

## Résumé : RMN

-La différence  $\Delta E$ , entre les deux états, est de :

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \gamma \frac{h}{2\pi} B_0$$

$\gamma$  : Constant du noyau ( $\text{rad} \cdot \text{T}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ )

$\Delta E$  : Écart d'énergie (J)

$B_0$  : champ magnétique (T)

$h$  : constante de Planck ( $6,62 \cdot 10^{-34} \text{ m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$ ).

---

-La population, qui rassemble les noyaux situés dans l'état d'énergie  $E_2$ , est un peu moins nombreuse que dans l'état  $E_1$  légèrement plus stable

$$R = \frac{N_2}{N_1} = \exp \left[ -\frac{\Delta E}{kT} \right]$$

$N_1$  : Nombre de noyaux situés dans l'état d'énergie  $E_1$

$N_2$  : Nombre de noyaux situés dans l'état d'énergie  $E_2$

$\Delta E$  : Écart d'énergie (J)

$k$  : Constante de Boltzmann  $1,380649 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$

$T$  : Température ( $^{\circ}\text{K}$ )

---

-Les valeurs de déplacement chimique ( $\delta_i$ ) :

$$\delta_i = \frac{\nu_i - \nu_{\text{réf.}}}{\nu_{\text{appareil}}} \cdot 10^6 = \frac{\Delta \nu}{\nu_{\text{appareil}}} \cdot 10^6$$

$\delta_i$  : déplacement chimique (ppm)

$\Delta \nu$  : différence de fréquence (Hz), (on a pas besoin de connaître  $\nu_{\text{réf.}}$ ).

$\nu$  : Fréquence de l'appareil (MHz)

---

-Relation de **Larmor**

$$h\nu = E_2 - E_1 \Rightarrow \nu = \frac{\gamma}{2\pi} B_0 \Rightarrow \nu \cdot 2\pi = \omega = \gamma \cdot B_0$$

$\nu$  : fréquence (Hz)

$\omega$  : pulsation ( $\text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$ )

$\gamma$  : constante de noyau ( $\text{rad} \cdot \text{T}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ )

$B_0$  : champ magnétique (T)

---

*Table de valeurs de déplacements chimiques en RMN <sup>1</sup>H.*

**Déplacements chimiques moyens de quelques types de protons**  
( $\delta$  est exprimé en ppm par rapport au TMS pris comme référence)

R est un groupe aliphatique saturé ; Ar est un groupe aromatique.

Protons CH <sub>3</sub>	$\delta$	Protons CH <sub>2</sub>	$\delta$	Protons CH	$\delta$
<b>Lié à un C AX<sub>3</sub> :</b>		<b>Lié à un C AX<sub>3</sub> :</b>		<b>Lié à un C AX<sub>3</sub> :</b>	
CH <sub>3</sub> -C	0,9	CH <sub>2</sub> -C	1,3	CH-C	1,5
CH <sub>3</sub> -C-NH <sub>2</sub> (ou NR <sub>2</sub> )	1,15	CH <sub>2</sub> -C-NH <sub>2</sub> (ou NR <sub>2</sub> )	1,3	CH-C-OH(ou OR)	1,6-2
CH <sub>3</sub> -C-Ar	1,25	CH <sub>2</sub> -C-Ar	1,6	CH-C-Cl	1,6
CH <sub>3</sub> -C-OH(ou OR)	1,15-1,3	CH <sub>2</sub> -C-OH(ou OR)	1,8		
<b>En <math>\alpha</math> d'une insaturation:</b>		<b>En <math>\alpha</math> d'une insaturation:</b>		<b>En <math>\alpha</math> d'une insaturation:</b>	
CH <sub>3</sub> -C=C	1,6	CH <sub>2</sub> -C=C	2,1-2,3	CH-C=C	2,5
CH <sub>3</sub> -CO-OR	2,0	CH <sub>2</sub> -C $\equiv$ C	2,6	CH-C $\equiv$ N	2,7
CH <sub>3</sub> -CO-OH	2,1	CH <sub>2</sub> -CO-OR	2,2	CH-CO-OH	2,6
CH <sub>3</sub> -CO-NH <sub>2</sub> (ou NR <sub>2</sub> )	2-2,1	CH <sub>2</sub> -CO-OH	2,35	CH-CO-R	2,5-2,7
CH <sub>3</sub> -C=C-C=O		CH <sub>2</sub> -CO-NH <sub>2</sub> (ou NR <sub>2</sub> )	2,1-2,2	CH-Ar	3,0
CH <sub>3</sub> -CO-R	2,0	CH <sub>2</sub> -C=C-C=O		CH-CO-Ar	3,3
CH <sub>3</sub> -Ar	2,1-2,2	CH <sub>2</sub> -CO-R	2,4		
CH <sub>3</sub> -CO-Ar	2,3-2,4	CH <sub>2</sub> -Ar	2,4		
	2,6	CH <sub>2</sub> -CO-Ar	2,7		
			2,9		
<b>Lié à un hétéroatome</b>		<b>Lié à un hétéroatome</b>		<b>Lié à un hétéroatome</b>	
CH <sub>3</sub> -NH <sub>2</sub> (ou NR <sub>2</sub> )	2,1-2,3	CH <sub>2</sub> -NH <sub>2</sub> (ou NR <sub>2</sub> )	2,5	CH-NH <sub>2</sub> (ou NR <sub>2</sub> )	2,9
CH <sub>3</sub> -NH-COR	2,8-2,9	CH <sub>2</sub> -NH-COR	3,3	CH-NH-COR	3,8-4,1
CH <sub>3</sub> -OR	3,3	CH <sub>2</sub> -OR	3,4	CH-OR	3,7
CH <sub>3</sub> -OH	3,4	CH <sub>2</sub> -OH	3,6	CH-OH	3,9
CH <sub>3</sub> -OCOR	3,7	CH <sub>2</sub> -OCOR	4,2	CH-OCOR	4,8-5,1
CH <sub>3</sub> -OAr	3,8	CH <sub>2</sub> -OAr	4,0	CH-OAr	4,0
CH <sub>3</sub> -NO <sub>2</sub>	4,3	CH <sub>2</sub> -NO <sub>2</sub>	4,4	CH-NO <sub>2</sub>	4,5-4,7
<b>Protons liés à un C insaturé:</b>	$\delta$	<b>Protons portés par un hétéroatome. Leur position dépend considérablement du solvant et de la concentration.</b>			
-C $\equiv$ CH	1,8-3,1	<b>OH</b>		<b>NH</b>	
-C=CH-	4,5-6,0	Alcool (ROH) : 0,7-5,5		Amine aliphatique (RNH <sub>2</sub> , RNH-) : 0,6-5,0	
ArH	6,5-8,2	Phénol (ArOH) : 4,5-7,1		Amine aromatique (ArNH <sub>2</sub> , ArNH-) : 2,9-4,7	
	(benzène : 7,27)	Amides (-CO-NH <sub>2</sub> , CO-NH-) : 6,0-8,5			
RCH=O	9,5-10,0	Acide (R-CO-OH) : 10,5-12,5			
ArCH=O	9,7-10,5				