

Livres



Génie de la réaction chimique

Daniel Schweich (coord.)

610 pages, 68,91 €

Éditions Tec & Doc, 2001

Dans le contexte de la collection Génie des procédés de l'École de Nancy et le prolongement des ouvrages de J. Villiermaux relatifs à la conception et au fonctionnement des réacteurs, D. Schweich propose un nouveau traité de génie des procédés consacré spécifiquement au génie de la réaction chimique.

Le très vaste domaine pris en compte dans cet ouvrage justifie 15 chapitres organisés en trois ensembles complémentaires. Le premier aborde les notions de base, les concepts, les modèles théoriques et les méthodes générales d'acquisition et d'interprétation de données cinétiques. Le deuxième ensemble examine les particularités de différents réacteurs classiques rencontrés dans l'industrie (cuve agitée homogène, réacteurs catalytiques hétérogènes, réacteurs à solide consommable, réacteurs électrochimiques, réacteurs de polymérisation et réacteurs photochimiques). Enfin, le troisième contient quelques approfondissements et des annexes utiles au lecteur (index, glossaire, bibliographie et abaques).

Les divers spécialistes qui ont rédigé seuls ou en équipe les divers chapitres de cet ouvrage collectif sont connus internationalement dans les secteurs de la recherche et de l'enseignement. La coordination de D. Schweich assure une excellente homogénéité des diverses contributions, claires et bien structurées, même si certains approfondissements conduisent parfois à des détails industriels très précis.

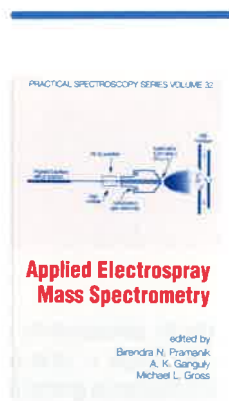
Dans l'ensemble, la présentation est agréable, rigoureuse, progressive et pédagogique. Une variété assez complète de modèles et de systèmes d'équations est proposée, agrémentée

régulièrement d'études de cas et de nombreux exemples (généralement avec solution). Des tableaux très clairs regroupent les informations nécessaires.

Si le chercheur bénéficie de développements fort utiles sur les mesures cinétiques, l'industriel, lui, est moins bien renseigné sur la précision et le choix des corrélations ou sur l'importance relative des divers phénomènes mis en jeu dans les processus pratiques. Dans le même contexte industriel, les commentaires sur la technologie, sur la mise en œuvre des catalyseurs ou sur la sécurité des procédés sont peu développés.

Ce livre sera donc très utile comme traité de référence pour les étudiants, les chercheurs et les ingénieurs en génie de la réaction chimique où ils trouveront de nombreux repères pour interpréter et modéliser leurs résultats. En conclusion, cet ouvrage de poids constitue une magistrale pierre de taille destinée à contribuer durablement à la construction de l'édifice francophone de génie des procédés.

Jean-Paul Euzen



Applied electrospray mass spectrometry

Practical spectroscopy series, vol. 32

Birendra N. Pramanik, A.K. Ganguly et Michael L. Gross (ed.)

434 pages, 185 \$

Marcel Dekker, New York, 2002

L'ionisation des molécules lourdes et polaires par la méthode « electrospray » (electrospray ionization ou ESI) a été l'une des méthodes d'analyse les plus novatrices et les plus porteuses d'applications importantes de ces vingt dernières années. Plusieurs ouvrages consacrés aux applications de l'electrospray ont paru au cours des douze derniers mois, et celui qui est présenté ici réunit 11 chapitres rédigés indépendamment par différents auteurs.

Contrairement aux autres ouvrages sur les applications de l'ESI, celui-ci n'affiche pas clairement dès son titre un domaine particulier, mais on y retrouve néanmoins les deux domaines où l'ESI est particulièrement utile : les médicaments et l'analyse des protéines.

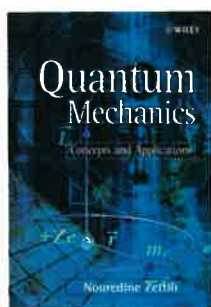
On affirme souvent que l'utilisation d'un spectromètre de masse ne nécessite pas d'en connaître tous les aspects techniques, cependant la maîtrise de l'ESI reste encore complexe, et il est justifié d'expliquer sa méthodologie avant de traiter des applications. C'est le sujet du premier chapitre, rédigé par Robert Cody, consacré à l'histoire, la théorie et l'instrumentation de l'ESI-MS, et qui occupe à lui seul 104 des 434 pages de l'ouvrage, soit le quart du volume. C'est beaucoup, d'autant que le résultat n'est pas totalement convaincant pour plusieurs raisons. Donner une liste de 486 références en fin de chapitre n'impressionne plus personne aujourd'hui où une recherche sur Internet avec le simple mot « electrospray » en retourne plusieurs milliers ; d'autant que le texte qui le précède n'explique pas véritablement le contenu de ces références et manque de figures et de tableaux pour rompre sa monotonie. On est également parfois gêné par les nombreux renvois vers les appareillages conçus par la société d'instrumentation qui emploie l'auteur, et qui altère la crédibilité du contenu. Par contraste, le chapitre deux, également co-rédigé par un scientifique travaillant pour une société d'instrumentation, est d'une totale objectivité. Le chapitre se termine par 14 pages de tableaux des rapports masse/charge de produits utilisés pour le calibrage de l'ESI, qui diluent davantage et un peu inutilement ce premier chapitre, avec de plus une petite erreur dans le tableau A11.

On retiendra bien davantage les deux chapitres consacrés aux nanotechniques d'introduction des échantillons (Nanospray au chapitre 2, traité par Covey et Pinto, Micro-electrospray et micro-dialyse au chapitre 11, rédigé par Andrén et Caprioli). La préparation d'échantillon, l'introduction des solutions liquides pour l'ESI reste un des aspects techniques laissé au choix de l'utilisateur et ces deux chapitres, bien rédigés et abondamment illustrés de photographies et de figures sont particulièrement utiles.

Les huit autres chapitres sont des descriptions d'applications à un problème particulier, notamment dans le domaine pharmaceutique et de l'analyse des protéines. Tous sont intéressants et couvrent la plupart des

aspects en cours d'exploration par des méthodes ESI : la chimie combinatoire, l'analyse des médicaments et des produits naturels, les études pharmacocinétiques et l'analyse quantitative des protéines par ICAT, la conformation des protéines par l'échange d'hydrogène, etc. En conclusion, malgré quelques faiblesses du premier chapitre, les dix autres apportent des éclairages utiles et justifient tout l'intérêt à porter à cet ouvrage.

Patrick Arpino



**Quantum mechanics
Concepts and applications**

Nouredine Zettili

649 pages, 29,95 £

John Wiley & Sons Ltd, 2001

Comme il est indiqué dans la post-face, ce livre est d'une structure peu courante. On trouve effectivement d'excellents livres sur la théorie de la mécanique quantique, on trouve plus difficilement des recueils de problèmes avec solutions, mais très rarement une réunion des deux. C'est ce qu'a tenté, il semblerait avec succès, N. Zettili. Celui-ci écrit « *on ne peut pas apprendre à nager sans se mouiller* » ; il en est effectivement de même en physique et plus particulièrement dans le cas de la mécanique quantique où les concepts vont à l'encontre de notre expérience macroscopique. Si l'on arrive à quitter nos réflexes habituels et donc à accepter le formalisme, on se trouve généralement très décontenancé, après cet effort d'abstraction, lorsqu'il faut revenir au réel de l'expérience et appliquer ce que l'on croit avoir compris. Chaque chapitre est donc accompagné de problèmes d'application avec solution et d'exercices dont la solution n'est pas donnée. Il est clair qu'une bonne utilisation de l'ouvrage est comme le conseille l'auteur, de résister à la tentation d'accéder directement aux solutions et de persé-

vérer à tenter de résoudre les problèmes posés.

Après une introduction très classique qui aborde les origines de la mécanique quantique et s'appuie sur l'expérience des doubles fentes pour introduire la dualité onde-particule, on trouve un chapitre dédié aux mathématiques associées ; on y trouve ce qui est nécessaire sur les opérateurs et leur représentation matricielle. Ces rappels seront certainement très utiles aux utilisateurs éloignés par leur âge de leurs cours de mathématiques, mais également aux étudiants qui ne sont pas forcément très sûrs de leurs bases mathématiques. Une courte introduction de la notation de Dirac (bra, ket) rendra service à des lecteurs à qui cette notation a souvent été imposée sans aucune explication, ni justification mathématique.

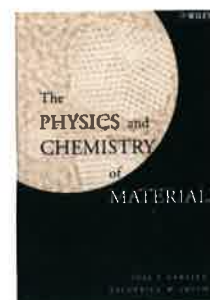
La suite du livre est assez classique dans sa constitution, abordant la particule dans un espace à une dimension après avoir décrit les postulats de la mécanique quantique. La notion de spin est ensuite introduite, pour arriver au principe d'exclusion de Pauli et au remplissage des couches électroniques dans le tableau périodique. Les méthodes d'approximation sont ensuite abordées. Le livre se termine sur une présentation rapide de la méthode de perturbation et l'application très concise aux phénomènes de diffraction des particules.

Il ne faut certainement pas prendre ce livre comme un ouvrage de référence complet sur la mécanique quantique, mais plutôt un moyen, soit d'aborder cette discipline, soit d'approfondir des connaissances assez superficielles que le chimiste utilise couramment. C'est dans cette dernière utilisation que les problèmes avec solution seront très utiles, car ils permettront, avant de passer à un problème concret à résoudre, « de se faire la main ». Fort de l'excellente compréhension qu'amènent les applications, le lecteur pourra alors aborder des domaines plus évolués, comme la résonance magnétique nucléaire ou les interactions orbitales, sans nécessairement refaire la démarche du calcul concret qui est faite ici, mais avec la conscience de pouvoir comprendre les détails du fonctionnement si cela s'avère nécessaire.

Ce livre, dont le texte et les problèmes ont été testés sur de nombreux étudiants, constitue un bon ouvrage de base pour l'étudiant, mais également pour l'enseignant ou le chercheur dans des disciplines « utilisatrices » de la mécanique quantique comme la chimie.

Il s'adresse aux personnes qui ont besoin d'utiliser « l'outil » mécanique quantique.

Jean-Claude Beloeil



**The physics and chemistry
of materials**

Joel I. Gersten et Frederick W. Smith

826 pages, 78,95 £

John Wiley & Sons, New York, 2001

Ce traité sur les matériaux est un ouvrage considérable tant en volume (826 pages complétées par des informations données sur le site Internet de Wiley) qu'en qualité. Ce n'est pas une introduction à la science des matériaux, mais un livre de nature plus fondamentale, se situant à la jonction de la physique du solide et de la science des matériaux. De ce fait, les physiciens pourront y trouver des applications de leurs développements théoriques, et les spécialistes des matériaux, des interprétations fondées scientifiquement des structures et propriétés des matériaux qu'ils utilisent. Conformément au titre de l'ouvrage, les auteurs veulent analyser les origines physiques et chimiques des propriétés des solides, tout en mettant l'accent sur les matériaux intéressants du point de vue technologique. Leur ambition est d'interpréter les structures et propriétés à partir de l'ordre atomique local et des liaisons chimiques.

Le traité couvre un vaste domaine. Ses 21 chapitres sont organisés en 5 parties, d'ampleur inégale. La première partie décrit, de façon générale, la structure des matériaux : structure des cristaux (réseaux, motif, coordinence), liaisons atomiques, diffraction et réseau réciproque, ordre et désordre dans les solides (notion de défaut). La seconde partie concerne les principales propriétés physiques des matériaux : propriétés thermiques (chaleur spécifique, dilatation thermique, conductivité thermique), à partir du concept de phonons ; processus thermiquement activés (diffusion, chan-

gements de phases, diagrammes de phase) ; propriétés électriques et thermiques, à partir des théories sur les électrons dans les solides ; propriétés optiques, magnétiques et mécaniques (élasticité, anélasticité, plasticité et rupture). Pour chaque type de propriétés, les auteurs se réfèrent aux théories pertinentes, analysées de façon critique, sans abuser du formalisme mathématique.

La troisième partie fait une présentation très large des différentes classes de matériaux : semi-conducteurs, métaux et alliages, céramiques, polymères, mais aussi matériaux diélectriques et ferroélectriques, supraconducteurs, matériaux magnétiques, matériaux pour l'optique. Les propriétés caractéristiques de chaque classe de matériaux sont d'abord discutées, en liaison avec la partie II. Des exemples et des applications choisis selon leur intérêt technologique sont systématiquement fournis.

La quatrième partie qui s'intitule « Surfaces, films minces, interfaces et multicouches » a pour objectif de montrer les effets de discontinuités dans la structure chimique et physique sur les propriétés des matériaux, avec deux aspects : minimiser certains problèmes liés aux surfaces et interfaces, tel le frottement, et ouvrir la voie à des matériaux aux propriétés nouvelles.

Enfin, la dernière partie, constituée par un seul chapitre, est consacrée à la synthèse et la mise en forme des matériaux. Ce chapitre de « sensibilisation » ne donne que les principes de base de l'élaboration et de la mise en forme des principales classes de matériaux (semi-conducteurs, métaux, céramiques et verres, polymères), en s'appuyant sur des exemples d'intérêt industriel.

Chaque chapitre comporte une bibliographie, limitée à des ouvrages de référence, et des problèmes. De plus, comme signalé plus haut, de nombreuses informations complémentaires peuvent être obtenues sur Internet : un chapitre complet sur les méthodes de caractérisation des matériaux, des développements sur des points particuliers, d'autres problèmes, des rappels de physique de base.

Je recommande cet ouvrage à tous ceux qui sont passionnés par les aspects fondamentaux de la science des matériaux et qui veulent connaître les bases théoriques des multiples propriétés des matériaux que nous utilisons : étudiants de 2^e et 3^e cycles, chercheurs, enseignants, ingénieurs. Sa lecture nécessite un certain bagage

théorique. Il peut servir de support à des cours avancés sur les matériaux ou de source d'approfondissement pour des exposés plus introductifs.

Jean-Marc Haudin



Chimie et physicochimie des polymères

Michel Fontanille et Yves Gnanou
Préface de Jean-Marie Lehn
586 pages, 53 €
Dunod, Paris 2002

Depuis le traité de G. Charpentier et L. Monnerie paru en 1969 « *Introduction à la chimie macromoléculaire* », on n'avait plus vu paraître d'ouvrage français pour l'enseignement supérieur de la chimie et physicochimie des polymères. La réflexion pédagogique sur le sujet n'est pourtant pas absente en France comme en témoignent les stages pédagogiques et les ouvrages du GFP bien cités par les auteurs, mais qui sont diffusés uniquement aux membres du GFP.

L'ouvrage, qui est proposé aux étudiants de maîtrise et aux écoles d'ingénieurs, a ce caractère pluridisciplinaire indispensable à qui veut aborder et comprendre le domaine des matériaux polymères.

Dans leur introduction, les auteurs nous rappellent que si des observations et même des développements industriels (la bakélite, le caoutchouc) sont relativement anciens (2^e partie du XIX^e siècle), la reconnaissance de la nature des polymères et la science qui en découle sont nées entre 1920 et 1930. Quelle fantastique accélération du savoir et du développement d'une science nouvelle en 70 ans !

Les six premiers chapitres expliquent avec les différents types d'enchaînements des monomères ce qu'est un polymère, comment les macromolécules peuvent s'organiser dans des processus supramoléculaires, comment elles se comportent en solution, ce qui est indispensable pour comprendre comment on mesure leurs dimensions et, bien entendu, comment

on caractérise les structures, configurations et conformations. Les notions développées dans ces 200 pages vont se retrouver dans la suite consacrée à la synthèse et aux propriétés.

Polymérisations par étapes et polymérisations en chaînes sont traitées dans les deux chapitres suivants. Les habituels problèmes que rencontrent les étudiants avec les différentes équations de Carothers pour la polymérisation par étapes et avec la cinétique et les rapports de réactivité des monomères pour les polymérisations et copolymérisations en chaînes sont clairement traités. Les méthodes de polymérisations vivantes et de polymérisations contrôlées qui se développent actuellement sont discutées dans cette partie.

Le polymère peut être lui-même le site de réactions chimiques et ce thème fait l'objet du chapitre IX dans lequel les auteurs relient structure chimique, tacticité, conformation et morphologie à la réactivité. Le chapitre suivant « les synthèses macromoléculaires » est traité pour montrer comment on peut par le génie de la polymérisation créer des fonctionnalités terminales, des copolymères à blocs et des architectures moléculaires encore plus complexes telles que dendrimères, polymères hyperbranchés etc... dont on commence à percevoir les applications.

Trois chapitres (XI, XII et XIII) sont consacrés aux propriétés en masse des polymères. Les auteurs traitent tout d'abord les phénomènes qui régissent transition vitreuse et cristallinité et dans le chapitre suivant sont abordées l'élasticité, la viscoélasticité et les propriétés mécaniques avec un bon développement sur le principe de l'équivalence temps-température dont on connaît l'importance pour analyser l'évolution des propriétés des matériaux polymères. Les notions d'endommagement et de rupture sont ensuite présentées dans le cadre des propriétés mécaniques aux grandes déformations.

Après avoir assimilé les sujets précédents, le lecteur aborde le développement des principes de rhéologie à l'état fondu et l'élaboration et la mise en œuvre des matériaux (chapitre XIII). La trentaine de pages consacrée à ce sujet est suffisante pour que l'on comprenne que ce domaine est important et conditionne les qualités des propriétés d'usage.

Les trois derniers chapitres sont des monographies sur les polymères naturels, les polymères synthétiques linéaires et les polymères tridimension-

nels ou réticulés. Ces chapitres permettent au lecteur de se retrouver dans les grandes familles bien connues et de connaître certains systèmes en devenir. Très nettement, ce livre déborde du champ de la stricte chimie et physico-chimie des polymères par son ouverture sur les matériaux, et cet ouvrage, fort bien présenté dans son aspect pédagogique avec une bonne bibliographie sera, on n'en doute pas, présent dans tous les laboratoires universitaires mais aussi dans les centres de recherche.

Peut-être serait-il intéressant, pour une prochaine édition, de trouver quelques exercices en fin de chapitre pour les étudiants comme on le trouve dans certains livres anglosaxons. Souhaitons enfin que la prochaine édition bénéficie d'un peu de couleur pour les illustrations.

Bernard Sillion



Comprendre la rhéologie : de la circulation du sang à la prise du béton

Philippe Coussot et Jean-Louis

Grossiord (coord.)

221 pages, 39 €

EDP Sciences, 2001

L'ouvrage publié sous le patronage du Groupe Français de Rhéologie décrit les concepts de base qui sous-tendent la rhéologie, science des écoulements. La rhéologie fait donc appel à la mécanique des fluides. Les mathématiques ont toujours tendance à envahir la mécanique ; les auteurs ont évité cet écueil, ils se sont contentés d'indiquer en encadré quelques formules, les plus courantes, sans les démontrer bien entendu. Ils ont cherché à offrir au lecteur la possibilité de lire la littérature technique sans être dérouté à la première information rhéologique...

Six chapitres illustrent par des exemples le comportement en écoulement de fluides aussi différents que le magma terrestre et le vernis à ongles. Il s'agit de montrer le rôle de la rhéologie pour la réalisation d'applications techniques ou la compréhension de

phénomènes de la nature. En amont de ces six chapitres, les concepts et les outils indispensables sont présentés, bref examen des types de comportement des fluides et des principes d'appareillages de mesure. Ce sont 25 pages assez faciles à lire mais qui demanderaient un effort de mémorisation au lecteur qui ignorerait strictement tout du langage adéquat. Il n'y a ni glossaire, ni index, le premier chapitre en tient lieu.

Le deuxième chapitre est le plus abondant et traite de l'écoulement d'une classe de matériaux techniquement très importante, celle des matières plastiques ; leur mise en œuvre exige une compréhension fine de leur comportement. La science rhéologique a beaucoup progressé à cause de la demande de l'industrie des plastiques, les travaux universitaires ont permis d'orienter la fabrication des matières et la mise en œuvre dont dépendent les propriétés d'usage des objets finis. L'origine moléculaire est brièvement expliquée : des particularités de l'écoulement des grandes molécules, taille des chaînes, structure linéaire, branchée ou en étoile. L'appareil mathématique a été réduit au minimum. Les auteurs sollicités pour l'écriture de ce chapitre appartiennent à des équipes françaises qui ont beaucoup apporté à la connaissance de la mise en œuvre des plastiques.

Les chapitres suivants sont des coups de projecteur dans des domaines variés où la rhéologie joue un rôle essentiel, mais où elle est moins attendue par le lecteur non prévenu : le sang, les produits alimentaires, les manteaux neigeux, les bétons, les peintures, les produits de beauté... La circulation sanguine dépend du sang, fluide complexe, et des vaisseaux aux parois souples. Le chapitre 3 en donne une description rapide. Les sauces et autres émulsions de l'industrie alimentaire font l'objet du chapitre 4. Le lecteur y prend conscience des problèmes de formulation à résoudre pour livrer des produits homogènes après des temps de stockage élevés ; un certain nombre de molécules géantes d'origine naturelle jouent un rôle essentiel. C'est aux grands mouvements de la nature que le chapitre 5 s'adresse : les magmas volcaniques, la neige, les laves torrentielles... L'avant dernier chapitre regroupe des informations sur des fluides très différents, mais qui font appel à la notion commune de suspensions d'objets de grande taille par rapport aux éléments du milieu qui les transporte. C'est le cas des peintures, des latex en particulier, des mortiers et

des bétons. La déformation du fluide doit être aisée pour l'étalement ou la coulée, un auto-lissage doit ensuite se produire et les couleures après que l'effort du pinceau a cessé doivent être absentes. L'eau doit s'évaporer sans laisser de bulles d'air, aussi bien pour les peintures latex que pour le béton ; dans ce dernier cas, il ne doit pas y avoir non plus de sédimentation des graviers les plus gros. Les boues de forage qui entraînent les déblais créés par le trépan relèvent de la même problématique. On retrouve la nécessité d'additifs organiques macromoléculaires.

Le dernier chapitre est consacré à l'industrie des cosmétiques. Ce sont le plus souvent des émulsions qui sont utilisées, simples ou multiples, avec des évolutions au contact de la peau hydrophile et sous l'influence de cisaillement lors de l'application. Des exemples sont donnés qui permettent de se faire une idée de la complexité des problèmes et de la science nécessaire à ces applications et les différents composants organiques et minéraux sont évoqués. Les problèmes rencontrés dans l'application des peintures se retrouvent pour celle des vernis à ongles.

Si les deux premiers chapitres nécessitent une lecture plus attentive, les suivants se lisent agréablement, comme un parcours de découverte pour le non initié.

Marc Carrega

Médias

Chemdraw 7 de ChemOffice Ultra 2002 (Ve 7)

Un logiciel de CambridgeSoft distribué par Ritme Informatique¹

CambridgeSoft a introduit début 2002 une nouvelle édition de sa suite logicielle, ChemOffice 7, dédiée à la gestion et à la reproduction graphique de l'information chimique. L'ensemble regroupe trois modules de base principaux : ChemDraw, pour le dessin en 2D et quelques outils de prédiction, notamment en RMN, Chem3D pour la modélisation dans l'espace et l'évaluation de propriétés physico-chimiques à l'aide de modèles de calculs de chimie théorique et ChemFinder pour la gestion de plusieurs bases de données. Comme précédemment, cette suite se décline en 3 versions : standard, pro et ultra, mais avec une documentation unique. Le déballage de la version « ultra » révèle 7 CD-Rom bien garnis et 4 manuels, permettant l'installation des divers modules tant sous Windows-PC que sous Macintosh.

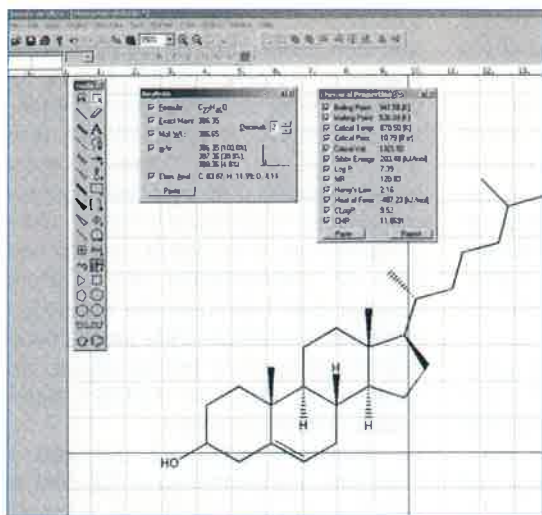


Figure 1.

Comme toujours, devant une telle richesse de documents, que peut écrire le critique en quelques paragraphes ? Encenser le produit n'ajoutera rien de plus aux nombreux propos élogieux déjà rédigés, et soigneusement archivés sur le site de l'éditeur ou dans ses propres publications². A l'inverse, chercher à débusquer le défaut, le « bug » insidieux, serait tout aussi injuste car visiblement, cette suite logicielle représente des milliers d'heures de travail par des équipes de chimistes et de programmeurs. Il s'en trouve sans doute quelques-uns, puisqu'une mise à jour de toute la suite, ChemOffice 7.01, a été rendue disponible en téléchargement, et également une mise à jour du seul module Chemdraw, passant à la version 7.03 en juin 2002. En dehors des sites officiels, on peut écumer des forums dans des groupes de discussion, mais cette recherche n'a pas révélé de sérieux griefs d'utilisateurs, ce qui est plutôt bon signe.

Les modules principaux de la suite sont suffisamment connus et utilisés par la communauté des chimistes depuis une quinzaine d'années pour ne pas avoir à les détailler, mais seulement à décrire les ajouts depuis la précédente version 6 introduite en 2000.

Limitons-nous pour l'instant à examiner Chemdraw 7.0, réservant l'analyse des autres modules pour un prochain numéro. On trouve peu de modifications dans les outils de dessin de base de Chemdraw. Cela fait maintenant plusieurs années que l'on trouve sur Internet des outils gratuits permettant d'effectuer les dessins de bases utiles pour publier et enseigner en chimie, et c'est donc sur des possibilités autres que le dessin pur que se concentrent les efforts des concepteurs pour proposer un produit innovant, comme des utili-

itaires pour la RMN, la spectrométrie de masse, la prédiction de propriétés physico-chimiques (par exemple douze d'entre elles dans la version « ultra » récente), l'intégration dans d'autres programmes tels que Microsoft Word ou Excel... Malgré tout, les ajouts de la version 7.03, même s'ils sont nombreux, portent plutôt sur des détails, telle une disposition différente du bureau et des menus, la numérotation des atomes d'une structure, une meilleure gestion de crochets pour la représentation de polymères, un tableau de modèles de structures

biochimiques (BioArt) permettant d'éditer rapidement la représentation de biopolymères. L'interactivité avec l'usage de la souris a été nettement améliorée et le bouton droit accède maintenant à la plupart des menus contextuels. On regrettera néanmoins que la molette d'une souris récente ne puisse toujours pas permettre d'effectuer une vue panoramique sur un projet de dessin. Des améliorations pourraient également être apportées à la régularité des divisions de la règle, à un paramétrage éventuel et un accrochage à la grille du dessin. A trop chercher à améliorer l'intelligence chimique du logiciel, il semble que son intérêt fondamental – le dessin précis de structures chimiques – soit moins prioritaire. Ces critiques sont toutefois mineures, puisque l'apprentissage du logiciel est toujours aussi aisé et permet de créer rapidement les structures les plus complexes, avec toutes ses notations, numérotations ou mise en évidence de sa stéréochimie sur une représentation en 2D.

Rien de tel qu'un exemple pour décrire les possibilités et les éventuelles limites d'un logiciel, même si l'on ne peut ainsi couvrir toute sa richesse. On peut taper le mot « cholestérol » et demander la transformation en structure chimique, qui s'affiche immédiatement.

Le logiciel sait vérifier la cohérence chimique, et toute erreur dans le nombre d'atomes d'hydrogène ou la nature de liaisons serait immédiatement signalée. L'opération inverse qui consiste, partant du dessin à demander son nom donne comme résultat :

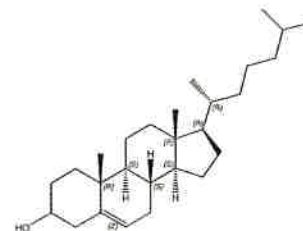
17-(1,5-Dimethyl-hexyl)-10,13-dimethyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-3-ol.

On peut aussi demander l'affichage en

notation linéaire SMILES, et l'on obtiendra dans ce cas :

```
CC(C)CCC[C@@H](C)[C@H]3CC[C@@]4([H])[C@]2([H])CC=C1CC(O)CC[C@@](C)1[C@]([H])2CC[C@]34C
```

L'opération inverse qui consisterait à partir d'une notation SMILES d'afficher la structure est tout aussi immédiate. Un autre format de notation linéaire, SLN, est également pris en charge. La demande d'afficher la stéréochimie conduit à :



Si on reprend le dessin du cholestérol, il est en principe possible de demander la numérotation des atomes. Le premier résultat ne donne cependant pas la numérotation correcte et inclut tous les éléments, y compris les atomes autres que le carbone. Si on la connaît à partir d'une source de référence, par exemple le *Handbook of chemistry and physics*, il est possible d'éditer le premier atome correct. Le manuel du logiciel indique à tort que la numérotation des autres atomes s'effectue automatiquement en séquence. En revanche, en double-cliquant les atomes les uns à la suite des autres dans l'ordre qui doit être le leur, et en désélectionnant les atomes qui n'ont pas à être numérotés, on affiche au bout d'une dizaine de clics la représentation recherchée.

Parmi les propriétés physico-chimiques que le logiciel sait estimer, les déplacements chimiques en RMN du proton ou du carbone-13 sont les plus utiles et les plus précis. En sélectionnant le dessin de la structure du cholestérol, la fonction « 1H-NMR shifts » donne la liste des déplacements chimiques, indique les protons concernés et dessine le spectre auquel on doit s'attendre. L'opération pour évaluer le spectre RMN du ¹³C est similaire dans son principe et aboutit à une qualité de résultats comparable.

ChemProp est une autre fonctionnalité qui peut afficher, lorsqu'elle est activée, douze constantes physiques et thermodynamiques : point de fusion, point d'ébullition, volume et pression critiques, énergie de Gibbs, coefficient de partage octanol/eau, indice de

Paramètre pour l'hexanol-1	Calculs par ChemProp	Valeurs expérimentales
Boiling point	429.06 [K]	430.15 [K]
Melting Point	217.70 [K]	221.55 [K]
Critical Temp	594.66 [K]	610.3 [K]
Critical Pres	34.52 [Bar]	34.17 Bar]
Critical Vol	390.50 [cm ³ /mol]	387 [cm ³ /mol]
Gibbs Energy	-137.18 [kJ/mol]	n.d. (non disponible)
Log P	1.80	2.03
MR	31.24 [cm ³ /mol]	42.20 [cm ³ /mol]
Henry's Law	3.14	n.d.
Heat of Formation	-319.40 [kJ/mol]	-315.9 [kJ/mol]
CLogP	1.881	n.d.
CMR	3.1133	n.d.

réfraction molaire, coefficient de la Loi de Henry, enthalpie de formation, etc. (figure 1).

Il convient néanmoins d'être prudent avec les résultats. Le manuel signale que ce module calcule 12 constantes pour des structures dessinées de moins de 100 atomes, et il n'y a aucun paramètre à régler. Le résultat s'affiche instantanément pour chaque formule dessinée. La comparaison avec des données expérimentales de la littérature montre que les erreurs sont parfois très grandes, au point que la confiance accordée aux données du tableau doit être toute relative. Il n'y a aucune mise en garde contre le risque de telles erreurs, ni dans le manuel de ChemDraw, ni dans les fichiers d'aide en ligne.

Dans le cas du cholestérol, le logiciel prédit des températures de fusion et d'ébullition, respectivement de 526,89 et 947,58 K, alors que les valeurs expérimentales sont de 421,5 et 633 K_(760mm); les autres valeurs, à peu près invérifiables dans la littérature, sont probablement à écarter.

L'accord est cependant bien meilleur si l'on se limite à de petites molécules; ainsi pour l'hexanol-1, la comparaison entre les calculs du logiciel ChemDraw et celles que l'on peut trouver dans la littérature est très honorable (voir tableau ci-dessus).

Un autre petit utilitaire, suivant aussi toute modification du dessin, fournit quelques données utiles pour la spectrométrie de masse, telles la masse chimique, la masse mono-isotopique, la répartition et les abondances du massif isotopique, sans prétendre être une aide à une interprétation des fragments possibles.

Il y a encore beaucoup d'autres possibilités qui ne peuvent être décrites ici et qui font de ChemDraw 7 un logiciel très utile au quotidien. Pendant les tests, aucune défaillance ou arrêt intempestif

n'a été observé. Les images dessinées s'exportent facilement dans d'autres applications telles que Microsoft Word ou Excel, et nous verrons par la suite comment le module de ChemOffice 2002 pour la conception et la recherche de bases de données, ChemFinder, sait maintenant les retrouver dans des documents Word ou Excel. Ceci, ainsi que les autres modules de ChemOffice 2002 seront commentés dans un prochain numéro.

Patrick Arpino

¹ 34, bd Haussmann, 75009 Paris.

Tél. : 01 42 46 00 42.

Fax : 01 42 46 00 33.

www.rtime.com

² <http://chemnews.cambridgesoft.com/features/special.cfm?Code=R>

Revue

Bulletin de l'Union des Physiciens (BUP)

Sommaire du n° 846, juillet-août-sept. 2002

- Découverte de la source d'énergie des étoiles, un survol historique, par Kamil Fadel.
- Sur l'expérience d'Ératosthène, par Arkan Simaan.
- Chimie et alimentation, par Françoise Rivoal et Bernadette Discamps.
- Les hétérocycles dans la chimie des arômes, par Xavier Fernandez, Sébastien Kerverdo, Louise Lizzani-Cuvelier et Elisabet Dunach.
- Tous les chemins mènent... Arôme, par Philippe Duby et Erik Bölcs.
- Actualisation des connaissances sur les moteurs électriques, par Charles-Henri Vigouroux.
- Remarques sur deux articles concernant les éléments chimiques, par Maurice Bernard.
- Collège autour d'un thème :
 - Évaluation au collège, par Dany Launer.

- Exemples d'itinéraires de découverte, par Dany Launer.
- Les compétences vues à travers le cas de l'écriture chimique en collège, par Frédéric Gérard.
- TP : que faire des résultats non conformes ?, par Gérard Vacher.
- Évaluation individuelle de compétences expérimentales en collège, par Dany Launer.
- Manipuler le 6^e élément, par Gérard Vacher, Béatrice Ricard et Myriam Pallière.
- 50^e Journées nationales de l'Union des Physiciens.

A signaler

A propos des journaux européens

- La rédaction de *L'Actualité Chimique* est heureuse de constater le brillant développement des journaux européens auxquels la SFC est associée.

Nous apprenons que l'indice d'impact de *ChemPhysChem* est de 4,21, ce qui le place en tête des journaux de chimie-physique. Ce résultat ne peut qu'encourager les auteurs français à publier dans nos journaux scientifiques européens et nous adressons nos félicitations à l'équipe de rédaction du journal.

• <http://www.chemphyschem.com>

- En janvier 2003, *Angewandte Chemie*, publié par John Wiley & Sons, devient hebdomadaire, revenant ainsi au tirage de 1898...

• Pour en savoir plus et lire l'éditorial du Dr Göltz's, « Back to the future » : http://www.wileyvch.de/vch/journals/2002/editorials/edit_2002_15.pdf

L'INRA et le développement durable

A l'occasion du 2^e sommet de la Terre consacré au développement durable qui s'est tenu à Johannesburg, l'INRA a ouvert sur son site Internet une page spéciale consacrée à ses recherches sur le développement durable, avec notamment un dossier sur l'étude de l'effet de serre et du réchauffement climatique, et leurs impacts sur l'agriculture et la forêt.

• <http://www.inra.fr/actualites/johannesburg.htm>

Pour la science fête ses 25 ans

Notre confrère *Pour la science* sort à cette occasion un numéro exceptionnel (n° 300).

Nous lui souhaitons un bon anniversaire et tous nos vœux pour le futur.