | Analyse théorique des phénomènes de discrimination énantiotopiques par RMN en milieu orienté chiral: Décomposition symmétrique et anti-symétrique de la matrice d’ordre de Saupe: Etude de molécules modèles de symétrie *C*s, *C*2v, *D*2d. (***Coll. avec le Weizmann Inst. & Max Planck Inst.***). | | |
|  **(2008-09)** | | Etude théorique et expérimentale du comportement orientationnel et conformationnel et de composés cycliques flexibles par RMN du deuterium dans les CLC: Cas de la cis-décaline et du THF. | | |
|  **(2008-09)** | | Analyse des étapes d’élongation et de désaturation d’acide gras C-18 issus du champignon fusarium lateritium par RMN 2D DAN anisotrope quantitative. (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | |
|  **(2008-09)** | | Etude conjointe de la désymmétrisation de composés aromatiques et vyniliques halogénés prochiraux: Echange énantiosélectif halogène–litium et reconnaissance prochirale dans une matrice cristal-liquide chirale. (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | |
|  **(2008-10)** | | Analyse combinée d’acides gras insaturés non-conjugués complets par RMN 2D du 2H en abondance naturelle en milieu orienté. | | |
|  **(2008-09)** | | Première analyse des teneurs isotopiques 2H dans l'acide vernolique. | | |
|  **(2008-09)** | Analyse de l’effet d’appauvrissement en 2H observé sur les sites éthyléniques impairs d’acides gras naturels et entre les sites H pro-(*R*) (riche) et le H pro-(*S*) (pauvre). (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | |
| **v (2008-09)** | Etude de l’origine de la répartition non statistique en 2H au long des chaînes des acides gras. (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | |
|  **(2007-08)** | Applications de la RMN 3D 2H en abondance naturelle dans les CLC. | | |
|  **(2007-08)** | | | Analyse théorique et expérimentale de la dynamique conformationnelle et orientationnel par RMN 13C et 2H abondance naturelle du 5CB dans sa phase nématique. (***Coll. avec l’Univ. de Southampton***). | | |
|  **(2006-08)** | | | Détermination empirique de la configuration absolue d’énantiomères par RMN 2H en abondance naturelle. | | |
|  **(2006-08)** | Etude de mélanges orientés contenant deux polypeptides chiraux: vers la quantification expérimentale des interactions «soluté-polypeptides». | | | | | |
|  **(2006-07)** | Tentative de détermination de la configuration absolue de molécules chirales de symétrie *C*3: Approche RMN et modélisation moléculaire | | | | | |
|  **(2006)** | Analyse de l'énantiosélectivité de transferts d'hydrogénation asymétrique sur des composés acétyléniques fluorés. | | | | | |
|  **(2005-06)** | Détermination de la stéréochimie (*pro-R*/*pro-S*) des sites deutériums présentant un effet de déplétion isotopique (D/H) dans le BPTH. (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | | | | |
|  **(2005-06)** | Stratégies analytiques pour analyser des mélanges de composés thréo/méso par RMN 2D en mileux orientés. | | | | | |
|  **(2005-06)** | Etude par RMN de la dynamique moléculaire de nouveaux composés chiraux de type cyclotrivératrylène (CTV). (***Coll. avec le Weizmann Inst. & Max Planck Inst.***). | | | | | |
|  **(2005-06)** | Etude du phénomène d’isomérisme rotationel par RMN 2H en milieu orienté chiral: le cas des atropoisomères chiraux et des composés parents prochiraux. | | | | | |
|  **(2004-06)** | Réduction cohérente de l’interaction quadrupolaire dans un solvant orienté. | | | | | |
|  **(2004-07)** | Détermination par RMN de la stéreochimie d’imines chirales synthétisées par spectroscopie micro-ondes (***Coll. avec BioCis***). | | | | | |
|  **(2004-05)** | Etude en RMN orienté de complexes de chrome chiraux (arène-6) tricarbonylés par RMN 13C et de leurs précurseurs. (***Coll. avec l’Univ. de Paris VI***). | | | | | |
|  **(2004-05)** | Analyse de molécules bioactives chirales. (***Coll. avec l’ICSN***). | | | | | |
|  **(2004-05)** | Développement et applications d'outils par RMN 2D impliquant des transferts d’aimantation 13C-2H dédiés à l'analyse spectrale dans les cristaux liquides. | | | | | |
|  **(2004-05)** | Mise au point et applications d’expériences RMN 3D d’autocorrélation deutérium phasée. | | | | | |
|  **(2003-04)** | Etude de l’influence d’un environnement chiral sur la distribution conformationnelle d’une molécule prochirale flexible: le 5CB. (***Coll. avec l’Univ. de Southampton***). | | | | | |
|  **(2003-04)** | Etude des mécanismes de discriminations énantiotopiques et énantiomériques dans les molécules prochirales et les molécules parentes de chiralité isotopique. | | | | | |
|  **(2002-04)** | Mise au point de nouveaux systèmes amphiphiles chiraux dédiés à l'analyse énantiomériques de molécules hydrosolubles. | | | | | |
|  **(2002-04)** | Etude de l’influence d’un environnement chiral sur la distribution conformationnelle de deux énantiomères «flexibles». (***Coll. avec l’Univ. de Southampton***). | | | | | |
|  **(2002-04)** | Quantification des rapports isotopiques (D/H) d’un fragment d’acides gras insaturés (BPTH) par RMN 2D 2H en abondance naturelle dans un solvant orienté. (***Coll. avec l’Univ. de Nantes***). | | | | | |
|  **(2002-03)** | Discrimination chirale par RMN 2D binucléaire dans un solvant orienté chiral. | | |
|  **(2002-03)** | Utilisation d'expériences de RMN 2D hétéronucléaires sélectives (HETSERF) dans les cristaux liquides. | | | | |
|  **(2002-03)** | Développement méthodologiques de la RMN 2D hétéronucléaire carbone-deutérium pour l'analyse stéréochimique en milieux orientés. | | | | |
|  **(2001-03)** | Analyse stéréochimique par RMN en milieu orienté chiral et achiral: Attribution des configurations relatives dans les molécules prochirales rigides. | | | | |
|  **(2001-02)** | Utilisation d'expériences de RMN 2D homonucléaires sélectives (SERF) dans les cristaux liquides | | | | |
|  **(2001-02)** | Etude des facteurs influençants la discrimination de directions énantiotopes dans les molécules prochirales (***Coll. avec le Weizmann Inst. & Max Planck Inst.***). | | | | |
|  **(2001-02)** | Nouvelles stratégies RMN 2D homo- et hétéronucléaires capables de simplifier l'analyse de spectres d'énantiomères perdeutérés orientés dans les cristaux liquides chiraux. | | | | |
|  **(2001-02)** | Applications en routine de la RMN 2D du deutérium en abondance naturelle dans un solvant cristal liquide chiral. | | | | | |
|  **(2001-02)** | Analyse énantiomérique de dérivés phosphorés P-benzylés chiraux par RMN 1D 13C couplé phosphore. | | | | |
|  **(2001-02)** | Etude du mécanisme de cyclisation d'esters **-halogénés-****-insaturés catalysée par SmI2 par RMN 2D 2H dans les milieux orientés. (***ICMMO***). | | | | |
|  **(2001-02)** | Analyse de la chiralité par RMN d'hétéronoyaux (Sélénium-77). | | | | |
|  **(2000-02)** | Développement et utilisation de nouveaux cristaux liquides chiraux polypeptidiques adaptés à l'analyse énantiomérique et énantiotopique. | | | | |
|  **(2000-01)** | Etude de la corrélation orientation-conformation dans les cristaux liquides. | | | | |
|  **(2000-02)** | Analyse de molécules prochirales dans les cristaux liquides chiraux: Conséquences et applications analytiques en stéréochimie. | | | | |
|  **(2000-01)** | Etude du potentiel analytique des cristaux liquides chiraux pour l'étude d'invertomères chiraux. | | | | |
|  **(2000-01)** | Discrimination d'éléments énantiotopes dans des molécules ne présentant pas d'atome prostéréogène tétraédrique. | | | | |
|  **(1999-02)** | Analyse énantiomérique et énantiotopique de composés de symétrie *C*3 et *C*3v de type tribenzocyclononène par RMN du 13C et du 2H dans les CLC. (***Coll. avec le Weizmann Inst. & Max Planck Inst.***). | | | | |
|  **(1999-01)** | Mesure d'excès énantiomèriques et diastéréoisomériques de dérivés benzéniques chiraux par RMN du carbone-13 et par RMN 2D du deutérium en abondance naturelle dans un solvant cristal-liquide chiral. | | | | |
|  **(1999-03)** | Discrimination d'hydrocarbures chiraux cycliques et acycliques par RMN DAN. | | | | |
|  **(1999-00)** | Analyse stéréochimique d'isomères thréo/érythréo par RMN 1D dans les milieux orientés chiraux et achiraux. | | | | |
|  **(1999)** | | | Etude des effets de dédoublements cinétiques au cours de réactions de cycloadditions asymétriques [2+3] appliquées à la synthèse de **-lactones chirales par RMN du carbone-13 dans un solvant cristal-liquide chiral. (***ICMMO***). | | | |
|  **(1998-00)** | | | Evaluation de l'énantiosélectivité de réactions de déshydrofluorination asymétriques par RMN 13C et 19F dans un solvant cristal liquide chiral : Application à la synthèse de dérivés propargyliques fluorés chiraux. (***Coll. avec l’ENSCR de Rennes***) | | | |
|  **(1997-01)** | | | Développement de nouvelles séquences RMN 2D deutérium en abondance naturelle dans CLC lyotropes chiraux: les expériences QUOSY. | | | |
|  **(1997-01)** | | | Quantification de la discrimination faciale dans les cristaux liquides chiraux. (***Coll. avec le Technion Inst****.*) | | | |
|  **(1996-97)** | | | Détermination et analyse de l'ordre orientationnel de deux énantiomères semi-rigides dans un solvant orienté chiral: Etude des effets vibrationnels. (***Coll. avec l’Univ. d’Oulu***). | | | |
|  **(1996)** | | | Etude par RMN. du deutérium des effets hydrodynamiques dans les solvants cristaux liquides polypeptidiques. | | | |
|  **(1996)** | | | Simplification des spectres RMN hétéronucléaires en milieu orienté : les expériences 2D SMI-COSY hétéronucléaires. | | | |
| **\* (1995-96)** | | | Discrimination et analyse de spectres d'énantiomères par RMN multidimensionnelle en milieu anisotrope chiral. | | | |
|  **(1995-97)** | | | Calcul des paramètres d'ordre orientationnel d’énantiomères dissous dans un solvent orienté chiral. | | | |
|  **(1994-98)** | | | Visualisation d'énantiomères par RMN 13C en abondance naturelle dans les cristaux liquides lyotropes chiraux : développements analytiques. | | | |
|  **(1992-94)** | | | Simplification des spectres RMN anisotropes par réduction cohérente de l'Hamiltonien de spins: les exp. 2D SMI-COSY homonucléaires. | | | |
|  **(1991-92)** | | | Développement de la méthodologie CRASY ("Correlated Random lAbel SpectroscopY") en | | | |

**AXES DE RECHERCHE (HORS THEMES PRINCIPAUX)**

|  |  |
| --- | --- |
|  **(2017-18)** | Suivi réactionnel et compréhension mécanistique par RMN 2H isotrope (***Coll. avec le CEA***). |
|  **(2013)** | Etude de la structure de dérivés pyrrolines avec une chaine *gem*-fluoré via des expériences NMR 2D HOESY 1H-19F. (***Coll. avec l’Univ. de Rennes***). |
|  **(2013)** | Etude du comportement dynamique d’électrolytes ioniques mésogènes : applications des expériences QUOSY DAN. (***Coll. avec le LLB/Saclay***). |
|  **(2009-10)** | Etude par RMN isotrope de la géometrie d’oxazolidines trifluorométhylés. (***Coll. avec l’Univ. de Cergy-pontoise***). |
|  **(2009-10)** | Etude par RMN isotrope de composés oxa- et thiahélicenes (***Coll. avec l’Univ. de Versailles***). |
|  **(2006-07)** | Etude de la structure et de la dynamique de composés cycliques de de type oxothiomolybdène Mo12 and Mo16 contenant des dérivés téréphtalates. (***Coll. avec l’Univ. de Versailles***). |
|  **(1999)** | Mise au point d'experiences RMN pour la mise en évidence de changements de spin photoinduits dans des complexes de Fer (III) (***ICMMO***). |
|  **(1997)** | Mise au point de stratégies et d'expériences RMN pour l'étude de matériaux hybrides. (***ICMMO***). |

***PERSPECTIVES DE RECHERCHE***

Compte tenu du potentiel analytique et des enjeux associés à la RMN anisotrope, les perspectives de recherche à moyen terme (5 ans) s'inscrivent dans une certaine continuité des activités scientifiques développées au cours de ces dernières années. Elles s’appuieront sur les résultats très positifs obtenus récemment, l’expertise acquise au cours du dernier quinquennal, et la mise en place de diverses collaborations actives, tant nationales qu’internationales.

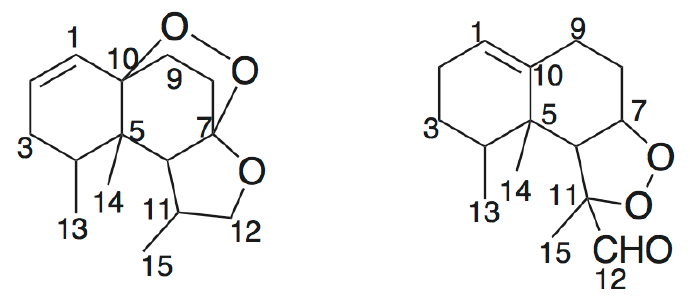
**I. RMN DAN et élucidation structurale/configurationelle de composés enantiopurs naturels** **bioactifs.**

Jusqu’à présent, seuls les RCSA(13C)s et (13C-1H)-RDC(13C-1H)s ont été utilisés dans le cadre de l’élucidation structurale de composés naturels complexes et leur détermination configurationnelle. L’un des derniers challenges analytiques dans le domaine de l’analyse structurale de molécules naturelles est l’utilisation des RQC(2H)s, sans enrichissement en deutérium. Cette approche offre l’avantage de données RMN associées aux RQC(2H)s dont l’amplitude est de un à deux (voir trois) ordres de grandeur supérieurs aux magnitudes des valeurs des RDC(13C-1H)s et des RCSA(13C)s, respectivement. L’intérêt majeur d’exploiter les RQC(2H)s réside donc dans l’amplitude des valeurs (en Hz) des RQCs et la précision des mesures associées à cette observable, notamment au niveau des groupements 13CH2 (système ABX).

Dans une première étape, nous étudierons le cas de molécules polycycliques complexes cibles dont la configuration des centres stéréogènes est déjà connue. Nous envisageons, ainsi, l’étude de la Strychnine (**cf. Fig. 1a**), la Brucine, l’Artémisinine et la DHEA, par exemple pour tester la validité et la robustesse de la méthode. Les premiers spectres 2D DAN anisotropes de la Strychnine (70 mg) dans PBLG sont très encourageants (**cf. Fig. 1a**). Les données expérimentales seront traitées avec le programme MSpin-RQC présenté précécedement [**122**]. L’attribution de la configuration relative des

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **(a)** |  | **(b)** |
|  | |
| **Figure 1. (a)** Spectre 2D *Q*-Résolue Fz DAN de la strychnine (dans PBLG. **(b)** Principe schématique de la détermination de la configuration relative de molécules bioactives complexes par spectroscopie RMN DAN anisotrope. | | |

centres stéréogènes sera réalisée en applicant le protocole présenté sur la **Figure 1b**, l’idée étant de générer des structures dont la configuration reste plausible (energétiquement parlant) et de confronter les différents stéréoisomères aux données anisotropes RQC(2H) mesurées dans un ou plusieurs systèmes orientants. Dans une seconde étape, d’autres produits naturels moins classiques dont la configuration n’est pas encore été établie seront étudiés (**cf. Fig. 2**), ainsi que le cas plus complexes de petites molécules flexibles.



|  |
| --- |
| **Figure 2.** Deux exemples de deux produits naturels polycycliques chiraux dont la configuration relative des centres stéréogènes est encore ambiguë. |

**II.RMN 2D 2H Ultrafast anisotrope (ADUF) et suivis réactionnels complexes.**

Récemment, nous avons montré, que des expériences 2D 2H ultrafast (UF) pouvaient être enregistrées en milieu orienté (expériences 2D ADUF) avec des temps d’acquisition inférieurs à la seconde. Ce type d’expériences 2D doit permettre l’étude de suivi réactionnel en temps réél et *in situ* (réalisés, par exemple, dans les cristaux liquides lyotropes) et notamment l’analyse des cinétiques des intermédiaires réactionnels (lors de réactions en cascade) dans le cas de molécules deutérées. Une telle application en chime n’a jamais encore testée et mérite une attention particulière.

**III.Nouvelles applications avec des mésophases chirales hélicoïdales de type « polyacétylene ».**

Promouvoir auprès des chimistes de nouveaux outils impliquant des milieux faiblement orientants, requiert à la fois des développements méthodologiques RMN innovants capable de répondre à leurs besoins, mais également la maîtrise de nouvelles phases cristal-liquides chirales. En collaboration avec le groupe « polymère » du Prof. M. Reggelin de l’Université de Darmstadt (Allemagne), une étude approfondie examinant les potentialités analytiques RMN de systèmes polymères de type « polyarylacétylèniques » (PLA) dérivé de la valine par exemple, vient d’être initiée. Ces polymères de configuration stable sont caractérisés par un bloc hélicoïdal (hydrophobe) et des chaînes latérales chirales constituées d’un amino-acide et d’une chaîne terminale alkyle (hydrophile) (**cf. Fig. 3a**) conduisant à des propriétés orientationnelles potentiellement très diffèrentes comparées aux phases de type polypeptide [**a,b,c**].

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 3.** (a) Structure des polymères PBLG et PLA. **(b)** Un exemple de différence de discrimination spectres 1D 2H-{1H} du (±)-1-phényl-propanol-d1 obtenus dans PLA et PBLG. | |

Nous envisageons une étude RMN multinucléaire (2H, 13C, 19F) de ce système orientant hélicoïdal en abordant tous les aspects de l’énantiomorphisme (molécules chirales avec ou centre stéréogène, chiralité isotopique, prochiralité) et en comparant les résultats expérimentaux en termes d’énantiodiscrimination avec ceux obtenus dans une phase polypeptidique (PBLG) (**cf. Fig. 3b**). Ce travail devrait permettre de mieux comprendre le rôle de la position du centre stéréogène (chaîne latérale *vs* hélice **) sur les méchanismes d’orientations différentielles et en définir l’importance.

**IV.Approfondir la compréhension du mécanisme d’énantioreconnaissance?**

D’un point de vue beaucoup plus fondamental, la compréhension globale des mécanismes d’orientation et des phénomènes d’énantiodiscrimination associés aux paramètres moléculaires des analytes dans les systèmes lyotropes chiraux restent encore des challenges difficiles à relever mais incontournables, notamment pour une meilleure modélisation informatique de ces systèmes lyotropes ternaires (prédiction par modélisation moléculaire (MD) informatique par exemple), ou la conception de nouveaux polymères hélicoïdaux énantiodiscriminants.

**V.Nouveau outils impliquant la « RMN anisotrope » pour la lutte contre la contrefaçon.**

A l’image des résultats obtenus avec la vanilline, nous envisageons d’étudier d’autres molécules d’intérêt économique comme la frambinone (utilisée comme arome alimentaire) (**cf. Fig. 4a**) [**d**]. L’objectif pour cette molécule est d’accéder au profil isotopique des quatre sites énantiotopes associés aux deux groupes méthylènes de la chaîne butanone qui sont non discriminés par RMN 1D DAN isotrope (**cf. Fig. 4b**). La comparaison des profils isotopiques de ces sites pour des molécules de frambinone d’origine synthétique et naturelle pourrait mettre en évidence des différences isotopiques utilisable pour valider leur origine chimique (contrôle d’authentification).

|  |  |
| --- | --- |
| **(a)** | **(b)** |
| **Figure 4. (a)** Structure de la frambinone. **(b**) spectre 1D DAN isotrope montrant que les directions énantiotopes des méthylènes 4 et 5 ne sont pas discriminés sur la base d’un différence de **(2H)iso [**c**]. | |

L’étude du profil isotopique (2H/1H) associé au fractionnement isotopique naturel par RMN 2D DAN anisotrope de composés chiraux pharmaceutiques (à un seul centre stérérogène) comme les anti-inflammatoires non stéroïdiens, AINS, de la famille des « profènes » (**cf. Fig. 5**) est également

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Ibuprofène (**1**) | Kétoprofène (**2**) | | Naproxène (**3**) | Flurbiprofène (**4**) | |
| **Figure 5.** (a) Structure moléculaire des AINS dont l‘étude est envisagée. | | | | | |
|  | |  | | |
| **Figure 6.** Série de sous-spectres 1D DAN extrait d’une expérience 2D Q-résolue Fz de l’ibuprofène dissous dans la phase chirale PBLG/(CHCl3 + CCl4) à 330 K en série scalémique (*ee* = 50% enrichi en (*S*)). | | | | |

envisagée afin de valider leur origine (molécule originales, générique, contrefaçon). A titre de résultats préliminaires, la **Figure 6** montre la discrimination de tous les énantio- et diastéréo-isotopomères monodeutérés de l’ibuprofène dissous dans PBLG observée sur les différents sous-spectres 1D DAN extrait d’une carte 2D QUOSY.

**VI.Détermination du fractionnement énantio-sélectif position spécifique du 13C par RMN dans les cristaux liquides chiraux.**

Le fractionnement isotopique intramoléculaire a pour origine la différence de comportement entre isotopes légers et lourds d'un même élément chimique (A/A’X) lors d'un processus chimique (réaction enzymatique par exemple). Il conduit à une variation des rapports isotopiques au cours de ce processus. Toute molécule est donc caractérisée par son profil isotopique site-spécifique (2H/1H)i ou (13C/12C)i. Récemment, le concept « RMN-FINS® » (2H/1H) a été étendu à l’étude du fractionnement isotopique (13C/12C) par RMN 1D 13C-{1H} quantitative en phase isotrope, et appliqué pour analyser des molécules achirales telles que la vanilline [**e**].Pour étudier le fractionnement isotopique (13C/12C)i des énantiomères

|  |  |
| --- | --- |
| de molécules chirales synthétisées à partir d’un composé prochiral précuseur (obtenus par synthèse asymétrique ou enzymatique) par RMN 13C-{1H} (**cf. Fig. 7**), il est nécessaire de pouvoir analyser facilement par les spectres 1D 13C-{1H} des deux isomères. Deux solutions sont possibles : i) séparer physiquement les énantiomères (chromatogaphie chirale préparative, par exemple) puis d’enregistrer séparément le spectre 13C-{1H} en milieu isotrope de chaque isomère afin d’analyser leur profil isotopique (deux échantillons) ; ii) utiliser un agent de | DATA:DOSSIER  PUB  ZOUTE:2018:PROJET NANTE REMAUD:Projet isotop:Diapositive1.tiff  **Figure 7.** Principe schématique de la discrimination chirale par RMN 13C-{1H} en milieu orienté chiral d’énantiomères d’un alcool. |

solvatation chiral (Europium chiral) ou un agent d’orientation chiral (CLC) afin de discriminer spectralement les deux énantiomères *in situ* sur la base d’une différence de RCSA(13C) et de mesurer simultanément leurs rapports isotopiques (13C/12C)i*R,S* respectifs (un échantillon). Quelle que soit la solution retenue, la séparation des signaux 13C-{1H} des deux énantiomères devrait permettre de pouvoir répondre à une question fondamentale: « Existe-t-il une relation entre le fractionnement isotopique 13C/12C et le fractionnement énantiomérique? ». Se poser cette question en lien avec une signature du fractionnement du 13C ou mieux avec une redistribution isotopomérique spécifique 13C (fractionnement intramoléculaire) lors de la création d’un carbone asymétrique, c’est aborder la thématique de: i) l’homochiralité des produits naturels ; ii) le facteur inducteur de l’énantiosélectivité ; iii) de l’authentification de molécules naturelles grâce à la signature de l’excès énantio-isotopomérique (*eei*).

Pour répondre à cette question, nous nous proposons d’étudier des alcools chiraux (famille du phénéthyléthanol) obtenue par dissymétrisation de la cétone prochirale parente correspondante par voie synthétique ou enzymatique. Dans une première étape, nous devons trouver les conditions expérimentales pour séparer suffisamment les signaux à chaque site 13C des deux énantiomères par RMN 13C-{1H} en milieu anisotrope chiral (**cf.** **Fig. 8)**, puis d’optimiser le protocol opératoire pour atteindre une précision sur la valeur des intégrales de chaque isomère et sur chaque site suffisante (%**0**). A terme, nous espérons pouvoir démontre qu’il existe une corrélation entre le fractionnement isotopique (13C/12C)i et le fractionnement énantiomérique, ce qui n’a jamais été démontré jusqu’à présent (prise de risque importante). Ce projet financé dans le cadre de l’AAP CNRS « ISOTOP 2018 » pour interdisciplinarité a été initié en collaboration avec l’Université de Nantes afin de bénéficier de la résolution spectrale et la sensibilité associées à un spectromètre RMN @ 17.6 T et équipé d’une sonde 13C cryogénique.

|  |
| --- |
|  |

**Figure 7.** Spectre RMN 1D 13C-{1H} du (±)-1-phénéthyléthanol en milieu anisotrope chirale obtenu à 9.4 T (100 MHz) (phase PBLG/CHCl3/CCl4) et montrant l’énantiodiscrimination de tous les sites 13C, ce qui devrait permettre de mesurer les *eei*.

**VI.Références additionnelles.**

[**a**] N.-C. Meyer, A. Krupp, V. Schmidts, C. Thiele, M. Reggelin, *Angew. Chem. Int. Ed*., **2012**, 51, 8334-8338.

[**b**] A. Krupp, M. Reggelin, *Magn. Reson. Chem.*,**2012**, 50, S45-S52.

[**c**] M. Dama, S. Berger, *Tetrahedron Letters*, **2012**, 53, 6439-6442.

[**d**] G. Fronza, C. Fuganti, C. Guillou, F. Reniero, *J. Agric. Food Chem.* **1998**, 46, 248−254.

[**e**] G.S. Remaud, S. Akoka, *Flavour Fragrance* J., **2016**, 32, 77-84.