

fibres cristallines non linéaires de  $Ba_2NaNb_5O_{15}$  (BNN) dopé  $Yb^{3+}/Gd^{3+}$  (F. Carrillo Romo, LPCML, Villeurbanne), effet des nanoparticules métalliques sur les propriétés optiques de terres rares (F. Pellé, GOTR-LPCM-CNRS, Meudon), « clusters » dans les cristaux  $Yb : LiNbO_3(MgO)$  (P. Goldner, GOTR-LPCM-CNRS, Meudon), propriétés optiques non linéaires des verres (G. Le Flem, ICMCB, Pessac), luminescence rouge de cérium dans  $LiY_6O_5(BO_3)_3$  (V. Jubera, ICMCB, Pessac), luminescence de  $Eu^{3+}$  dans les borates  $LnBO_3$  et  $Ln_3BO_6$  obtenus par sol-gel (G. Bertrand-Chadeyron, Laboratoire des matériaux inorganiques-CNRS, Aubière), susceptibilité paramagnétique à partir du champ cristallin (C. Colon, Dépt. de physique appliquée, EUIT,

Madrid), propriétés magnétiques et spectroscopiques des métaphosphates  $M(PO_3)_3$ ,  $M = Cr, Mo, Fe$  (T. Rojo, Dépt. de chimie inorganique, Bilbao) sont quelques-uns des sujets exposés.

Divers autres thèmes ont aussi été évoqués. Nanocomposites hybrides inorganique-organique : synthèses et applications (C. Sanchez, LCMC, université Pierre et Marie Curie, Paris), propriétés optiques de matériaux hybrides contenant des lanthanides (D. Zambon, Laboratoire des matériaux inorganiques-CNRS, Aubière), pigments inorganiques et couleur (D. Vivien, LCAES-ENSCP, Paris), préparation de pigments à base de  $ZrSiO_4$  par sol-gel (E. Cordoncillo, Dépt. de chimie inorganique et organique, Castellon), nouveaux matériaux pour application thermoélectrique (D. Ravot, LPMC-

CNRS, Montpellier), spectroscopie diélectrique de  $LiNiO_2$  (J. C. Badot, LCAES-ENSCP, Paris), conducteurs ioniques rapides (O. Bonke, Laboratoire des fluorures, Le Mans), matériaux pour électrodes pour les batteries au lithium (P. Lavela, Laboratoire de chimie inorganique, Cordoue ; A. Khun, Dépt. de chimie inorganique et des matériaux, Madrid), composés intermétalliques de terres rares comme électrodes pour batteries Ni-hydrures (J.-M. Joubert, LCMTR-CNRS, Thiais) et enfin films de  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  électrodéposés sur Ag ou sur  $SrTiO_3$  (M. Alario-Franco, Laboratoire de chimie de l'état solide, Madrid).

La prochaine Rencontre aura lieu en Espagne, la date est à préciser.

## Modélisation et images en chimie

C'est sur ce thème que les chimistes de l'université de Marne-la-Vallée, sous le patronage de la commission interdivisions Enseignement de la Société Française de Chimie, ont organisé les 17<sup>e</sup> Journées de l'Innovation et de la Recherche dans l'Enseignement de la Chimie, (JIREC) qui se sont déroulées du 23 au 26 mai 2000 sur le campus de l'université. Ces Journées ont rassemblé plus de 100 participants, la plupart français, incluant 29 enseignants de lycées et classes préparatoires.

Le thème retenu cette année est l'un des thèmes les plus fondamentaux de la chimie : les modèles, leur représentation en images et leur validation. Ces journées comportent des conférences de revue sur des thèmes émergents en relation avec les nouveaux programmes et des séances de discussion (ateliers) entre enseignants du supérieur et professeurs des lycées.

Différents niveaux de modélisation et de simulation en chimie ont été illustrés au cours de ces Journées :

- **La modélisation des structures électroniques** des atomes et des molécules : le rôle des doublets d'électrons dans les liaisons, la géométrie des molécules, la mésomérie, la spectroscopie électronique. Ce thème a été présenté et discuté dans les exposés de Pavel Rosmus (UMLV), Rolland Lissillour (Rennes) et dans les ateliers.

- **La modélisation des mouvements internes** des molécules : en particulier Richard Lavery (Paris) a présenté l'étude des conformations des molécules biologiques.

- **La modélisation de la réactivité** : la chimie sur l'échelle de temps de la femto seconde, couronnée en 1999 par le prix Nobel de chimie, a été introduite par Chantal Daniel (Strasbourg), la chimie de l'atmosphère par Gérard Toupance (Créteil) et les mécanismes en chimie organique ont été discutés dans les ateliers animés par Nguyen Trong Ahn (École polytechnique) et Jean-Pierre Foulon (Paris).

- **La modélisation des effets macroscopiques** : avec la mise en

œuvre de la dynamique moléculaire et de traitements statistiques a été présentée par Anne Boutin (Orsay) et la simulation numérique de la dissociation d'une molécule sous l'effet d'un solvant par Philippe Millié (CEA Saclay).

La place des modèles, qu'ils soient empiriques ou mathématiques, l'analyse de leur validité et la façon de les introduire dans les différents cycles d'étude ont été des sujets abondamment débattus dans les ateliers en insistant sur leur implication dans les nouveaux programmes de chimie et physique des lycées qui entrent en vigueur dès la rentrée 2000 pour les classes de seconde. Ces nouveaux programmes font une large part à l'approche microscopique de la structure et de la réactivité de la matière. Le rôle que joue l'image comme support pour la compréhension des modèles a été largement discuté à l'occasion de toutes les applications abordées.

Gilberte Chabaud