

S. Betoule, M. Leite, U. Garnier, S. Nicolas,  
É. Dubus, G. Naboulet, C. Marin, M. Vincent

# Outils numériques au service de la chimie expérimentale

CAPES  
Agrégation

17 manipulations  
expérimentales détaillées  
et commentées



ellipses

# Table des matières

<b>1 Présentation des outils numériques de simulation</b>	<b>7</b>
1.1 Simulation de spectres IR et RMN	9
1.2 Méthodes de chimie quantique	18
1.3 Méthode de HÜCKEL	28
<b>2 Présentation des outils numériques d'acquisition</b>	<b>39</b>
2.1 Création d'une chaîne de mesure via une carte Arduino™	40
2.2 Suivi temporel assisté par ordinateur	54
2.3 Titrage automatique et semi-automatique	67
<b>3 Présentation des outils numériques de traitement de données</b>	<b>79</b>
3.1 Traitement des incertitudes	80
3.2 Régression linéaire	116
<b>4 Présentation des bases de données numériques</b>	<b>133</b>
4.1 Base de données de grandeurs physico-chimiques et de spectres	135
4.2 Sécurité au laboratoire	141
<b>5 Les outils numériques au service de l'analyse quantitative</b>	<b>155</b>
Titrage de l'acide acétique dans le vinaigre	156
Titrage de l'eau de Javel	173
Titrage du dioxygène dissous dans l'eau : méthode de WINKLER	188
Titrage par précipitation sélective des ions halogénure $\text{Cl}_{(\text{aq})}^-$ et $\text{I}_{(\text{aq})}^-$	201
Comparaison de deux méthodes de titrage électrochimique	214
Dosage du cuivre dans le laiton	231
Dosage de la quinine dans le Schweppes®	242

<b>6 Les outils numériques au service de l'électrochimie</b>	<b>259</b>
Étude de la pile DANIELL	260
Électrosynthèse de l'eau de Javel	275
Étude de l'accumulateur au plomb	288
Tracé du diagramme $E$ -pNH <sub>3</sub> de l'argent	301
<b>7 Les outils numériques au service de la chimie verte</b>	<b>317</b>
Synthèse d'un dérivé de chalcone	325
Réaction de DIELS-ALDER	338
Tosylation du $\beta$ -citronellol	354
<b>8 Mesure et suivi de grandeurs physico-chimiques</b>	<b>367</b>
Création d'un colorimètre via une carte Arduino <sup>TM</sup>	368
Détermination d'une enthalpie de réaction par calorimétrie	381
Comparaison des titrages pH-métrique et calorimétrique de l'acide phosphorique	394
<b>Index</b>	<b>413</b>