

MC8 : UTILISATION DE BASE DE DONNÉE EN CHIMIE EXPÉRIMENTALE

Présenté par Gaetan Gaston

1 Des bases de données pour préparer l'expérience

Manip présentée : séparation de l'acide benzoïque du 2-naphtol.

But : séparer grâce à la différence de pKa. Handbook :

Acide benzoïque : pKa= 4,2

Naphtol : pKa = 9,53

Ref : Daumarie p157

On peut utiliser une BDD pour connaître l'aspect d'un produit

2 Des bases de données pour valider l'expérience

2.1 Les bases de donnée en chimie organique

Friedel-Craft : Produit présent sur la SDBS : base de donnée de spectre IR et RMN

2.2 Limite des bases de données

Manip présenté : synthèse de l'acétate de benzyl : Gruber p403

Meilleure manip : addition d'un organomagnésien sur le cinnamaldéhyde. Gruber p419

Nécessité de passer par le calcul numérique

NMR DB, Huckel pour les orbitales, gaussian pour le spectre IR ?

3 Conseil

- Une base de donnée n'est jamais suffisante : besoin d'un chimiste : bien axer son discours autours.
- Bien de présenter des bases de donnée de sécurité
- Bien de présenter un Handbook plus fiable qu'internet + intérêt historique.