

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

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

6	Les outils numériques au service de l'électrochimie	259
	Étude de la pile DANIELL	260
	Électrosynthèse de l'eau de Javel	275
	Étude de l'accumulateur au plomb	288
	Tracé du diagramme E - $p\text{NH}_3$ de l'argent	301
7	Les outils numériques au service de la chimie verte	317
	Synthèse d'un dérivé de chalcone	325
	Réaction de DIELS-ALDER	338
	Tosylation du β -citronellol	354
8	Mesure et suivi de grandeurs physico-chimiques	367
	Création d'un colorimètre via une carte Arduino TM	368
	Détermination d'une enthalpie de réaction par calorimétrie	381
	Comparaison des titrages pH-métrique et calorimétrique de l'acide phosphorique	394
	Index	413