

MC8 : Apport des outils numériques en chimie expérimentale - Réaction de Wittig dans l'eau (BUP)

Présentée par Mélanie Anizan

Remarques générales : très bon montage pour ce qui est du fond, mais la forme reste à améliorer. Les manipulations présentées sont pertinentes et complémentaires, la manip imposée a même pu être rattachée au sujet. Le fonctionnement des appareils et les gestes manipulateurs sont connus. Toutefois la manière dont sont présentés le sujet et les manipulations sont à retravailler de manière à fluidifier et clarifier le discours. Les éléments de fond étant déjà présents, il s'agit avant tout de réorganiser un peu le discours pour en faire ressortir les éléments essentiels : pourquoi l'informatique en chimie (apport supplémentaire par rapport à l'expérimentateur) ? Quelles sont les possibilités offertes ? Quelles sont les limites ? La partie manipulative servant ensuite à démontrer comment le numérique est utilisé.

Le piège ici est le risque de faire passer l'explication des manipulations chimiques avant celle de la place du numérique, ce qui donne l'impression que le sujet est relégué au second rang. Ce piège a été évité dans la partie I, mais pas dans la partie II.

Les réponses aux questions étaient bonnes mais à quelques moments il nous a fallu creuser pour les avoir. Une utilisation plus efficace des fiches ou d'illustrations peut permettre de s'épargner des explications laborieuses. En particulier sur les incertitudes !

Plan présenté :

- I) Utilisation du numérique pour anticiper une manipulation et exploiter les résultats

Titration de l'acide aspartique (Cachau 239)

- II) Utilisation du numérique en chimie organique pour exploiter une réactivité

Addition nucléophile d'un organomagnésien sur le cinnamaldéhyde (Gruber p419)

- III) Utilisation du numérique pour identifier un composé

Manip imposée : réaction de Wittig dans l'eau

Plan proposé :

I) Simulation d'expérience et traitement de données automatique

Titration de l'acide aspartique (Cachau p239)

II) Prédiction de la réactivité d'une molécule

Addition nucléophile d'un organomagnésien sur le cinnamaldéhyde (Gruber p419)

III) Assistance à la caractérisation d'un composé

Manip imposée : réaction de Wittig dans l'eau

Le plan que je propose est le même au niveau des expériences et du discours, les titres ont juste été changés pour éviter les répétitions et faire ressortir de manière plus claire le rôle du numérique dans les manipulations présentées. Il ne faut pas oublier que le plan reste la manière la plus efficace de transmettre au jury les points les plus importants de votre argumentation auxquels il va devoir prêter attention.

De manière générale, éviter les titres longs ou répétitifs et les mots qui laissent place à l'interprétation. Par exemple « Utilisation du numérique pour identifier un composé » prête à confusion car on pourrait croire que l'outil informatique va de lui-même identifier votre composé (ce qui est possible en DRX par exemple où certains logiciels font correspondre le diffractogramme avec leur base de données pour renvoyer l'espèce chimique et la maille cristallographique du composé).

Introduction : (2 minutes)

Premier ordi en 1930, et apparition du binaire en 1940. Définition du numérique (Outil de calcul d'informations ou de grandeurs physiques au moyen de caractères, tels que des chiffres, ou au moyen de signaux à valeurs discrètes). Annonce du plan.

L'introduction est un peu courte (2 minutes) et laisse donc de la marge pour développer le propos. Si vous choisissez de faire l'historique court du domaine (ce qui est ici amorcé), alors vous devez expliquer comment les évolutions de l'informatique lui ont fait acquérir le stade d'outil de laboratoire aujourd'hui. Sinon, vous pouvez aussi faire un tour d'horizon de l'informatique moderne et des enjeux dans différents domaines scientifiques (mathématique théorique, physique, biologie...) pour recentrer ensuite sur la chimie. Cette seconde option nécessite plus de culture générale sur des domaines autres que la chimie donc l'historique reste probablement l'option la moins risquée.

Le principal problème ici reste donc qu'entre Alan Turing et l'informatique moderne, il s'est passé des choses qu'il aurait fallu expliciter. Les deux plus importantes sont la

démocratisation de l'informatique qui se fait au cours des années 1980 et la montée en puissance des processeurs. Les ordinateurs auparavant étaient soit mécaniques soit programmables (l'utilisateur d'en sert en entrant des lignes de code). Les années 1980 verront apparaître les premières interfaces graphiques rendant beaucoup plus accessible l'utilisation des machines. En parallèle, l'invention du premier microprocesseur en 1971 et leur développement exponentiel suivant la loi de Moore permet une montée en puissance rapide des machines qui deviennent alors un outil de choix pour effectuer des calculs ou opérations logiques longues et fastidieuses. Ainsi la simplicité d'utilisation combinée à la puissance croissante de calcul ont permis au numérique d'être progressivement adopté par les scientifiques.

I) Utilisation du numérique pour anticiper une manipulation et exploiter les résultats (40 minutes environ)

L'utilisation du logiciel pour simuler les courbes de titrages a été bien présentée, et l'intérêt de cette simulation (comparaison des méthodes pH/conductimétrie sans avoir à faire l'expérience) a bien été mise en avant. Le fonctionnement du logiciel est connu mais a dû faire l'objet de questions au lieu d'être présenté spontanément. Le retour des résultats expérimentaux par rapport aux simulations a bien été effectué avec une illustration du recul à avoir sur la simulation (problèmes avec les conductivités des acides aminés). Le fonctionnement du pH-mètre et du conductimètre sont connus. Pour un titrage avec plusieurs acidités, une fiche avec les domaines de prédominance des espèces peut être utile afin de faciliter le discours, notamment sur les variations de quantités d'ions au cours du titrage.

Un bémol toutefois : je vous déconseille fortement d'effectuer à la fois un dosage pH-métrique et un conductimétrique dans le même bécher, en particulier si vous n'exploitez ensuite que l'un d'entre eux. Mettez les deux montage côte à côte et effectuez seulement celui qui vous intéresse. Ou juste faites celui qui vous intéresse et mentionnez que l'autre a déjà été effectué en préparation.

Les incertitudes ont ensuite été présentées avec le logiciel GUM. Je vous conseille d'avoir sous le coude une fiche dédiée à expliquer les incertitudes avec un schéma de gaussienne pur faciliter l'explication. Les incertitudes des deux méthodes de titrage ont été comparées ce qui est très intéressant pour montrer une autre limite de la simulation.

II) Utilisation du numérique en chimie organique pour exploiter une réactivité (environ 20 minutes)

Étapes de lavage, puis utilisation d'Hulis pour prédire les sites d'addition par contrôle de charge ou contrôle orbitalaire. Le logiciel est bien présenté, les étapes de lavages sont bien expliquées mais après que la question ait été posée. Il aurait été plus judicieux de faire les présentations dans l'ordre inverse : c'est le logiciel qui est ici le cœur du sujet. En faisant passer les étapes de lavage en premier et en leur accordant

beaucoup de temps, on a l'impression que l'on se focalise sur la réaction et que l'outil informatique ne viens que justifier à posteriori la caractérisation du produit.

Le choix de la manip est très pertinent car le réactif est le même que pour la manip imposée. Les réponses aux questions ont été de bonne qualité. Attention aux petites erreurs de manip en orga (erlenmeyer sous l'ampoule à décanter, garder un bout de papier pour déposer la verrerie sale dégoulinante).

III) Utilisation du numérique pour identifier un composé (20 minutes environ)

Essorage et CCM effectués. Le front du solvant n'était pas droit (problème à cause du fond du bocal ?). Attention à bien casser les morceaux au cours de l'essorage. Les tâches sur la CCM n'ont pas spontanément été attribuée et ont dû faire l'objet de questions avant que leur identité n'ait été donnée. La température de fusion est inférieure à celle attendue, mais la justification a été donnée spontanément : le produit n'était pas pur.

Le fait d'avoir simulé le spectre RMN avec mestrenova pour rattacher cette manip au sujet était une très bonne idée, ne pas hésiter à l'exploiter plus quitte à passer moins de temps sur la partie I.

Conclusion : (1 minute)

Le numérique est un outil, l'interprétation reste le travail de l'expérimentateur. Les modèles utilisés par le numérique et la chimie théorique ont été brièvement mentionnés.

Il manque du contenu sur cette conclusion. Quitte à entrer dans la chimie computationnelle, autant ajouter plus de détails, par exemple sur les modélisations de médicaments par l'industrie pharmaceutique, les modélisations de repliement de protéines, ...