

Sommaire :

1. Principes fondamentaux de la spectroscopie

Ce chapitre d'introduction pose les bases physiques communes à toutes les méthodes d'analyse structurale.

- La nature du rayonnement électromagnétique (longueur d'onde, fréquence, énergie).
- Les régions du spectre électromagnétique et leur impact sur la matière (transitions nucléaires, électroniques, vibrationnelles, rotationnelles).
- Intensité et largeur des raies spectrales (population des niveaux d'énergie, loi de Boltzmann).

2. Spectrométrie de masse (SM)

Bien qu'il ne s'agisse pas d'une spectroscopie à proprement parler (pas d'absorption de lumière), c'est la méthode de choix pour déterminer la formule brute et le squelette d'une molécule.

- Principes de base : ionisation, accélération, déflexion et détection.
- Les techniques d'ionisation (impact électronique, électrospray, MALDI).
- Analyse de la fragmentation : identification des morceaux de la molécule pour reconstituer le puzzle.
- Utilisation des isotopes pour déterminer la formule brute.

3. Spectroscopie infrarouge (IR) et Raman

Cette section se concentre sur l'analyse des fonctions chimiques (groupements d'atomes) présentes dans une molécule.

- Théorie de la vibration moléculaire (modèle de l'oscillateur harmonique).
- Modes de vibration : élongation (*stretching*) et déformation (*bending*).
- Identification des groupes fonctionnels (ex: hydroxyles, carbonyles, amines) grâce aux fréquences caractéristiques.
- Complémentarité entre la spectroscopie Infrarouge et la spectroscopie Raman (règles de sélection).

4. Spectroscopie de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) : Principes de base et RMN du proton (^1H)

La RMN est l'outil le plus puissant du sommaire pour cartographier précisément la connectivité des atomes d'hydrogène.

- Le spin nucléaire et le comportement des noyaux dans un champ magnétique externe.
- Le phénomène de résonance et le **déplacement chimique** (δ).

- L'intégration des signaux (détermination du nombre de protons équivalents).
- Le couplage spin-spin (multiplicité des signaux : doublets, triplets, etc.) et la constante de couplage (J).

5. Spectroscopie RMN du carbone-13 (^{13}C) et RMN multidimensionnelle

Ce chapitre pousse la RMN plus loin pour analyser directement le squelette de carbone et résoudre des structures complexes.

- Spécificités de la RMN du ^{13}C (faible abondance naturelle, sensibilité).
- Découplage de protons et spectres DEPT (distinction entre CH_3 , CH_2 , CH et carbones quaternaires).
- Introduction à la RMN bidimensionnelle (RMN 2D) : corrélations homonucléaires (COSY) et hétéronucléaires (HSQC / HMBC) pour lier les carbones et les hydrogènes voisins.

6. Diffraction des rayons X (DRX)

Pour clore la détermination structurale, l'ouvrage aborde la seule méthode permettant d'obtenir une image "directe" et absolue en 3D de la molécule dans un cristal.

- Principes de la cristallographie et de la diffraction.
- La loi de Bragg.
- Détermination de la carte de densité électronique.
- Obtenu final : distances de liaison, angles de liaison et stéréochimie absolue.

7. Stratégie combinée pour la résolution de structures

L'épilogue du livre est purement pratique. Simon Duckett y propose une méthodologie pour croiser les données de tous les chapitres précédents :

1. Trouver la masse et la formule brute (Masse).
2. Repérer les fonctions chimiques clés (Infrarouge).
3. Connecter les atomes entre eux (RMN ^1H et ^{13}C).
4. Valider ou cristalliser si un doute subsiste (Rayons X).