

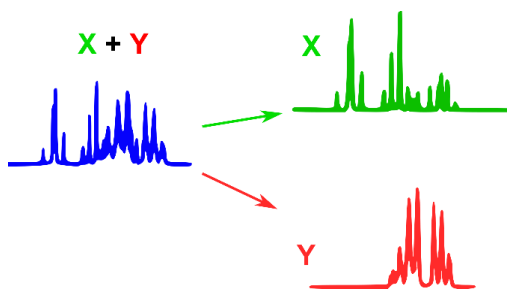
DÉCOMPOSITION DE SPECTRES RMN DE MÉLANGES COMPLEXES DE PETITES MOLÉCULES

Piersanti, Elena¹, Cherni, Afef², Anthoine, Sandrine², Chaux, Caroline², Shintu, Laetitia¹, Yemloul, Mehdi¹, Torrèsani, Bruno²

¹Aix Marseille, CNRS, Centrale Marseille, iSM2, Marseille, France. 52 Avenue Escadrille Normandie Niemen, 13013 Marseille.

²Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, I2M, Marseille, France. Chateau Gombert – 39 rue F. Joliot Curie– 13453 Marseille.

Malgré le développement de méthodes de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN), permettant d'augmenter la résolution spectrale, la complexité croissante des échantillons conduit à des spectres surchargés qui compromettent les performances analytiques de cette technique [1]. L'association des méthodes mathématiques de traitement du signal, avec les développements méthodologiques de la RMN, est une alternative prometteuse [2, 3]. Dans ce contexte, ce travail se concentre sur deux aspects liés à l'analyse de mélanges complexes par RMN. Premièrement, le développement et l'optimisation de séquences d'impulsions RMN. Deuxièmement, l'application aux données RMN d'algorithmes de séparation de source à l'aveugle (BSS). Cette technique de séparation des sources était, à l'origine, utilisée dans le domaine de l'acoustique, notamment pour la reconstruction des sources audio individuelles à partir de plusieurs mélanges de sons [4,5]. Cette méthode de séparation, a montré son efficacité pour la décomposition des spectres dans le domaine de la RMN 1D et 2D [6, 7, 8, 9]. Dans ce cas, la décomposition des spectres est réalisée à l'aide de corrélations, essentiellement des variations de concentrations, détectées sur une série de jeux de données. Ce qui permet l'extraction des spectres purs des constituants du mélange. Plusieurs types d'échantillons, tels que des mélanges synthétiques de terpènes, ont été utilisés pour évaluer l'efficacité des algorithmes d'extraction des spectres purs.



- [1] Kim, H. K., Choi, Y. H., Verpoorte, R., 2011, Trends Biotechnol. 29 (6), 267–275. <https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2011.02.001>.
- [2] Chaux, C., Combettes, P. L., Pesquet, J.-C., Wajs, V. R., 2007, Inverse Probl. 23 (4), 1495–1518. <https://doi.org/10.1088/0266-5611/23/4/008>.
- [3] Comon, P.; Jutten, C. Academic press, 2010.
- [4] Vincent, E., Gribonval, R., Fevotte, C., 2006, IEEE Trans. Audio Speech Lang. Process. 14 (4), 1462–1469. <https://doi.org/10.1109/TSA.2005.858005>.
- [5] Isomura, T., Toyozumi, T., 2019, Sci. Rep. 9 (1), 7127. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-43423-z>.
- [6] Nuzillard, D., Bourg, S., Nuzillard, J.-M. J., 1998, Magn. Reson. 133 (2), 358–363. <https://doi.org/10.1006/jmre.1998.1481>.
- [7] Toumi, I., Caldarelli, S., Torrèsani, B., 2014, Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc. 81, 37–64. <https://doi.org/10.1016/j.pnmrs.2014.06.002>.
- [8] Toumi, I., Torrèsani, B., Caldarelli, S. 2013, Anal. Chem. 85 (23), 11344–11351. <https://doi.org/10.1021/ac402085x>.
- [9] Cherni, A., Piersanti, E., Anthoine, S., Chaux, C., Shintu, L., Yemloul, M., Torrèsani, B. 2019, Faraday Discuss. 218, 459–480. <https://doi.org/10.1039/C9FD00014C>.

Acknowledgements: This project has received funding from the Excellence Initiative of Aix-Marseille University – A*midex, a French “Investissement d’Avenir” program.