

Méthodologie, section chimie module L1, Université Paris-Est (Marne la Vallée)

Marius Lewerenz
MSME, UMR8208 CNRS, Bât. Lavoisier, p. N33
lewerenz@univ-mlv.fr, 0160-95 73 21
14 novembre 2014

1 Ressources bibliographiques

1.1 Importance du travail bibliographique

Un travail bibliographique précède chaque travail expérimental ou théorique dans les sciences naturelles. Ce travail sert à se renseigner sur les méthodes de travail utilisées par d'autres scientifiques pour des projets semblables et éventuellement leurs résultats comme référence pour une comparaison critique. Du point de vue pratique ce travail sert à obtenir des consignes pour l'exploitation des appareils et les propriétés chimiques et toxicologiques des substances chimiques qui seront manipulées.

1.2 Types de ressources bibliographiques

1.2.1 La production de savoir scientifique

La grande majorité des résultats et méthodes scientifiques est publiée dans des **revues scientifiques** sous forme d'**articles**. Les revues scientifiques dans le secteur des sciences naturelles et techniques contemporaines publient pour la plupart des articles en anglais et il est une bonne idée de s'habituer à la lecture de cette langue même si le début peut être difficile. Des dictionnaires sont à votre disposition dans la bibliothèque, par exemple Robert & Collins (Copernic 423.41 ROB).

Souvent ces revues ont leurs racines historiques dans les comptes rendus des séances des anciennes académies de science. La forme de publication traditionnelle est sur papier sous forme de cahiers dans un rythme hebdomadaire, mensuel etc. qui sont éventuellement rassemblés dans un tome relié. Aujourd'hui quasiment toutes les revues savantes sont publiées parallèlement en ligne et il y a désormais mêmes des revues qui existent exclusivement sous forme électronique. Les résultats publiés dans des revues scientifiques ont habituellement passé un certain filtre de qualité par un système d'expertises effectuées par d'autres scientifiques avant publication. Il faut quand-même considérer ces résultats comme 'en discussion' entre scientifiques et les lire et utiliser avec un esprit critique.

Comme étudiant de notre université et par l'intermédiaire de votre login institutionnel vous avez accès aux versions électroniques d'un certain nombre de ces revues scientifiques. Les seuls revues scientifiques dans le secteur chimie que vous trouvez dans la bibliothèque d'enseignement du bâtiment Copernic sont *Nature* et *Journal of Chemical Education*. Vous pouvez consulter ce dernier également en ligne (<http://pubs.acs.org/journal/jceda8>). Il est fortement recommandé de regarder la structure des articles par exemple dans *Nature* pour apprécier la logique d'un bon compte rendu de travaux pratiques (exposé du problème avec résumé de résultats connus, description des méthodes utilisées, présentation des résultats, discussion critique des résultats, conclusion). Par la même occasion vous pouvez observer la pratique de *citation scientifique*, voir Sec. 1.2.2.

Les travaux de l'ensemble des scientifiques conduisent souvent (mais pas toujours!) à un certain consensus de 'savoir acquis'. La première étape de consolidation d'une problématique scientifique se retrouve sous forme d'**articles de revue** qui donnent un résumé critique de résultats ou de méthodes avec nombreuses références commentées vers les travaux originaux. Des revues importantes et spécialisées dans ce genre de publication sont par exemple *Chemical Reviews* (American Chemical Society, <http://pubs.acs.org/journal/chreay>), *Chemical Society Reviews* (Royal Society of Chemistry, <http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/cs>) et *Reviews of Modern Physics* (American Physical Society, <http://rmp.aps.org/>).

Les résultats quantitatifs de recherche de grand intérêt pratique et des méthodes scientifiques sont parfois publiés dans des revues spécialisées comme *Journal of Physical and Chemical Reference Data* (American Institute of Physics, <http://jpcrd.aip.org/>) ou *Review of Scientific Instruments* (<http://rsi.aip.org/>). Souvent ces résultats quantitatifs sont rassemblés dans des livres ou séries de livres de référence et des **bases de données** électroniques (voir Sections 1.3 et 1.4).

La dernière étape de consolidation est l'intégration d'un résultat ou d'une méthode dans des monographies thématiques et éventuellement dans des livres d'enseignement de niveaux divers. Le délai typique entre une découverte originale et sa description dans un livre d'enseignement est au moins 10 ans.

1.2.2 Les citations scientifiques

Quand on utilise une information scientifique qu'on a repérée dans un article, un livre ou une base de données il faut obligatoirement inclure une référence à cette source d'information dans la documentation du travail effectué. Ces citations doivent être suffisamment précises pour permettre au lecteur de votre document de retrouver l'information originale.

Même si les ressources électroniques deviennent de plus en plus importantes leur nature éphémère n'en fait pas de bonnes références. Les bases de données électroniques ou les recherches internet par moteur de recherche devraient vous diriger normalement vers une source classique sur papier archivée dans de nombreuses bibliothèques scientifiques.

Les volumes des revues scientifiques sont numérotés et sont identifiés par une année de publication. La citation d'un article prend typiquement une forme comme A. Lepetit, B. Legrand et C. Lemaître, *J. Org. Chem.* **99**, 1234 (2011). La liste des auteurs est ici suivie d'une abréviation conventionnelle du nom de la revue, ici 'Journal of Organic Chemistry', le numéro du volume (**99**), la page (1234) et l'année de publication. La séquence de ces informations et la typographie dépend de la convention de la revue dans laquelle votre texte est publié ou de votre choix pour votre compte rendu. Dans un autre document la même référence peut être donnée comme Lepetit A., Legrand B., et Lemaître C., 2011, *J. Org. Chem.* 99, 1234.

Pour un livre on indique le ou les auteur(s), le titre du livre, l'année de publication, le nom de l'éditeur. Eventuellement on peut ajouter le numéro ISBN ('International Standard Book Number'), un identificateur international unique pour chaque livre.

L'arrivée des publications parallèles conventionnelles et électroniques ou purement électroniques a conduit à la création d'un identificateur unique qui s'appelle DOI ('Digital Object Identifier') qui est de plus en plus souvent ajouté à une référence classique.

1.3 Ressources sur papier

Cette section présente une liste de collections importantes pour la chimie dont certaines ont une longue histoire. Seulement certaines des ressources compactes sont facile d'accès pour vous. Dans ce cas le numéro d'inventaire dans la bibliothèque d'enseignement est indiqué comme Copernic XXXXX.

1.3.1 Collections compactes

Cette section donne une petite sélection de sources d'information qui ne dépassent pas la taille d'un livre ou d'une petite série de livres. Un certain nombre de ces sources est disponible pour consultation ou prêt dans la bibliothèque d'enseignement.

1. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry* ("IUPAC Green book"), E. R. Cohen et al., Blackwell Scientific Publications (<http://old.iupac.org/publications/books/author/cohen.html>). Publication de 'International Union of Pure and Applied Chemistry' (IUPAC), organisme chargé de la définition des standards internationaux de nomenclature en chimie. Définition des unités officielles, des facteurs de conversion, des valeurs des constantes fondamentales etc.
2. *Handbook of Chemistry and Physics, 93rd edition*, W. M. Hayes, éd. CRC Press, Boca Raton (Copernic 540 CRC). Un livre extrêmement utile qui devrait être dans l'armoire de chaque chimiste : Propriétés physiques de nombreuses substances, tableau thermodynamiques, formules importantes etc.
3. *Dictionnaire de Chimie*, L. M. Granderye (Copernic 540.3 GRA).
4. *Les constituants chimiques de la matière, description des éléments*, M. Lefort, Ellipses (Copernic 546 LEF).
5. *Dictionnaire des corps purs simples de la chimie*, R. Luft, Cultures et Techniques (Copernic 546 LUF).
6. *The Elements*, J. Emsley, Oxford Clarendon Press ; traduction en français : *Les éléments chimiques*, Polytechnica 1998. Collection riche des propriétés physiques et chimiques très diverses de tous les éléments chimiques.
7. *NIST-JANAF Thermochemical tables* (Copernic 541.36 NIS). Grandeurs thermodynamiques (enthalpies de réaction et de formation, capacités calorifiques, entropies etc.) validées par le bureau des standards américain (NIST = National Institute of Standards and Technology).
8. *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 9th edition*, R. J. Lewis, van Nostrand Reinhold (Copernic 604.7 LEW). Informations sur les propriétés physiques et toxicologiques de nombreuses substances accessibles par un index multilingue.
9. *Vogel's Textbook of Practical Organic Chemistry, 5th edition*, Furniss et al. (Copernic 547 VOG). Ce livre contient des appendices de plus de 100 pages avec des informations utiles sur des composés organiques courants.

1.3.2 Grandes collections : chimie organique

Cette section vous donne quelques informations sur des grandes collections classiques de la chimie dont certaines ont débuté dans le 19^e siècle.

1. La plus grande collection des propriétés des composés organiques et de leur synthèse est 'Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie', initialement publié en allemand et continué en anglais, qui comprenait 503 tomes au moment de l'arrêt de la version papier en 1998 et existe depuis 1994 sous forme d'une base de données électronique qui est actuellement gérée par l'éditeur néerlandais Elsevier, très actif dans le secteur de publication scientifique.
2. Le grand classique dans les collections de méthodes de synthèse en chimie organique est 'Methoden der Organischen Chemie' par Houben et Weyl, désormais également transformé

en base de données

(<http://www.thieme-chemistry.com/en/products/reference-works/houben-weyl.html>).

Vous trouvez une petite introduction et appréciation de cet œuvre sur le site

<http://www.indiana.edu/~cheminfo/h-wguide.html>

3. Organic syntheses (<http://www.orgsyn.org/>). Cette collection (publication courante et version scannée des anciennes volumes) est en libre accès. On peut consulter également http://fr.wikipedia.org/wiki/Organic_Syntheses.

1.3.3 Grandes collections : chimie inorganique

1. La collection classique est 'Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie' établie en 1817 par Leopold Gmelin. Initialement écrit en allemand, depuis 1981 en anglais ('Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry'), et arrêtée en 1997 elle comprend 760 livres. Le passage à la version électronique a conduit à une fusion avec 'Beilstein' sous la gestion de Elsevier qui fait partie du système payant 'Reaxys' (<http://www.elsevier.com/online-tools/reaxys>).

1.3.4 Grandes collections : chimie physique

1. La plus grande collection de données d'importance pour la chimie physique est la collection 'Landolt-Börnstein', initialement rédigé en allemand, en anglais depuis les années 60 et désormais également transformé en base de données électronique maintenu par l'éditeur scientifique Springer (<http://www.landolt-boernstein.com/>). Normalement l'accès à ces informations est payant.

Le site <http://lb.chemie.uni-hamburg.de/> donne accès à la plupart de ces informations y compris des liens vers des informations toxicologiques et légales (section 'European regulations' sur la page de chaque substance, en particulier l'entrée 'Hazard information'). Voir également <http://www.ulb.ac.be/bibliotheques/bst/landolt.html> pour un petit résumé en français.

1.4 Ressources en ligne

En plus des ressources traditionnelles mentionnées précédemment et pour la plupart converties en base de données électroniques il y a d'autres sources d'information exclusivement électroniques :

1. Les propriétés et risques associés à de nombreuses substances sont le sujet de la collaboration internationale **eChemPortal** associé à l'OCDE (organisation de coopération et de développement économiques, OECD = 'organisation for economic co-operation and development' en anglais) qui s'appuie sur plusieurs bases de données des organisations nationales participantes. Le point d'entrée dans cette source d'information est <http://www.echemportal.org/echemportal/index>. Pour chercher une substance on peut utiliser le bouton 'Chemical Substance Search' sur la page d'accueil ou aller directement à <http://www.echemportal.org/echemportal/page.action?pageID=9>.
2. L'union européenne maintient un site qui rassemble toutes les informations concernant les caractéristiques et règles d'utilisation de substances chimiques. Ce système s'appelle **ESIS** = 'European Chemical Substances Information System' : <http://esis.jrc.ec.europa.eu/> Un autre accès à ces informations est le portail de la 'European Chemicals Agency' : <http://echa.europa.eu/>, lien 'Information on Chemicals' ou

<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals>. Une version francophone est accessible à l'adresse <http://www.echa.europa.eu/fr/web/guest/regulations/clp> lien 'Information sur les produits chimiques'.

3. L'INRS (<http://www.inrs.fr/>) est un organisme qui s'occupe de la santé et sécurité au travail. Sur son site internet vous trouvez de nombreuses informations sur les risques chimiques (<http://www.inrs.fr/accueil/risques/chimiques.html>) et spécifiquement des centaines de fiches toxicologiques (<http://www.inrs.fr/accueil/produits/bdd/recherche-fichetox-criteres.html>).
4. Probablement la plus grande base de données chimiques gratuite est le site du NIST américain. On trouve ces informations l'adresse <http://webbook.nist.gov/chemistry/>. Cette ressource donne des propriétés physiques de nombreuses substances mais ne contient aucune information toxicologique.
5. Pour chercher des stratégies de synthèse en chimie organique on peut exploiter <http://www.organic-chemistry.org/reactions.htm>
6. IUPAC maintient un site central avec des liens vers plusieurs bases de données spécialisées (par exemple cinétique en phase gazeuse, solubilités) à l'adresse <http://www.iupac.org/home/publications/e-resources/databases.html>
7. Si vous connaissez le nom précis de la substance sur laquelle vous cherchez des informations une recherche internet classique avec les mots clé 'MSDS nom-de-la substance' ou 'fiche signalétique nom-de-la substance' peut donner un résultat. **MSDS** est un acronyme anglais pour 'Materials Safety Data Sheet', un document qui rassemble toutes les informations importantes sur des substances commercialisées et doit être fourni par le producteur, souvent sur internet. A cette occasion vous allez découvrir les entreprises spécialisées dans les produits chimiques.
8. Google scholar est une version scientifique du moteur de recherche Google qui affiche des résultats trouvés dans des sources académiques en ligne qui sont considérées comme sérieuses (revues scientifiques, livres, thèses).

Pour retrouver des informations dans des article de recherche, une démarche complexe pour un débutant, deux grandes bases de données commerciales et payantes existent, auxquelles vous avez normalement accès par votre login institutionnel :

1. 'Web of science', maintenu par l'entreprise Thomson Reuters : <http://thomsonreuters.com/web-of-science/> lien 'Product login'. Cet outil est le successeur des services offertes par 'Institute for Scientific Information (ISI)', pionnier des bases de données bibliographiques scientifiques.
2. Scopus (<http://www.elsevier.com/online-tools/scopus>) maintenu par Elsevier et accessible à l'adresse <http://www.scopus.com/>. Un guide d'utilisation est disponible à l'adresse <http://info.sciencedirect.com/scopus/france>

Les sites web des revues scientifiques vous offrent typiquement la possibilité d'effectuer une recherche par mot clé dans cette revue.

1.5 Pictogrammes

La dangérosité d'une substance chimique est souvent affichée sur son emballage sous forme de texte, mais plus particulièrement et obligatoirement par un pictogramme. Les anciens pictogrammes en noir sur fond orange viennent d'être remplacés par un nouveau système de pictogrammes noir sur blanc avec cadre rouge. Vous trouvez plus d'information sur ce sujet à l'adresse <http://www.inrs.fr/accueil/risques/chimiques/classification-produits>.

Un site alternatif est maintenu par le gouvernement canadien dont la version francophone est <http://www.hc-sc.gc.ca/ewh-semt/occup-travail/whmis-simdut/symbol-fra.php>. Les correspondances entre les anciens et les nouveaux pictogrammes et leur signification sont résumées dans Fig. 1.

1.6 Outils mathématiques et statistiques

1. P. R. Bevington et D. K. Robinson, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, 2nd ed.*, McGraw-Hill 1992. Le classique du traitement statistique des données expérimentales.
2. G. Cowan, *Statistical Data Analysis*, Oxford University Press 1998. Texte moderne sur les bases de la statistique, la propagation d'erreurs et l'estimation de paramètres.
3. D. S. Sivia, *Data Analysis, A Bayesian Tutorial*, Oxford University Press 1996. Très bon texte sur l'approche de Bayes au traitement statistique de données.
4. J. R. Taylor, *An Introduction to Error Analysis*, University Science Books 1982. Analyse d'erreurs statistiques et systématiques.
5. M. Abramowitz et I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions, AMS 55*, National Bureau of Standards, Washington, D. C. 1964
Version électronique en accès libre : <http://people.math.sfu.ca/~cbm/aands/>. Un successeur électronique est la 'NIST Digital Library of Mathematical Functions' <http://dlmf.nist.gov/>.
6. I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Academic Press 1980, ISBN 0-12-294760-6

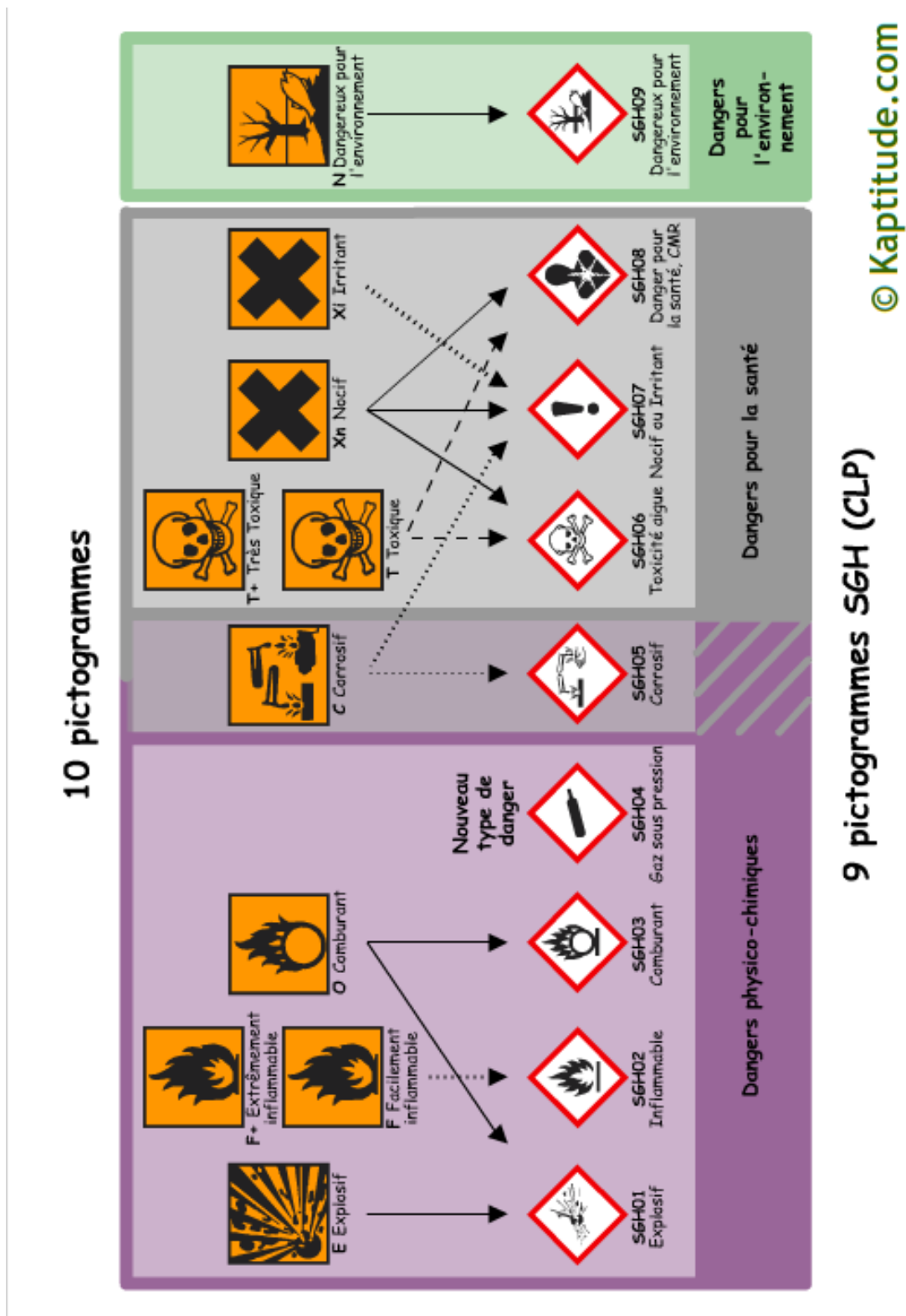


FIGURE 1 – Anciens (noir sur orange) et nouveaux (cadre rouge) pictogrammes pour identification visuelle et rapide des risques associés à une substance chimique (<http://www.risque-chimique.fr/nouveaux-pictogrammes.html>).