

Utilisation des ressources informatiques à disposition à l'agrégation

Manon LECONTE, Jean-François OLIVIERI
École normale supérieure

7 septembre 2021

Ce document ainsi que les manuels d'utilisation de tous les logiciels présentés sont téléchargeables sur le Google Drive des étudiants à la préparation à l'agrégation.

Vous trouverez sur le lien suivant la liste des ressources (matériel, bibliographie et logiciels) disponibles le jour du concours :

<http://agregation-chimie.fr/index.php/les-epreuves-orales/materiels-livres-ressources-numeriques>

Chimgéné

Logiciel très complet de chimie générale permettant notamment :

- de tracer des diagrammes E-pH (utiles en montages) ;
- d'étudier la cinétique des réactions ;
- de représenter des mailles cristallines ;
- de créer des courbes de répartition (plutôt que des diagrammes de prédominance).

Sites Internet :

- Téléchargement et guide : Site de Chimsoft, actuellement en reconstruction.
http://www.chimsoft.com/boutique/product.php?id_product=17

Remarques sur l'installation :

Système d'exploitation : Windows (version antérieure à Windows 10).

Logiciel payant ; une version de démonstration devrait exister, *a priori* presque complète.

Le logiciel est installé sur les ordinateurs de Montrouge.

Exercice :

Cinétique : https://www.ac-paris.fr/portail/upload/docs/application/pdf/2012-12/approche-numerique-contrôle-cin-contrôle-thermo-pcsi_2012-12-09_19-26-41_842.pdf

(Exercice visant à comparer contrôle thermodynamique et contrôle cinétique, sur un ensemble de réactions du type $C \xrightleftharpoons[k_2]{k_{-2}} A \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} B$ avec des exemples pour les constantes de vitesse.)

E-pH : Expliciter sur un schéma la méthode de Winkler (titrage du dioxygène dissous dans une eau - *Cachau-Rédox* : une solution de sulfate de manganèse (II), et de KI en milieu basique est préparée, que l'on acidifie après 30 minutes, avant de la titrer par une solution de thiosulfate).

Mieplot

Logiciel permettant entre autres de tracer la courbe reliant la taille des nanoparticules en solution avec l'absorption maximale de celles-ci. Celui-ci se consacre principalement aux phénomènes de diffusion.

Sites Internet :

- Téléchargement et informations : <http://www.philiplaven.com/mieplot.htm>
La page du site comporte quelques exemple, et un dossier d'aide est présent dans le téléchargement.

- Exemple d'utilisation pour des nanoparticules d'or : http://www.nhn.ou.edu/~bumm/NanoLab/pdf/Au_NP_spectrophotometry_activity.pdf (donne la démarche à suivre pour utiliser le logiciel et exporter les données)

Remarques sur l'installation :

Système d'exploitation : Windows.

Erreur fréquente à l'installation décrite dans le lien de téléchargement :

Users of PCs configured in languages other than English may find that MiePlot fails to start correctly - giving an error message about "international" versions of Windows expecting "," (rather than ".") as the decimal symbol. For example, MiePlot assumes that numbers will be entered in the form "1.25", not "1,25". In fact, error-checking routines will automatically convert such entries into the form expected by MiePlot.

To overcome this problem in Windows 10, you should select "Control Panel" from the Windows Start menu, followed by "Region" and then "Formats". Click on "Additional settings" and then under the "Numbers" tab, select "." as the "Decimal symbol".

Exercice :

Faire une courbe reliant le maximum d'absorption d'une solution de nanoparticules d'or avec la taille des particules en solution (cf. BUP 952, mars 2013 - [Synthèse et détermination de la taille de nanoparticules d'or](#)).

Gum_mc - Calcul d'incertitudes

Gum_mc est un logiciel de calcul d'incertitudes composées, il décrit clairement les différents types d'incertitudes et permet de les calculer très rapidement avec un peu d'habitude. Très utile en général, que ce soit pour les leçons de physique et les montages de chimie. En cas de difficulté avec les incertitudes, nous invitons à la lecture de la ressource suivante : BUP 968, novembre 2014 - [Des incertitudes sur la notion d'incertitude](#).

Sites Internet :

- Téléchargement : http://jeanmarie.biansan.free.fr/gum_mc.html
- Données sur les incertitudes présentes sur le site de Culture SciencesChimie :
<http://culturesciences.chimie.ens.fr/content/les-incertitudes-de-type-et-b-en-chimie-application-%C3%A0-un-dosage-par-la-m%C3%A9thode-de-mohr> ;
<http://culturesciences.chimie.ens.fr/content/estimation-de-l%E2%80%99incertitude-de-la-mesure-lors-dun-dosage-en-chimie>

Remarques sur l'installation :

Systèmes d'exploitation : Windows ; Linux ; Mac.

Exercice :

Estimer les incertitudes dans le cadre d'un dosage simple (type B), colorimétrique.

HuLis

HuLis est une application Java utilisée pour du calcul de structure électroniques dans le cadre de la méthode de HÜCKEL simple. Il permet une approche numérique de la mésomérie sous deux approches : le calcul des coefficients des orbitales atomiques dans chaque orbitales moléculaires ou par le poids relatifs des formes limites (type liaison de valence). On peut réordonner les atomes, afficher les orbitales, tracer des diagrammes d'OM et afficher l'énergie des orbitales. L'indice de liaison multiple est affiché sous la forme de pointillés. Un calcul de charges partielles est possible (Limites : système pi-conjugué, pas d'optimisation de géométrie).

Sites Internet :

- Téléchargement : <http://www.hulis.free.fr/>
- Manuel disponible en ligne : http://www.hulis.free.fr/download/HuLiS_Manuel_3_2.pdf

- Des exemples intéressants d'utilisations pédagogiques proposés par des universitaires sont également disponibles : http://www.hulis.free.fr/huckel_teaching_materials.shtml

Remarques sur l'installation :

Logiciel gratuit, disponible sur Mac et Windows.

Exercices :

- Représenter le radical propylène, puis le cation propylène, puis l'anion propylène. Dans chaque cas comment évolue la distribution de charge ? Dans le cas du cation générer automatiquement les structures mésomères possibles et calculer le poids de chacune.
- Représenter les structures suivantes et observer l'évolution des charges partielles et des niveaux d'énergie. Quelle molécule devrait réagir le plus rapidement avec le cyclopentadiène ? Tracer à présent le diène suivant : la réaction avec celui-ci sera-t-elle plus ou moins rapide ? Quelle sera la régiosélectivité observée ? contrôle de charge et contrôle orbitalaire sont-ils en accord ?
- Tracer la molécule d'acroléine. Sur quel atome se fera une addition nucléophile dans le cas d'un contrôle de charge ? Dans le cas d'un contrôle orbitalaire ?
- En utilisant la théorie des OF et le logiciel Hulis, étudier le mécanisme de la réaction d'ozonolyse.
- Montrer que l'écart HO-BV diminue quand la conjugaison augmente.

Nota Bene :

Il existe également un autre logiciel du même type, Hückel (<http://chimiepclamartin.nos-actus.fr/sur-le-net/logiciels-libres>)

Wolfram Demonstration

De nombreuses animations pour la Chimie et la Physique, à choisir et à télécharger sur le site.

Sites Internet :

- Téléchargement : <https://www.wolfram.com/products/player/legacy-cdf.cgi>
- Banque de données : <http://demonstrations.wolfram.com/>

Remarques sur l'utilisation :

Il est nécessaire d'installer le lecteur de Wolfram pour lire les animations.

Vesta

VESTA est un programme de visualisation 3D pour les structures chimiques, données volumétriques telles que la densité électronique et les morphologies cristallines.

Sites Internet :

- Téléchargement : <http://jp-minerals.org/vesta/>
- Manuel disponible en ligne : <http://jp-minerals.org/vesta/en/doc.html>

Remarques sur l'installation :

Logiciel gratuit, disponible sur Windows, Mac et Linux, en anglais.

Exemple de NaCl :

Structure et caractéristiques de la maille NaCl : dans le cristal NaCl, appelé *halite*, les anions chlorure occupent les nœuds d'un réseau cubique faces centrées (CFC, noté F), dont les cations sodium occupent les sites interstitiels octaédriques, formant un second réseau CFC décalé d'une demi-maille par rapport au premier réseau anionique.

Groupe d'espace	Fm3m
Paramètre de maille a	564 pm
Rayon de Na^+	102 pm
Rayon de Cl^-	181 pm
Coordonnées de Na^+	$(0,0,0)$; $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$; $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$
Coordonnées de Cl^-	$(\frac{1}{2},0,0)$; $(0,0,\frac{1}{2})$; $(0,\frac{1}{2},0)$; $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

Exercice : Construire la structure cristallographique du chlorure de césium à partir des données suivantes.

Groupe d'espace	Pm3m
Paramètre de maille a	410 pm
Rayon de Cs^+	169 pm
Rayon de Cl^-	181 pm
Coordonnées de Cs^+	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
Coordonnées de Cl^-	(0,0,0)

Déterminer le nombre d'atomes par maille, la coordinence pour chacun des ions.

Dozzaqueux - Simulations de dosages

Logiciel libre et gratuit de simulation de courbes de dosage en solution aqueuse. Il permet de générer des courbes de dosage pH-métrique, conductimétrique, potentiométrique, ainsi que les concentrations des espèces en solution en fonction du volume de solution titrante versé. Il est également possible d'exporter les données pour un traitement externe, par exemple sur Regressi.

Sites Internet :

- Téléchargement : <http://jeanmarie.biansan.free.fr/dozzaqueux.html>

Remarques sur l'installation :

Logiciel gratuit, disponible sur Mac, Linux et Windows.

Nota Bene :

D'autres logiciels tels que ChimSol ou Simulwin permettent de faire la même chose. À vous de choisir celui qui vous convient le mieux !

Regressi - Traitement de données

Regressi est un logiciel de traitement de données expérimentales, très intuitif et simple d'utilisation. Il permet de tracer des courbes à partir de données, de les modéliser par des fonctions mathématiques, de calculer de nouvelles grandeurs. Quelques outils permettent d'analyser les données, comme un réticule (pour y appliquer la méthode des tangentes).

Il est utile pour tous traitements de données, en particulier pour les montages.

Sites Internet :

- Téléchargement : <http://regressi.fr/WordPress/download/>

Remarques sur l'installation :

Logiciel gratuit, disponible sur Mac et Windows.

Nota Bene : Les logiciels [LatisPro](#) et [QtiPlot](#) peuvent aussi être utilisés.

Exercices : On se propose d'étudier la réaction d'oxydation des ions fer (II) par le permanganate. On donne les couples d'oxydoréduction :



On titre 10 mL d'une solution de sulfate de fer(II) à $50 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ par une solution de permanganate de potassium à $10 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$. On travaille en milieu sulfurique en rajoutant 20 mL d'acide sulfurique à $1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

1. Donner l'équation de la réaction.
2. Paramétrer la réaction de dosage à l'aide du logiciel Dozzaqueux.
3. Tracer les courbes représentant l'évolution des concentrations des espèces présentes, ainsi que le potentiel des deux couples en fonction du volume de solution titrante ajouté. En déduire le volume équivalent.
4. Exporter les données afin de les traiter sur Regressi, puis déterminer le volume équivalent en utilisant :
 - la méthode de la dérivée.
 - la méthode des tangentes.

Specamp

Specamp est un logiciel gratuit permettant de visualiser, exploiter et enregistrer des spectres UV/Visible, IR et de RMN du proton.

Specamp utilise les fichiers au format JCAMP (Joint Committee on Atomic and Molecular Physical Data), qui est un format standard d'échange de données chimiques et spectroscopiques. Il est possible de télécharger de nouveaux spectres à partir de l'onglet "Base de données".

En UV/Visible, il est possible d'afficher un spectre, de faire des mesures de longueurs d'onde, d'additionner ou soustraire des spectres et d'appliquer la loi de BEER-LAMBERT. Il est possible d'obtenir le spectre d'absorption de solutions colorées avec la possibilité d'afficher le schéma du spectrophotomètre à une longueur d'onde choisie.

En spectroscopie IR, le logiciel permet d'afficher des spectres (en absorbance ou en transmittance), de comparer des spectres de différentes molécules ou encore de mettre en évidence les modes de vibration.

En spectroscopie RMN, le logiciel permet de charger des spectres de RMN du proton, de les comparer, de les superposer. Une table permet d'estimer les déplacements chimiques.

Sites Internet :

- Téléchargement : <http://www.sciences-edu.net/physique/specamp/specamp.htm>
- Manuel disponible en ligne : <http://www.sciences-edu.net/physique/specamp/Notice-enseignants-%20Specamp.pdf>

Remarques sur l'installation :

Logiciel gratuit, disponible sur Windows.

Exercices : Entraînez-vous à prédire la structure d'une molécule à partir de son spectre IR ou de RMN!

Pour ce faire, dans le module "Spectroscopie IR", choisir "Organigramme de détermination" ou "Attribution spectre-formules". Trois exercices sont également disponibles dans le module "Spectroscopie RMN" : attribution protons-signaux, attribution spectre-formules, et prédiction de spectres.

ChemSketch

Logiciel, en anglais, permettant de représenter des molécules organiques. Il est utile comme support des leçons de chimie. Logiciel libre, équivalent à ChemDraw.

Sites Internet :

- Téléchargement : <https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/download.php>

Sites Internet

- *VLE Database* : http://vle-calc.com/phase_diagram.html
Permet de tracer des diagrammes binaires liquide-vapeur (banque de molécules). Site en **anglais**.
- *Culture Sciences Chimie* : <http://culturesciences.chimie.ens.fr/>
Le site CultureSciences-Chimie a été créé pour assurer une formation scientifique de haut niveau, accessible à tout utilisateur, en particulier aux enseignants. Il met à disposition des ressources permettant d'améliorer l'enseignement de la chimie avec des articles "à la pointe". Les articles sont rédigés ou relus par des chercheurs, et souvent reliés à des thèmes du programme officiel de lycée ou du supérieur.
À noter que l'équivalent existe en physique (<http://culturesciencesphysique.ens-lyon.fr>).
- *Orbimol* : <http://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/orbimol/fr/index-fr.shtml>
Base de données d'OM calculées au niveau semi-empirique AM1.
Développé par Patrick CHAQUIN, le site OrbiMol donne accès aux orbitales moléculaires et à la topologie de plus de 700 molécules. Après avoir sélectionné l'onglet "base de données", on peut accéder à ces molécules, regroupées par fonctions organiques, type VSEPR.
Pour chaque molécule, un menu "Orbitales moléculaires" permet de visualiser le diagramme d'énergie, les informations sur la molécule (formule brute, développée), sur son état électronique et l'iso-surface de chaque orbitale (la HO est affichée par défaut). Un menu "Groupe de symétrie" permet d'afficher les éléments de symétrie de la molécule.

- *Données industrielles, économiques, géographiques sur les principaux produits chimiques, métaux et matériaux* : <https://www.lelementarium.fr/>
Ce site internet, créé entre autres par Jean-Louis VIGNES, remplace l'ouvrage du même nom. Il est actualisé chaque année. Les éléments traités sont répertoriés dans un tableau périodique. Très utile pour agrémenter les leçons et les montages de chimie de points de culture générale.
- *Tableau périodique* : <https://www.phtable.com/?lang=fr>
Ce tableau périodique interactif propose, pour chaque élément, un lien vers sa page wikipédia, ses propriétés, une représentation de toutes ses orbitales atomiques, ses isotopes et les composés principaux qu'il peut former. Un site très complet disponible à l'agrégation, et utile pour un grand nombre de leçons et de montages.
- *Les éléments chimiques* : <https://www.elementschimiques.fr/?fr>
Assez complémentaire à Ptable. Ce site est particulièrement intéressant pour la comparaison de propriétés atomiques (électronégativité, rayons, ...) au sein du tableau périodique.
- *Gold book IUPAC* : <https://www.goldbook.iupac.org>
Incontournable pour chercher toutes vos définitions avant une leçon et un montage.
- *Spectral Database for Organic Compounds, SDBS* : https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi
Grande base de données de spectres IR, de RMN, de masse, etc de molécules organiques. Très utile pour comparer avec vos spectres expérimentaux obtenus en montage. La recherche se fait par nom, par molécule, masse molaire ou par CAS.
- *Simulation de spectres de RMN* : <https://www.nmrdb.org>
De nombreux outils permettent de générer des spectres de RMN ^1H , ^{13}C , COSY, HSQC. Le site contient également quelques exercices.
- *SynArchive.com* : <https://synarchive.com/>
Base de données de synthèses totales, très complète (les conditions expérimentales et les rendements sont précisés!). On peut faire des recherches par nom de molécule, nom de réaction ou encore groupement protecteur.
- *GeoGebra* : <https://www.geogebra.org/graphing>
Calculatrice graphique qui permet de tracer des courbes avec des paramètres que l'on peut faire varier à l'aide de curseurs. Très visuel pour vos leçons!
- *Python*
Une liste de sources utiles pour Python est fournie ci-dessous :
 - <https://openclassrooms.com/fr/courses/235344-apprenez-a-programmer-en-python>, cours OpenClassroom dont seule la première partie du cours peut-être utile à l'agrégation. Le reste est trop poussé et inutile.
 - <https://www.concours-centrale-supelec.fr/CentraleSupelec/SujetsOral/PC> Fiches synthétiques pour élèves du concours Centrale-Supélec, résumant les fonctions vues en PC/PC* que ce soit pour le calcul matriciel, le tracé graphique, l'analyse numérique, les polynômes ou les probabilités. Le maximum pouvant être demandé en terme de connaissance à un enseignant de CPGE.
 - <https://chimsoft.com/download/python/PythonLycee.pdf> Guide de python, niveau lycée, développé par les auteurs du logiciel ChimGéné.

Périodiques en ligne

- *Bulletins de l'Union des Professeurs de Physique et de Chimie (BUP)* : <http://bupdoc.udppc.asso.fr/consultation/selections.php>.
- *Techniques de l'Ingénieur* : <https://www.techniques-ingenieur.fr/>.
- *L'Actualité Chimique* : <https://new.societechimiquedefrance.fr/lactualite-chimique-le-journal-de-la-scf>.
- *Journal of Chemical Education* : <https://pubs.acs.org/journal/jceda8>.

Animations

- *Figures animées pour la Physique* : http://www.sciences.univ-nantes.fr/sites/genevieve_tulloue/
Ce site contient des animations Flash ou Java, développées par l'université de Nantes, illustrant de nombreux domaines de la physique comme l'électricité, la mécanique, l'optique géométrique, les ondes, la cristallographie, la thermodynamique, l'astrophysique, ...
- *Ostralo* : <http://www.ostralo.net/> Animations Flash pour la physique et la chimie, niveau lycée.
- *Eurochlor* : <https://www.eurochlor.org/> Animations de chimie industrielle, très utile pour illustrer le procédé chlore-soude. Les trois principaux modes de synthèse sont illustrés en cliquant sur les onglets comme suit : *About chlor-alkali* > *How are chlorine and caustic soda made*.
- *The King's Centre for Visualization in Science* : <http://www.kcvs.ca/>
Animations de physique, notamment une portant sur l'effet photoélectrique.
- *PhET* : <https://phet.colorado.edu/>
Animations en HTML5, développées par l'université du Colorado. Le site présente des animations pour la physique et la chimie. Le site est très fourni et illustre de nombreux concepts (diffusion, modèle VSEPR, ...)
- *ChemTube3D* : <https://www.chemtube3d.com/>
Visualisations et animations 3D sur de nombreux domaines de la chimie : mécanismes stéréosélectifs en chimie organique, cristallographie, orbitales, spectroscopie, ... Seul bémol : on est limité dans le choix des exemples.
- *Labosims* : <https://web-labosims.org/category/animations>
Animations niveau lycée en physique (diffraction et interférences, images et couleurs, spectres) et en chimie (cristallographie, configuration électronique).

Ressources du centre de préparation

- *Moodle géré par les enseignants de l'agrégation* : <https://moodle-sciences.upmc.fr/moodle-2021/>
Cours, emplois du temps, corrections de leçons et de montages mis à jour régulièrement par les intervenants à la prépa agrég.
- *Compte Gmail des élèves* :
adresse : agregationchimieulm@gmail.com
mot de passe : [disponible sous peu]

Google Drive contenant des ressources numériques (sites internet, articles numériques, ...) à votre *usage personnel* dans la rubrique "RessourcesBibliographique", l'historique des expériences réalisés par vos prédécesseurs dans la rubrique "tp géné/orga", ...