

## Revue

## BULLETIN DE L'UDP

## Sommaire du n° 814 (mai 1999)

- Les phénomènes « paranormaux »... au secours de la culture scientifique, par Henri Broch.
- Mécanique des fluides et expérimentation, par Luc Petit, Nathalie Fraysse.
- Validation à petite échelle d'un envi-

ronnement d'apprentissage par découverte, par J.L. Sierra Fernandez, J.F. Perales Palacios.

- Les dérives de la dérivée, par Jean-Paul Roux.
- Étude expérimentale de l'action d'un filtre passe-bande sur un signal périodique non sinusoïdal, par Maurice Dourlent.
- Température ou chaleur ?, par Jean Jandaly.

• Expériences illustrant la notion d'équilibre de solubilité appliquées au cas de  $PbI_2$ , par Michel Ficheux, Jean-Paul Sauvage.

- Prix Nobel de médecine physiologie 1998, par Alfred Mathis.
- La force de Laplace en seconde, par Jacques Chargé.
- Mesure d'une résistance dynamique.
- Congrès de l'Association for Science Education (ASE).

## Livres

DESCRIPTION ORBITAIRE  
DE LA STRUCTURE ÉLECTRONIQUE  
DES SOLIDES1 - DE LA MOLÉCULE AUX  
COMPOSÉS 1D

Christophe Iung, Enric Canadell  
Ediscience International

Chacun reconnaît maintenant que la théorie des orbitales moléculaires est un outil essentiel des chimistes lors de l'étude de la structure et de la réactivité d'une molécule. Ces raisonnements orbitaux sont utilisés par tous les chimistes quelle que soit leur spécialité. De ce fait, la théorie des orbitales moléculaires est maintenant enseignée en DEUG et appliquée à la réactivité en maîtrise dans toutes les universités françaises. Il est, hélas, plus rare que ce superbe outil soit utilisé afin de relier les propriétés physiques d'un solide périodique à sa structure cristalline via l'analyse de sa structure électronique. Or, des travaux de recherche initiés par R. Hoffmann, J.K. Burdett et M.-H. Whango ont montré ces 15 dernières années combien cette approche théorique pouvait être performante et surtout facile à utiliser.

Dans ce cadre, j'ai particulièrement plaisir à recommander l'ouvrage récemment publié en français par Christophe Iung et Enric Canadell. Ce livre a l'ambition de montrer comment l'analyse en termes d'interactions orbitales de la fonction d'onde décrivant un électron dans un solide périodique permet de relier la structure d'un cristal à ses propriétés physiques et en particulier ses propriétés

de conduction. Il est important de se rappeler que cette approche simple à comprendre et à appliquer, tant par un théoricien que par un expérimentateur physicien ou chimiste, a permis de comprendre voire de prédire les propriétés physiques de nombreux matériaux complexes. Il est donc maintenant particulièrement important que ces récentes découvertes soient présentées dans un ouvrage pédagogique ayant pour vocation d'apprendre au lecteur de nouveaux concepts et de les appliquer sur des systèmes réels. Telle est l'ambition de l'ouvrage de MM. Iung et Canadell.

Cet ouvrage d'introduction est subdivisé en 8 chapitres. Puisqu'il s'adresse tout autant à un public de chimistes que de physiciens, les deux premiers chapitres permettent de rappeler quelques notions de base nécessaires par la suite. Ainsi, dans un premier chapitre principalement destiné aux chimistes, il est présenté la théorie de l'électron libre ainsi que les principales caractéristiques des métaux, semi-métaux, semi-conducteurs et isolants. Dans un second chapitre, au contraire destiné aux physiciens soucieux de combler quelques lacunes en chimie, l'intérêt de la théorie des orbitales moléculaires couplée à la théorie des groupes ponctuels y est rappelé et illustré sur des exemples classiques et utiles pour la suite de l'ouvrage. Ce chapitre relatif à la molécule isolée est tout à fait essentiel pour la suite de l'ouvrage consacré à la détermination de la structure électronique des composés périodiques 1D, c'est-à-dire la détermination de leur diagramme de bandes, de la position du niveau de Fermi au sein de ce

diagramme, de l'interprétation de leurs propriétés de conduction et de la détermination de la nature des éventuelles distorsions structurales que le composé est susceptible de subir à basse température.

Le chapitre 3 définit la notion d'orbitales de Bloch, d'orbitales cristallines et décrit la construction du diagramme de bandes du système modèle  $H_n$  régulier ou dimérisé. Ainsi, toutes les notions indispensables à l'étude d'un matériau périodique y sont présentées et illustrées. Le chapitre 4 fournit une interprétation en terme d'instabilité vis-à-vis d'une onde de densité de charge des distorsions de Peierls, distorsions responsables de transition métal-isolant d'un grand nombre de matériaux. Le chapitre 5 montre comment l'on peut s'aider de la symétrie d'un composé afin d'en simplifier l'étude. Le chapitre 6 traite de la structure électronique du trans-polyacétylène et présente l'utilisation d'orbitales de fragment afin de déterminer la structure électronique d'un composé (méthode FMO). Le chapitre 7 présente la détermination et l'analyse de la structure électronique du polyacène, exemple de composé susceptible de se distordre à la suite d'une distorsion de Peierls du second ordre. Le chapitre 8 est consacré à l'étude de la structure électronique de composés inorganiques tels que le KCP ( $K_2Pt(CN)_4Br_{0,3} \cdot 3H_2O$ ), les chaînes de formules  $ML_4L'$  (telles que  $[Pt(NH_3)_4Cl]^{2+}$  et  $ReCl_4N$ ),... Ce dernier chapitre finit par des sujets d'études proposés aux lecteurs. De plus, de nombreux exercices avec solutions détaillées sont proposés tout au long de cet ouvrage.

ge afin de permettre au lecteur d'approfondir par lui-même sa lecture ou d'appliquer les concepts présentés dans le texte.

Après lecture, le lecteur doit être capable de déterminer et surtout d'analyser la structure électronique des composés périodiques 1D. Il possède alors toutes les connaissances nécessaires pour aborder l'étude de la structure électronique des solides 2D et 3D (les « vrais solides ») qui fera l'objet d'un second volume qui devrait paraître l'an prochain.

Cet ouvrage ne nécessite pas de connaissances avancées en physique du solide ou en mécanique quantique. Des connaissances acquises en licence de chimie ou chimie-physique ou physique suffisent largement. L'utilisation graphique des orbitales, la tentative réussie de laisser de côté les équations mathématiques quand il existait une approche orbitale en fait un ouvrage particulièrement abordable à un vaste public d'enseignants et d'étudiants de maîtrise ou de thèse. Sa présentation aérée, son prix attractif (125 F) en font un ouvrage qui devrait trouver sa place sur les étagères de nombreux chimistes et physiciens.

*Odile Eisenstein*

## LA CASSEROLE DES ENFANTS

*Hervé This*  
Éditions Belin

Cet ouvrage de chimie et de physique, fondé sur la cuisine, pour tous les enfants de 7 à 77 ans, est agrémenté de fiches expérimentales.

## CAPTEURS CHIMIQUES

**Club MicroCapteurs Chimiques**  
Prix exceptionnel : 200 F au lieu de 250 F

Le CMC2 (Club MicroCapteurs Chimiques) a édité un premier ouvrage consacré aux capteurs chimiques. Ce livre, de 300 pages, présente de manière didactique, aussi bien les principes de la reconnaissance chimique et biochimique que ceux des transducteurs associés. Les aspects traitement des signaux, micro-systèmes, ainsi que de nombreux exemples d'applications des capteurs gaz, capteurs chimiques et bio-capteurs sont présentés.

Il s'agit d'un ouvrage de référence, indispensable aussi bien aux chercheurs travaillant dans le domaine des capteurs,

qu'aux étudiants, élèves ingénieurs ou industriels.

A l'occasion de son 10e anniversaire, le CM2 donne la possibilité d'acquies cet ouvrage à des conditions exceptionnelles : 20 % de réduction sur le prix normal.

- **CMC2, Ifos/PCI, École Centrale de Lyon, BP 163, 69131 Écully Cedex.**

## LIVRES PARUS

- **La classification périodique des éléments. La merveille fondamentale de l'univers**  
P. Depovere  
Broché, 138 p., 95 FF
- **Beginning group theory for chemistry**  
P. Walton  
Broché, 144 p., 16,95 £  
Oxford Science Publications, Oxford, oct. 1998
- **Applications of anionic polymerization research**  
R. P. Quirk  
376 p., 90 £  
American Chemical Society, août 1998
- **Chimie. Molécules, matière, métamorphoses**  
P. Atkins, L. Jones  
Broché, XXXVI/1024 p., 495 FF  
De Boeck-Université, déc. 1998
- **Handbook of plastic and rubber additives**  
Relié, 250 £ (CD Rom : 325 £)  
Gower
- **Biodegradation and biodeterioration of polymers. Kinetic aspects**  
K.Z. Gumargaliev, G. E. Zaikov  
202 p., 79 \$  
Nova Science Publishers Inc., New York, 1998
- **Biochemistry : a manual for universities**  
D.G. Knorre, S.D. Mysina  
396 p., 74 \$  
Nova Science Publishers Inc., New York, 1998
- **Biopolymers : sophisticated materials with growing market potential**  
2e édition, 107 p., 1 850 \$  
Technical Insights, Wiley, mars 1998
- **Polymers in medicine**  
G.E. Zaikov  
207 p., 85 \$  
Nova Science Publishers Inc., New York, 1998
- **Drug discovery from nature**  
S. Grabley, R. Thiericke  
Relié, 347 p., 746 FF  
Springer-Verlag, 1999
- **Fatty acids**  
Supplement to McCance & Widdowson's - The composition of foods  
Broché, 200 p., 32,50 £  
Royal Society of Chemistry
- **Dose. The dictionary of substances and their effects**  
S. Gangolli  
2e édition, relié, 6 500 p., 1 295 £  
Royal Society of Chemistry, oct. 1999
- **The heavier d-block metals. Aspects of inorganic and coordination chemistry**  
C. E. Housecroft  
Broché, 96 p., 5,99 £  
Oxford Science Publications, Oxford, 1999
- **Membrane separation : applications from aerospace to wastewater**  
145 p., 1 800 \$  
Technical Insights, Wiley, août 1998
- **Phénomènes de transport et leurs résolutions numériques**  
E. Saatdjian  
2e édition, 408 p., 195 FF  
Polytechnica, 1998
- **Issues in environmental science and technology**  
R.E. Hester, R.M. Harrison  
39 £ (68 \$)  
Royal Society of Chemistry, 1999
- **Mesures des émissions à l'atmosphère des sources fixes**  
Collection Données et références  
60 p., 150 FF  
Ademe Éditions, 1998
- **Techniques de traitement par voie biologique des sols pollués**  
Collection Connaitre pour agir  
248 p., 330 FF  
Ademe Éditions, nov. 1998
- **Produits dangereux. Guide d'évaluation des risques à l'usage des PME-PMI**  
Éditions INRS, 1999
- **L'atlas professionnel des déchets en France**  
1er CD Rom consacré aux déchets, 500 FF  
Ademe Éditions, nov. 1998