

PREAMBULE

Cette charte expose les obligations auxquelles sont tenus les utilisateurs de la plateforme RMN du pôle CPM de l'Université de Lorraine.

Il est entendu qu'en adhérant à la présente charte, l'utilisateur s'engage à respecter ou à faire respecter l'ensemble des règles ci-dessous.

Les engagements sont matérialisés par la signature du présent document par chaque personne concernée, attestant ainsi qu'elle a pris connaissance de ladite charte.

1. Présentation de la plateforme

La plateforme RMN a pour objectif de rendre accessible l'outil RMN à l'ensemble de la communauté scientifique et industrielle de Lorraine. Il dispose pour cela d'un large panel de spectromètres (cf. annexe 1) allant de 100 à 600 MHz couvrant l'ensemble des applications de la RMN (liquide, solide et imagerie).

Les appareils sont installés sur le campus de la faculté des sciences de Vandoeuvre les Nancy, et un appareil est aussi disponible au technopôle de Metz. Deux appareils du site de Nancy, décrits ci-dessous, sont en libre accès après formation par une personne responsable de la plateforme.

Les deux appareils en libre accès sont :

- « 400 direct » : Un spectromètre Bruker Avance III 400 MHz équipé d'une sonde en détection directe (*Sonde BBFO 5mm : double résonance, noyaux 1H, 2H et X, détection directe des hétéronoyaux (dont 19F), gradients Z 50 G/cm, accord automatique de la sonde, d'un refroidisseur d'air BCU-05 et d'un passeur d'échantillons 60 positions.*

Cet appareil est utilisé sous forme de créneaux réservés par laboratoire.
Détection optimisée du carbone-13.

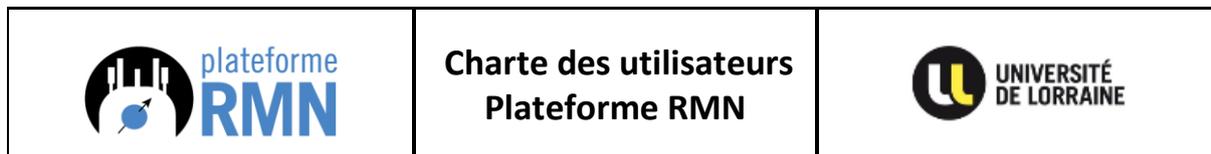
- « 400 inverse » : Un spectromètre Bruker Avance III 400 MHz équipé d'une sonde en détection inverse (*Sonde BBI 5mm : double résonance, noyaux 1H, 2H et X, détection inverse des hétéronoyaux, gradients Z 50 G/cm, accord automatique de la sonde*) et d'un passeur d'échantillons 60 positions.

Cet appareil est utilisé sous forme d'accès libre. Les expériences longues (expériences hétéronucléaires à deux dimensions notamment, >15min) sont automatiquement lancées sur la nuit (18h-8h).
Détection optimisée du proton.

Les personnels de la plateforme assurent la gestion de l'ensemble du parc instrumental de la plateforme, les analyses et les développements méthodologiques. Ils assurent en particulier le maintien des performances et la maintenance des équipements, la planification des temps d'occupation et la réservation du matériel. Ils assurent aussi la réalisation d'expériences spécifiques (RMN du solide, diffusion, variation de température...).

2. Fonctionnement et accessibilité

Les appareils de la plateforme RMN sont accessibles à tous les utilisateurs, soit par des demandes de projets particuliers (manipulations réalisées par le personnel de la plateforme et/ou les utilisateurs avancés) soit par la mise à disposition des deux appareils 400MHz.



Pour les demandes de projet particulier, les utilisateurs doivent contacter les personnes responsables afin d'en étudier la faisabilité et le cas échéant d'établir un planning d'expériences en accord avec les responsables de la plateforme.

L'utilisateur doit être formé à l'utilisation des deux appareils à 400MHz en libre accès (décrits au chapitre 1) Il devient alors autonome pour réaliser les expériences pour lesquelles il a été formé (annexe 4), et s'engage à respecter les procédures d'utilisation ainsi que les plannings (annexe 2). En cas de doute, demander au responsable de l'équipement. Concernant les périodes « sur réservation », les demandes doivent être effectuées via le site web : <https://resa-ijb.univ-lorraine.fr> et sont soumises aux responsables de la plateforme qui gèrent les plannings. Afin de satisfaire au mieux les demandes des utilisateurs, il est impératif que les demandes de réservation soient émises le plus tôt possible.

Heures d'ouverture du service : du Lundi au Vendredi de 8h à 18h. En dehors de ces créneaux, une demande devra être faite auprès du responsable de la plateforme.

La plateforme est fermée durant les périodes de fermeture de l'université.

3. Hygiène et sécurité

Chaque utilisateur est tenu de respecter les règles d'hygiène et de sécurité et de bonnes pratiques de laboratoire appliquées dans les laboratoires publics.

Il est interdit de manger et boire dans les locaux.

En raison de la présence de champs magnétiques intenses, l'accès aux appareils est strictement interdit aux personnes ayant une contre-indication médicale (pacemakers, implant chirurgical ferromagnétiques, appareils électroniques implantés, etc). Chaque permanent a la nécessité absolue de vérifier auprès de ses stagiaires cette particularité. Par ailleurs, il est interdit de pénétrer dans la zone des 5 Gauss de chacun des appareils (matérialisée par ligne jaune/noire au sol) avec tout objet ferromagnétique ou sensible au champ magnétique (clés, téléphone portable, carte magnétique, objets métalliques, etc.).

L'utilisateur est responsable de la bonne connaissance des risques chimiques et/ou biologiques associés aux échantillons qu'il apporte sur le site. Il est tenu d'informer les personnels de la plateforme des risques spécifiques et des mesures de sécurité liés à la manipulation de ses échantillons.

La teneur en oxygène des salles des spectromètres est mesurée en permanence. En cas de teneur impropre à l'accès, une alarme visuelle et sonore indiquera l'évacuation de la salle. Cette évacuation est obligatoire et doit se dérouler aussi rapidement que possible dans le calme et par les sorties indiquées par la signalisation.

Les portes des salles des spectromètres doivent être maintenues fermées afin que la température des pièces reste constante.

4. Engagement de la plateforme

Dans le cadre de la démarche qualité entreprise par la plateforme RMN, elle s'engage à satisfaire les besoins de ses utilisateurs par le développement actualisé de son savoir, le perfectionnement de ses équipements et l'amélioration continue de son organisation, ceci en conformité avec les exigences réglementaires et légales.



Les responsables de la plateforme s'engagent à étudier la faisabilité des demandes et informent le futur utilisateur de l'adéquation de ces dernières avec les instruments et les compétences de la plateforme.

Dans le cadre de la mise à disposition des appareils, les utilisateurs conservent la propriété de leurs résultats. La plateforme s'engage à ne pas utiliser ces résultats sans l'autorisation explicite de leur propriétaire.

La plateforme s'engage auprès de ses utilisateurs à :

- rendre des prestations de services de qualité.
- gérer les plannings et flux des demandes d'utilisation des spectromètres en fonction des disponibilités humaines et matérielles.
- former l'utilisateur afin qu'il soit autonome sur certains appareils mis à disposition (cf. chapitre 2).
- informer l'utilisateur de tout dysfonctionnement de nature à impacter son projet.
- répondre à toute réclamation d'un utilisateur.

5. Engagement utilisateurs

5.1 Échantillons

Tout utilisateur s'engage à fournir ses échantillons préparés selon les recommandations de la plateforme et le cahier des charges établi, notamment sur les volumes de solvants, la masse de produit maximales ou minimales et la propreté des tubes (annexe 3). La plateforme s'autorise à refuser les échantillons qui lui seront délivrés dans de mauvaises conditions.

Il s'engage également à reprendre les échantillons après analyse, ou exceptionnellement et avec l'accord des responsables de la plateforme, à indiquer la procédure d'évacuation des déchets.

5.2 Utilisation du matériel informatique

L'utilisateur s'engage à n'utiliser les ordinateurs de la plateforme que pour réaliser ses expériences. Cette utilisation doit se faire conformément à la charte informatique de l'Université de Lorraine. L'installation de logiciels sans l'accord des responsables est proscrite. Après utilisation, l'utilisateur doit se déloger de sa session. Dans le cas de l'utilisation du passeur d'échantillon, la session peut rester ouverte pendant la durée du créneau alloué au laboratoire mais doit être fermée à la fin de celui-ci.

L'utilisateur est propriétaire de ses données et est responsable de leur sauvegarde et de leur archivage. Le service de RMN effectue régulièrement une suppression des données afin de conserver de l'espace sur les disques durs.

5.3 Matériel

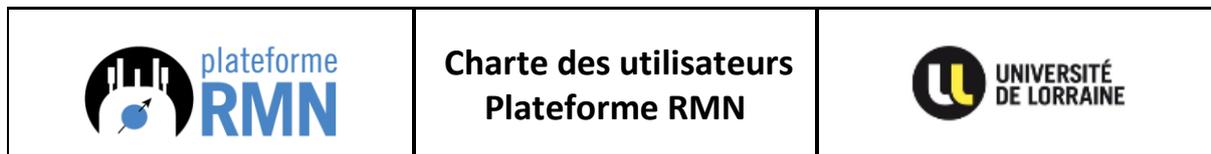
Tout utilisateur doit respecter les procédures d'utilisation et, le cas échéant (utilisateurs avancés uniquement), de mise en route et d'arrêt des appareils. Elles sont établies et modifiables uniquement par le personnel de la plateforme selon les spécifications des fournisseurs de matériel.

Aucune modification ou adaptation ne doit être apportée aux différents équipements même temporaires, sans avoir le consentement du responsable de la plateforme.

L'utilisateur s'engage à signaler aux responsables tout dysfonctionnement éventuel.

5.4 Responsabilité

Les instruments sont mis à la disposition des utilisateurs qui ont l'obligation d'en prendre soin, de respecter les règles de l'art et les consignes d'utilisation, de respecter les règles d'hygiène et sécurité conformément aux bonnes pratiques de laboratoire.



Pendant leur présence au sein de la plateforme, les utilisateurs restent sous la responsabilité du directeur de leur laboratoire et de leur organisme d'appartenance. En cas de mise en cause directe de la responsabilité d'un utilisateur ayant conduit à une détérioration d'un équipement, son équipe/laboratoire devra prendre en charge les réparations ou remplacements nécessaires.

5.5 Respect de l'accessibilité

Tout utilisateur doit respecter les conditions d'accès de la plateforme (planning, demande d'analyses, ...). Il s'engage à ne pas réserver de façon inconsidérée les instruments et garde en mémoire qu'il s'agit d'un outil commun dont il ne peut disposer sans prendre en compte les autres utilisateurs. Aucune annulation de la réservation d'un appareil dans un délai inférieur à 2h avant la réservation ne sera autorisée : la réservation sera alors facturée.

5.6 Prestation pour un tiers

Les unités de recherche ou organismes disposant d'un forfait donnant accès libre aux instruments de la plateforme RMN s'engagent à ne pas réaliser des analyses ne relevant pas de leurs activités directes de recherche. Les analyses pour un tiers ne doivent pas être facturées au nom d'une autre entité que la plateforme RMN.

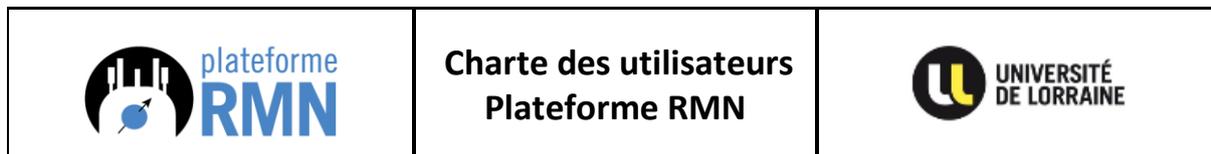
5.7 Valorisation

Tout utilisateur interne ou externe s'engage à reconnaître la plateforme pour les analyses effectuées sur les instruments, deux cas de figure sont possibles :

- a) Les analyses ont été réalisées en prestation de service uniquement : la reconnaissance se traduit, dans les articles, par la mention : « *NMR analyses were performed on the CPM NMR facility of Université de Lorraine* » dans le « Matériels et Méthodes » ; et/ou « *The authors would like to thank the CPM NMR facility of Université de Lorraine for its contribution to the present publication* » dans les remerciements.
- b) Les analyses ont impliqué des développements spécifiques et/ou une participation intellectuelle et/ou technique spécifique de la part de l'un ou plusieurs des personnels de la plateforme, qui ont eu un impact significatif sur l'avancement des travaux : le ou les personnels de la plateforme seront intégrés dans la liste des co-auteurs. Le positionnement sera discuté avec les auteurs.

Les utilisateurs sont également tenus d'informer la responsable de la plateforme et de lui indiquer les références des publications incluant des données obtenues grâce à la plateforme.

Sauf indication contraire explicitement formulée par le demandeur, la prestation ainsi que le titre du projet pourront être mentionnés dans les supports de communication de la plateforme (rapports d'activité, présentations orales, posters, brochures...). Les résultats ne seront pas divulgués par la plateforme, sauf accord préalable du demandeur.



6. Acceptation de la charte

En signant la présente charte, l'utilisateur s'engage à respecter les conditions d'accès et de travail sur la plateforme, et plus largement les différentes règles énoncées dans cette charte.

Toute personne ne respectant pas les engagements du présent document, ainsi que les protocoles en vigueur sur la plateforme ou toute autre recommandation concernant l'hygiène et la sécurité, peut se voir interdire l'accès à la plateforme par le responsable.

Fait à _____, le ____ / ____ / ____

Le responsable de la plateforme/l'équipement
(nom, signature)

L'utilisateur
(nom, signature)

ANNEXE 1 – liste des équipements

Bruker Avance III 600 (Nancy)

Sonde BBFO 5mm
Sonde TBI 5mm
Sonde BBO 10mm
Sonde MAS DVT HXY 4mm
Sonde MAS DVT HX 2.5mm
Sonde MAS DVT HXY 1.3mm
Sonde MicWB40 avec bobines 1H 25mm, 1H/13C 10mm, 1H/13C 5mm, 1H surface 2cm, 23Na 25mm
Sonde MicWB57
Sonde Diff30 avec bobines 1H 5mm, bobine 1H/13C 5mm, bobine 1H 10mm
Refroidisseur d'air BCU-X
Dispositif de rhéologie RHEO-NMR

Bruker Avance III 400 « 400 direct » (Nancy)

Sonde BBFO 5mm à accords automatiques
Sonde BBO 10mm : double résonance, noyaux 1H, 2H et X, détection directe des hétéronoyaux
Sonde DUAL 10mm : double résonance, noyaux 1H, 2H et 19F
Sonde 5mm : noyaux 1H et 2H
Refroidisseur d'air BCU-05
Passeur d'échantillons SampleCase+ 60 positions

Bruker Avance III 400 « 400 inverse » (Nancy)

Sonde TBI 5mm
Sonde BBI 5mm à accords automatiques
Passeur d'échantillons SampleCase+ 60 positions

Bruker Avance Neo Nanobay 400 (Metz)

Sonde BBFO+ 5mm à accords automatiques
Passeur d'échantillons SampleCase+ 60 positions

Bruker Avance IIIHD 300 (Nancy)

Sonde BBO 5mm
Sonde BBI 10mm
Sonde SEI Haute Température 5mm
Sonde DUAL 5mm : double résonance, noyaux 1H, 2H et 13C
Sonde DUAL 5mm : double résonance, noyaux 1H, 2H et 29Si
Sonde MAS DVT HXY 4mm
Sonde MAS VTN HX 2.5mm
Refroidisseur d'air BCU-05

Bruker Avance Biospec 24/40 (Nancy)

Gradients BGA20s
Insert de gradients BGA6s
Antennes Volumiques Rapid Biomédical 1H 1.5cm 3.5cm, 5cm, 9cm, 16cm
Antenne « Litzcoil » Doty 15.5cm
Antennes de surface 1H/13C et 1H/31P

ANNEXE 2 – plannings d’utilisation du « 400 direct » et du « 400 inverse » du site de Nancy et utilisation du système de Gestion et de Réservations de Ressources (GRR).

planning d'utilisation du spectromètre 400MHz direct (sonde BBO)

(hors périodes de fermeture de la faculté des sciences)

	Lundi	Mardi	Mercredi	Jeudi	Vendredi	Samedi	Dimanche
8h -14h	Service commun	plein N ₂ L2CM	L2CM	L2CM	Service commun	sur réservation	sur réservation
14h-18h	LERMAB	L2CM	L2CM	LERMAB	sur réservation	sur réservation	sur réservation
nuit	LERMAB	L2CM	L2CM	LERMAB	sur réservation	sur réservation	sur réservation

planning d'utilisation du spectromètre 400MHz inverse (sonde BBI)

(hors périodes de fermeture de la faculté des sciences)

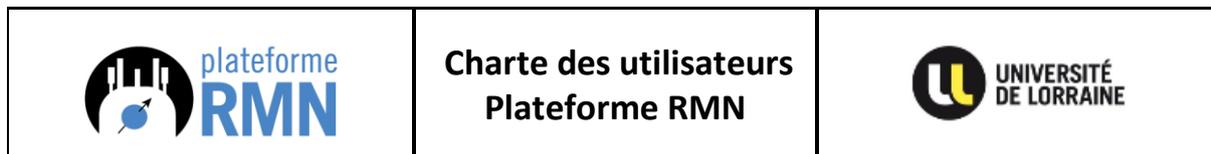
accès libre: seulement expériences courtes en journée (8h-18h)

	Lundi	Mardi	Mercredi	Jeudi	Vendredi	Samedi	Dimanche
8h -14h	accès libre	accès libre	plein N ₂ accès libre	accès libre	accès libre	sur réservation	sur réservation
14h-18h	accès libre	accès libre	accès libre	accès libre	Service commun	sur réservation	sur réservation
nuit	accès libre (expériences longues)	accès libre (expériences longues)	accès libre (expériences longues)	accès libre (expériences longues)	sur réservation	sur réservation	sur réservation

réservations auprès de:

Younes BOUIZI Younes.Bouizi@univ-lorraine.fr

Sébastien LECLERC Sebastien.Leclerc@univ-lorraine.fr



1. Le planning d'utilisation de la plateforme RMN est accessible via un navigateur WEB à cette URL : <https://resa-ijb.univ-lorraine.fr>

2. Pour vous connecter, utilisez votre identifiant UL (ex : Dupont5) ainsi que votre mot de passe. Si vous êtes déjà enregistré comme utilisateurs autorisés de GRR, passez à l'étape suivante, sinon vous serez alors identifiés comme « visiteur » et seule la consultation est possible. Pour effectuer des demandes de réservation et intégrer la liste des utilisateurs, il faut faire une demande en envoyant votre « Identifiant UL » à : cpm-plateforme-rmn-contact@univ-lorraine.fr;

3. L'écran principale affiche une vue de l'ensemble des spectromètres du domaine « **plateforme RMN** » sous la forme d'un calendrier (vue de la semaine en cours)

L'utilisateur peut :

- choisir le mode d'affichage des réservations (affichage « jour » en cliquant sur le jour, « semaine » en cliquant sur le numéro de la semaine, « mois » en cliquant sur le mois),
- sélectionner le jour de la réservation dans un calendrier,
- choisir le domaine et le spectromètre du domaine à afficher, ici le domaine est « **Plateforme RMN** »,
- en cliquant sur une réservation dans le planning, l'utilisateur peut en visualiser les détails.

4. Pour réserver un spectromètre sur une plage horaire donnée, l'utilisateur choisit le planning (vue "jour", "semaine" ou "mois") et le spectromètre à réserver. Puis il clique, dans le planning, sur la petite croix de couleur de la case qui correspond au début de la réservation. Une fiche de réservation apparaît, l'utilisateur doit la compléter avant de valider.

- Les réservations sont modérées et sont effectuées au nom de la personne connectée.
- Il est important de remplir le champ « brève description » avec le nom de votre unité de recherche (ex : LEMTA, L2CM, LERMAB, ...) et votre Nom.
- En option (sans obligation), le champ « description complète » peut renseigner le type d'expérience : solide, liquide, le noyau (1H, 13C, 29Si, 27Al,...), etc ...
- Choisir son laboratoire dans la liste.
- Choisir la date de début et fin de la réservation.
- Le domaine : ici « Plateforme RMN ».
- Le spectromètre à réserver.
- Le type de réservation : « Réservation spectromètre », les autres paramètres sont réservés aux administrateurs de la plateforme.
- Pour valider la demande, il faut cliquer sur « Enregistrer »

5. Il est possible de modifier ou supprimer une réservation :

- Comme pour la réservation, il est nécessaire de s'identifier pour modifier ou supprimer une réservation.
- Les personnes habilitées à supprimer ou modifier une réservation sont : le propriétaire de la réservation lui-même, à condition que la réservation ne soit pas passée, le gestionnaire de la ressource, l'administrateur général de GRR ou l'administrateur restreint du domaine concerné.
- Il faut cliquer sur la réservation à modifier ou supprimer puis, dans la nouvelle page qui s'ouvre, cliquer sur le lien correspondant à l'action souhaitée (suppression ou modification).

ANNEXE 3 – recommandations pour la préparation des échantillons

La réalisation d'expériences de RMN haute résolution nécessite tout d'abord un échantillon de bonne qualité répondant à un certain nombre de contraintes.

Choix des tubes de RMN

Les tubes de RMN doivent être de bonne qualité, propres et secs avant utilisation. La sensibilité, notamment en RMN du proton, est telle que toute impureté sera détectée et pourra nuire à la qualité ou à l'interprétation de votre analyse. La longueur minimum de ces tubes doit être de 178 mm. Le magasin central de l'université propose trois qualités de tubes compatibles avec les appareils. Les tubes « haut débit » par boîte de 100 (MAG-VTRMN05 – Wilmad WG-1000-7) sont suffisants pour les analyses totalement automatisées avec passeur d'échantillons. Les tubes standard (MAG-VTRMN01 – Wilmad WG-1228) conviennent pour la plupart des expériences et pourront donner une homogénéité de champ magnétique légèrement meilleure. Les tubes haute qualité (MAG-VTRMN011 – Wilmad 527-PP) permettent d'obtenir la meilleure homogénéité de champ magnétique quand une très haute résolution est souhaitée.

Remplissage des tubes

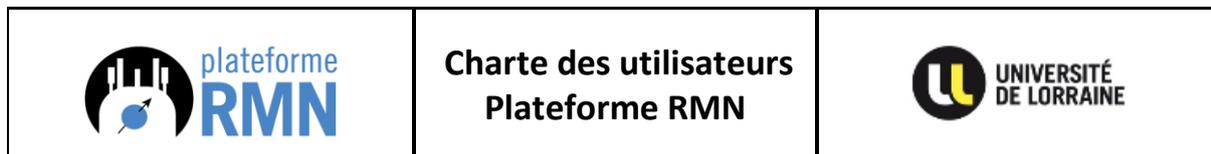
La résolution d'un spectre RMN dépend du réglage de l'homogénéité du champ magnétique dans lequel se trouvera plongé l'échantillon. Ce réglage est délicat et doit être réalisé pour chaque échantillon, il est fortement dépendant de la hauteur de liquide dans le tube. Pour une optimisation du réglage automatique de l'homogénéité, il est ainsi recommandé d'utiliser une hauteur de remplissage constante de 40mm (correspondant à environ 600 μ l de solution pour des tubes de 5mm).

Choix du solvant deutéré

Il est nécessaire d'utiliser en RMN des solvants deutérés qui permettent de stabiliser et d'effectuer le réglage de l'homogénéité du champ magnétique par observation du deutérium. Les produits deutérés ne sont jamais à un taux d'enrichissement isotopique de 100%. Le résidu de solvant non deutéré conduira à un signal protonique qui quelquefois se superposera aux signaux de la molécule ou des molécules d'intérêt.

Concentration du soluté

La RMN est une technique peu sensible. Il est donc nécessaire de concentrer vos échantillons. Cette affirmation est valide pour les mesures des noyaux en concentration isotopique faible comme le carbone 13. Une concentration de 0.6 mol.l⁻¹ permet une analyse rapide (15 à 20 mn) en ¹³C. Cette concentration correspond à 40 mg d'un composé de masse molaire 100 g.mol⁻¹ dans 580 μ l (volume correspondant à un tube de 5 mm rempli de 4 cm de liquide). Si votre concentration est très inférieure à cette valeur il faudra prévoir un temps d'expérimentation plus long.



ANNEXE 4 – liste non exhaustive des expériences réalisables sur les deux spectromètres 400MHz en libre-service

- Expérience standard ^1H . (**PROTON**)

Durée approximative : 2 mn

La fenêtre spectrale par défaut s'étale de -4 à 16ppm.

- Expérience ^1H avec élimination du solvant. (**WATERSUP**)

Durée approximative : 2 mn

Cette expérience utilisant les gradients permet d'obtenir le spectre d'un soluté en faible concentration ($\sim 1\text{mM}$) dans de l'eau légère dont le signal doit être supprimé.

- Expérience 2D COSY. (**COSY45SW**)

Durée approximative : 20 mn

C'est la plus simple des expériences de corrélation homonucléaire qui permet d'obtenir, via le couplage scalaire, les connectivités entre protons.

- Expériences 1D et 2D NOESY et ROESY.

Durée approximative : suivant le système étudié (une nuit en général)

L'expérience NOESY permet de mettre en évidence la proximité spatiale des protons. Elle peut être un outil de choix pour élucider une structure.

- Expérience standard ^{13}C découplé du proton. (**13C CPD**)

Durée approximative : de 20 mn à plusieurs heures suivant la concentration du soluté

C'est l'expérience de base permettant l'observation du ^{13}C . Les carbones quaternaires ou des carboxyles peuvent être plus difficiles à mesurer du fait d'une relaxation lente combinée à une plus faible sensibilité. Les spectres obtenus ne sont pas quantitatifs. Cette expérience est à réaliser en priorité sur le « 400 direct » qui présente une meilleure sensibilité pour l'observation directe du ^{13}C .

- Expérience Attached Proton Test. (**13C APT**)

Durée approximative : de 40 mn à plusieurs heures suivant la concentration du soluté

Cette expérience permet de différencier les carbones portant 1 ou 3 protons des carbones quaternaires ou portant 2 protons. Les premiers conduiront à un signal " négatif " les seconds à un signal " positif " dans le spectre. Cette expérience est à réaliser en priorité sur le « 400 direct » qui présente une meilleure sensibilité pour l'observation directe du ^{13}C .

- Expérience quantitative ^{13}C découplé du proton.

Durée approximative : de 1 à plusieurs heures suivant la concentration du soluté

Cette expérience permet de mesurer de manière quantitative le ^{13}C . Elle nécessite un temps d'expérimentation nettement supérieur. Une préparation particulière de l'échantillon (ajout d'un agent relaxant) peut être nécessaire. Cette expérience est à réaliser en priorité sur le « 400 direct » qui présente une meilleure sensibilité pour l'observation directe du ^{13}C .

- Expérience standard ^{19}F . (**^{19}F**)

Durée approximative : 10 mn

C'est l'expérience de base permettant l'observation du ^{19}F .

- Expérience standard ^{31}P découplé du proton. (**^{31}P**)

Durée approximative : de 10 mn à plusieurs heures suivant la concentration du soluté

C'est l'expérience de base permettant l'observation du ^{31}P . La sonde du spectromètre « 400 direct » étant optimisée pour les noyaux ^{31}P et ^{13}C en observation directe, il sera préférable d'y réaliser ces expériences.

- Expérience 2D de corrélation 1H-noyau X directement lié (**HSQCETGP**)

Durée approximative : 1 heure

L'expérience HSQC avec utilisation des gradients permet d'obtenir en un temps d'expérimentation court avec des concentrations faibles (~50 mM) la carte de corrélation entre proton(s) et noyau X chimiquement liés (via les couplages ^1J entre protons et noyau X). Elle s'avère très utile pour identifier sans ambiguïté les différentes résonances des spectres protoniques et X. Cette expérience est à réaliser en priorité sur le « 400 inverse » qui présente une meilleure sensibilité pour l'observation ^1H .

- Expérience 2D de corrélation ^1H - ^{13}C non directement lié (**HMBCGP**)

Durée approximative : 3 heures

L'expérience HMBC avec utilisation des gradients permet d'obtenir en un temps d'expérimentation court avec des concentrations faibles (~50 mM) la carte de corrélation entre proton(s) et ^{13}C non chimiquement liés (via les couplages ^nJ ($n>1$) entre protons et carbone 13). C'est un outil puissant pour la résolution de structure et l'identification des carbones quaternaires. Cette expérience est à réaliser en priorité sur le « 400 inverse » qui présente une meilleure sensibilité pour l'observation ^1H .