

## LIVRES

### Computer-Aided Drug Design Methods and applications

T.J. Perun & C.L. Propst  
Marcel Dekker

Ce livre est une revue assez générale des principaux aspects du "drug-design" ou conception assistée par ordinateur (CAO) de médicaments. L'accent est mis sur une approche mécanistique (interaction au niveau atomique entre effecteur et cible) de la modélisation moléculaire.

L'ouvrage est divisé en deux parties. La première partie comporte une description rapide des principales techniques de calculs et méthodes expérimentales utilisées dans le domaine de la CAO. Un chapitre est en particulier consacré à l'aspect théorique de cette méthodologie : fonction énergie potentielle, mécanique moléculaire, mécanique quantique, dynamique moléculaire, méthode de Monte Carlo. Le lecteur trouvera également, dans un autre chapitre, une rapide description des outils graphiques et logiciels les plus couramment utilisés. L'importance de la connaissance d'informations structurales fiables est soulignée par deux chapitres consacrés à la cristallographie et à la RMN. N'ont pas été oubliées des notions de cinétiques enzymatiques.

Tous ces principes sont illustrés au travers d'exemples présentés tout au long de la deuxième partie. Six chapitres y sont réservés.

L'ouvrage, comporte un grand nombre de références bibliographiques et constitue une source d'information importante pour les étudiants, les enseignants et les chercheurs s'intéressant à ce domaine.

Evelyne Surcouf

### Physical Chemistry

4<sup>e</sup> édition

P.W. Atkins

Oxford University Press, 1990

Oxford University Press propose la 4<sup>e</sup> édition du célèbre ouvrage "Physical Chemistry" de P.W. Atkins. La première édition parut en 1978 et connut un tel succès que l'ouvrage fut rapidement traduit en plusieurs langues. L'ouvrage, remanié lors de nouvelles éditions en 1982 et 1986, a profondément marqué l'enseignement de la chimie physique, du moins dans le monde anglo-saxon. En France, il

s'adresse aux étudiants du 2<sup>e</sup> cycle universitaire et aux élèves ingénieurs chimistes. Il couvre en 1 000 pages un très vaste domaine.

Les idées qui sont à la base du succès de l'ouvrage n'ont pas varié : un parti pris didactique où l'explication l'emporte sur la démonstration, une présentation typographique exceptionnelle mettant en valeur les concepts et les résultats et permettant à l'étudiant de tester pas à pas son degré de compréhension, un très grand nombre d'exercices, maintenant répertoriés en trois catégories : exercices, problèmes numériques et problèmes théoriques, le refus d'entrer dans des développements trop théoriques, la rubrique "lecture complémentaire" qui figure à chaque fin de chapitre étant destinée à remplir cette fonction. Le tout est servi par un style alerte, parfois même peu familier, voire humoristique (*cf.* le problème du barman peu scrupuleux, p. 157). Le plan de l'ouvrage n'a pas varié par rapport à l'édition précédente, mais le contenu de certains chapitres introduit succinctement quelques développements récents ; par exemple, le paragraphe RMN insiste sur les techniques par transformée de Fourier et les illustre en montrant un spectre 2D.

Nous pensons qu'un tel livre est extrêmement utile à nos étudiants sous un volume réduit, pour un prix réellement accessible et, à condition d'accepter de faire l'effort de lire un anglais très attrayant, ils disposent d'un excellent ouvrage, moderne et agréable, couvrant l'ensemble des bases de la chimie physique. Ils trouvent facilement les développements plus fondamentaux, ou plus spécialisés, dans les bibliothèques universitaires, ou dans les cours de leurs enseignants !

J.M. Chezeau

### Modern NMR Spectroscopy

J.K.M. Sanders, E.C. Constable,  
B.K. Hunter

Oxford University Press, 1989

Ces dernières années, de nombreux ouvrages ont permis aux chimistes d'acquérir ou de développer leurs connaissances dans le domaine de la RMN multiimpulsionnelle, mono- et bidimensionnelle. Quoique souvent fort bien illustrés, ils ne permettaient pas dans la plupart des cas au lecteur de tester d'une façon aisée l'acquisition de ces connaissances. Le livre de J.K.M. Sanders, E.C.

Constable et B.K. Hunter vient combler fort heureusement cette lacune. Il se présente comme le complément idéal des ouvrages évoqués précédemment, en particulier de celui proposé par deux des auteurs (*Modern NMR Spectroscopy, a Guide for Chemists*).

L'introduction comporte des rappels de quelques notions fondamentales ainsi qu'une présentation de la stratégie à suivre pour entreprendre une analyse structurale prenant en compte éventuellement les renseignements fournis par d'autres techniques (spectrométrie de masse, IR, UV). Les conventions et abréviations utilisées dans le texte sont aussi explicitées dans cette introduction.

Les spectres 1D ou 2D présentés dans le chapitre 1, sur le même échantillon de camphre, sont une illustration de nombreuses malfaçons rencontrées en RMN par impulsion, suite à l'emploi de paramètres d'acquisition incorrects ou résultant d'un traitement du signal défectueux. Chaque spectre défectueux est examiné sous forme de question-réponse.

Le chapitre 2 contient un ensemble de problèmes à résoudre, les réponses figurant parfois dans le chapitre lui-même. Différents aspects de la RMN y sont abordés (RMN des noyaux exotiques, RMN du proton et du carbone 13 1D et 2D) de manière très variée. L'importance des problèmes liés à la symétrie des molécules ainsi qu'au phénomène d'échange est développée dans le chapitre 3.

Le chapitre 4 présente un ensemble d'exercices de difficultés supérieures à celles rencontrées lors des deux précédents chapitres, les solutions devant a priori être obtenues à l'aide des seules données RMN. Ainsi que le disent les auteurs, les problèmes posés permettent de tester l'aptitude du lecteur à mener une analyse structurale par RMN.

L'apport de la RMN à une meilleure compréhension des mécanismes réactionnels en synthèse ou des voies biosynthétiques apparaît clairement lorsque le lecteur tente de répondre aux questions qui figurent dans le chapitre 5. Des données spectroscopiques autres que les données RMN, ainsi que des éléments précisant dans quel contexte le problème soulevé est apparu, placent le lecteur dans la situation typique du chimiste ou du biochimiste qui cherche à interpréter le résultat d'une expérience.

Les auteurs ont eu l'excellente idée de réunir dans un chapitre un ensemble de suggestions pour chacun des exercices proposés, de manière à mettre le lecteur sur la voie de la solution et à le guider dans sa réflexion.

Finalement, les solutions aux problèmes fi-

gurent à la fin de l'ouvrage soit sous forme d'explication détaillée, soit sous forme de renvoi à des articles de la littérature.

L'ouvrage a le grand mérite d'aborder les aspects les plus variés de la RMN tant du point de vue des thèmes que de la nature des techniques mises en œuvre. Il est destiné à des chercheurs de toute expérience possédant déjà de bonnes connaissances de la RMN par impulsion et doit être utilisé parallèlement à des ouvrages plus académiques, dont il deviendra fort probablement un complément indispensable. Il est en outre fort bien présenté et très agréable à parcourir, et, à aucun moment, la suite des questions ne conduit à un sentiment de lassitude.

Daniel Davoust

## Organotin chemistry

(Journal of Organometallic Chemistry Library 21)

Iwao Omae

Elsevier, 1989

Dynamisée par une importante activité industrielle, la chimie organique de l'étain se développe de façon spectaculaire. Long-

temps curiosités de laboratoire, les organostanniques occupent aujourd'hui une place de choix tant au plan économique (stabilisants du PVC, biocides, catalyseurs) qu'au niveau des outils de synthèse.

L'ouvrage d'Omae fait partie de la série "Journal of Organometallic Chemistry Library", éditée par Elsevier, ensemble hétéroclite de mises au point, revues bibliographiques annuelles, conférences plénières de congrès internationaux et monographies. L'auteur est parti de la constatation, justifiée, que les ouvrages généraux sur la chimie organostannique commencent à dater et que les monographies récentes sont trop spécialisées. Il entend donc, en 350 pages, faire le point sur un large secteur en évolution rapide.

Si tous les points d'importance sont abordés, on remarquera que certains aspects sont développés de façon un peu trop généreuse (chapitre 2 sur l'étain et ses combinaisons inorganiques ou chapitre 3, consacré aux méthodes de base de préparation des organostanniques, qui ne renferme pratiquement aucune référence postérieure à 1970 mais cite abondamment les propres travaux de l'auteur). D'autre part, le découpage des chapitres 4 (préparation et propriétés des organostanniques), 5 (réactions des organostanniques) et 6 (synthèse organique par les organostanniques) est désordonné. Ainsi, par exemple, les propriétés chimiques se trouvent arbitrairement réparties sur les trois chapitres et une utilisation aussi importante en synthèse organique que la réduction des

halogénures organiques par les hydrures d'étain se trouve surtout décrite dans le chapitre 5.

Il n'en demeure pas moins que l'ouvrage est une source extrêmement utile d'information et de références récentes et que les chapitres 7 (structure des organostanniques), 8 (spectroscopie) et 9 (applications industrielles) constituent de bonnes mises au point. L'objectif de l'auteur, annoncé dans sa préface, était de rédiger un livre utile non seulement aux chercheurs de tous les secteurs de la chimie, mais aussi aux étudiants. Si on peut raisonnablement douter de l'impact d'un tel livre sur les derniers, les premiers trouveront en "Organotin Chemistry" un ouvrage bien documenté et une source de réflexion, voire d'inspiration, sur une chimie organométallique d'importance académique et industrielle.

M. Pereyre

## Vient de paraître

**Ion-Selective Electrodes, 5** (Proceedings of the 5th Symposium, Matrafüred, Hongrie, 9-13 octobre 1988), sous la direction de E. Pungor.  
688 p.  
Pergamon Press, Akadémiai Kiado. 1989.

**Basic Principles and Techniques of Molecular Quantum Mechanics**, par R.E. Christoffersen  
700 p., relié.  
Springer-Verlag, 1989.

**Future Opportunities in Catalytic and Separation Technology**, sous la direction de M. Misono, Y. Moro-Oka, S. Kimura.  
390 p.  
Elsevier, 1990.

**Catalysts in Petroleum Refining 1989** (Proceedings of the 1st Int. Conference on Catalysts in Petroleum Refining, Kuwait, 5-8 mars 1989), sous la direction de D.L. Trimm, S. Akashah, M. Absi-Halabi, A. Bishara.  
594 p.  
Elsevier, 1990.

**Recent Advances in Zeolite Science** (Proceedings of the 1989 Meeting of the British Zeolite Association, Cambridge, April 17-19 1989), sous la direction de J. Klinowski, P. J. Barrie.  
318 p.  
Elsevier, 1990.

**Vapor-Liquid Equilibrium Data at High Pressure** (Physical Sciences Data, 42), par S. Ohe.  
384 p.  
Elsevier, 1990.

**Chemical Sensor Technology**, vol. 2, sous la direction de T. Seiyama.  
304 p.  
Elsevier, 1990.

**Abrégé de chimie organique avec exercices et tests**, par V. Loppinet, G. Germain, R. Mari, D. Burnel.  
Broché, 368 p.  
Masson, 1990.

4	Be	5	B	6	C	7	N	8	O	9	F		
		13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl		
29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br
47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I
79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At

**Heteroatom Chemistry**  
An International Journal of Main Group Elements

For further information and a free sample copy please contact VCH, P.O. Box 10 11 61, D-6940 Weinheim

European Editor:  
Alfred Schmidpeter  
Far East Editor:  
Shigeru Oae

Editor-in-Chief:  
William E. McEwen

**VCH**

**Chemistry of Alicyclic Compounds : Structure and chemical Transformations** (Studies in Organic Chemistry, 38); par G. Haufe et G. Mann.  
468 p.  
Elsevier, 1990.

**Atomic and Molecular Clusters** (Studies in Physical and Theoretical Chemistry, 68), sous la direction de E.R. Bernstein.  
820 p.  
Elsevier, 1990.

**Pharmacochemistry Library : Trends in Medicinal Chemistry '88** (vol. 12), proceedings of the Xth International Symposium on Medicinal Chemistry, Budapest, 5-19 August 1988, sous la direction de H. van der Goot, G. Domany, L. Pallos.  
872 p.  
Elsevier, 1989.

**Barrier Polymers and structures** (ACS Symposium serie n° 423), par W.J. Koros.  
Broché, 393 p.  
American Chemical Society, 1990.

**Fire and Polymers : Hazards Identification and Prevention** (ACS Symposium Series n° 425), par Gordon L. Nelson.  
Broché, 610 p.  
American Chemical Society, 1990.

**Lasers in Polymer Science and Technology : Applications** (vol. 1, 2, 3 et 4), sous la direction de Jean-Pierre Fouassier et Jan F. Rabek.  
Vol. 1 : 320 p., vol. 2 : 288 p., vol. 3 : 304 p., vol. 4 : 288 p.  
CRC Press, 1989.

**NMR Basic Principles and Progress : Isotope Effects in NMR Spectroscopy** (vol. 22), sous la direction de P. Diehl, E. Fluck, H. Günther.  
Relié, 171 p.  
Springer-Verlag, 1990.

**Electron Paramagnetic Resonance of Exchange Coupled Systems**, par A. Bencini, D. Gatteschi.  
Relié, 287 p.  
Springer-Verlag, 1990.

**Acronyms and Abbreviations in Molecular Spectroscopy. An Encyclopedic Dictionary**, par D.A.W. Wendisch.  
Relié, 315 p.  
Springer-Verlag, 1990.

**Surfaces, interfaces et films minces. Observation et analyse**, par Bernard Agius, Michel Froment.  
Broché, 470 p.  
Dunos, 1990.

**Diterpenes of Flowering Plants : Compositæ (Asteraceæ)**, par F. Seaman, F. Bohlmann, C. Zdero.  
Relié, 638 p.  
Springer-Verlag, 1990.

**Advances in Polymer Sciences : Polymer Processing** (vol. 93), sous la direction de M.L. Fridman.  
Relié, 190 p.  
Springer-Verlag, 1990.

**La maîtrise des déchets industriels**, par Michel Maes.  
448 p.  
Pierre Johanet, 1990.

**Enzyme Chemistry : Impact and applications** (second edition), sous la direction de Colin J. Suckling.  
Relié, 396 p.  
Chapman and Hall, 1990.

**Analyseurs industriels**, par Jean-Claude Groussin.  
Relié, 233 p.  
Eyrolles, 1988.

**Chemistry of Glasses** (second edition), par A. Paul.  
Relié, 376 p.  
Chapman and Hall, 1990.

**Les Argiles**, par S. Caillere, S. Henin, M. Rautureau.  
126 p.  
Septima, 1989.

**Fuel Science and Technology Handbook**, sous la direction de James G. Speight.

Relié, 1205 p.  
Marcel Dekker, 1990.

**Industrial Applications of Material Processing in Space : A European Approach (série Arago, n° 9)**, par l'Observatoire Français des Techniques Avancées.  
Broché, 240 p.  
Masson, 1990.

**The Handbook of Environmental Chemistry : Anthropogenic Compounds** (vol. 3., part E), par O. Hutzinger.  
Relié, 189 p.  
Springer-Verlag, 1990.

**Chemistry of Plant Protection : Controlled Release, Biochemical Effects of Pesticides, Inhibition of Plant Pathogenic Fungi** (vol. 6), sous la direction de W.S. Bowers, W. Ebing, G. Haug.  
Relié, 312 p.  
Springer-Verlag, 1990.



SCHWEIZERISCHE  
CHEMISCHE GESELLSCHAFT  
Verlag Helvetica Chimica Acta  
Postfach, CH-4002 Basel

## HELVETICA CHIMICA ACTA

### Subscription

**Vol. 73, 1990**  
sFr. 515.- + postage  
32.- Europe  
sFr. 515.- + postage  
50.- Oversea

### Still available

**Reprinted editions**  
Vols 1-27 (1918-1944)

Vol. 28 Out of print

**Original editions**  
Vols 29-72 (1946-1989)

Please request our  
price list