Mensuel
numéro
10
Octobre 2002

l'actualité chimique

Pour de l'eau potable

Matériaux désordonnés à l'échelle atomique

SFC Eurochem Toulouse 2002 Compte rendu

sfc
société française de chimie

Édité par la Société Française de Chimie - ISSN 0151 9093

EDP SCIENCES

Rentrée universitaire

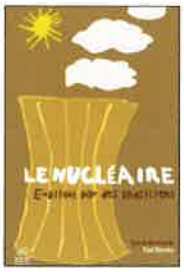
Analyse statistique des données expérimentales
K. Protassov
Collection Grenoble Sciences

• 2-86883-590-2
• 160 pages
• 22 €

La physique des solides
N.W. Ashcroft
et N.D. Mermin

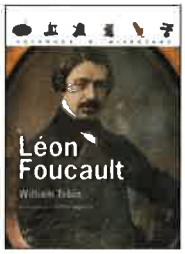
• 2-86883-577-5
• 900 pages
• 65 €

Le nucléaire expliqué par les physiciens
Dirigé par P. Bonche



• 2-86883-575-9
• 320 pages
• 39,50 €

Léon Foucault
W. Tobin
Adaptation française par J. Lequeux



• 2-86883-615-1
• 368 pages
• 29 €

La mécanique quantique
Problèmes corrigés
V.M. Galitski, B.M. Karnakov
et V.I. Kogan
Collection Grenoble Sciences

Tome 1
• 2-86883-585-6
• 320 pages
• 38 €

Tome 2
• 2-86883-586-4
• A paraître en décembre 2002

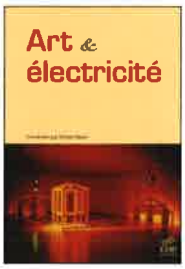
Mécanique
De la formulation lagrangienne au chaos hamiltonien
G. Gignoux et B. Silvestre-Brac
Collection Grenoble Sciences

• 2-86883-584-8
• 464 pages
• 45 €

Minimum Competence in Scientific English
J. Upjohn, S. Blattes, V. Jans
Collection Grenoble Sciences

• 2-86883-445-0
• 256 pages
• 16,76 €

Art et éléctricité
Edité par M. Menu



• 2-86883-568-6
• 100 pages
• 18 €

Chimie organique hétérocyclique
Structure fondamentales
R. Milcent

• 2-86883-583-X
• 650 pages
• 59,50 €

Physique et interrogations fondamentales 6
Un siècle des quanta
Coordonné par Y. Saquin
et G. Cohen-Tannoudji

• 2-86883-604-6
• 172 pages
• 19 €

Naissance de la physique de la Sicile à la Chine
M. Soutif
Collection Grenoble Sciences

• 2-86883-589-9
• 250 pages
• 29 €

Le cycle des combustibles
L. Patarin

• 2-86883-620-8
• 220 pages
• 45 €

EN VENTE CHEZ VOTRE LIBRAIRE ou EDP Sciences – BP 112 – 91944 Les Ulis cedex A

Fax : 01 69 86 06 78 - e-mail : customers@edpsciences.org - Ajouter 5 € pour participation aux frais de port

l'actualité chimique

RÉDACTION
Rédacteur en chef : Bernard Sillion
Rédactrice en chef adjointe : Séverine Bléneau-Serdel
Secrétaire de rédaction, maquettiste, webmaster : Évelyne Girard
Secrétaire de rédaction, activités de la SFC, manifestations : Roselyne Messal
Secrétaire de rédaction : Christine Guillou
Chargés de rubrique : Lydia Bonazzola (Enseignement), Yves Dubosc (Livres et médias, Manifestations), Gilbert Schorsch (Industrie), Pierre Vermeulin (Chimie francophone).
Comité de rédaction : P. Aldebert (CNRS), P. Arpino (div. Chim. anal.), A. Audibert-Hayet (IFP), B. Badet (ICSN), X. Bataille (Histoire des sciences), E. Bordes (div. Cat.), J. Buendia (SCI), M. Carrega (div. Matér. polym.), G. Chambaud (com. interdiv. Enseignement), N. Cheymol (CPGE), J.-C. Daniel (groupe Formulation, GFP), R.-E. Eastes (ENS), J.-P. Foulon (UDP), J. Fournier (club Histoire), Y. Gauduel (div. Chim. phys.), J.-S. Girardon (club des jeunes), G. Gros (chimie des procédés), J.-F. Gruson (IFP), J.-F. Lambert (div. Cat.), P. Pichat (ADT), A. Picot (Prévention des risques chimiques), D. Rutledge (div. Chim. anal.), G. Schorsch (SFC), F. Sécheresse (div. Chim. coord.), H. This (INRA-Collège de France), M. Verdaguer (UPMC), P. Vermeulin (CNRS), J.-N. Verpeaux (div. Chim. orga.), C. Viel, D. Vivien (div. Chim. solide)
Journaliste stagiaire : Colin Droniou
Publication analysée ou indexée par : Chemical Abstracts, la base de données PASCAL

ÉDITION
Société Française de Chimie
250, rue Saint-Jacques, 75005 Paris
Tél. : 01 40 46 71 64 - Fax : 01 40 46 71 61
E-mail : ac@sfc.fr - http://www.sfc.fr
Directeur de la publication : François Mathey, président de la Société Française de Chimie
Imprimerie : SPEI, BP 26, 54425 Pulnoy
Maquettage articles : e-Press, 197, Bd Zerktouni 20000 Casablanca (Maroc)
ISSN 0151 9093
Commission paritaire n° 0402 G 75884

DIFFUSION
EDP Sciences S.A. 17, avenue du Hoggar, PA de Courtaboeuf, BP 112, 91944 Les Ulis Cedex A
http://www.edpsciences.org
Tél. : 01 69 18 75 75 - Fax : 01 69 28 84 91
Marketing : Isabelle Pouliquen

PUBLICITÉ
Céline Hoarau, EDP Sciences
Tél. : 01 69 18 15 12 - Fax : 01 69 86 07 65
hoarau@edpsciences.org

© SFC 2002 - Tous droits réservés
Dépôt légal : octobre 2002
Toute représentation ou reproduction, intégrale ou partielle, fait sans le consentement de l'auteur, ou des ayants droits, ou ayant cause, est illicite (loi du 11 mars 1957, alinéa 1er de l'article 40). Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait une contrefaçon sanctionnée par les articles 425 et suivants du Code pénal. La loi du 11 mars 1957 n'autorise, aux termes des alinéas 2 et 3 de l'articles 41, que les copies et les reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective d'une part, et, d'autre part, que les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration.

TARIFS 2002 - L'ACTUALITÉ CHIMIQUE
(11 numéros par an)
Particuliers : France 70 € - Étranger 75 €
Institutions : France 168 € - Étranger 180 €
Membres de la SFC : nous consulter
Abonnement : EDP Sciences
subscribers@edpsciences.org
Prix de vente au numéro : 15,5 €

EDP SCIENCES
sfc société française de chimie

Éditorial 2
Chimie durable : la carotte ou le bâton ?, par **B. Sillion** 2

Recherche 3
La science au service du patrimoine européen, par **G. Schorsch** 3
Le carbure de silicium : un nouveau support pour la catalyse hétérogène, par **C. Pham-Huu, N. Keller** et **M.J. Ledoux** 8
Structure des matériaux désordonnés à l'échelle atomique : vers une compréhension de l'ordre à moyenne portée par les méthodes de simulation numérique, par **C. Massobrio** et **M. Celino** 19

Industrie 26
Les problèmes de l'eau potable an II, par **P. Pichat** 26
Production et distribution de l'instrumentation scientifique. Conséquences pour les acteurs et les partenaires, par **P. Arpino** et **C. Droniou** 33

Enseignement 37
Les travaux pratiques
Alkylation réductrice d'un aminoacide, par **J.-C. Hannachi** 37

La chimie au quotidien 40
La science sur la bonne longueur d'onde, par **C. Droniou** 40
Des chimistes à la Fête de la science anglaise, par **P. Aldebert**, **G. Chauve**, **S. Dorthe** et **C. Monteiro** 44

Informations générales 45

Livres et médias 50

Manifestations 56
SFC Eurochem Toulouse 2002 : un essai à transformer... Toulouse, 8-11 juillet 2002, par **G. Schorsch** 56
Calendrier 61

Activités de la SFC 63

Courrier des lecteurs 64

Un article supplémentaire au numéro « Quoi de neuf en catalyse ?» (mai-juin 2002), paginé de II à VIII, est encarté dans ce numéro sous la première de couverture :
Catalyse hétérogène et chimie fine,
par Joël Barrault, Yannick Pouilloux, Patrice Marécot, Daniel Duprez et Michel Guisnet.

Index des annonceurs

Alfa Aesar *IIIe de couv.* *EDPS* *IIe de couv.* *EMEC3* *IVe de couv.*

Chimie durable : la carotte ou le bâton ?

Le sommet de la Terre à Johannesburg a mis encore une fois en évidence les incompréhensions qui se manifestent lorsqu'il s'agit d'évoquer le développement durable au niveau politique. Mais si l'on s'en tient au plan strictement technique qui est le nôtre ici, de l'analyse des causes du réchauffement de la Terre et de l'effet de serre, des critères qui caractérisent les énergies propres... etc, les diagnostics divergent, et ces différences servent, bien entendu, les analyses politiques. Les positions politiques reflètent-elles réellement l'activité technique des différents pays en matière de développement durable ? Il est intéressant d'observer que dans certains pays industrialisés comme aux États-Unis, alors que le discours politique est plutôt conservateur en matière de réglementation, la recherche est active dans le domaine des procédés durables, en particulier en chimie. En matière de développement, il n'est pas certain qu'il y ait un « avant » et un « après » la prise de conscience écologique. On sait que tous les procédés de chimie, chimie lourde, chimie des grands intermédiaires, chimie fine évoluent, et cela depuis longtemps pour des raisons économiques, mais aussi pour des considérations écologiques (même avant que l'adjectif ne devienne d'usage courant). On oppose souvent économie à écologie, mais les concepts modernes d'économie d'atomes, de chimie douce, le développement de procédés dans l'eau ou le gaz carbonique supercritique ne vont pas nécessairement vers une élévation du coût du procédé et il est probable que dans le futur le « bâton » de la réglementation sera moins efficace que la « carotte » de la simplification du procédé, plus économique parce moins dangereux, et ne nécessitant pas d'installations lourdes de traitement de rejets. A cet égard, le colloque SFC Environnement organisé par une équipe animée par J.-F. Fauvarque montrera, avec des intervenants industriels et universitaires, ce que font et peuvent faire la chimie et l'électrochimie pour l'environnement.

Lors d'un colloque organisé par la SCI, la SFGP, l'AFTP, le CNISF et la SFC, avec le soutien du CNRS, et qui aura lieu à la Maison de la Chimie le 21 novembre, les problèmes des risques chimiques seront discutés dans une perspective de chimie durable. Il était souhaitable que sur un sujet d'une telle importance les sociétés scientifiques du domaine de la chimie s'associent pour tirer des conclusions communes. Dans le futur, cette coopération pourrait se poursuivre en explorant, par des colloques organisés en commun, ce que recouvre sur le plan scientifique cette notion de chimie durable/procédés nouveaux comme évoqués ci-dessus, mais aussi ce que peut apporter la chimie des substances naturelles qui fera d'ailleurs l'objet du numéro spécial de *L'Actualité Chimique* terminant l'année 2002.

Bernard Sillion
Rédacteur en chef

Les lecteurs trouveront dans ce numéro un article sur la « catalyse hétérogène et chimie fine ». Cet article a été encarté afin de pouvoir être introduit dans le numéro spécial sur la catalyse de mai-juin 2002 dont il fait partie.

La science au service du patrimoine européen

Gilbert Schorsch

Les actions de la Commission Européenne en faveur du patrimoine culturel : un raccourci des préoccupations des restaurateurs

Les grottes préhistoriques d'Altamira ou de Lascaux, l'Acropole ou le Colisée, les cathédrales du Moyen Age avec leurs vitraux ou les résidences royales d'Hampton Court ou de Versailles – *dans le domaine des sites et des monuments* –, les œuvres des primitifs flamands, des peintres ou sculpteurs de la Renaissance italienne, les partitions de J.-S. Bach ou les écrits des Shakespeare, Goethe ou Hugo – *dans les divers domaines culturels* –, autant d'exemples qui ont marqué le développement et forgé la culture européenne.
Pour être transmis, ce patrimoine doit être restauré ou préservé, car il contribue à la prise de conscience de l'identité européenne. Sans cette mémoire collective, il sera difficile d'approfondir l'intégration européenne.
Depuis longtemps, les administrations responsables des politiques culturelles, aux niveaux national ou régional, se sont efforcées d'entretenir ces chefs-d'œuvre.
En complément de toutes ces initiatives locales, la Commission Européenne a décidé, depuis une quinzaine d'années, d'encourager les partages d'expériences et de favoriser les collaborations entre laboratoires et entreprises européens pour la conservation du patrimoine commun. Ainsi, depuis 1986 et dans le cadre des Programmes Cadre de R & D successifs, près de 45 millions d'euros ont été consacrés au financement d'une centaine de projets.
La liste de ces projets, périodiquement remise à jour par la Commission [1], offre d'ailleurs un condensé des principales étapes et préoccupations en matière de « politique patrimoniale ».

Cracovie. Vue aérienne du château royal, la cour à arcades et la cathédrale (à droite). D.R.

A l'origine, les études étaient descriptives et analytiques. Il s'agissait de dresser l'inventaire des principales pollutions et d'établir la cartographie des principaux dommages. Par suivi sur site, les laboratoires spécialisés commencèrent par étudier et partager leurs observations sur les **effets des diverses pollutions atmosphériques** (polluants gazeux, particules organiques, brouillards salins, micro-organismes...) sur les principaux monuments ou bâtiments et sur les matériaux utilisés pour leur construction (granit, marbre, calcaire, bronze, bois, verre...). Bien avant la prise de conscience des effets néfastes de la pollution sur la santé humaine, les monuments faisaient office de marqueurs des risques, à l'image des balises ou des phares !
Rapidement aussi, architectes des Monuments historiques et conservateurs des Musées réalisèrent qu'il ne suffisait pas de mettre documents ou objets d'art à l'abri pour les soustraire à la pollution et à la dégradation. Ces derniers sont sensibles aux microclimats. Papier, cuir, textile, argenterie firent aussi l'objet d'études de vieillissement systématiques. Salles et vitrines d'exposition sont ainsi équipées pour un contrôle précis des conditions d'exposition. Même les matériaux de construction de salles et enceintes doivent être adaptés pour éviter toute dégradation ! Ainsi, certains mastics silicones – *ceux dégageant de l'acide acétique au durcissement* – ou panneaux de particules – *ceux à base de colles urée/formol par exemple* – doivent être systématiquement exclus.
Parallèlement, des études de mise au point de méthodes de vieillissement accéléré et de modélisation des effets dans des chambres à atmosphère contrôlée furent entreprises pour apporter une contribution prédictive aux études analytiques initiales.
Par la suite, les études prirent une tournure plus concrète et opérationnelle. La recherche de **techniques de détection plus fines des dégradations** – *comme par exemple la tomographie ou le microforage* – ou la mise au point de **techniques d'entretien plus adaptées** rendirent plus efficace le travail des restaurateurs.
Ainsi, pour exemples, furent mis au point *le traitement des surfaces au laser,* moins dégradant que les techniques traditionnelles de sablage et moins polluant que l'utilisation de tensio-actifs et de solvants, ainsi que des *mortiers ou enduits spéciaux*, réduisant les effets des sels.
Les études prirent aussi un caractère plus fondamental. Les actions de l'humidité par condensation ou remontée capillaire – *avec leurs effets sur les dépôts de sels et leur modélisation sur des pans entiers de murs en pierre ou en briques* –, la dégradation des papiers par les encres pyrogalliques – *qui ont détérioré progressivement les notes de Léonard de Vinci ou les dessins de Rembrandt* –, la ternissure des objets en argent, ou le dépôt de vert-de-gris sur le bronze, autant d'exemples qui démontrent la nécessité d'entreprendre des études plus fondamentales pour

identifier puis combattre les facteurs essentiels de dégradation.

La Conférence de Cracovie ou l'ouverture vers les préoccupations des pays de l'Europe de l'Est

Depuis 5 ans déjà, la Commission Européenne avait pris l'habitude de réunir annuellement les équipes participant à ses divers programmes pour les inciter à échanger leurs expériences. Après Rome, Aix-la-Chapelle, Saint-Jacques de Compostelle et Strasbourg, ce fut donc au tour de Cracovie d'accueillir cette année la conférence.
Au départ, le choix de Cracovie fut essentiellement politique : au moment des discussions sur l'élargissement de l'Europe des Quinze, il s'agissait de donner un coup d'accélérateur aux collaborations qui existaient déjà entre les laboratoires et les administrations d'Europe de l'Est et ceux de l'Ouest. Mais à l'expérience, ce choix s'est avéré fort judicieux. Il a largement contribué à la bonne ambiance et aux bons échanges techniques (*encadré 1*).
En effet, Cracovie est l'ancienne capitale du Royaume de Pologne. Elle a connu ses heures de gloire du XIIIe au XVIIe siècle, et a pratiquement vécu depuis, à quelques courtes périodes près, sous domination étrangère. La préservation du patrimoine a donc été agitée par les habitants de Cracovie comme un étendard à la face des occupants successifs. Un moyen subtil d'afficher leur identité nationale !
Il n'est donc pas étonnant que près de 300 participants – *dont 140 environ en provenance de pays candidats à l'adhésion à la Communauté Européenne élargie et 60 jeunes, à qui des bourses avaient été accordées pour faciliter leur participation à cette manifestation* – se soient retrouvés à Cracovie.

Les thèmes

Les thèmes des sessions et groupes de travail parallèles sont résumés dans le *tableau I*.
Les **sessions** ont donné essentiellement l'occasion d'examiner une partie des projets récents retenus par les experts de la Commission. Celle consacrée aux agents biologiques, qui a passé en revue les effets des micro-organismes, s'est avérée particulièrement riche.
L'inventaire des divers modes ou types de **biodétérioration** recensés sur un certain nombre de sites (poudrage, exfoliation, mais surtout coloration due à des champignons ou lichens…) démontrent les effets négatifs bien connus. L'utilisation de micro-organismes pour le renforcement par calcification des supports donne un exemple d'effet positif des micro-organismes, moins connus du grand public. Enfin,

Encadré 1

Pourquoi Cracovie ?

Située sur les bords de la Vistule, la vieille ville de Cracovie a conservé son aspect originel jusqu'à nos jours. Dès 1257, un damier de rues convergeait vers une immense place quadrangulaire sur laquelle fut bâtie à partir de 1358 une grande Halle aux draps, qui rappelle celle des villes flamandes, et l'église gothique Mariacki.
Entre le XIIIe et le XVe siècle, des fortifications en pierre et en brique furent ensuite érigées. Elles entouraient la ville et la réunissaient à la colline du Wavel. De cette colline, la résidence des princes et des rois de Pologne et la cathédrale – *où reposent les grandes figures polonaises, le roi Ladislas Jagellon et le poète Adam Mickiewicz entre autres* – dominent la ville. Ce site n'est pas sans rappeler celui de Prague, avec un nombre de touristes plus réduit !
Dès 1400, Cracovie fut également le siège de la première université polonaise. Le Musée du Collegium Maius de l'université Jagellon expose d'ailleurs les lunettes qu'utilisait Copernic qui y avait fait ses études. Jean-Paul II et le cinéaste Andrzej Wajda sont des étudiants célèbres plus récents de cette université.
Au début du XXe siècle, une grande partie des remparts et des fossés a été transformée en ceinture arborée. Elle sert de campus aux nombreux étudiants et donne une ambiance sympathique et vivante à cette vieille ville.
Il n'est donc pas étonnant que Cracovie ait été inscrit, dès 1978, sur la liste des 10 premières villes du patrimoine mondial de l'UNESCO. Récemment, Cracovie fut aussi Ville Européenne de la Culture 2000. Plus d'une vingtaine de musées permanents y ont été créés. Pendant notre séjour, se tenaient simultanément des expositions de gravures de Goya, de peintures de James Enso et d'œuvres d'un architecte allemand de l'Art Nouveau. De quoi rivaliser avec l'activité culturelle de n'importe quelle ville européenne !
La proximité du quartier juif de Kazimierz illustre aussi l'esprit de tolérance de la cité. C'est son expérience du ghetto de Kazimierz qui a incité Roman Polanski à adapter *Le pianiste*, qui vient de recevoir la Palme d'or à Cannes.
Mais le développement de cette ville, dont la population actuelle atteint 750 000 habitants, est basé sur des activités industrielles, tout au long de son histoire. Au sud de Cracovie, les mines de sel de Wieliczka, exploitées dès la 2e moitié du XIIIe siècle, figuraient également dans la première liste du patrimoine de l'UNESCO. Mais après la 2e guerre mondiale, Cracovie a été confrontée aux problèmes posés par le développement industriel en zone urbaine. Le complexe métallurgique de Nova-Hüta, où travaillèrent jusqu'à 12 000 ouvriers, s'est développé de façon anarchique. Il est à moins d'une dizaine de kilomètres de la vieille ville ! Cracovie a donc subi de plein fouet les affres des pollutions industrielles. Le maire actuel, Andrezj Golas, diplômé de l'Académie des Mines de Cracovie, réussit plutôt bien l'intégration culturelle et économique de sa cité. Bien sûr, les activités du complexe métallurgique sont en baisse. Des mesures de réduction des pollutions ont été prises. Les difficultés viennent à présent des transports et des risques que posent les vibrations et les pollutions automobiles au patrimoine bâti. Automobiles et tramways pénètrent en plein cœur de la vieille ville ! De nouveaux travaux pratiques d'urbanisation en perspective…
Nous avons le sentiment que Cracovie est en train de gagner son pari. La ville, qui gère depuis dix siècles sa planification urbaine, illustre parfaitement les problèmes du développement durable et du patrimoine ! Elle méritait d'organiser la 5e Conférence annuelle du patrimoine européen.

Vue du nord-ouest de la Grande Place et de la Halle aux Draps, au fond l'église Notre-Dame gothique (2e moitié du XIVe siècle) et le beffroi de l'ancien Hôtel de ville (XIVe siècle). D.R.

Tableau I - « Cultural Heritage Research: a Pan-European Challenge ! ».
Le programme de la conférence de Cracovie.

Sessions
A. Past and present European cultural heritage research
B. Biotechnologies in cultural heritage protection and conservation
C. Damage assessment: causes, mechanisms and measurements
D. Protection and treatment of paper, leather and parchment
Groupes de travail
1. Integrating cultural heritage into the living (19 exemples)
2. Education and training needs for the conservation and protection of cultural heritage (15 présentations)
3. Meeting user needs: small and medium enterprises and research (12 exposés)
4. The conservation of cultural heritage for sustainable development, including tools and technologies for the protection of archeological heritage (14 courts exposés)

le traitement des documents en air appauvri en oxygène est une technique récente pour étouffer micro-organismes et insectes qui les détériorent. Pour cela, les objets à assainir sont mis sous enveloppes plastiques imperméables à l'azote.

Les « **workshops** » ont plutôt offert l'occasion de faire l'inventaire et de discuter d'un certain nombre de préoccupations actuelles rencontrées dans les divers pays membres de l'Europe élargie. Ils visaient à jeter les bases de futures collaborations.

Diverses expériences de mise au point de nouvelles techniques de restauration ont été confrontées. A suivre les présentations, le laser semble être devenu l'outil de prédilection des restaurateurs ! Ne nous y trompons pas. La technique intéresse les chercheurs, mais elle n'est pas encore monnaie courante chez les restaurateurs, surtout en Europe de l'Est !

La proximité de la Bohême et de la Silésie explique le nombre élevé de présentations consacrées à **l'identification**

Encadré 2

La conférence de presse

La Commission Européenne profita de cette conférence pour programmer parallèlement une conférence de presse spéciale. Une première : l'occasion de présenter, en détails, les résultats de trois projets récents. La Commission a évidemment retenu des projets qui concernent le patrimoine des futurs pays associés et dans lesquels des laboratoires d'Europe centrale étaient directement impliqués.

Une vingtaine de journalistes, en provenance principalement des futurs pays associés ont participé à cette réunion. Christian Paterman, directeur du Programme « Environnement » a rappelé les objectifs de la Commission. Cristina Gutiérrez-Cortines, député européen, a expliqué que le patrimoine était aussi pris en compte dans les travaux du Parlement Européen. Ensuite, après les interventions des représentants des Académies des Sciences de la Pologne et de la République Tchèque, les responsables de chacun des trois projets ont résumé, à l'aide de reportages vidéo, les objectifs et les résultats de leurs études. La diversité des objectifs est intéressante :

• ***Le projet ENVIART*** (Environmental impacts, degradation and protection) s'est intéressé à dresser l'inventaire des dégâts et à procéder à la restauration de faux marbre baroque (à base de mélanges de gypse, de pigments et de colle animale en deux couches). Ce marbre artificiel a été utilisé pour la décoration des colonnes et des sculptures dans une chapelle baroque du XVIIIe siècle, érigée à la place d'un ancien monastère cistercien du XIIIe siècle en Basse-Silésie et dégradée depuis par des remontées capillaires et des infiltrations. Cette chapelle rénovée servira de cas d'école pour de nombreuses réalisations baroques similaires en Europe centrale et en Europe du Sud. Ces types de décorations, très répandues dans ces régions, attestent des forts courants d'échange au XVIIIe siècle dans la partie méridionale de l'Europe.

L'identification des pigments d'origine, puis la formulation de couches à porosité contrôlée pour permettre simultanément une bonne évacuation de l'humidité capillaire tout en s'opposant à la pénétration de l'eau de condensation, furent les deux défis techniques d'une restauration qui s'est étalée sur quatre ans, de 1998 à 2002.

• ***Le projet LiDo*** (Light dosimeter for monitoring cultural heritage) propose le suivi de l'exposition à la lumière des objets d'art. La sélection de mélanges de pigments, un bleu très sensible associé à un rouge qui l'est moins, déposés sur papier ou inclus dans une résine, permet d'accumuler le flux de lumière reçu par l'objet exposé. Un brevet est en cours de dépôt sur cette association. Le niveau de sensibilité aux radiations et à la durée d'exposition a été déterminé ainsi que l'effet des microclimats. La lumière, nécessaire pour mettre en valeur les objets, devient leur ennemi !

A terme, en fonction des doses de lumière reçues, ces dosimètres devraient pouvoir actionner des écrans qui mettraient parchemins, papier, photos, textiles... à l'abri des radiations gênantes. Bibliothèques et musées profiteront à terme de ce projet. Le Centre de recherche sur la conservation des documents graphiques a été associé à ce travail (Bertrand Lavédrine).

• ***ARCCHIP*** (Advanced research Center for cultural heritage interdisciplinary project) visait la mise en place d'un centre d'excellence virtuel pour évaluer, enregistrer et suivre l'évolution des dégradations, aussi bien les fissures que la biodétérioration et l'impact du tourisme sur le patrimoine culturel bâti. La cathédrale de Prague, elle aussi inscrite sur la liste du patrimoine mondial, a servi de modèle pour suivre l'effet des vibrations engendrées par un passage continu de touristes. Mais ce centre, dirigé par Milos Drdracky, de l'Institut de Mécanique Théorique et Appliquée de l'Académie des Sciences de la République Tchèque, s'applique simultanément à former les futurs techniciens et à discuter de ces sujets avec un réseau d'experts de l'Union Européenne et des pays candidats.

Restauration des chapiteaux de la chapelle des Ducs à Krzeszow, en Basse-Silésie (projet ENVIART). D.R.

et à l'origine des divers défauts observés sur les verres. Heureusement que chimistes et céramistes maîtrisent les diagrammes de phase. A présent, une majorité des défauts recensés peuvent être attribués à des problèmes de formulation, mettant en cause le choix des matières premières souvent trouvées sur place. Mais il a été aussi question des verres archéologiques, dont la mise à jour provoque des effets de détérioration accélérée. Une présentation dans des conditions proches de celles dans lesquelles ces objets ont été mis à jour est-elle possible ?
La proximité des pays baltes et scandinaves explique aussi pourquoi le bois et la préservation des églises en bois ont été particulièrement à l'honneur !
Mais c'est surtout **la confrontation des politiques de mise en valeur des sites** qui s'est avérée particulièrement intéressante, avec des problèmes diamétralement opposés. Comment mettre en valeur des sites historiques isolés et avec quel niveau d'investissement pour tenter d'y attirer un flot continu de touristes ? Et pour les sites reconnus, comment faire ensuite pour qu'ils gardent leur âme malgré la foule des touristes ? L'augmentation brutale de l'humidité dans les musées ou les églises les jours de pluie, avec les touristes qui s'y précipitent, sont autant de préoccupations pour les responsables. La fermeture des grottes de Lascaux, trop sensibles au passage des touristes, est un exemple révélateur de la politique de gestion des sites. La maîtrise des microclimats devient une exigence primordiale en matière de patrimoine !

Commentaires

Au terme de cette 5e Conférence sur le patrimoine européen, nous ferons trois réflexions sous des formes différentes.

Un constat tout d'abord : le patrimoine constitue à la fois une illustration et une contribution au « développement durable ».
Au travers des différents exemples cités, il apparaît clairement que la conservation et la restauration nécessitent, sur le plan technique, une approche pluridisciplinaire. La science des matériaux, le recours à des techniques physico-chimiques fines d'examen et des connaissances de biologie, contribuent simultanément à la résolution des problèmes posés.
Mais les enjeux ne sont ni purement techniques, ni purement économiques. Ainsi, le secteur de la restauration représente environ 500 000 emplois pour une dépense globale de 3,5 milliards d'euros par an en Europe. Et il contribue de plus en plus au développement du tourisme. Le soleil, les plages et la gastronomie ne sont pas les seuls responsables de l'attrait touristique de la France, de l'Italie ou de l'Espagne !
Le tourisme culturel, avec le pouvoir d'achat de cette clientèle particulière, est devenu un véritable enjeu économique, difficilement chiffrable. Sites ou musées doivent donc être harmonieusement intégrés dans la cité ou la région. La préservation des sites participe directement à la réduction des pollutions de toutes sortes.
La nécessité d'un dialogue permanent entre techniciens des sciences et des arts et architectes – *pour ce qui est du possible* –, administrations municipales et régionales – *pour ce qui est faisable* – et population locale – *pour ce qui est réellement souhaité* – est évidente. Le « développement durable » exige ce type de dialogue. Incontestablement, la réussite d'un tel dialogue contribue fortement à la qualité de la vie des autochtones et de leurs visiteurs. On le perçoit sans difficulté dans les cités ou les lieux qui ont une âme, une tradition, et une vision…
Il a été symptomatique de constater qu'après la session d'ouverture et la conférence de presse au Théâtre Slovacki, c'est l'Université qui a accueilli les sessions scientifiques, mais les tables rondes ont eu pour cadre l'Hôtel de ville ! Preuve qu'il ne faut pas confondre les rôles.

Un regret ensuite : le manque d'ouverture des réunions sur le patrimoine.
Il est regrettable que ces conférences ne réunissent majoritairement que des représentants des laboratoires ou des administrations associés directement aux divers programmes européens. Les spécialistes du patrimoine ont bien sûr leurs propres conférences. Il est dommage qu'il n'y ait pas davantage d'échanges entre les programmes communautaires et les divers programmes nationaux. Les progrès viennent en partie de ces types de rencontres.
Mais il est encore plus regrettable qu'il n'y ait pas non plus davantage de confrontations entre spécialistes du patrimoine d'une part, et universitaires et industriels ayant des préoccupations voisines d'autre part. La préservation du patrimoine pose des problèmes particuliers dont ces derniers pourraient profiter. Des exemples ? Les contrôles non destructifs, les micro-analyses ou la nécessité de mettre en œuvre des vernis et liants réversibles exigent des compétences analytiques ou de formulation très pointues. Inversement, les scientifiques mettant au point des techniques analytiques spécifiques, ou les industriels commercialisant des matériaux, des peintures et des encres, devraient faire profiter plus rapidement les spécialistes du patrimoine de leurs avancées. L'étroitesse des marchés de ces techniques ou produits n'incite pas suffisamment les industriels à se laisser détourner par les préoccupations des spécialistes du patrimoine !

Une question enfin : l'Europe peut-elle avoir une « politique commune » en matière de patrimoine ?
La situation dans les différents pays européens est certainement trop contrastée pour que l'on puisse répondre « non » sans ambiguïté. Entre l'Italie, qui a une politique et une tradition très fortes au niveau national, et l'Angleterre où les responsabilités sont très dispersées, en passant par l'Allemagne où les actions sont déléguées au niveau des Länder, les situations sont extrêmement variées. Le domaine du patrimoine est par excellence un domaine où la subsidiarité devrait jouer à fond.
En conséquence, la Commission Européenne ne peut être qu'un « facilitateur ». Pour cela, elle doit être au courant des préoccupations nationales et régionales, tout en connaissant simultanément les équipes capables de les aborder. Il est évident que compte tenu des moyens limités dont disposent les pays en cours d'association, c'est certainement dans ce domaine que la Commission aura un rôle déterminant à jouer.

Conclusion : quelle sera la place du soutien au patrimoine culturel dans le 6e PCRD ?

Il n'est donc pas étonnant de constater que le patrimoine ne fait plus partie des priorités qui ont été retenues dans le futur 6e PCRD, au grand regret de la communauté chargée de le défendre. Mais une solution sera certainement trouvée

pour qu'une meilleure concertation entre spécialistes du patrimoine et scientifiques puisse être trouvée. Car la conscience de l'identité européenne est plus profonde que la simple mise en place de l'euro. Un rapport récent établi par les spécialistes du patrimoine tente d'ailleurs de convaincre la Commission Européenne de l'intérêt évident de poursuivre une action commune dans ce domaine [2]. L'Espace Européen de Recherche ne peut que profiter d'une meilleure intégration de ces préoccupations en matière de patrimoine à celles de son développement scientifique et technique !

Références

[1] A review of the European Commission Research on Environmental Protection and Conservation of the European Cultural Heritage (updated May 2002 version).

[2] Technological requirements for solutions in the conservation and protection of historic monuments and archeological remains, STOA Project 2000/13-CULT/04, Final study, Luxembourg, octobre **2000**.

Gilbert Schorsch
est membre du Comité de rédaction de *L'Actualité Chimique**, en charge de la rubrique Industrie.

* 250 rue Saint-Jacques, 75005 Paris.
Tél. : 01 40 46 71 64. Fax : 01 40 46 71 61.
E-mail : ac@sfc.fr

La cour à arcades du Collegium Maius (1493-1497), bâtiment néogothique de l'Université Jagellon où se sont déroulées les conférences. D.R.

Le carbure de silicium

Un nouveau support pour la catalyse hétérogène

Cuong Pham-Huu, Nicolas Keller et Marc J. Ledoux

Summary **Silicon carbide: a novel catalyst support for heterogeneous catalysis**
This article reports progress in developing a new class of support materials based on silicon carbide (SiC). Silicon carbide offers superior mechanical and thermal properties, which coupled to chemical inertness, avoid several of the problems inherent in the use of commercial supports, mainly based on oxides, alumina or activated charcoal. Medium or high surface area SiC can now be easily prepared in various shapes, by preshaping a carbon precursor ("shape memory synthesis"), from the macroscopic (monolith, sphere, extrudate, grains...) to the nanoscopic scale (SiC nanotube). High performances obtained with SiC supported catalysts are described for some applications such as automotive exhaust-pipe reactions, selective isomerization of paraffinic hydrocarbons and H_2S removal by direct oxidation into elemental sulfur.
Mots-clés **Carbure de silicium, support de catalyseur, catalyse hétérogène.**
Key-words **Silicon carbide, heterogeneous catalyst support, heterogeneous catalysis.**

Les catalyseurs sont des outils remarquables qui accélèrent et orientent les réactions chimiques, permettant la transformation de produits abondants et de faible coût en d'autres produits à plus forte valeur ajoutée. La catalyse joue ainsi un rôle fondamental dans l'économie, la protection de l'environnement et la santé publique. D'après des données récentes, entre 20 et 30 % du produit national brut (PNB) de la plupart des pays développés sont directement issus de la catalyse. Cette part devrait encore fortement augmenter dans les décennies à venir, en raison d'une demande croissante pour des procédés catalytiques, en général moins consommateurs d'énergie et produisant moins de polluants [1].

Les recherches menées dans ce domaine sont nombreuses et de nouveaux catalyseurs sont fréquemment introduits dans les procédés commerciaux afin d'en améliorer les performances. Les catalyseurs sont généralement constitués d'une phase active déposée sur un support solide. Le support, par sa porosité, permet un accès facile des réactifs aux sites catalytiques ainsi que la désorption des produits. Son rôle est de disperser la phase active, d'augmenter l'activité intrinsèque du catalyseur et de réduire ainsi la quantité de phase active nécessaire à la réaction. En général, les supports possèdent une surface spécifique importante, $> 100\ m^2/g$, et une bonne résistance aux agressions qu'exercent les milieux réactionnels. L'introduction de nouveaux supports est en revanche nettement moins fréquente et très peu ont été commercialement développés depuis la fin de la dernière guerre mondiale. Les supports les plus utilisés demeurent actuellement encore l'alumine, la silice et le carbone qui ont tous été introduits il y a déjà plusieurs décennies.

Dans cette revue, nous allons discuter de la synthèse et de la caractérisation d'un nouveau type de support, **le carbure de silicium**, ainsi que des résultats catalytiques obtenus au laboratoire sur ce support pour quelques réactions clés. Celles-ci ont montré que l'utilisation du carbure de silicium permet d'obtenir des propriétés catalytiques intéressantes par rapport aux supports classiques. Des perspectives de développements industriels seront présentées succinctement en conclusion.

Le carbure de silicium

Le carbure de silicium est un matériau déjà utilisé dans de nombreux domaines (matériaux de renforcement en mécanique, abrasifs et composants électroniques). Il possède une forte conductibilité thermique et électrique, une forte résistance à l'oxydation, une forte résistance thermique, mécanique ainsi qu'à l'écrasement et est en outre quasiment inerte chimiquement. Ces qualités le rendent très attractif pour être utilisé comme support de catalyseur, spécialement en catalyse hétérogène où les conditions réactionnelles sont fréquemment relativement sévères (agression par les réactifs et produits, fonctionnement à haute température et/ou sous pression élevée, fréquentes régénérations...).

La forte conductibilité thermique du solide permet de réduire l'inhomogénéité de la température dans l'ensemble du lit catalytique ou entre la surface et le corps du grain lors de réactions fortement exothermiques ou endothermiques, notamment oxydation ou déshydrogénation. Dans le cas de réactions endothermiques, la température du lit peut être maintenue efficacement par un chauffage extérieur, tandis que pour les réactions exothermiques ou lors de régénérations oxydantes, la forte conductivité du support permet d'éviter la formation de points chauds, susceptibles de se former en surface du catalyseur et pouvant induire un frittage irréversible, soit de la phase active, soit du support lui-même, fortement préjudiciable aux performances du catalyseur. Ces points chauds peuvent aussi affecter la sélectivité de la réaction.

La forte résistance à l'oxydation permet de travailler en présence d'oxydants à des températures relativement élevées (environ 900 °C) sans que le support ne soit détruit par oxydation comme c'est le cas avec du charbon actif.

L'inertie chimique permet d'éviter les réactions parasites entre le support et la phase active comme cela se produit fréquemment avec un support chimiquement actif tel que l'alumine (sulfatation...). Elle permet également de travailler en milieux agressifs, acide ou basique, sans que le support ne soit attaqué, par exemple lors de la synthèse de composites zéolithe-SiC où le milieu réactionnel de synthèse est fortement basique.

La résistance thermique procure également au matériau une remarquable stabilité thermique à haute température (notamment lors des phases de régénération du catalyseur). En effet, l'instabilité structurale de l'alumine à haute température (≥ 700 °C, particulièrement en présence d'eau dans le milieu réactionnel) est un facteur limitant de manière conséquente son utilisation (transformation de la forme γ à haute surface spécifique en son homologue α de basse surface spécifique), et rendant fréquemment indispensable un dopage de l'alumine de forme γ avec différents éléments afin d'améliorer la stabilité thermique du support (et également sa tenue mécanique).

La résistance mécanique permet d'éviter la formation de poussières lors des chocs thermiques durant les phases de régénération. Dans certains cas, ces chocs peuvent engendrer la désintégration du catalyseur. De même dans les réactions de dépollution catalytique des gaz d'échappement d'automobile, une bonne résistance mécanique est souhaitée, en raison des chocs et vibrations répétés. Elle joue en outre un rôle essentiel lors de l'utilisation des catalyseurs dans les réacteurs à lit fixe, durant les phases de chargement/déchargement du catalyseur et lors de la réaction proprement dite. Dans le *tableau I*, les propriétés physiques du carbure de silicium sont présentées et comparées avec celles d'un support traditionnel tel que l'alumine.

Tableau I - Caractéristiques physiques de SiC et Al_2O_3.

Caractéristiques physiques	SiC	Al_2O_3
Conductibilité thermique ($W.m^{-1}.°C^{-1}$)	100-200	20
Conductibilité thermique monocristal ($W.m^{-1}.°C^{-1}$)	490	25
Coefficient d'expansion thermique 100 et 500 °C ($10^{-6}.°C^{-1}$)	3,7	7,3
Résistivité à 25 °C (cm)	$> 10^{13}$	$> 10^{14}$
Constante diélectrique 1 MHz	40	8,5
Densité ($g.cm^{-3}$)	3,2	3,8
Température de frittage (°C)	2 000	1 500
Module de Young (10^{12} $dyn.m^{-2}$)	4,0	3,7

Malgré l'ensemble des avantages décrits ci-dessus pouvant permettre au carbure de silicium de se substituer à terme aux supports conventionnels pour diverses réactions catalytiques, l'impossibilité de synthétiser du SiC sous une forme possédant une surface spécifique élevée (typiquement supérieure à quelques dizaines de m^2/g) limitait encore récemment son utilisation en tant que support de catalyseur. En effet, le procédé industriel de fabrication du SiC commercialement disponible est encore basé sur une méthode de synthèse à haute température (1800 °C) développée par Acheson à la fin du XIXe siècle, qui prépare du SiC à très faible surface (0,1 à 1 m^2/g). Cette quasi absence de surface spécifique ne permet pas une bonne dispersion de la phase active et rend vain son emploi en tant que support de catalyseur. De plus, le problème crucial de la mise en forme finale se pose également. Le SiC commercial (carborundum) sous forme de poudre est actuellement post-formé par adjonction de liants pouvant se dégrader dans le milieu réactionnel et/ou modifier les propriétés des catalyseurs. La présence de liants peut également inhiber l'accès des réactifs au support. L'utilisation en catalyse du carbure de silicium est ainsi directement liée à la possibilité de le préparer avec une surface spécifique plus élevée et de procéder à sa mise en forme sans adjonction de liants. Plusieurs méthodes de synthèse ont été développées en Europe et aux États-Unis durant les deux dernières décennies afin d'obtenir un carbure de silicium de surface spécifique satisfaisante et ainsi pallier à ce défaut majeur du SiC industriel [2-6]. Ces travaux sont néanmoins peu ou pratiquement pas développés au-delà de l'échelle du laboratoire, soit parce qu'ils nécessitent une mise en œuvre complexe, soit parce qu'ils génèrent, en même temps que le produit, des rejets corrosifs et toxiques, introduisant ainsi des contraintes rendant le développement de ces techniques délicat d'un point de vue industriel.

La synthèse à mémoire de forme

Les travaux menés par notre équipe ont montré que la synthèse de carbure de silicium ayant des surfaces spécifiques élevées est possible par l'intermédiaire d'une réaction du type gaz-solide [7-9]. L'avantage de cette méthode réside en sa simplicité de mise en œuvre, sa facilité à être transférée du niveau laboratoire au niveau pilote puis industriel, ainsi qu'en une absence totale de sous-produits nocifs ou corrosifs à l'exception du monoxyde de carbone facilement oxydable.

Synthèse à l'échelle du laboratoire

Le solide carboné, préalablement préformé en fonction des réactions visées, par exemple monolithe pour des pots catalytiques, extrudés ou billes pour des réactions à lit fixe, ou poudre pour des lits transportés, est attaqué par des vapeurs de SiO sous vide dynamique à des températures de synthèse allant de 1 200 à 1 300 °C. Le SiC est formé selon l'équation réactionnelle $2\,C + SiO \leftrightarrow SiC + CO$. Les vapeurs de SiO sont générées dans un premier temps *in situ* un peu plus bas dans le réacteur par réaction entre Si et de la silice selon l'équation $Si + SiO_2 \rightarrow 2\,SiO$. Le CO formé durant la réaction est activement pompé hors de la zone réactionnelle, permettant ainsi de déplacer l'équilibre vers la formation de SiC.

La réaction procède par formation de germes de SiC sur la surface du carbone, puis par propagation dans l'ensemble du solide, avec pour conséquence la conservation de la morphologie macroscopique du carbone de départ : l'éponge de carbone amorphe est transformée en une éponge de SiC cristallisé, d'où la dénomination de **synthèse à mémoire de forme**. Suivant l'application recherchée, l'utilisation de charbon actif de haute surface spécifique permet par cet effet de mémoire de forme de conserver une partie de la surface du matériau (le squelette carboné permettant également de maintenir une tenue mécanique significative). En effet, la séparation de ces deux réactions en deux compartiments lors de la synthèse rend possible l'établissement d'un gradient de température dans le four, et donc la carboréduction de SiO à plus basse température que celle utilisée pour sa génération. En limitant ainsi les phénomènes de diffusion de surface par l'utilisation de basses températures, le SiC formé peut donc conserver une surface spécifique relativement élevée par rapport à celle de

la méthode classique. Il est cependant intéressant de noter que conjointement à l'effet de mémoire de forme du squelette carboné, le SiC développe également sa propre surface spécifique. En effet, l'utilisation de matériaux carbonés de départ de faible surface spécifique (quelques m^2/g) n'est en rien néfaste à l'obtention de SiC de surface spécifique élevée. Ceci a été vérifié lors de la synthèse de microtubes de SiC possédant une surface spécifique supérieure à 45 m^2/g en partant de microfibres de carbone de surface spécifique inférieure à 1 m^2/g [10].
Le carbure de silicium ainsi formé possède une surface spécifique, mesurée par l'adsorption d'azote, allant de 20 à plusieurs dizaines de m^2/g de solide, en fonction des conditions réactionnelles utilisées. Selon l'utilisation désirée, le cœur carboné restant à l'intérieur du composite SiC-C peut être conservé (réactions sous atmosphère réductrice) ou éliminé par combustion sous air (réactions sous atmosphère oxydante). La synthèse de nanotubes de SiC à partir de nanotubes de carbone présentée sur la *figure 1* permet d'illustrer cette méthode de synthèse.

Figure 1 - Synthèse par mémoire de forme de nanotubes de SiC (**B**), à partir de nanotubes de carbone (**A**).
Les nanotubes de SiC conservent la morphologie de départ du carbone. La création d'une nouvelle porosité sur le SiC est visualisée par l'aspect granuleux de la surface des tubes.

Figure 2 - Exemples de carbure de silicium avec différentes morphologies synthétisé par la méthode de mémoire de forme : **A**) extrudés ; **B**) grains ; **C**) billes.
Ces matériaux sont synthétisés à l'échelle pilote (kg/jour) par passage sous flux d'argon dans un four tournant et non plus sous vide dynamique comme lors des synthèses à l'échelle de laboratoire.

Synthèse à l'échelle industrielle

La méthode de synthèse originelle développée au laboratoire a ensuite été modifiée par les chercheurs de Pechiney afin d'obtenir un procédé adapté aux contraintes économiques industrielles et de produire du carbure de silicium de différentes morphologies, telles que des grains, des tubes, des billes, des extrudés ou des monolithes [11-12]. Dans cette méthode, le silicium et le carbone sont intimement liés par une résine apportant l'oxygène nécessaire à la réaction. Le composé ainsi obtenu est durci par un traitement thermique sous atmosphère contrôlée, puis chauffé à plus haute température pour donner du SiC. Outre la mise en forme directe du support (séchage de la pâte obtenue, puis mise en forme par extrusion ou sphéronisation de cette pâte), l'emploi d'un four tubulaire rotatif balayé par un gaz inerte entraînant le CO formé permet de fabriquer du SiC en mode continu et de s'affranchir de l'utilisation du vide. Quelques exemples de SiC synthétisé selon cette méthode sont illustrés sur la *figure 2*.
Les monolithes destinés à être utilisés comme support de catalyseur dans les réactions de dépollution des gaz d'échappement d'automobile (pots catalytiques) sont formés par une méthode légèrement différente [11]. Le squelette carboné est formé par de la mousse de polyuréthane que l'on a préalablement traitée afin d'obtenir la surface spécifique et la porosité désirée. La mousse est ensuite imprégnée par une suspension de poudre de silicium dans une résine organique contenant la quantité requise d'oxygène. La résine est alors polymérisée puis chauffée pour obtenir le monolithe de SiC (*figure 3*).
Les synthèses à l'échelle pilote industriel à Pechiney (quelques kg/mois) ont été optimisées pour atteindre à l'heure actuelle l'échelle pilote de démonstration industrielle (quelques t/an).

Caractéristiques générales du support

Cristallinité

Le diagramme de diffraction des rayons X du solide après synthèse est présenté sur la *figure 4* et montre la présence de raies de diffraction correspondant à la phase β-SiC cristallisée dans le réseau cubique faces centrées. Le très léger épaulement du pic principal détecté vers 34 ° en angle

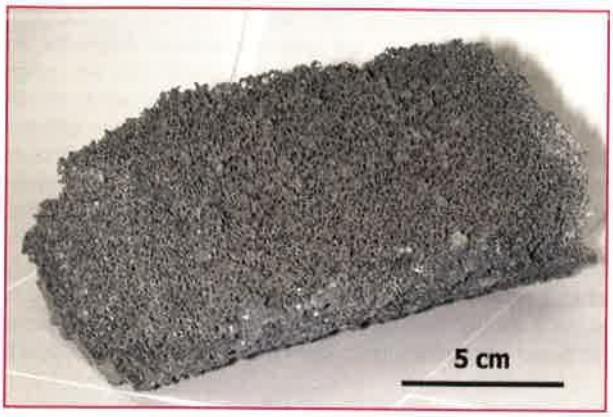


Figure 3 - Section d'un monolithe de SiC.

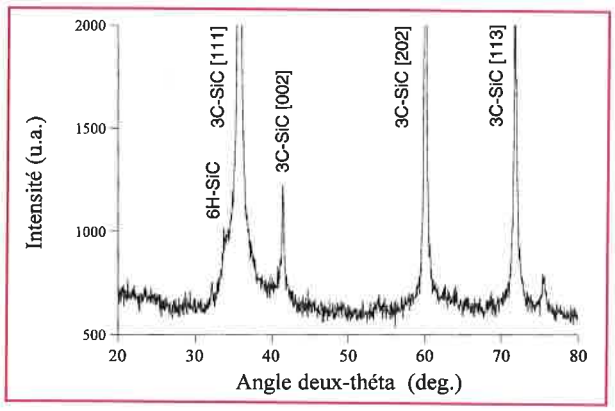


Figure 4 - Diagramme de diffraction des rayons X du carbure de silicium obtenu selon la méthode de synthèse à mémoire de forme (anticathode au cuivre, $\lambda_{CuK\alpha}$ = 1,5406 Å).

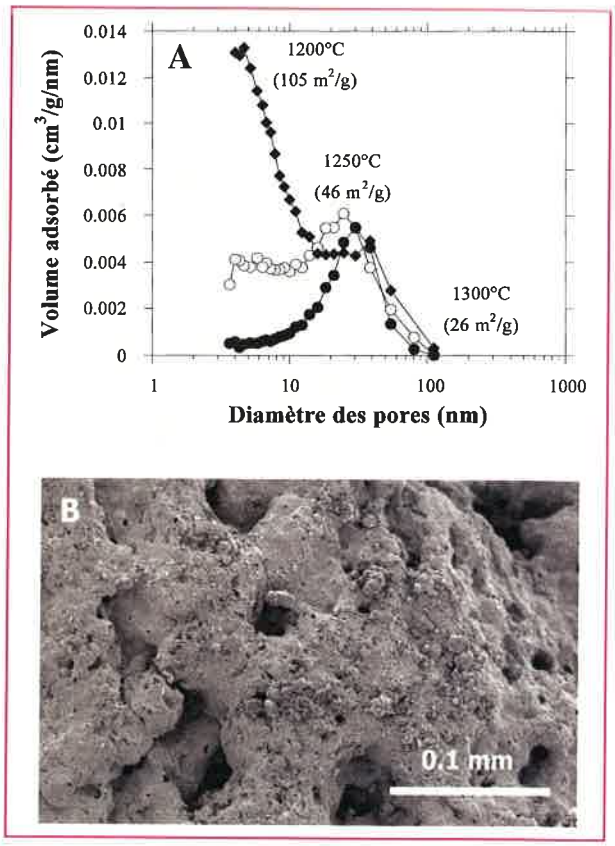


Figure 5 - **A**) Distribution poreuse et surface spécifique du carbure de silicium obtenues par adsorption d'azote à la température de l'azote liquide ; **B**) Image de microscopie électronique à balayage montrant la présence de macropores.

deux-théta est attribué à la phase α-SiC de structure hexagonale, formée en faible quantité dans le matériau, en raison de l'existence de nombreuses fautes d'empilement selon l'axe de croissance dans le matériau (voir ci-dessous). Aucune autre phase telle que la silice ou le silicium n'est détectée, indiquant que si de telles phases sont présentes dans le matériau, elles ne peuvent l'être que sous forme amorphe ou en très faible quantité.

Surface spécifique et porosité

En fonction des paramètres de synthèse, le carbure de silicium peut être obtenu avec différentes surfaces spécifiques allant de 20 à plus de 100 m^2/g [9]. A l'heure actuelle, le carbure de silicium préparé à l'échelle pilote possède une surface spécifique de l'ordre de 25 à 40 m^2/g. Le solide ainsi synthétisé est constitué d'un réseau de méso- et macropores (> 2 nm) comme l'illustre le diagramme de pores de la *figure 5*, modifiable par exemple selon la température de synthèse. Il est à noter que les valeurs de surface spécifique sont légèrement sous-estimées car les surfaces données ne tiennent pas compte de l'ensemble des macropores du solide qu'une traditionnelle porosimétrie à l'azote ne permet pas d'estimer avec précision (une estimation des macropores est cependant possible par porosimétrie au mercure). La macroporosité du solide est illustrée par l'image de microscopie électronique à balayage présentée sur la même figure. L'absence totale de micropores s'avère cruciale dans différentes applications par rapport aux supports traditionnels fortement microporeux tels que l'alumine ou le charbon actif. En effet, les micropores induisent des phénomènes de diffusion, pour les réactifs ainsi que pour les produits, qui sont néfastes pour les réactions à étudier.

Microstructure et nature de la surface

La microstructure du solide synthétisé est visible sur l'image obtenue par microscopie électronique à transmission (MET) (*figure 6a*). L'existence d'une forte densité de défauts d'empilement le long de l'axe de croissance (111) conduit à l'obtention d'un carbure de silicium possédant un désordre unidimensionnel. Ces défauts d'empilement sont visibles sur la *figure 6a*. L'absence d'ordre à longue distance suivant la direction (111) conduit ainsi à la succession, sur de courtes distances, des polytypes α hexagonal (6H-SiC selon la notation de Ramsdell) et β cubique faces centrées (3C-SiC) du SiC, ceci étant possible en raison de la faible différence structurelle entre ces deux phases. Ce désordre dans la direction (111) est également responsable de l'atténuation de l'intensité de la raie de diffraction correspondant au plan (002) du SiC, normalement située à 2θ = 41-42 °.
Nous observons également l'existence d'une fine couche d'amorphe d'environ 2-3 nm d'épaisseur, recouvrant une partie de la surface du SiC. L'analyse par XPS a montré

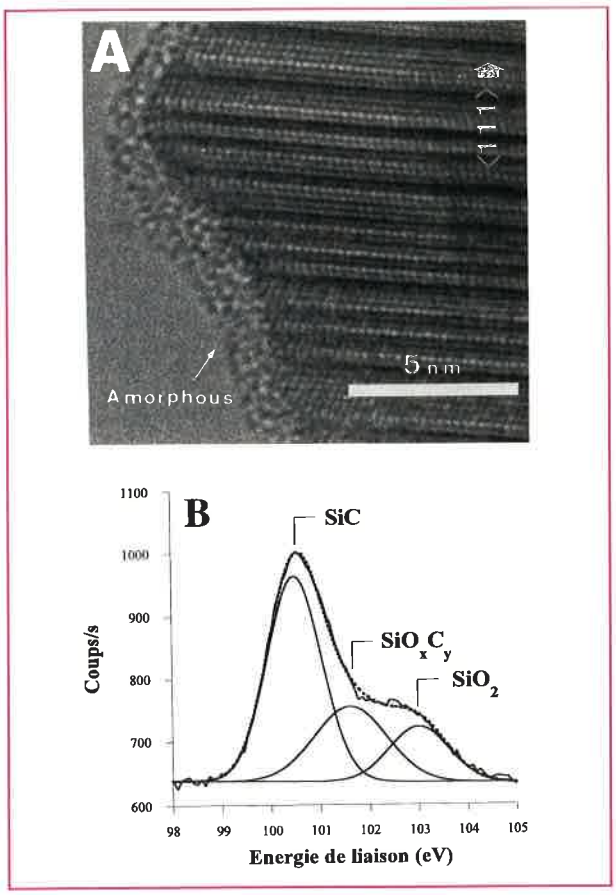


Figure 6 - **A**) Image de microscopie électronique à transmission du SiC. Noter la présence de la phase amorphe en surface et la densité des défauts d'empilement le long de l'axe (111) du matériau ; **B**) Spectre d'XPS Si 2p du matériau montrant la présence de trois phases : SiC, SiO_xC_y et SiO_2. Après traitement en présence de NaOH à 80 °C, les phases SiO_xC_y et SiO_2 disparaissent.

l'existence de trois phases à la surface du matériau : SiO_2, SiO_xC_y et SiC (*figure 6b*). D'après ces analyses, il semblerait que la surface du SiC formé soit constituée d'une part d'un mélange de deux phases silicium contenant une quantité d'oxygène plus ou moins importante, à savoir le dioxyde de silicium et l'oxycarbure de silicium en accord avec les résultats déjà reportés dans la littérature [13-15] et d'autre part de SiC pur. Il semblerait que la présence de cette mince couche mixte d'oxycarbure et d'oxyde de silicium en surface favorise l'adsorption des précurseurs sur la surface et la dispersion des phases actives. Cette phase siliciée contenant de l'oxygène interagirait avec le sel précurseur durant l'imprégnation pour permettre la bonne dispersion de la phase supportée. Il est à noter que le comportement de cette peau d'oxycarbure est totalement différent de celui d'un oxyde de silicium classique [8]. La présence du carbure de silicium en-dessous a probablement également une influence non négligeable sur la réactivité de cette couche.

Dualité de l'état de surface

Le carbure de silicium synthétisé selon la méthode à mémoire de forme possède la propriété intéressante que les zones purement SiC, de nature hydrophobe, et celles contenant plus ou moins d'atomes d'oxygène (SiO_2/SiO_xC_y), de nature hydrophile, ont une localisation différente en surface du matériau. En effet, il semblerait que les zones hydrophiles constituent les parois internes des pores, en raison de la densité élevée de défauts dans les plans formant les pores par rapport aux plans denses du SiC (plans à hauts indices de Miller, facilement oxydables, tout au moins partiellement, afin de minimiser leur énergie). En revanche, les zones hydrophobes, purement SiC, constituent l'essentiel de l'extérieur des pores, étant formées de plans denses et stables à bas indices de Miller. Cette hétérogénéité de la surface du SiC joue un rôle déterminant dans les procédés de dépôt par imprégnation de la phase active sur le support.

Stabilité thermique et en milieu agressif

La stabilité thermique du carbure de silicium en fonction de la température et de l'atmosphère de traitement est présentée dans le *tableau II*. Cependant, lorsque la température est supérieure à 1 300 °C et ce quelle que soit l'atmosphère de traitement, il y a apparition du phénomène de frittage, en raison de la diffusion de surface qui induit la disparition des petits pores, au profit des pores de plus grande taille [16-17]. Ce phénomène est d'autant plus important que la surface spécifique du matériau est élevée. L'inertie chimique du carbure de silicium permet de récupérer par un simple lavage avec une solution acide ou basique les métaux constituant la phase active après la fin de vie du catalyseur. Ce point est particulièrement important lorsque la phase active est constituée soit de métaux nobles coûteux, soit de métaux nocifs pour l'homme ou l'environnement.

Tableau II - Stabilité du SiC.

Conditions de traitement	Surface spécifique avant (m^2/g)	Surface spécifique après (m^2/g)
Air, 1 000 °C, 2 h	95	35
N_2, 1 000 °C, 4 h	172	145
N_2, 2 % H_2O, 1 000 °C, 4 h	172	28

Applications en catalyse hétérogène

Le carbure de silicium ainsi synthétisé est utilisé comme support dans diverses réactions catalytiques (*figure 7*) dont quelques exemples sont reportés ci-dessous. Dans la mesure du possible, les performances sont comparées à celles obtenues sur des supports traditionnels afin de mettre en évidence les avantages offerts par ce nouveau support.

Réactions de dépollution catalytique des gaz d'échappement d'automobile

Les catalyseurs actuels sont composés d'une phase active à base de métaux nobles (Pt, Pd, Rh) supportés sur des monolithes en céramique ou métalliques, recouverts par une couche d'enduit à base d'alumine. Cette dernière, par sa grande surface spécifique, assure la dispersion des métaux de la phase active. Néanmoins, durant le fonctionnement, en raison des fortes températures d'utilisation et de la présence de vapeur d'eau, l'alumine subit un important frittage et même des transitions de phase (passage de la phase γ-Al_2O_3 de haute surface spécifique à la phase α-Al_2O_3 de faible surface spécifique) [18], qui induisent une perte de surface

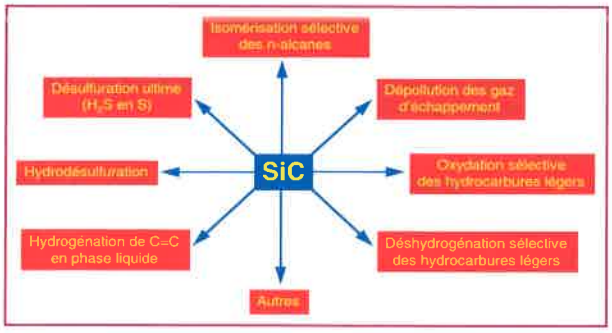


Figure 7 - Différentes réactions catalytiques utilisant le SiC comme support. D'autres réactions, en cours de validation, ne sont pas reportées sur la figure.

non négligeable. De plus, l'interaction entre le support à base d'alumine et les métaux de la phase active supportée, due à l'importante réactivité chimique de l'alumine, entraîne la désactivation du catalyseur [19]. Les propriétés physico-chimiques du SiC peuvent permettre de répondre à l'ensemble de ces inconvénients et rendent ce matériau apte à être utilisé en tant que support des métaux actifs.

Les très bons résultats catalytiques obtenus avec du platine et du rhodium déposés sur du SiC en grains, pur ou dopé avec de l'oxyde de cérium, sont présentés sur la *figure 8a*. Une température de demi-conversion du CO (communément appelée $CO_{light\ off}$) de 210 °C constitue une excellente performance par rapport aux catalyseurs conventionnels. L'activité catalytique ne diminue que faiblement (augmentation de la température de demi-conversion à 244 °C) après un vieillissement à 800 °C en présence de 4 % en volume de vapeur d'eau pendant 10 h (*figure 8b*). Comme attendu, la présence de cérium augmente considérablement la dispersion de la phase métallique déposée par rapport à celle observée sur du carbure de silicium pur, se traduisant par une amélioration notoire des performances comparées au support SiC pur (non reportées dans cet article). Deux images de microscopie électronique du catalyseur après réduction sont présentées sur les *figures 9a* et *9c*. L'agrandissement montre la présence de petites particules

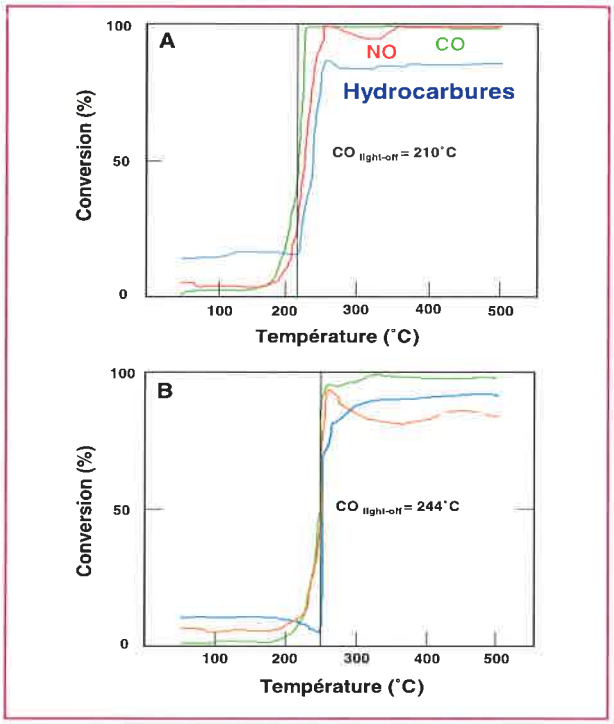


Figure 8 - Activité catalytique obtenue sur le catalyseur Pt-Rh/SiC-Ce : **A**) catalyseur neuf après réduction sous hydrogène à 400 °C ; **B**) catalyseur après un vieillissement à 800 °C en présence de 4 v. % de vapeur d'eau pendant 10 h.

de CeO_2 avec différentes orientations sur la surface du catalyseur (*figure 9b*). Hormis quelques particules de tailles voisines de 10 nm, le matériau présente une dispersion élevée de la phase métallique, remarquable pour un support considéré comme chimiquement inerte et possédant une surface spécifique moyenne (quelques dizaines de m^2/g). En effet, les meilleures dispersions des phases métalliques sont en règle générale obtenues sur des supports chimiquement actifs et/ou à surface spécifique élevée (alumine de forme γ, charbon actif...). La bonne dispersion de la phase active est

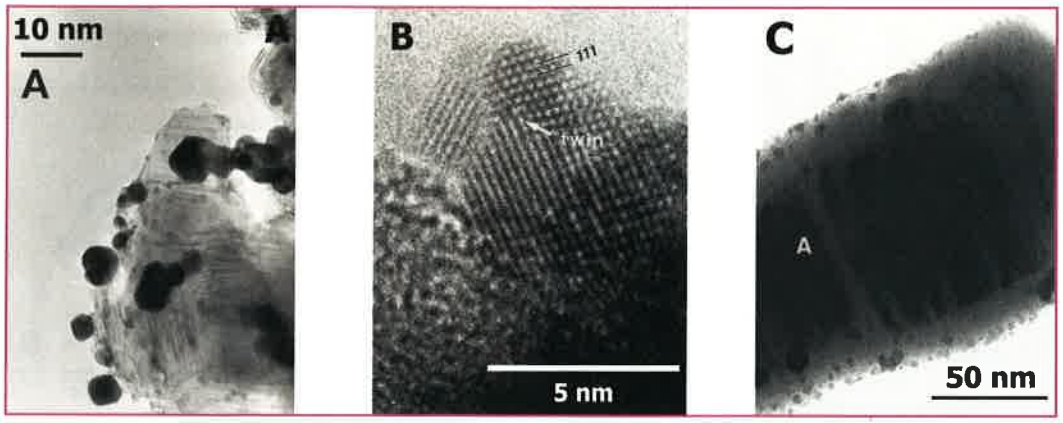


Figure 9 - **A**) Image de microscopie électronique à transmission du Pt-Rh supporté sur du carbure de silicium dopé avec 5 % de cérium. La bonne dispersion dans le cas du SiC dopé avec du cérium est attribuée à la présence d'une phase amorphe contenant Si, C, O et Ce en surface qui présente une forte interaction avec le sel précurseur ; **B**) Image de microscopie à haute résolution montrant la présence de petites particules de CeO_2 sur la surface du support ; **C**) SiC entouré de la couche d'amorphe contenant Si, C, O et Ce, permettant la bonne dispersion des particules métalliques (« A » correspond au support SiC).

attribuée à une interaction entre le sel précurseur et la couche oxycarbure de silicium localisée en surface du support.
Le carbure de silicium peut être efficacement utilisé en lieu et place des supports traditionnels à base d'alumine supportée sur des monolithes de cordiérite pour les réactions de dépollution catalytique des gaz d'échappement. La forte conductibilité thermique du SiC et sa bonne tenue à haute température offrent la possibilité soit de préchauffer le monolithe lors des démarrages à froid, soit de le rapprocher du moteur afin d'accélérer le processus de purification. Ses bonnes propriétés dispersantes, encore améliorées par la présence de cérium, évitent la préimprégnation d'un enduit, opération coûteuse et difficile à réaliser. La faible densité du SiC par rapport à celle des supports classiques le rend en outre très compétitif vis-à-vis des problèmes de vibrations et de chocs durant le fonctionnement.

Isomérisation sélective des hydrocarbures paraffiniques

L'isomérisation sélective des *n*-paraffines contenant de 5 à 10 atomes de carbone en leurs isomères branchés permet d'augmenter d'une manière considérable l'indice d'octane de ces mélanges [20]. Pour des coupes d'hydrocarbures plus lourdes, gazole ou huiles de lubrification, l'isomérisation sélective permet de diminuer le point de congélation des produits sans modifier leur indice de cétane ou de viscosité [21]. Les catalyseurs conventionnels utilisés pour ces réactions sont essentiellement à base de métaux nobles (Pt) supportés sur zéolithes ou autres supports acides et ne permettent que d'obtenir de faibles rendements en produits isomères, en raison d'une forte tendance au craquage des molécules branchées lorsque la conversion totale est élevée [22]. Le mécanisme de réaction bifonctionnel métal-acide et la thermodynamique sont responsables de ce craquage.
Les résultats obtenus au laboratoire ont montré que cette réaction pourrait être réalisée avec des rendements élevés sur des catalyseurs à base d'oxycarbure de molybdène supporté sur SiC [23-25]. L'inertie chimique du SiC permet de transformer facilement l'oxyde de molybdène, MoO_3, en son oxycarbure, MoO_xC_y dans les conditions de réaction par échange entre les atomes d'oxygène du réseau et ceux de carbone provenant de la phase gaz [23] (*figure 10*). Cette transformation est impossible à réaliser sur un support à base d'alumine à cause du partage de certains atomes d'oxygène entre l'oxyde de molybdène supporté et l'alumine [23]. Les résultats catalytiques obtenus lors de l'isomérisation du *n*-heptane sur des catalyseurs à base de molybdène supportés sur SiC et Al_2O_3 sont présentés dans le *tableau III*. L'absence de sites acides sur le support SiC, ainsi qu'un mécanisme de réaction différent, permettent l'obtention de rendements très élevés en produits isomères sans craquage significatif (≤ 10 %) (*figure 11a*). Les performances d'un catalyseur traditionnel de type Pt supporté sur β-zéolithe sont reportées sur la *figure 11b*, et montrent clairement la supériorité du catalyseur supporté sur SiC [25-27].

Tableau III - Isomérisation du *n*-heptane sur MoO_3-9%/SiC et MoO_3-20%/Al_2O_3.
[a] Les résultats présentés ont été obtenus après 10 heures de réaction lorsque les catalyseurs ont atteint un état stationnaire.

Pression (atm.)	1		20	
Catalyseur	MoO_3/SiC	MoO_3/Al_2O_3	MoO_3/SiC	MoO_3/Al_2O_3
Conversion (mol-%)[a]	30	16	36	50
Vitesse spécifique (mol/g de MoO_3/s)	27	8	183	17
Sélectivité iso-C_7 (%)	77	50	93	67

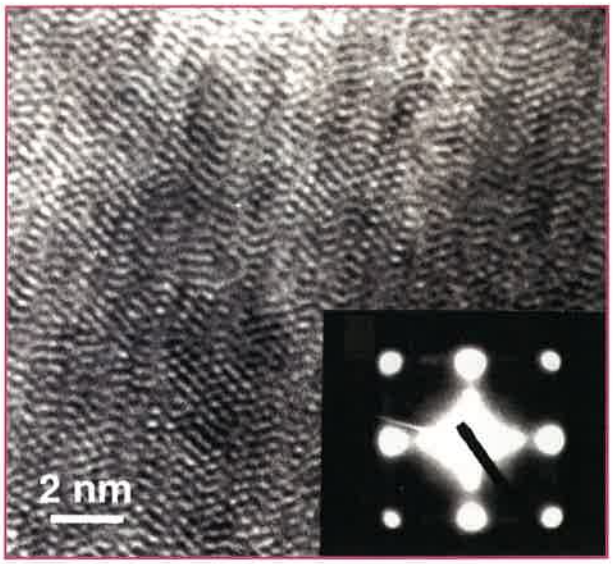


Figure 10 - Image de microscopie montrant la microstructure en forme de « chevron » de la phase oxycarbure de molybdène.

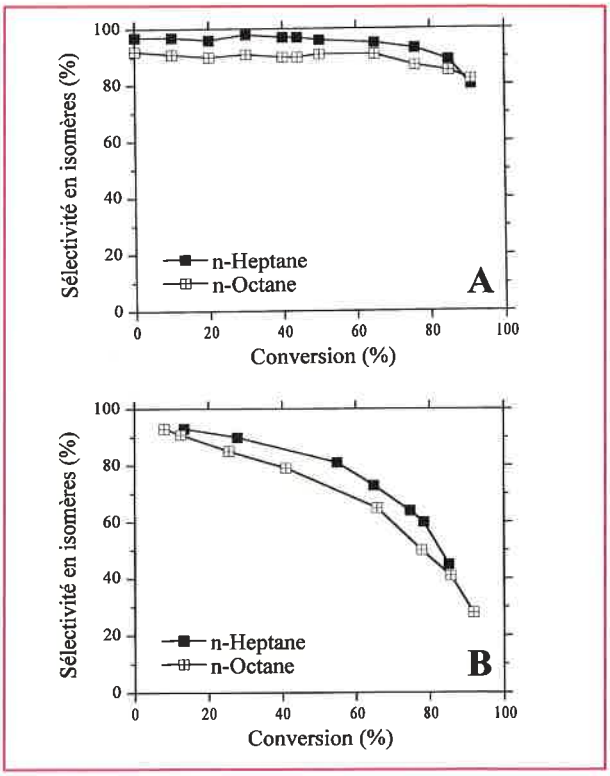


Figure 11 - Évolution de la sélectivité en isomères en fonction de la conversion dans le cas de l'isomérisation du *n*-heptane et du *n*-octane, obtenue sur : **A**) catalyseur à base d'oxycarbure de molybdène et **B**) catalyseur Pt supporté sur β-zéolithe (350 °C, 6 bar).

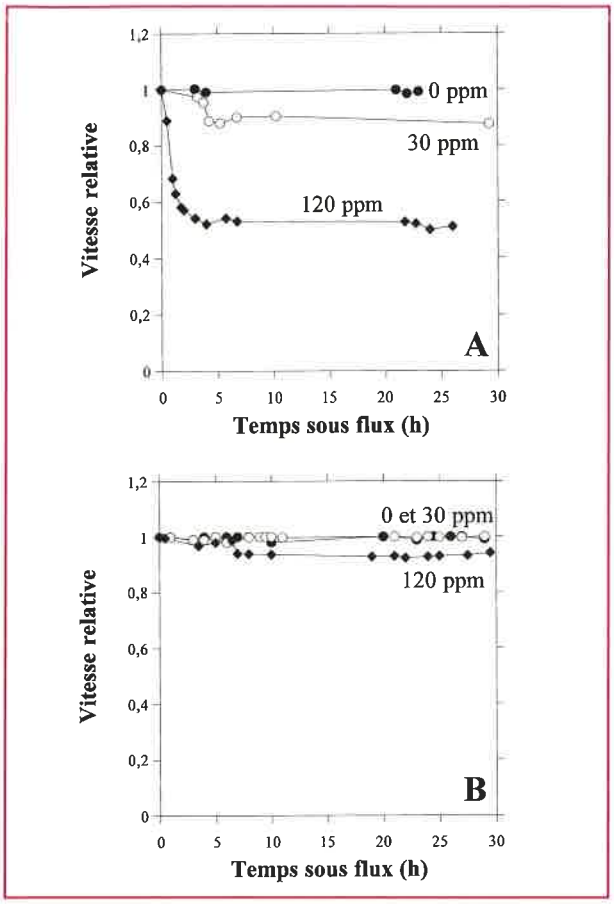


Figure 12 - Effet de la concentration en soufre sur l'isomérisation du *n*-heptane (350 °C, 6 bar) en fonction du temps sous flux sur : **A**) catalyseur Pt supporté sur β-zéolithe et **B**) catalyseur à base d'oxycarbure de molybdène.

Il faut également noter que la phase oxycarbure de molybdène ainsi formée présente une très forte résistance vis-à-vis des poisons tels que les composés soufrés ou azotés présents dans le flux à traiter, poisons qui affectent d'une manière catastrophique les catalyseurs Pt/supports acides. Nous reportons sur la *figure 12* les résultats obtenus sur un catalyseur à base d'oxycarbure de molybdène et un catalyseur bifonctionnel Pt/zéolithe bêta en présence de composés soufrés dans la charge à traiter, avec différentes concentrations allant de 0 à 120 ppm en volume [28]. En présence du soufre, le catalyseur à base de platine supporté sur zéolithe est rapidement désactivé (*figure 12a*), par titration des sites métalliques actifs par le soufre présent dans la charge (inhibition des sites d'adsorption du métal par le soufre). A faible concentration de soufre dans la charge, i.e. 30 ppm, la désactivation ne concerne que l'activité catalytique, la sélectivité demeure stable. Lorsque la concentration augmente de 30 à 120 ppm, la désactivation est plus sévère et non seulement l'activité diminue, mais la sélectivité, indiquant que la nature même de la phase active a été modifiée.

Sur le catalyseur à base d'oxycarbure de molybdène, l'activité et la sélectivité en isomérisation demeurent pratiquement inchangées et ce pour des concentrations en soufre de 120 ppm (*figure 12b*). La forte résistance de l'oxycarbure de molybdène vis-à-vis du soufre dans la charge à traiter peut être expliquée par la nature même de la phase active. En effet, celle-ci est formée de différents états de réduction du molybdène, $Mo^{4+}O_xC_y$, $Mo^{5+}O_xC_y$ et $Mo^{4+}O_2$. D'après les résultats publiés dans la littérature, la sulfuration d'une phase de Mo^{IV} est plus difficile que celle d'une phase de Mo^{VI} dans MoO_3 [29]. De ce fait, le faible degré d'oxydation du molybdène présent dans la phase oxycarbure rend le phénomène de sulfuration peu probable et explique ainsi la stabilité de la phase oxycarbure de molybdène vis-à-vis du soufre.

Désulfuration ultime ($H_2S \rightarrow S$)

En raison de sa forte toxicité, l'hydrogène sulfuré (H_2S), qu'il soit issu des unités de traitement du gaz naturel ou des raffineries, est une préoccupation fondamentale des industries pétrolières et gazières. Il peut être simplement éliminé par transformation en SO_2, par combustion à haute température dans une torchère en sortie d'unité. Néanmoins, la formation de SO_2 étant en partie responsable des pluies acides, l'industrie pétrochimique a développé des procédés dans le but de réduire la quantité d'H_2S en sortie d'unité, et ainsi de diminuer les rejets de SO_2 dans l'atmosphère.

L'utilisation du seul procédé Claus-modifié, développé sous l'impulsion de I.G. Farben dès 1937 et basé sur une élimination de l'H_2S en soufre élémentaire, tout d'abord thermique puis catalytique, ne permet pas de satisfaire aux normes de plus en plus strictes en passe d'être imposées par les autorités politiques des principaux pays industrialisés, dans leur volonté affirmée de lutte contre la pollution et de la protection de l'environnement [30-32]. L'H_2S résiduel, de l'ordre de quelques milliers de ppm jusqu'au pourcent, peut être alors catalytiquement oxydé en soufre élémentaire par de l'oxygène [31-32]. On parle de procédé **discontinu** lorsque la température de réaction est inférieure au point de rosée du soufre, 180 °C, rendant nécessaire une phase de régénération du catalyseur permettant de faire couler hors du lit catalytique le soufre formé et déposé sur le catalyseur durant son fonctionnement. Le procédé est dit **continu** lorsque la température de réaction est supérieure au point de rosée du soufre ; dans ce cas, le soufre formé sous forme gaz est évacué de manière continue du lit catalytique et se condense régulièrement dans une zone froide en sortie de réacteur sans qu'il soit nécessaire d'arrêter la réaction. Les supports utilisés actuellement sont essentiellement à base d'alumine, pure ou dopée avec différents éléments [32]. Il est à noter que le mélange réactionnel contient également une concentration importante de vapeur d'eau formée durant les étapes précédentes du procédé Claus-modifié et qui n'a pas été enlevée du flux. En présence des réactifs et produits ainsi que d'une forte concentration de vapeur d'eau, les supports à base d'alumine sont détériorés par formation de sulfate, entraînant une perte d'activité en fonction du temps. La phase nickel pourrait être également transformée en sulfate, fortement soluble dans l'eau, provoquant une perte directe de la phase active.

Procédé discontinu

Les premiers résultats obtenus sur des catalyseurs à base de nickel supporté sur du SiC ont montré que ces catalyseurs présentent un fort potentiel pour ce type de réaction [33-37]. En effet, le matériau NiS_2/SiC (5 % de nickel en masse) s'avère être un catalyseur extrêmement actif et sélectif pour l'oxydation de l'H_2S, à des concentrations de l'ordre de

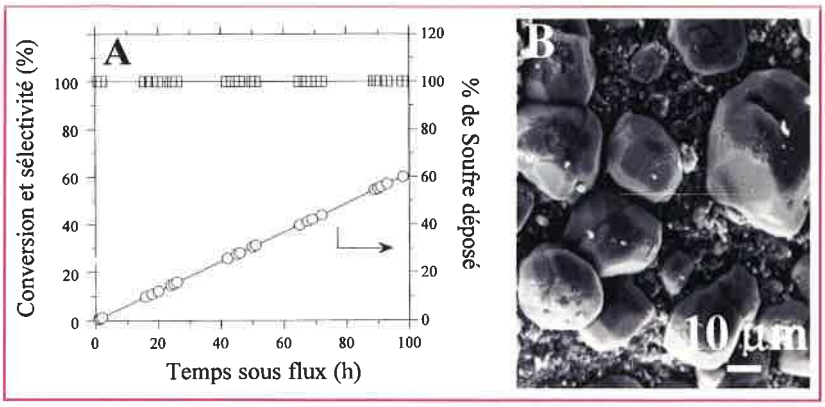


Figure 13 - **A**) Activité désulfurante du catalyseur NiS_2/SiC pour la réaction d'oxydation de l'H_2S en soufre à 60 °C (H_2S 2 000 ppm, O_2 3200 ppm, eau 20 %, temps de contact réactifs/catalyseur 4 s) ; **B**) Image de microscopie électronique à balayage du catalyseur après un cycle de réaction et contenant 60 % de soufre solide. Les agrégats de soufre sont formés d'une manière hétérogène sur la surface du catalyseur.

2 000-4 000 ppm, en soufre élémentaire, et ce à des températures allant de 40 à 100 °C [33-35]. Dans cette gamme de températures, la totalité de l'H_2S entrant est transformée et la sélectivité en soufre demeure de 100 % (*figure 13a*). Le soufre élémentaire piégé sur la surface du catalyseur (*figure 13b*) n'entraîne aucune désactivation du catalyseur jusqu'à des concentrations en soufre de l'ordre de 60 % de la masse du catalyseur de départ.

Cette exceptionnelle stabilité est attribuée à la fois à la présence de macropores dans le support, permettant le stockage d'une importante quantité de soufre, et à la présence de zones *hydrophobes* et *hydrophiles* sur la surface du support, qui permettent de maintenir un accès libre des réactifs aux sites actifs [36]. La phase active (NiS_2) est fixée dans les mésopores du SiC, dont les parois internes sont de nature hydrophile ; lorsque la réaction se déroule en présence d'eau dans le flux, le fin film d'eau formé par condensation capillaire à la température de 100 °C, de même que la fraction plus importante de l'eau condensant lorsque la température est plus proche de l'ambiante, est localisé sur les zones hydrophiles du support. On comprend alors que les particules supportées soient nettoyées au cours de la réaction, l'eau assurant le transport du soufre à la manière d'un tapis roulant et permettant son évacuation loin des sites actifs. Ce film s'arrête à l'extérieur des pores, aux jonctions des surfaces hydrophiles et hydrophobes, et le dépôt du soufre s'effectue alors sur les zones hydrophobes du support, exemptes de phases actives. Ainsi, la redispersion et l'accumulation du soufre formé durant la réaction ne modifient pas le nombre de sites actifs accessibles, et n'affectent donc pas les performances du catalyseur.

Lorsque la réaction est réalisée en absence ou en présence d'une faible concentration de vapeur d'eau (< 5 % vol.), l'activité désulfurante se dégrade rapidement (*figure 14a*), par encapsulation des sites actifs par le soufre solide formé lors de la réaction. Le soufre formé se dépose directement sur les sites actifs dont il bloque rapidement l'accès. L'observation par microscopie électronique montre qu'en absence de vapeur d'eau, le soufre formé n'est plus sous forme de grosses particules réparties à la surface du catalyseur, mais sous forme d'un film constitué d'une multitude de petits agrégats (*figure 14b*).

Les tests réalisés en fonction des cycles de réaction et régénération ont montré que l'activité catalytique est stable et qu'il n'y a pas de désactivation.

Procédé continu

Dans le procédé fonctionnant en mode continu, le soufre formé en phase vapeur est condensé à l'extérieur du réacteur, et la phase active à base de nickel est remplacée par du fer, moins actif mais nettement plus sélectif à ces températures plus élevées, typiquement de l'ordre de 240 °C [36-39]. En effet, il s'agit d'arrêter l'oxydation au soufre élémentaire et non pas d'aller jusqu'à SO_2 car le problème de pollution ne serait pas réglé. Les caractérisations effectuées sur le catalyseur après test catalytique ont montré que la phase supportée Fe_2O_3 initiale est transformée sous le mélange réactionnel en une phase oxysulfure de fer, FeS_xO_y. La totalité de l'H_2S entrant (concentrations résiduelles égales à 1 vol. %) est convertie, tandis que la phase oxysulfure de fer stabilisée sous flux permet de former 90 % de soufre élémentaire et seulement 10 % de SO_2 (*figure 15*). Après stabilisation, le rendement en soufre élémentaire (de l'ordre de 90 %) demeure extrêmement stable en fonction du temps sous flux (plusieurs centaines d'heures) indiquant que la nature de la phase active stabilisée n'est pas modifiée sous flux au cours du test. De telles performances n'ont jamais été atteintes par les procédés industriels concurrents ou ceux reportés dans la littérature.

L'inertie chimique du support permet d'éviter les problèmes de sulfatation, qui limitent très sérieusement les

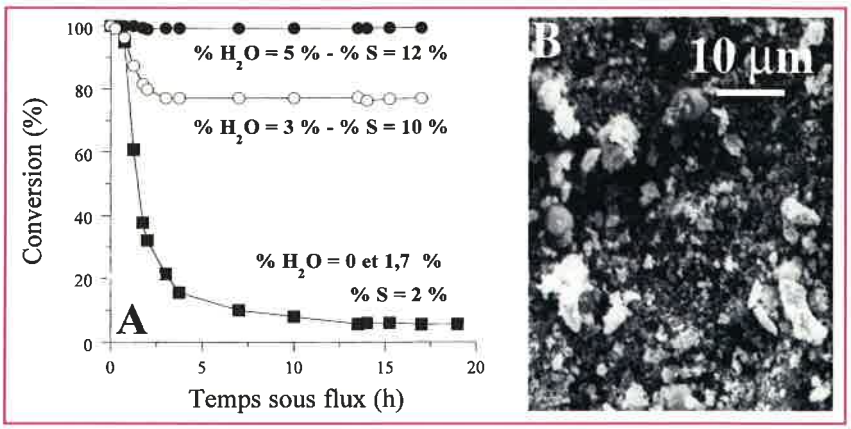


Figure 14 - **A**) Activité désulfurante du catalyseur NiS_2/SiC pour la réaction d'oxydation de l'H_2S en soufre à 60 °C en présence de différentes concentrations de vapeur d'eau dans le flux réactionnel ; **B**) Image de microscopie électronique à balayage du catalyseur montrant la formation d'un film de soufre homogènement dispersé sur la surface du catalyseur et qui bloque l'accès des sites actifs. (Le pourcentage du soufre solide déposé après le test est reporté).

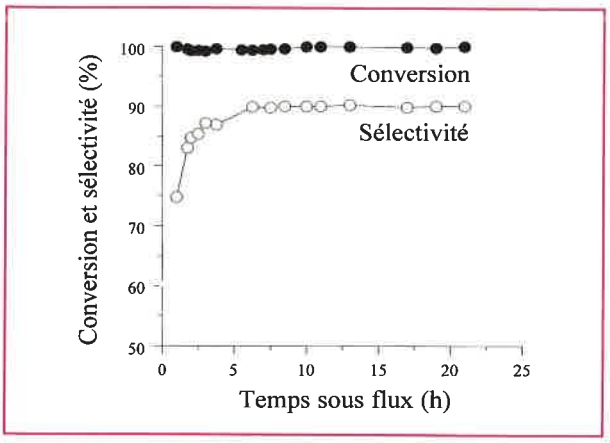


Figure 15 - Conversion de l'H_2S et sélectivité en soufre élémentaire en fonction du temps sous flux, obtenues sur un catalyseur à base de Fe_2O_3/SiC à 240 °C.
Conditions réactionnelles : H_2S 0,9 %, O_2 2,2 %, vapeur d'eau 20 %. Dans ce procédé, le soufre formé est évacué hors de la zone réactionnelle. (temps de contact : 3,4 s).

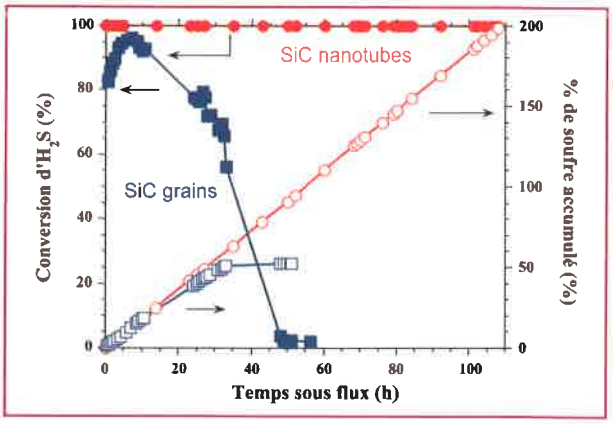


Figure 16 - Activité désulfurante obtenue sur un catalyseur à base de NiS_2/SiC (grains et nanotubes) à 60 °C.
H_2S 2 000 ppm, O_2 3200 ppm, eau 20 %, temps de contact réactifs/catalyseur 1 s.
Le pourcentage de soufre accumulé sur le catalyseur par rapport à sa masse initiale est également reporté en fonction du temps sous flux.

performances et la stabilité des catalyseurs utilisant un support à base d'alumine. L'absence totale de microporosité du SiC est un atout considérable, permettant d'atteindre des sélectivités en soufre élémentaire très élevées, car elle permet de réduire d'une manière considérable le temps de séjour des produits de réaction à l'intérieur des pores du catalyseur. En effet, la microporosité est connue notamment pour augmenter artificiellement le temps de séjour des produits de réaction dans le lit catalytique, favorisant ainsi la ré-oxydation du soufre formé dans un premier temps par l'oxygène présent en excès dans le flux réactionnel. La forte conductibilité thermique du SiC permet également de mieux homogénéiser la température du lit catalytique et d'éviter ainsi la formation des points chauds, néfastes pour la sélectivité du procédé.

Nanotubes de SiC en catalyse

Dans cette section sont présentés d'une manière succincte les premiers résultats étonnant de l'utilisation de nanotubes de SiC en tant que support de catalyseur dans la réaction de désulfuration ultime. Les nanotubes de SiC sont synthétisés par la méthode dite de « mémoire de forme » entre de la vapeur de SiO et des nanotubes de carbone (*figure 1b*) [40]. Les performances catalytiques obtenues à basse température (60 °C) sur des catalyseurs à base de grains et de nanotubes de SiC sont comparées sur la *figure 16*. L'utilisation de nanotubes de SiC en tant que support pour la phase active à base de sulfure de nickel permet une nette amélioration de l'activité désulfurante et ce même à des vitesses de passage de gaz plus importantes par rapport au catalyseur supporté sur des grains [40]. L'hypothèse avancée pour expliquer ces résultats est basée sur des phénomènes de condensation capillaire qui se produiraient à l'intérieur des tubes et qui permettraient une augmentation artificielle de la pression d'H_2S sur le site actif par rapport à la pression de travail macroscopique, favorisant ainsi la cinétique de la réaction. La vitesse de réaction serait alors contrôlée par la pression nanoscopique alors que la pression apparente d'H_2S, macroscopique, demeure constante à l'extérieur des tubes. Ce nouveau concept de concentration locale, sans les inconvénients des problèmes de diffusion rencontrés sur des nanostructures plus étroites (zéolithes), pourrait s'appliquer au niveau environnemental à de nombreuses réactions de dépollution en phase gaz ou liquide, quand le polluant est extrêmement dilué, et par conséquent très difficile à éliminer par une réaction chimique dont la vitesse dépend presque toujours de la concentration ou de la pression partielle du produit.

Conclusion

Cette revue succincte nous a permis de présenter une nouvelle méthode de synthèse permettant l'obtention de carbure de silicium, possédant des surfaces spécifiques comprises entre 20 et 100 m^2/g, pour être utilisé ensuite comme support de catalyseur. Le deuxième intérêt de la méthode est que la morphologie du SiC peut être pilotée à volonté, en fonction de la réaction visée, par contrôle de la mise en forme du mélange de départ, extrusion, sphéronisation, etc. Ce contrôle est très important car il est connu que la forte résistance mécanique du SiC rend une mise en forme ultérieure très difficile.
La dispersion de la phase active dans les pores du support est assurée par la présence d'une couche mixte d'oxycarbure et oxyde de silicium constituant les parois internes de ces pores et qui présente une bonne interaction avec les sels précurseurs des phases supportées. La forte conductibilité thermique du support permet une rapide homogénéisation de la température dans le lit catalytique et évite ainsi la formation de points chauds pouvant modifier la nature de la phase active et/ou la sélectivité de la réaction.
Les performances catalytiques obtenues par rapport à celles que permet l'utilisation des supports traditionnels indiquent que ce carbure de silicium pourrait être efficacement utilisé en lieu et place des supports commerciaux actuels dans le cas des réactions tests présentées ci-dessus. Notons également que la liste d'exemples reportée dans cet article n'est en rien exhaustive : le SiC a également été utilisé avec succès comme support de catalyseur dans d'autres réactions telles que la déshydrogénation sélective du *n*-butane [41-42], l'oxydation sélective du *n*-butane en

anhydride maléique [43-45] et l'hydrogénation sélective de double liaison dans les cétones ou aldéhydes possédant une insaturation en position α,β [46-47].

Perspectives et développement industriel

Les résultats obtenus récemment au laboratoire sur la synthèse des nanotubes de SiC ont également ouvert de nouvelles perspectives non moins intéressantes dans l'utilisation de ces matériaux dans les réactions en milieu liquide ou en milieu gazeux très dilué (traitement des traces au niveau environnemental). La morphologie tubulaire de ces matériaux pourrait être mise à contribution dans le développement de nouveaux types de catalyseurs. Une meilleure caractérisation des phases actives en fonction de la nature du support utilisé (pur ou dopé avec différents éléments) et des paramètres de réaction sera également un plus pour améliorer les performances actuelles.
Le développement industriel de ces nouveaux matériaux à base de SiC est désormais en route par l'intermédiaire de la création de la société SICAT [48]. Cette société va prochainement assurer la fabrication à l'échelle pilote industriel de ces matériaux (plusieurs t/an), afin de fournir aux industriels intéressés les échantillons pour les premiers tests à l'échelle de démonstration industrielle.

Remerciements

Ces travaux ont été en partie financés par les sociétés Pechiney (France), Elf (France), Dupont (États-Unis), Lurgi (Allemagne) et l'Ademe (France). La synthèse du SiC au niveau pilote a été assurée par le Centre de Recherche de Voreppe (Pechiney). Les auteurs voudraient également remercier sincèrement C. Job (ex-Pechiney et actuellement SICAT SA) et J.-C. Bernier (Institut de physique et chimie des matériaux de Strasbourg, UMR 7504 du CNRS), aujourd'hui directeur du Département Chimie du CNRS, pour avoir cru en ce projet et l'avoir soutenu depuis ses débuts. Enfin, les auteurs remercient, pour leurs contributions aux travaux présentés dans cette revue durant la préparation de leurs thèses au sein du laboratoire, S. Hantzer, S. Marin, P. Del Gallo, P. Delporte, E. Peschiera, C. Bouchy, S. Roy, B. Heinrich, et J.-P. Tessonnier, G. Ehret, C. Estournès et J. Guille (Institut de physique et chimie des matériaux de Strasbourg).

Références

[1] a) *Catalysis looks to the future*, NRC, National Academy Press, Washington DC, **1992** ; b) Mills G.A., *Catal. Today*, **1994**, *22*.
[2] Kennedy P., North B., *Proc. Br. Ceram. Soc.*, **1983**, *33*, p. 1.
[3] Lednor P.W., *Catal. Today*, **1992**, *15*, p. 243.
[4] Chorley R.W., Lednor P.W., *Adv. Mater.*, **1991**, *3*, p. 474.
[5] Lednor P.W., de Ruiter R., *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **1991**, p. 1625.
[6] Moene R., Makkee M., Moulijn J.A., *Appl. Catal. A: General*, **1998**, *167*, p. 321.
[7] Ledoux M.J., Guille J., Hantzer S., Dubots D., *US Patent* n° 4 914 070, **1990**.
[8] Ledoux M.J., Hantzer S., Pham-Huu C., Guille J., Desaneaux M.P., *J. Catal.*, **1988**, *114*, p. 176.
[9] Ledoux M.J., Pham-Huu C., *Catal. Today*, **1992**, *15*, p. 263.
[10] Keller N., Pham-Huu C., Ledoux M.J., Estournès C., Ehret G., *Appl. Catal. A: General*, **1999**, *187*, p. 255.
[11] Prin M., Baluais G., *Brevet Français* n° 93-06015, Pechiney Recherche, **1993**.
[12] Keller N., Pham-Huu C., Roy S., Ledoux M.J., Estournès C., Guille J., *J. Mater. Sci.*, **1999**, *34*, p. 3189.
[13] Taylor T.N., *J. Mater. Res.*, **1989**, *4*, p. 189.
[14] Porte L., Sartre A., *J. Mater. Sci.*, **1989**, *24*, p. 271.
[15] Renlund G.M., Prochazka S., Doremus R.H., *J. Mater. Res.*, **1991**, *6*, p. 2716 and ibid.
[16] Hase T., Lin B.W., Iseki T., Suzuki H., *J. Mater. Sci. Lett.*, **1986**, *5*, p. 69.
[17] Elder P., Krstic V.D., *J. Mater. Sci. Lett.*, **1989**, *8*, p. 941.
[18] Schwartz J.A., Contescu C., Contescu A., *Chem. Rev.*, **1995**, *95*, p. 477.
[19] Yao H.C., Stepien H.K., Gandhi H.S., *J. Catal.*, **1980**, *61*, p. 547.
[20] Maxwell I.E., Naber J.E., *Catal. Lett.*, **1992**, *12*, p. 105.
[21] a) Miller S.J., *Brevet US* n° 4 689 138, Chevron Com., **1987** ; b) Miller S.J., *Brevet US* n° 4 710 485, Chevron Com., **1987**.
[22] Taylor R.J., *Appl. Catal. A: General*, **1994**, *119*, p. 121.
[23] Pham-Huu C., Peschiera E., Del Gallo P., Ledoux M.J., *Appl. Catal. A: General*, **1995**, *132*, p. 77.
[24] Delporte P., Pham-Huu C., Ledoux M.J., *J. Chim. Phys.*, **1996**, *93*, p. 507.
[25] Ledoux M.J., Del Gallo P., Pham-Huu C., York A.P.E., *Catal. Today*, **1996**, *27*, p. 145.
[26] Blekkan E.A., Pham-Huu C., Ledoux M.J., Guille J., *Ind. Eng. Chem. Res.*, **1994**, *33*, p. 1657.
[27] York A.P.E., Pham-Huu C., Del Gallo P., Ledoux M.J., *Catal. Today*, **1997**, *35*, p. 51.
[28] York A.P.E., Pham-Huu C., Del Gallo P., Blekkan E.A., Ledoux M.J., *Ind. Eng. Chem. Res.*, **1996**, *35*, p. 672.
[29] Spevack P.A., McIntyre N.S., *J. Phys. Chem.*, **1993**, *97*, p. 11031.
[30] Dupuy J., Graulier M., *Information Chimie*, Spécial catalyse, **1969**, p. 33.
[31] *Sulphur*, **1997**, *250*, p. 45.
[32] *Sulphur*, **1998**, *257*, p. 34.
[33] Philippe A., Savin-Poncet S., Nougayrède J.-B., Ledoux M.J., Pham-Huu C., Crouzet C., *Demande Brev. Français*, Elf Aquitaine Production, n° 94-013752, **1994**.
[34] Ledoux M.J., Nougayrède J.-B., Savin-Poncet S., Pham-Huu C., Keller N., Crouzet C., *Demande Brev. Français*, Elf Aquitaine Production, n° 97-16617, **1997**.
[35] Keller N., Pham-Huu C., Ledoux M.J., Nougayrède J.-B., Savin-Poncet S., Bousquet J., *Catal. Today*, **2000**, *61*, p. 157.
[36] Keller N., *Thèse de l'université*, Université de Strasbourg, **1999**.
[37] Ledoux M.J., Pham-Huu C., Keller N., Savin-Poncet S., Nougayrède J.-B., Bousquet J., Boll W., Morgenroth R., *Sulphur*, **2000**, *269*, p. 41.
[38] Keller N., Pham-Huu C., Ledoux M.J., *Appl. Catal. A: General*, **2001**, *217*, p. 205.
[39] Ledoux M.J., Nougayrède J.-B., Pham-Huu C., Keller N., Savin-Poncet S., Crouzet C., *Demande Brev. Français*, Elf Aquitaine Production, n° 98-11941, **1998**.
[40] Pham-Huu C., Keller N., Ehret G., Ledoux M.J., *J. Catal.*, **2001**, *200*, p. 400.
[41] Krause A.O.I., Ledoux M.J., Meunier F., Del Gallo P., Pham-Huu C., Niemi V., Hiltunen J., *Brevet Finlandais* n° 95-0751, **1995**.
[42] Harlin M.E., Krause A.O.I., Heinrich B., Pham-Huu C., Ledoux M.J., *Appl. Catal. A: General*, **1999**, *185*, p. 311.
[43] Ledoux M.J., Crouzet C., Bouchy C., Kourtakis K., Mills P.L., Lerou J.J., *Brevet US* Appl. PCT n° CL-1097-P1, Dupont Com., **1999**.
[44] Ledoux M.J., Crouzet C., Pham-Huu C., Turines V., Kourtakis K.D., Mills P.L., Lerou J.J., *J. Catal.*, **2001**, *203*, p. 495.
[45] Meunier F., Delporte P., Heinrich B., Bouchy C., Crouzet C., Pham-Huu C., Panissod P., Lerou J.J., Mills P.L., Ledoux M.J., *J. Catal.*, **1997**, *169*, p. 33.
[46] Pham-Huu C., Keller N., Ehret G., Charbonnière L., Ziessel R., Ledoux M.J., *J. Mol. Catal. A: Chem.*, **2001**, *170*, p. 155.
[47] Pham-Huu C., Keller N., Charbonnière L., Ziessel R., Ledoux M.J., *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **2000**, *19*, p. 1871.
[48] SICAT Sarl, contact : Claude Job, 14 avenue Hoche, 75014 Paris ; Marc J. Ledoux, LMSPC, UMR 7515 du CNRS, 25 rue Becquerel, 67087 Strasbourg Cedex 2. E-mail : ledoux@cournot.u-strasbg.fr.

C. Pham-Huu

N. Keller

Cuong Pham-Huu est ingénieur de recherche, **Nicolas Keller**, chargé de recherche, et **Marc J. Ledoux**, directeur de recherche, au Laboratoire des matériaux, surfaces et procédés pour la catalyse à l'ECPM de Strasbourg*.

M.J. Ledoux

* Laboratoire des matériaux, surfaces et procédés pour la catalyse, UMR 7515 du CNRS, ECPM, Université Louis Pasteur, 25 rue Becquerel, 67087 Strasbourg Cedex 02.
Tél. : 03 90 24 26 75. Fax : 03 90 24 26 74.
E-mails : cuong.lcmc@ecpm.u-strasbg.fr
ledoux@cournot.u-strasbg.fr
nkeller@chimie.u-strasbg.fr

Structure des matériaux désordonnés à l'échelle atomique

Vers une compréhension de l'ordre à moyenne portée par les méthodes de simulation numérique

Carlo Massobrio et Massimo Celino

Summary **Atomic scale structure of disordered materials: toward an understanding of intermediate range order via computer simulation**

The concept of short range order is largely developed to describe disordered systems, since it is based on the idea that structural correlations do not extend beyond the first shell of neighbors. However, a more extended level of structural order (intermediate range order, IRO) can be found in disordered network forming systems, as those belonging to the AX_2 family (A = Si, Ge ; X = O, Se, S). IRO manifests itself through the appearance of a first sharp diffraction peak in the total structure factor. This feature arises at values of the momentum transfer in reciprocal space definitely lower than those associated to the main peak, which is related to the short range order. Disordered network forming system have a high technological impact, since they can play the role of host glassy matrices whose structure can be changed by addition of fast ionic species, the so-called network modifiers. In this paper we show that first principles molecular dynamics, which ensures a self-consistent solution of Newton equations, is the method of choice to link the microscopic origins of IRO to specific features of the atomic structure. By going beyond the predictions of more qualitative approches, the description of chemical bonding on the basis of state-of-the-art density functional theory allows to conclude that intermediate range order is compatible with the presence of homopolar bonding. These are responsible for moderate deviations from chemical order.

Mots-clés **Matériaux désordonnés, propriétés structurales, dynamique moléculaire, fonctionnelle de densité.**
Key-words **Disordered materials, structural properties, molecular dynamics, density functional theory.**

Comment aborder l'étude de l'ordre à moyenne portée ?

Les systèmes désordonnés sont couramment identifiés sur la base de la portée réduite de leur degré d'ordre structural. Cet ordre à courte portée est limité, dans la plupart des cas, aux distances entre plus proches voisins et disparaît au-delà de ces longueurs caractéristiques. Toute forme d'organisation structurale impliquant des distances plus élevées, et qui met en jeu une corrélation spatiale entre un nombre fini de couches de voisins, contribue à l'établissement d'une forme d'ordre plus prononcée, l'ordre à moyenne portée. Comment cet ordre apparaît-il et de quelle manière pouvons-nous le caractériser ? Dans le cas des réseaux désordonnés liquides et amorphes de type AX_2 (A : Si ou Ge ; X : O, S ou Se), on fait appel aux facteurs de structure obtenus par diffraction des neutrons ou des rayons X. Ces grandeurs présentent un premier pic aigu (FSDP, « first sharp diffraction peak ») pour des vecteurs d'ondes dans l'espace réciproque compris entre 1 et 2 $Å^{-1}$ [1]. Étant donné que ces valeurs sont inférieures à celles correspondant au pic principal, le FSDP doit être associé à un ordre qui s'établit sur des distances plus grandes que les liaisons entre les premiers voisins. Ces distances sont typiquement comprises entre 5 et 15 Å. Si l'on se situe à l'échelle atomique, la compréhension de l'ordre à moyenne portée, étroitement liée à celle de l'origine du FSDP, nécessite des modèles structuraux fondés sur l'existence de corrélations spatiales étendues. Parmi les schémas phénoménologiques proposés à ce titre, rappelons celui qui consiste à associer des plans atomiques à la composante de Fourier correspondant au FSDP. Dans un article paru en 1996, P.H. Gaskell et D.J. Wallis proposent la notion de quasi-plans dans les verres, en analogie avec les plans de Bragg dans les cristaux [2]. Cependant, la présence de ces plans dans un réseau désordonné n'a jamais été confirmée expérimentalement, ce qui prouve qu'une mémoire de l'état cristallin ne peut pas survivre dans les états liquides et amorphes. Selon un deuxième modèle, l'ordre à moyenne portée est lié aux corrélations entre agrégats d'atomes [3]. Cette idée a un caractère purement générique, car elle ne donne aucune information sur la taille et le mécanisme de formation de ces agrégats. Dans une troisième approche, l'espace est partagé en cations et en particules fictives associées aux régions vides, les interactions entre ces deux entités étant supposées être responsables de l'apparition du FSDP [1]. Il s'agit du modèle, élaboré par S. Elliott, qui associe les corrélations à courte portée du

système cations-vides aux corrélations à moyenne portée dans le système réel. Les idées de S. Elliott sont très souvent utilisées pour une première interprétation des données expérimentales, mais elles sont loin d'être applicables à tous les réseaux désordonnés.

Vers la fin des années 80, le caractère hypothétique et qualitatif de ces propos a stimulé les premières applications de la modélisation à l'échelle atomique (dynamique moléculaire) à l'étude de l'ordre à moyenne portée. Dans le cas d'un système modèle constitué par des sphères dures chargées de deux espèces différentes, un premier résultat probant avait montré qu'il existe un lien entre l'apparition du FSDP, la formation de tétraèdres et le rapport entre les rayons des sphères [4]. Lorsque le rapport entre les rayons se situe à l'intérieur d'un intervalle bien défini, la coordinence AX_4 entre des cations A de charge + 4 et des anions X de charge - 2 favorise la formation d'un réseau de tétraèdres et l'établissement de l'ordre à moyenne portée. A la lumière de cette analyse, la présence de défauts de coordinence AX_2, AX_3 et AX_5 et de défauts homopolaires n'est pas compatible avec l'ordre à moyenne portée. Cet ordre semble se manifester lorsque des motifs géométriques bien définis (les groupes AX_4) sont reliés les uns aux autres par des ponts entre les atomes A qui se partagent un, voir deux atomes de type X. Déjà, à partir de 1980, les limites d'une telle approche étaient mises en exergue par de nombreuses évidences expérimentales qui faisaient état d'un nombre non négligeable de liaisons Ge-Ge et Se-Se dans l'amorphe $GeSe_2$ [5].

Plus récemment, le développement des moyens de calculs et l'extension du formalisme de la dynamique moléculaire ont permis la prise en compte explicite de la structure électronique du système et, par conséquent, ont accru la fiabilité de ces modélisations [6]. Dans le cadre unifié de la dynamique moléculaire *ab initio* qui décrit à la fois la dynamique des atomes et l'évolution dans le temps de la liaison chimique, il est désormais possible de traiter les interactions donnant lieu à l'ordre à courte et à moyenne portée avec une très grande précision. De ce fait, le calcul du champ de forces s'est affranchi de toute approximation empirique sur la nature des liaisons entre les atomes. L'application de cette démarche aux réseaux désordonnés SiO_2 et $GeSe_2$ a montré qu'une relation étroite existe entre la nature de la liaison (plus ou moins ionique) et la formation d'unités tétraédriques prédominantes, ces deux éléments étant accompagnés par l'apparition du FSDP dans le facteur de structure [7-8]. Les systèmes SiO_2 liquide et amorphe sont constitués par des tétraèdres SiO_4 reliés les uns aux autres par le partage d'un atome d'oxygène (connexion partageant les sommets, « corner sharing »). Les liaisons Si-Si et O-O entre premiers voisins sont absentes et apparaissent seulement à très hautes températures [7]. Par voie de conséquence, l'arrangement structural adopté par le silicium et l'oxygène dans ce composé est quasiment identique à celui que l'on pourrait envisager en se basant sur les modèles empiriques des années 80, qui surestiment le caractère ionique de l'interaction. Quelle est la clé pour comprendre ce résultat ? En effet, la forte différence d'électronégativité entre Si (1,8) et O (3,5) rend très ardue toute liaison directe entre les atomes de la même espèce. Ce constat justifie partiellement une description fondée sur des charges ponctuelles de signes opposés (Si : + 4, O : - 2) distribuées dans l'espace selon la proportion stœchiométrique. La situation est bien différente dans le cas des systèmes désordonnés $GeSe_2$. Dans une série d'articles récents, nous avons montré que, dans le liquide $GeSe_2$, les tétraèdres sont majoritaires parmi toutes les formes de coordinence possible entre les atomes de Ge et de Se, mais ils coexistent avec un nombre non négligeable de défauts homopolaires Ge-Ge et Se-Se [8-10]. Si l'on diminue artificiellement le degré d'ionicité de la liaison en modifiant la partie échange et corrélation de l'énergie totale, de manière à déplacer la charge de valence de l'espace autour des atomes vers celui entre les atomes, l'ordre à moyenne portée disparaît [9]. Ce changement se manifeste par une diminution marquée du nombre de tétraèdres et l'absence du premier pic aigu dans le facteur de structure. La différence d'électronégativité est moins importante dans $GeSe_2$ que dans SiO_2, car les valeurs respectives sont 1,8 pour Ge et 2,5 pour Se. Cette différence suggère qu'en partant du SiO_2, un degré d'ionicité moins accentué n'est pas incompatible avec l'ordre à moyenne portée, mais elle ne dit rien sur la véritable structure atomique sous-jacente. De plus, on est conduit à conclure que les systèmes désordonnés $SiSe_2$ pourraient être très semblables à leurs analogues $GeSe_2$, car l'électronégativité est la même pour Ge et Si. Du point de vue expérimental, l'ordre à moyenne portée est aussi bien observé dans l'amorphe $GeSe_2$ que dans l'amorphe $SiSe_2$, la structure cristalline de ce dernier comportant des tétraèdres connectés exclusivement par partage de deux atomes de Se (connexion de type « edge sharing »).

Le but de cette contribution est d'abord de comprendre comment l'ordre à moyenne portée peut correspondre à des organisations structurales distinctes. En évoquant le cas connu des systèmes désordonnés $GeSe_2$, et en nous intéressant au cas du $SiSe_2$, nous montrons aussi jusqu'à quel point le simple critère lié à la différence d'électronégativité entre les deux constituants est insuffisant pour prédire la structure atomique d'un système AX_2. Cet objectif est abordé par une étude du liquide $SiSe_2$, qui a été effectuée en tenant compte des résultats déjà obtenus pour les systèmes désordonnés $GeSe_2$. Nous nous concentrons sur les liquides car les structures amorphes correspondantes sont tout simplement obtenues par trempe à partir des températures plus élevées, l'ordre à moyenne portée ne variant pas d'une manière significative.

Aspects méthodologiques : corrélation entre liaison chimique et structure atomique

Dans nos simulations, les atomes sont placés dans une boîte périodique avec une densité (masse volumique) égale à la densité expérimentale que l'on souhaite reproduire. Le volume doit être suffisamment grand pour permettre la prise en compte de distances typiques de l'ordre à moyenne portée. Cela est atteint si les côtés de la boîte sont plus grands que 15 Å. Le compromis entre ces considérations et la nécessité de ne pas alourdir les coûts du calcul nous a conduit à choisir des modèles limités à 144 atomes. Le choix des positions initiales ne revêt pas en soi une importance majeure, car le système doit perdre la mémoire de cette configuration et être mis en condition d'échantillonner ses positions et ses vitesses d'une manière statistiquement fiable à la température voulue. Dans le cas des simulations de l'état liquide, l'énergie cinétique attribuée aux particules au départ correspond à une température très élevée qui est progressivement réduite une fois que chaque atome a

parcouru une distance égale à plusieurs distances interatomiques. Cette première phase de l'évolution temporelle, qui amène l'ensemble des atomes à leur équilibre thermodynamique, n'est pas prise en compte dans le calcul des moyennes sur le temps du facteur de structure S(q) ou des fonctions de distribution de paire $g_{\alpha\beta}(r)$. Une bonne précision statistique nécessite différentes conditions initiales qui sont le point de départ d'évolutions temporelles à l'équilibre les plus longues possible. Les calculs de dynamique moléculaire permettent de résoudre numériquement les équations du mouvement pendant des intervalles de temps pouvant aller, en fonction du nombre d'atomes, jusqu'à quelques dizaines de picosecondes. Ces intervalles sont suffisants pour décrire la thermodynamique d'un système, à condition que l'état stationnaire d'équilibre soit atteint. C'est largement le cas dans les liquides.

Dans le cadre de la dynamique moléculaire *ab initio* [6], les atomes se déplacent dans l'espace sous l'action d'un champ de force directement dérivé, pour chaque configuration atomique, à partir de la théorie de la fonctionnelle de densité. Selon ce formalisme, pour une configuration atomique donnée, l'énergie totale d'un système d'électrons et ions en interaction est une fonctionnelle unique de la densité électronique [11]. Cette dernière grandeur peut être exprimée comme une fonction d'orbitales indépendantes à une particule, les fonctions d'onde. Dans la dynamique moléculaire *ab initio*, un ensemble de degrés de liberté électroniques fictifs évoluant en même temps que les atomes est associé à ces fonctions d'onde, ce qui permet à la structure électronique du système de s'adapter à tout changement des positions atomiques, sans abandonner l'état fondamental (évolution adiabatique) [6-10]. Par rapport aux modèles empiriques, la structure électronique peut à la fois s'adapter aux différentes configurations microscopiques et déterminer leurs changements. En effet, la distribution spatiale des électrons de valence n'est plus déterminée *a priori* et, surtout, elle n'est plus concentrée d'une manière ponctuelle dans l'espace comme dans l'hypothèse du schéma cations-anions. Un exemple probant est donné par les courbes de niveau de la densité électronique de valence obtenues pendant nos simulations et montrées dans la *figure 1*. Pour une configuration atomique donnée du liquide $GeSe_2$, nous avons sélectionné trois atomes de Se et un atome de Ge. Ce dernier, qui se trouve au centre de la figure, est situé à environ 1,5 Å au-dessus du plan défini par les atomes de Se. Il s'agit d'un arrangement de type AX_3 qui témoigne de la variété de coordinences existantes dans ce système. Le dépeuplement des électrons de valence autour du Ge et le profil sphérique de la densité de charge autour des Se indiquent clairement que le caractère ionique de la liaison est très accentué. Néanmoins, nous observons non seulement que la charge a une extension spatiale non négligeable mais aussi qu'elle possède une composante directionnelle dirigée, des atomes de Se, dans la direction de l'atome de Ge. Cette démonstration de la nature iono-covalente de la liaison électronique dans un composé AX_2 confirme le bien fondé des modèles théoriques capables de décrire la structure atomique et la structure électronique sur un pied d'égalité et au même niveau de fiabilité.

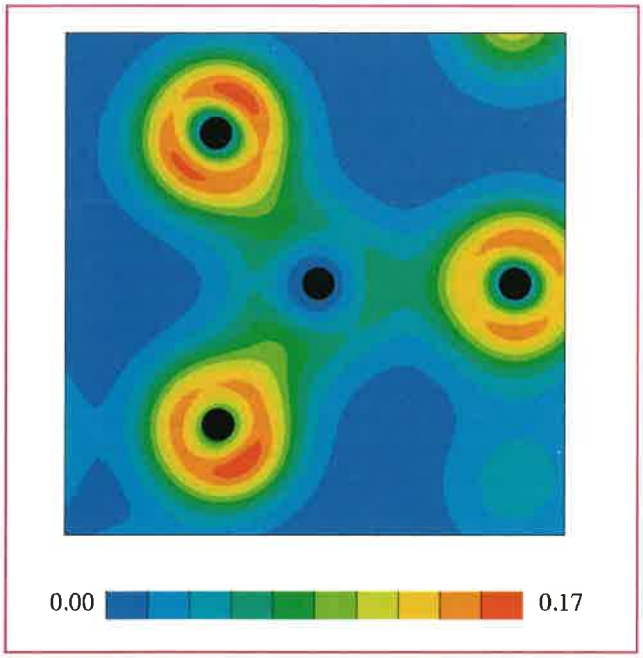


Figure 1 - Courbes de niveau de la densité électronique de valence pour trois atomes de Se et un atome de Ge (au centre), dans le liquide $GeSe_2$.

La configuration a été obtenue à T = 1 100 K. Les trois atomes de Se sont sur le plan de la figure, l'atome de Ge environ 1,5 Å au-dessus. Le calcul a été effectué en tenant fixes les positions des atomes et en faisant converger la structure électronique vers son minimum d'énergie (état fondamental). La densité électronique de valence est donnée en unités $e/(a.u.)^3$, e étant la charge de l'électron.

Ordre chimique et propriétés structurales

Étant donné que la détermination expérimentale de la structure d'un réseau désordonné est surtout basée sur des mesures effectuées dans l'espace réciproque, nous nous intéressons à la comparaison entre les facteurs de structure totaux mesurés et calculés pour les deux liquides $GeSe_2$ et $SiSe_2$ (*figure 2*). Les températures choisies sont situées, relativement aux points de fusion (T_f) respectifs, de manière à obtenir le même rapport T/T_f dans les deux systèmes. Pour

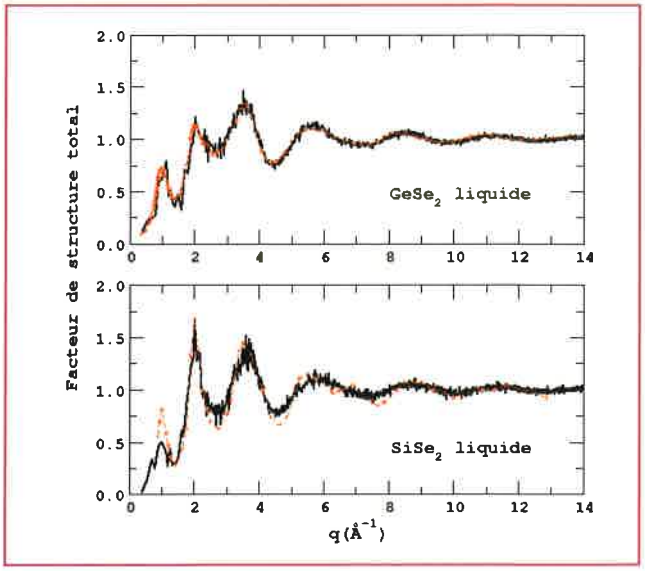


Figure 2 - Facteurs de structure totaux pour les deux liquides $GeSe_2$ et $SiSe_2$ à T = 1 100 K et T = 1 300 K respectivement.

Les courbes rouges correspondent aux données expérimentales, obtenues à T = 1 050 K pour $GeSe_2$ [15] et à température ambiante dans la phase amorphe pour $SiSe_2$ [20].

$GeSe_2$ ($SiSe_2$), les mesures sont disponibles dans l'état liquide (amorphe). Cependant, pour $SiSe_2$ les calculs ont été effectués pour une phase liquide à la même densité que l'amorphe. L'accord est très bon sur tout l'intervalle des vecteurs d'onde q. Pour des petites valeurs de q (1 $Å^{-1}$), l'apparition du premier pic aigu est une indication de l'établissement d'un ordre à moyenne portée dans les deux systèmes. La faible sous-estimation de la hauteur du FSDP dans le cas du $SiSe_2$ est cohérente avec l'augmentation attendue d'intensité en passant de la phase liquide à la phase amorphe à la même densité. Nous remarquons qu'un accord aussi favorable pour une grandeur qui est spécifiquement associée à des distances bien au-delà des interactions entre plus proches voisins est la meilleure preuve de la validité des modèles périodiques utilisés dans les simulations. Des différences notables entre les deux systèmes subsistent dans la région comprise entre 2 et 4 $Å^{-1}$, ce qui est lié à l'ordre à courte portée. Les pics et les minima sont beaucoup plus prononcés dans le liquide $SiSe_2$. Ce comportement suggère que les corrélations spatiales entre premiers voisins sont mieux définies que dans le cas du liquide $GeSe_2$. Pour mieux apprécier la portée de ces différences dans l'espace réel, nous faisons appel aux fonctions de distribution de paire $g_{\alpha\beta}(r)$. Dans le cas expérimental, ces quantités sont obtenues par intégration de Fourier des facteurs de structure, procédure d'autant plus précise que le nombre de vecteurs d'onde est élevé. La portée finie de l'intégration engendre des contributions artificielles qui apparaissent pour des petites distances, ce qui rend ardue l'interprétation des résultats. La dynamique moléculaire donne, par contre, un accès direct aux $g_{\alpha\beta}(r)$, qui sont calculées, pour toute distance compatible avec la grandeur de la boîte, en enregistrant le nombre de fois que deux particules sont séparées par une longueur **r** au cours de la trajectoire temporelle.

Dans la *figure 3*, nous montrons les fonctions de distribution de paire $g_{\alpha\beta}(r)$ pour les deux liquides. Par intégration de ces fonctions dans l'espace direct, nous obtenons les nombres de coordination $n_{\alpha\beta}$, qui fournissent le nombre de voisins d'une espèce donnée autour de l'atome. Le liquide $SiSe_2$ est caractérisé par une succession plus marquée de couches des voisins. La distribution $g_{SiSi}(r)$ comporte deux pics principaux. Le premier est situé à 3 Å et correspond, dans la structure cristalline du $SiSe_2$, à la distance entre deux atomes de Si faisant partie de deux tétraèdres dans une connexion à arête commune. Les connexions partageant les sommets contribuent au deuxième pic dans la fonction de distribution de paires $g_{SiSi}(r)$ et constituent un tiers de toutes les connexions entre les tétraèdres. La distribution $g_{GeGe}(r)$ est très différente. Le pic principal a une largeur à demi hauteur d'environ 1,5 Å et le deuxième maximum est très aplati, ce qui témoigne d'une perte rapide des corrélations entre les différents atomes de Ge pour des distances supérieures à 5 Å. A la fois dans $g_{SiSi}(r)$ et dans $g_{GeGe}(r)$, on peut observer un maximum peu prononcé pour des distances comprises entre 2,4 Å et 2,7 Å. Ce détail des distributions est dû à la présence de défauts homopolaires Si-Si et Ge-Ge. La distribution $g_{SiSe}(r)$ est très pointue à 2,30 Å, la distance entre premiers voisins Si-Se. Par comparaison, la hauteur du pic correspondant dans $g_{GeSe}(r)$ est fortement réduite, et sa forme plus large. Les nombres de coordination relatifs à ces deux cas sont $n_{GeSe} = 3{,}76$ et $n_{SiSe} = 3{,}86$ pour $GeSe_2$ et $SiSe_2$ respectivement. Du côté des distributions $g_{SeSe}(r)$, les deux distributions montrent un premier pic pour des distances comparables (2,35 Å), suivi par un pic plus important près de 4 Å. Le premier pic est associé aux défauts homopolaires Se-Se, plus nombreux dans le liquide $GeSe_2$, comme l'indiquent les nombres de coordination ($n_{SeSe} = 0{,}37$: liquide $GeSe_2$, $n_{SeSe} = 0{,}09$: liquide $SiSe_2$). Le deuxième pic est le reflet des corrélations structurales entre différents atomes de Se appartenant à un même tétraèdre.

A partir des nombres de coordination, nous pouvons extraire d'autres renseignements sur la structure des deux liquides. Selon la loi baptisée « 8-N » par S. Elliott, le nombre de voisins d'un atome dans un réseau à deux composantes est prévisible en tenant compte de sa position dans le tableau périodique [12]. En d'autres termes, des atomes dans la colonne 6 comme O et Se sont censés avoir 2 voisins, tandis que ce nombre devient 4 pour Si ou Ge. Pour tout système qui suit cette loi, on peut déterminer le degré d'ordre chimique qui est maximal lorsque le nombre de liaisons entre les atomes d'espèces différentes (liaisons hétéropolaires) est le plus élevé possible, par rapport à la composition. Par exemple, dans le cas du $GeSe_4$, la formation de liaisons homopolaires est inévitable, et cela sans que l'ordre chimique en soit nécessairement affecté. La mesure de cet ordre s'obtient par les nombres de coordinations moyens, $n_\alpha = n_{\alpha\alpha} + n_{\alpha\beta}$, α et β étant Si, Se ou Ge. La loi « 8-N » est mieux respectée par le liquide $SiSe_2$ car $n_{Si} = 3{,}96$ et $n_{Se} = 2{,}02$. Ces valeurs sont très proches de celles d'un réseau de type « 8-N » parfait (4 et 2 respectivement), mais contiennent aussi une contribution due aux défauts homopolaires ($n_{SiSi} = 0{,}10$, $n_{SeSe} = 0{,}09$). La loi « 8-N » s'applique moins bien au liquide $GeSe_2$ qui est décrit par des nombres de coordination moyens $n_{Ge} = 3{,}80$ et $n_{Se} = 2{,}25$. Bien que la déviation de la loi « 8-N » soit limitée à 12 %, ce système ne peut pas être considéré comme chimiquement ordonné, le nombre de liaisons homopolaires entre les atomes de Se ($n_{SeSe} = 0{,}37$) étant assez élevé.

Les différents degrés d'ordre chimique donnent lieu à des variations notables dans les coordinences des atomes. Ces quantités sont définies en choisissant un rayon de coupure approprié entre plus proches voisins et en excluant dans le

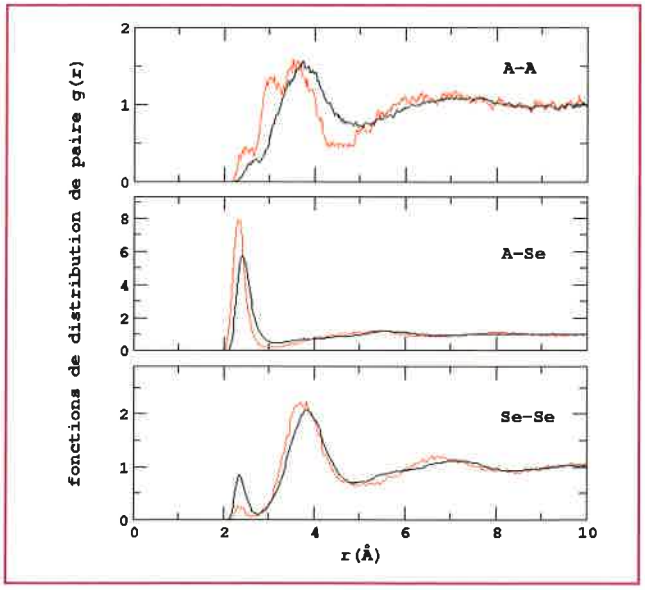


Figure 3 - Fonctions de distribution de paire A-A, A-Se et Se-Se pour les deux liquides ASe_2 (A : Ge, Si) à T = 1 100 K et T = 1 300 K respectivement.
La courbe noire donne les résultats pour $GeSe_2$ et la rouge pour $SiSe_2$.

dénombrement tous les atomes qui se trouvent au-delà de la région sphérique correspondante. Un bon choix consiste à adopter une valeur légèrement supérieure au premier pic de la fonction de distribution de paires entre les atomes d'espèces différentes. Considérons d'abord le cas du liquide $SiSe_2$. Le pourcentage d'atomes Si quatre fois coordonnés est de 79 % et dans 70 % des cas, les quatre voisins du Si sont des atomes de Se. Les liaisons du type Si-$SiSe_3$ concernent 9 % des Si. Des unités $SiSe_3$ (8,3 %) et $SiSe_2$ (4,6 %) sont aussi présentes. Parmi les atomes de Se, 88 % sont deux fois coordonnés, et 12 % d'entre eux forment des liaisons homopolaires. Les mêmes analyses, appliquées au liquide $GeSe_2$, donnent un pourcentage moindre d'atomes de Ge quatre fois coordonnés (61 %), tandis que 22 % d'entre eux sont trois fois coordonnés et 11 % cinq fois coordonnés. Les liaisons homopolaires concernent 32 % d'atomes de Se, dont seulement 70 % sont deux fois coordonnés.

Une vision très détaillée de la structure et de ses changements dans le temps...

La dynamique moléculaire permet de s'appuyer sur la visualisation des coordonnées du système pour mieux comprendre sa structure et les mécanismes de formation et de rupture des liaisons au cours du temps. La *figure 4* reproduit les configurations atomiques à un instant donné pour les liquides $GeSe_2$ et $SiSe_2$. Chaque liaison est représentée par un segment liant deux atomes partagé selon les couleurs attribuées aux différentes espèces (rouge pour Si, noir pour Ge et vert pour Se). Les images mettent en évidence la structure de type réseau qui est commune aux deux systèmes et qui comporte un grand nombre d'atomes de Ge et Si quatre fois coordonnés. Cependant, une analyse plus fine aide à déceler des différences notables, dont certaines sont reliées aux différents degrés d'ordre chimique quantifiés précédemment. Dans le liquide $SiSe_2$, il existe des séquences étendues d'atomes de Si connectés par des ponts à arête commune qui prévalent sur les connexions partageant les sommets. Chaque connexion ponts à arête commune correspond à un anneau de 4 atomes. Leur existence est en accord avec les indications des expériences Raman effectuées sur l'amorphe [13]. Il est également à remarquer que les défauts homopolaires sont assez peu nombreux (un seul pour chaque espèce dans la *figure 4*), de même que les atomes de Si et de Se qui s'écartent de la coordinence tétraédrique. Un comportement différent caractérise le liquide $GeSe_2$. Plusieurs chaînes d'atomes de Se sont observables (pour la plupart des dimères), ainsi que des atomes de Se trois fois coordonnés. Le nombre de connexions partageant les sommets est maintenant prédominant. La présence de liaisons Se-Se rend aussi possible la formation d'anneaux de 5 atomes.

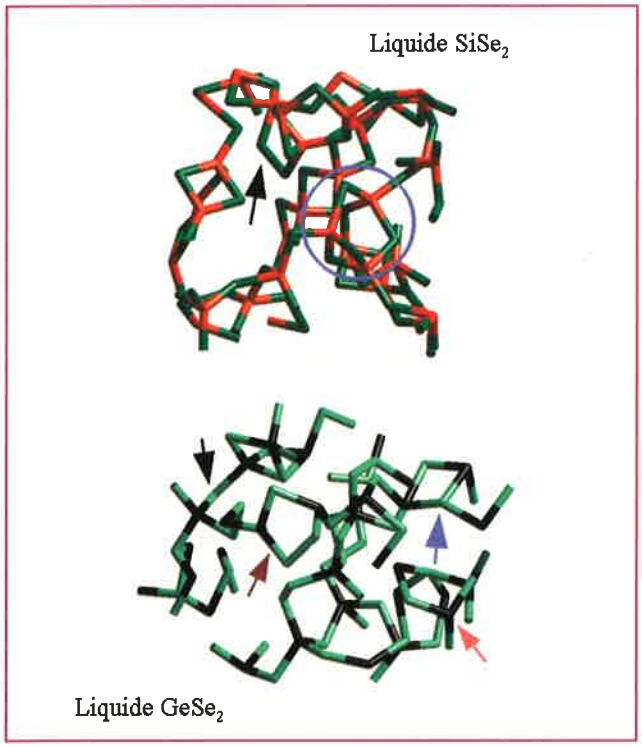


Figure 4 - Partie supérieure : configuration du liquide $SiSe_2$ à T = 1 300 K.
Les traits rouges correspondent aux atomes de Si et les verts aux atomes de Se. Le cercle bleu met en évidence un anneau de 6 atomes chimiquement ordonné (3 atomes de Si, 3 atomes de Se). Une liaison homopolaire Se-Se est indiquée par la flèche noire.
Partie inférieure : configuration du liquide $GeSe_2$ à T = 1 100 K.
Les traits noirs correspondent aux atomes de Ge et les verts aux atomes de Se. Les flèches mettent en évidence une connexion « corner-sharing » (flèche noire), un anneau formé par 5 atomes et contenant une liaison homopolaire Se-Se (flèche marron), un atome de Se trois fois coordonné (flèche bleu) et un atome de Ge trois fois coordonné (flèche rouge).

Quelle est la stabilité dans le temps des motifs structuraux qui composent les réseaux ? Tout au long de son évolution, des liaisons peuvent se casser et se reformer sous l'effet de l'agitation thermique. En moyenne, chaque atome du liquide $GeSe_2$ parcourt une distance de l'ordre de 3 Å pendant une durée de 10 ps à T = 1 100 K. Cette valeur est un peu moins élevée dans le cas du liquide $SiSe_2$. Un calcul du temps de vie des liaisons a montré que leur durée (1 ps) est drastiquement réduite, dans le cas des liaisons homopolaires, par rapport aux liaisons hétéropolaires (3-4 ps) [10]. Ces dernières sont à la base de la stabilité des tétraèdres. Cependant, cette stabilité est aussi fonction de la température, car elle diminue fortement lorsque deux atomes, l'un Ge et l'autre Se, (ou Si et Se), par effet de vibrations, s'éloignent de leur distance optimale qui est celle donnée par le premier maximum des fonctions de distribution de paire $g_{GeSe}(r)$ et $g_{SiSe}(r)$. Cette évaluation ne considère, comme liaisons brisées, que celles qui persistent dans le temps pendant une durée suffisamment longue, de l'ordre de 0,5 ps.

Le mécanisme de formation des liaisons entre les différentes unités tétraédriques n'est pas pris en compte et, en même temps, n'est pas accessible aux approches de calcul qui traitent un système étendu comme une superposition d'unités structurales indépendantes [14]. Cette démarche a conduit, dans le cas des systèmes désordonnés $SiSe_2$, à proposer l'existence d'un certain nombre de connexions privilégiées entre les tétraèdres, notamment celles à arête commune qui donneraient lieu à des chaînes formées par 3 tétraèdres. Jusqu'à quel point peut-on considérer un système désordonné tout simplement comme un ensemble d'agrégats indépendants liés les uns aux autres ? Le suivi des configurations obtenues par dynamique moléculaire nous fait comprendre que cette hypothèse est beaucoup trop simpliste. Nous savons déjà que des défauts homopolaires existent dans les réseaux désordonnés et que le temps de vie des liaisons traduit un mouvement de diffusion. Or, c'est exactement cette diffusion qui rend

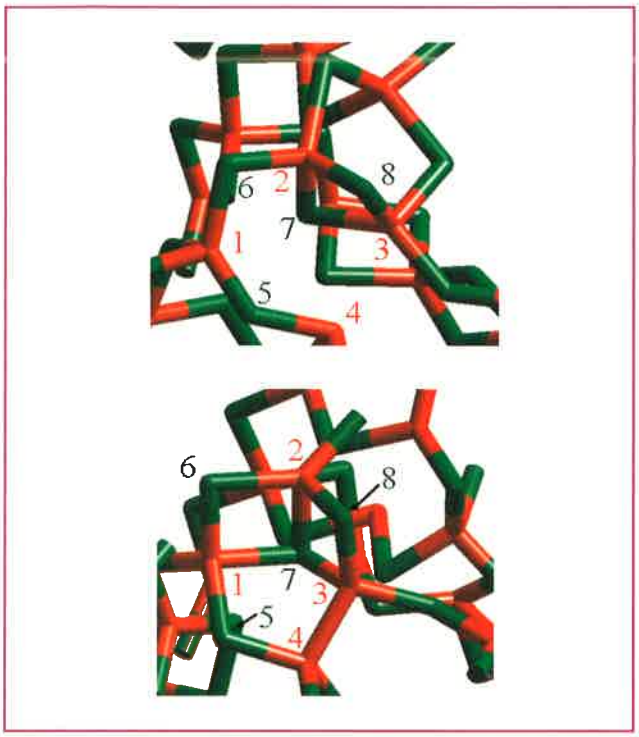


Figure 5 - Mécanisme de destruction et de création d'anneaux dans le liquide $SiSe_2$ à T = 1 300 K.
Les deux configurations sont séparées par 0,5 ps. Une liaison homopolaire se forme entre deux atomes de Si (3 et 4 dans la figure).

possible la transformation des unités structurales au cours du temps, par recombinaison et échange d'atomes. Les défauts homopolaires jouent un rôle inattendu mais essentiel dans ces mécanismes.

A titre d'exemple, nous montrons, dans la *figure 5*, deux configurations séparées par 0,5 ps. La première est un agrandissement d'une partie du système observé dans la *figure 4*. Dans ce cas, les 4 atomes de Si (désignés par les chiffres 1 à 4 en rouge) sont impliqués, le 1er dans une connexion partageant les sommets, le 2e et le 3e dans un anneau de 4 atomes (dont les atomes Se 7 et 8, en vert, font aussi partie) et un anneau de 6 atomes, tandis que le 4e est lié, parmi les atomes visibles, seulement à l'atome 5. Dans la deuxième configuration, le rapprochement entre les atomes 3 et 4 (liaison Si-Si) et entre les atomes 1 et 7 (liaison Si-Se) engendre la rupture de l'anneau de 6 atomes. Bien que l'anneau formé par 2, 8, 3 et 7 soit stable, deux nouvelles structures fermées se forment, composées par les atomes 1, 6, 2, 7 et les atomes 1, 7, 3, 4, 5. Par voie de conséquence, l'atome 7 devient trois fois coordonné et un anneau composé par un nombre impair d'atomes peut se créer. L'atome 2 est partagé entre deux anneaux de 4 atomes : cette situation est en accord avec les résultats expérimentaux qui chiffrent à 20 % le nombre d'atomes de Si impliqués dans deux connexions « edge-sharing ». Cependant, la structure décelée par la simulation est tout à fait originale, car elle implique des liaisons totalement exclues dans le cadre d'un modèle purement ionique. Son mécanisme de formation met en évidence la notion d'un désordre chimique transitoire qui est à l'origine de plusieurs configurations pouvant aussi subsister dans la phase amorphe. Cela suggère que, même dans un système largement ordonné du point de vue chimique, les écarts à cet ordre ne peuvent pas être négligés *a priori*.

Conclusions et perspectives : du fondamental au technologique

La comparaison entre les structures atomiques des liquides $SiSe_2$ et $GeSe_2$, basée sur la dynamique moléculaire *ab initio*, nous fait comprendre que l'ordre à moyenne portée peut correspondre à des arrangements structuraux différents ayant en commun une succession d'éléments prédominants connectés dans l'espace. Dans le cas des systèmes AX_2, ces éléments sont les tétraèdres AX_4. Du côté de la modélisation à l'échelle atomique, un premier niveau de description consiste à expliquer l'ordre à moyenne portée et le premier pic aigu de diffraction, en considérant un réseau dépourvu de défauts structuraux et parfaitement ordonné chimiquement. Cette description est d'autant plus justifiée que la liaison est ionique, ce qui rend impossible le rapprochement entre les atomes de la même espèce. Cette approximation n'a pas soulevé de controverses majeures jusqu'à l'apparition des premières évidences expérimentales indiquant la présence de défauts homopolaires. Il est nécessaire d'aller au-delà d'une distribution de charges ponctuelles pour tenir compte des différentes configurations adoptées par les liquides $GeSe_2$ et $SiSe_2$, qui sont néanmoins caractérisés par la même différence d'électronégativité. A partir d'une analyse des configurations, il apparaît que l'ordre à moyenne portée peut correspondre à des réseaux qui diffèrent entre eux par deux aspects. Le premier est le mode de connexion entre les unités constitutives prédominantes. Ceci peut correspondre à une totalité de connexions partageant les sommets (amorphe SiO_2) ou à une coexistence entre les connexions partageant les sommets et les connexions à arête commune. C'est le cas des liquides $GeSe_2$ et $SiSe_2$, $SiSe_2$ étant peuplé par plus de connexions à arête, comme son homologue cristallin. Le deuxième aspect a trait au nombre de défauts homopolaires et d'écarts à la coordinence tétraédrique. L'ordre à moyenne portée persiste, comme le montre l'apparition de signes caractéristiques dans le facteur de structure (le FSDP), à condition qu'au moins la moitié des « cations » (les atomes Si ou Ge) aient une coordinence tétraédrique.

Plus complexe est la compréhension de l'origine du premier pic aigu de diffraction dans les facteurs de structure partiels, que nous n'abordons pas ici. La mesure de ces grandeurs s'effectue par des expériences de diffraction de neutrons avec substitution isotopique [15]. Cette technique est fondée sur le fait que la structure du système n'est pas affectée par un changement des isotopes des espèces atomiques, tandis que la diffraction des neutrons change à cause des différentes longueurs de diffusion des isotopes. Parmi les facteurs de structure partiels ainsi dégagés, certains peuvent être obtenus comme une combinaison linéaire des facteurs de structure relatifs aux espèces atomiques. En particulier, le facteur de structure concentration-concentration est lié à la portée spatiale de l'ordre chimique. La présence d'un FSDP dans cette grandeur et son interprétation sont au centre d'un vif débat qui a stimulé des travaux théoriques récents [8, 16]. L'intérêt majeur qui est porté par de nombreuses équipes expérimentales et théoriques à la structure des réseaux désordonnés est motivé par les retombées technologiques qu'une bonne maîtrise de ces matériaux peut susciter. Dans un travail récent, les solides électrolytes AgI et Ag_2Se ont été utilisés comme additifs dans les réseaux vitreux $GeSe_4$ et As_2Se_3 [17]. L'objectif est d'obtenir des verres avec une conductivité électrique accentuée, ouvrant la voie à des

nouvelles applications dans le domaine des batteries et des récepteurs. Les verres ionocovalents AX_2 (A : Si, Ge, X = O, Se, S), mais aussi d'autres composés comme B_2O_3, Al_2O_3, sont des excellentes matrices d'accueil pour l'insertion d'autres espèces, à savoir Na_2O, K_2O, Li_2O, Li_2S, Ag_2Se. Les atomes de ces dernières, sous forme de cations, sont susceptibles de se déplacer rapidement dans le réseau et d'en modifier la structure. Ces espèces additives ont pour effet d'ouvrir le réseau du verre et d'abaisser le point de la transition vitreuse. De nombreux modèles phénoménologiques sont disponibles pour décrire la mobilité des atomes introduits dans les matrices vitreuses. Cependant, aucun d'eux ne va au-delà d'une interprétation qualitative et n'apparaît plus convaincant que les autres. Comme l'indiquent des résultats récents obtenus par dynamique moléculaire dans le cadre des potentiels empiriques, la modélisation à l'échelle atomique est en mesure de relever ce défi [18]. Il est intéressant de remarquer que cette approche répond d'une manière naturelle aux questions soulevées par Bunde, Funke and Ingram dans une revue récente [19] : où sont les ions et pourquoi occupent-ils certains sites plutôt que d'autres ? Quel est leur mécanisme de diffusion ? Ces questions ont trait à la structure des verres et des additifs et aux corrélations structurales qui se créent entre eux, ainsi qu'aux phénomènes de transport. A l'aide de la dynamique moléculaire, utilisée en combinaison avec le formalisme de la fonctionnelle de densité, il est concevable que des réponses significatives à ces problèmes soient apportées dans un futur très proche.

Remerciements

Les développements des idées, des concepts et des résultats exposés dans cet article ont tiré largement profit d'une collaboration fructueuse, tout au long de ces dix dernières années, avec Alfredo Pasquarello (École polytechnique fédérale de Lausanne, Suisse) et Roberto Car (Princeton university, États-Unis). Nous remercions Claude Demangeat (IPCMS, Strasbourg) pour ses remarques constructives. Nous remercions aussi le Centre de calcul IDRIS du CNRS pour une généreuse allocation de temps de calcul.

Références

[1] Elliott S.R., *Nature*, **1991**, *354*, p. 445.
[2] Gaskell P.H., Wallis D.J., *Phys. Rev. Lett.*, **1996**, *76*, p. 66.
[3] Moss S.C., Price D.L., *Physics of Disordered Materials*, D. Adler, H. Fritzsche, S.R. Ovshinsky, Plenum, New York, **1985**, p. 77.
[4] Iyetomi H., Vashishta P., Kalia R.K., *Phys. Rev. B*, **1991**, *43*, p. 1726.
[5] Bresser W.J., Boolchand P., Suranyi P., de Neufville J.P., *Phys. Rev. Lett.*, **1981**, *46*, p. 1689.
[6] Car R., Parrinello M., *Phys. Rev. Lett.*, **1985**, *55*, p. 2471.
[7] Sarnthein J., Pasquarello A., Car R., *Phys. Rev. Lett.*, **1995**, *74*, p. 4682.
[8] Massobrio C., Pasquarello A., Car R., *Phys. Rev. Lett.*, **1998**, *80*, p. 2342.
[9] Massobrio C., Pasquarello A., Car R., *J. Am. Chem. Soc.*, **1999**, *121*, p. 2943.
[10] Massobrio C., Pasquarello A., Car R., *Phys. Rev. B*, **2001**, *64*, p. 144205.
[11] La théorie de la fonctionnelle de densité et ses applications dans le domaine de la dynamique moléculaire *ab initio* sont détaillées dans [6-10], ainsi que dans de nombreux ouvrages, comme *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, R. Parr et W. Yang, Oxford University Press (New York), Clarendon Press (Oxford), **1989**.
[12] Elliott S.R., *Physics of Amorphous Materials*, Longman Group UK Ltd, **1990**.
[13] Selvanathan D., Bresser, W.J., Boolchand P., *Phys. Rev. B*, **2000**, *61*, p. 15061.
[14] Jackson K., Grossman S., *Phys. Rev. B*, **2001**, *65*, p. 012206.
[15] Penfold I.T., Salmon P.S., *Phys. Rev. Lett.*, **1991**, *67*, p. 97.
[16] Zhang X., Drabold D.A., *Phys. Rev. B*, **2000**, *62*, p. 15695.
[17] Boolchand P., Bresser W.J., *Nature*, **2001**, *410*, p. 1070.
[18] Jund P., Kob W., Jullien R., *Phys. Rev. B*, **2001**, *64*, p. 134303.
[19] Bunde A., Funke K., Ingram M.D., *Solid State Ionics*, **1998**, *105*, p. 1.
[20] Johnson R.W., Price D.L., Susman S., Arai M., Morrison T.I., Shenoy G.K., *J. Non-Cryst. Solids*, **1986**, *83*, p. 251.

C. Massobrio

M. Celino

Carlo Massobrio
est directeur de recherche CNRS au sein de l'Institut de physique et de chimie de matériaux de Strasbourg (IPCMS)*.

Massimo Celino
est chercheur au Centre de recherches ENEA (Agence nationale italienne pour les nouvelles technologies)** et à l'Institut de physique de la matière condensée, Unité de Recherche Rome 1, Italie.

* Institut de physique et de chimie des matériaux de Strasbourg (IPCMS), 23 rue du Loess, 67037 Strasbourg Cedex.
Tél. : 03 88 10 70 40. Fax : 03 88 10 72 49.
http://www-ipcms.u-strasbg.fr/gemm/people/massobrio/massobrio-fr.html

** ENEA, Ente per le Nuove Tecnologie l'Energia e l'Ambiente, C.R. Casaccia, CP 2400, I-00100 Rome, Italie.
Tél. : +39 630483871. Fax : +39 630484230.
E-mail : Carlo.Massobrio@ipcms.u-strasbg.fr
Massimo.Celino@casaccia.enea.it
ou Massimo.Celino@ipcms.u-strasbg.fr
http://www.enea.it/hpcn

Les problèmes de l'eau potable an II

Philippe Pichat

En 1976, une sécheresse aiguë et étonnante dans le Nord de l'Europe avait ému une opinion publique qui croyait jusqu'alors qu'une telle calamité ne pouvait atteindre que les pays du Sud. Cet événement, une préoccupation croissante vis-à-vis de la pollution, avait incité *L'Actualité Chimique* à nous demander de traiter « Les problèmes actuels de l'eau » ; l'article expliquait comment une utilisation inadaptée de notre planète pouvait agir défavorablement sur notre approvisionnement en eau, tant sur le plan de la qualité que de la quantité, en favorisant de surcroît sécheresses et inondations [1]. Le présent article fait le point de la situation 26 ans plus tard, alors que l'Unesco vient de déclarer 2003 « Année de l'eau ».

Le cycle de l'eau – l'eau et l'environnement

« *Deçà, delà, en haut, en bas... jamais elle ne connaît la quiétude... elle n'a rien à soi mais s'empare de tout...* » (Léonard de Vinci, *Carnets*).

La biosphère n'est pas peuplée de façon désordonnée par les êtres vivants, mais par des communautés – associations de micro-organismes, de végétaux, d'animaux – installées dans un milieu déterminé ; cette biomasse est sensiblement proportionnelle au volume d'eau des précipitations à la surface des terres émergées qui, arrivant au sol, peut :

• ruisseler jusque dans les océans, en empruntant ruisseaux, rivières, fleuves.

Le ruissellement est important, on s'en doute, sur les terrains imperméables, par exemple granitiques. Dans ce cas, l'eau de pluie alimente essentiellement les eaux de surface. La conséquence est qu'il n'y a que peu de ressources en eau souterraine notable (c'est le cas de la Bretagne). Une autre conséquence est qu'en fonction des précipitations, les cours d'eau ont un débit irrégulier.

• percoler, s'infiltrer et alimenter les gisements aquifères souterrains.

Contrairement au cas précédent, l'infiltration et la percolation sont considérables dans les bassins sédimentaires (Ile-de-France, Aquitaine) constitués de couches de calcaire, de marne, d'argile...

Les réserves en eau souterraine sont considérables. Elles dépassent par des puissances de 10 le volume d'eau de surface. Environ 98 % de l'eau douce serait sous la surface de la Terre ; les 2 % restants constituant les rivières, les lacs, les réservoirs naturels et artificiels. Environ 97 % de l'eau qui serait sous la surface de la Terre constitue les nappes phréatiques ; les 3 % restants qui constituent l'humidité du sol sont essentiels pour la vie végétale. A la surface de la Terre, les précipitations sont dans de nombreuses régions si irrégulières dans le temps et dans l'espace que, sans l'apport des eaux souterraines, les rivières seraient souvent asséchées.

Les phénomènes de percolation des précipitations jouent, on s'en doute, un rôle souvent essentiel dans la réhydratation des sols ; quant au processus de rétention de l'eau, il est effectué par imprégnation des roches microporeuses et par absorption à la surface de silico-aluminates, les argiles ; celles-ci ont la propriété de « gonfler » et de retenir des quantités considérables d'eau [2]. Des substances organo-minérales (complexes argilo-humiques) et des substances biologiques (humus, mousses, végétaux) fixent, comme nous l'avons tous observé pour ces dernières dans la nature, beaucoup d'eau.

• s'évaporer, transpirer (ces deux processus sont groupés sous le nom d'évapotranspiration) par l'intermédiaire du système foliaire alimenté en eau par les racines.

La *figure 1* représente le schéma simplifié du cycle de l'eau.

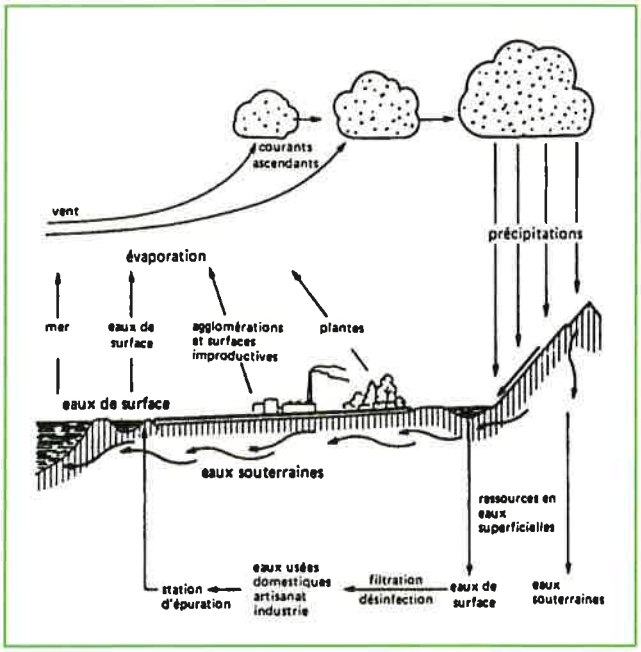


Figure 1 - Schéma simplifié du cycle de l'eau.

La vitesse de circulation de l'eau et ses implications

Le processus général de circulation des eaux dans le sol est gravitationnel, mais freiné par les phénomènes de capillarité. Il se développe dans le sous-sol des courants analogues à ceux des rivières et des fleuves. En milieu suffisamment homogène et isotrope, la vitesse de circulation de l'eau est très faible, de quelques mètres par an à quelques mètres par

jour ; alors que pour un cours d'eau de surface, la vitesse est de l'ordre du mètre par seconde. Lorsqu'un déchet sera déversé dans une eau souterraine au-dessus d'une nappe phréatique, la pollution n'apparaîtra que lentement : la contamination peut demander des années, voire des décades à se manifester.
Rappelons que la pollution est le résultat de la perturbation produite par la présence d'une substance en quantité trop importante dans un écosystème. L'humanité ne peut survivre qu'à la condition que les écosystèmes (rivières, prairies, forêts...) qui constituent notre biosphère ne soient pas trop perturbés. Le déversement des déchets dans l'environnement est une cause fréquente de pollution. Une eau de surface, par exemple celle de la Tamise, contient de l'oxygène dissout ; les poissons en ont besoin pour vivre et se développer. Quand des matières organiques y sont déversées, celles-ci sont dégradées par des micro-organismes qui consomment cet oxygène dissous. La teneur en oxygène de l'eau décroît et les espèces de poissons les plus sensibles à la teneur de l'eau en oxygène – truites, saumons, ombres – périssent en premier. La faune aquatique extrait l'oxygène de l'eau par des branchies, l'équivalent de nos poumons. En été, pour pouvoir disposer d'assez d'oxygène, ils peuvent être amenés à pomper davantage d'eau dans leurs branchies et, par là, absorber davantage de polluants.
Dans une eau de surface, une pollution peut être détectée soit directement (odeur, couleur, trouble...), soit indirectement par la mort de poissons, de crustacés, suite à un déversement d'une quantité importante de déchets tels que hydrocarbures ; c'est un cas de mort instantanée de poissons. Par contre, les éléments toxiques peuvent s'accumuler dans leurs corps : leur santé se détériore lentement, leur vie sera raccourcie, leur descendance pourra avoir des malformations, leur probabilité d'être atteint d'un cancer s'accroîtra... et ils pourront mettre en danger la santé des consommateurs... On a affaire dans ce cas, contrairement à précédemment, à de la toxicité chronique. Les mesures de toxicité aiguës sont traditionnellement effectuées sur des animaux (rats, souris...), sur de petits crustacés (daphnies...) ou sur des bactéries.

Pollution et nuisance – pouvoir auto-épurateur du sol

Notre nourriture provient principalement du sol qu'il importe donc de protéger des polluants puisqu'il fournit l'eau aux plantes qui peuvent fixer des substances toxiques dans leur système racinaire et foliaire lorsque ces substances atteignent des concentrations significatives dans le sol. Ces substances toxiques inhibent, on le sait, la croissance des végétaux, base du développement durable ; il importe de protéger contre les polluants les ressources en eau, qu'elles soient de surface (la banlieue de Paris par exemple est principalement alimentée par l'eau prélevée dans la Seine, la Marne et l'Oise) ou souterraines.
Les silicates complexes et divers carbonates qui forment le sol absorbent une partie des éléments polluants. Le sol, jusqu'à un certain stade, peut se protéger des polluants par :
• un bouclier physico-chimique lié à la capacité de neutraliser, par exemple, des composés acides au moyen de carbonates de calcium, d'échanger des composants des argiles qui se comportent comme des échangeurs d'ions,
• un bouclier physique assurant la protection contre les matières en suspension,
• un bouclier biologique formé de communautés de micro-organismes qui peuvent dégrader en gaz carbonique et en eau des polluants organiques.
Le cycle de l'eau est susceptible d'être perturbé de façon appréciable par les conséquences des occupations humaines dont les tendances porteuses sont rappelées ci-après.

Évolution de l'environnement – tendances générales

« *It is better to be alarmed and scared now than to be killed hereafter* » (Churchill, 1935).

Augmentation du pourcentage de populations urbanisées

Non seulement le pourcentage de populations urbanisées devrait augmenter sensiblement par rapport à la situation actuelle mais de plus, ces populations seraient dans des villes de plus en plus grandes : les mégapoles (plus de 2 millions d'habitants) ou *a priori*, pour des raisons d'échelle, il sera de surcroît de plus en plus difficile de lutter contre la pollution (27 des 33 mégapoles seraient dans des pays émergents) (*tableau I*).

Tableau I - Augmentation de la population des mégapoles (Source : Nations Unies).

		Augmentation 1994-2015
1	Dacca (Bangladesh)	+ 157 %
2	Lagos (Nigeria)	+ 151 %
3	Karachi (Pakistan)	+ 117 %
4	Djakarta (Indonésie)	+ 93 %
5	Bombay (Inde)	+ 89 %
6	Delhi (Inde)	+ 85 %
7	Istanbul (Turquie)	+ 64 %
8	Tianun (Chine)	+ 63 %
9	Manille (Philippines)	+ 63 %
10	Pékin (Chine)	+ 62 %
11	Shanghai (Chine)	+ 59 %
12	Le Caire (Égypte)	+ 54 %
13	Calcutta (Inde)	+ 53 %
14	Sao Paulo (Brésil)	+ 29 %
15	Mexico (Mexique)	+ 21 %
16	Rio De Janeiro (Brésil)	+ 18 %
17	Los Angeles (États-Unis)	+ 17 %
18	Séoul (Corée du Sud)	+ 14 %
19	Buenos Aires (Argentine)	+ 13 %
20	Tokyo (Japon)	+ 8 %
21	New York (États-Unis)	+ 8 %
22	Paris (France)	+ 2 %
23	Osaka (Japon)	+ 0 %

« *Les grandes villes risquent de trouver en elles-mêmes les principes de leur ruine* » (Louis XIV).
Cette situation constitue un défi :
• sur le plan de la quantité : l'eau nécessaire à une grande agglomération doit souvent être transportée sur de longues distances. C'est ainsi que de l'eau est transportée du Colorado en Californie sur plus de 500 kms.
• sur le plan de la qualité : l'épuration des eaux usées correspondantes doit être correctement effectuée pour ne pas perturber l'environnement.

Augmentation du pourcentage des surfaces imperméables à l'eau

Les eaux pluviales, en particulier dans le cas d'un orage nettoyant les toits, les rues, les parkings et les égouts des grandes agglomérations, se chargent de polluants divers tels que le zinc provenant des couvertures des constructions et les hydrocarbures des chaussées.
Dans le cas d'un rejet direct dans une eau de surface, la quantité importante de polluants apportée provoque une perturbation sérieuse du milieu aquatique ; il s'ensuit par exemple la mort de grandes quantités de poissons...
Dans le cas d'un envoi des eaux pluviales non plus directement dans une eau de surface mais dans une station d'épuration conçue pour fonctionner dans une certaine fourchette de débit et de charge de pollution, le fonctionnement de celle-ci est perturbé et ceci pendant une période qui va bien au-delà de la durée de l'orage pour une station biologique.
Il est donc nécessaire de trouver des solutions de stockage temporaire des eaux d'orage dans des bassins de rétention ; dans une optique préventive, il est souhaitable de mettre davantage en place des solutions qui minimisent la quantité d'eau d'orage type ruissellement en favorisant la pénétration sur place de l'eau dans le sol.
C'est ainsi que dans les parkings, une réalisation intéressante consiste à mettre en place une structure en nid d'abeille fait de polyéthylène haute densité recyclé, dont les alvéoles sont remplies avec un mélange de sable pour le drainage et de terre végétale (*figure 2*).

Figure 2 - Élément du parking de SARP Industries (Limay, Yvelines).

En ce qui concerne la construction, le « toit » de construction représenté *figure 3* n'est pas recouvert de tuiles ou d'ardoises mais de terre mise en végétation qui absorbe l'eau d'un orage et évite le ruissellement. Ce système apporte confort thermique en hiver et fraîcheur en été, et peu de frais d'entretien de toiture...

Augmentation de la quantité de déchets produits

Ils sont d'origines domestique, industrielle et agricole. En ce qui concerne les premiers, le citadin dispose en général de peu d'espace. Bien souvent, il ne bénéficie pas comme autrefois de cave, de grenier..., ce qui l'incite à jeter des produits ou des objets dont il n'a plus l'usage immédiat. Un habitant d'une grande agglomération telle que Paris rejette en général pondéralement environ 1 kg/jour, soit deux fois plus de déchets que quelqu'un vivant à la campagne, mais environ 2,5 fois moins qu'un nord-américain.

Figure 3.

Dans le monde, les déchets industriels solides représenteraient plus de 2 milliards de tonnes, dont plus de 300 millions de tonnes de déchets dangereux.
En ce qui concerne les déchets des activités agricoles pour augmenter les rendements à l'échelle internationale, on emploie engrais (azote, phosphore, potassium...) et produits phytosanitaires ; la portion de ceux-ci non utilisée par les plantes se retrouve dans l'environnement. Ces rejets, additionnés de ceux des élevages, ont pollué les ressources souterraines en eau potable de régions comme la Bretagne.
Pour augmenter les rendements agricoles, on arrose, on irrigue. La surface des terres cultivées prises sur les forêts augmente ; les 2/3 seraient irriguées, ce qui provoque un prélèvement sur les ressources en eau insupportable à moyen terme car les sols deviennent trop salins ; c'est le cas de l'Andalousie qui doit envisager d'amener par une canalisation d'environ 1 000 km l'eau de l'Ebre.
En regardant le schéma du cycle de l'eau, il en découle que cette quantité croissante de déchets, à moins d'être gérée de façon optimale, ne peut que détériorer *a priori* la qualité des ressources en eau, qu'elles soient de surface ou souterraines, compte tenu des polluants lessivés (voir [1]). De plus, la gestion des déchets telle qu'elle est pratiquée actuellement consomme souvent de l'eau en tant que vecteur d'évacuation des déchets.

Augmentation de la quantité de déchets produits

« *I will show you fear in a handful of dust* » (T.S. Eliot, *The waste land*).

Nous avons déjà vu les conséquences de l'imperméabilisation de surfaces sur le cycle de l'eau. Des sols peuvent aussi être dégradés chimiquement en devenant trop salins, en étant l'exutoire de pollutions municipales, industrielles ou agricoles. De plus, ils perdent en général leur couvert végétal (ce qui est le cas en Andalousie). Chaque année dans le monde, 6 millions d'hectares de terres agricoles seraient désertifiées, 24 milliards de tonnes de terres arables seraient perdues, 20 % des terres irriguées seraient devenues trop salines ; de nombreuses terres doivent donc être abandonnées.
Les conséquences de cette dégradation des sols sont bien sûr la perturbation du cycle de l'eau avec pour résultat la diminution de la quantité et la qualité de la « ressource ».

Résultats obtenus en matière de « gestion » de l'eau

« *Qui sait si l'art de vivre en société n'est pas susceptible d'être perfectionné comme les autres arts* » (Lavoisier).

Les tendances générales de l'évolution de notre environnement créent des conditions propices à une situation globale alarmante en ce qui concerne la fourniture d'eau potable aux populations. En fait, la mise en œuvre de sciences et techniques permet de lutter contre ces tendances bien que l'amélioration des techniques analytiques permette de détecter des polluants insoupçonnés ; en d'autres termes, les exigences de qualité vis-à-vis de l'eau potable sont croissantes.

Rappel sur la production d'eau potable

« *Il faut qu'une eau soit limpide, aérée, sans odeur ou saveur sensibles* » écrivait déjà Hippocrate il y a plus de 2 000 ans. Les Romains ont ensuite organisé leur vie sociale autour de l'eau, amenée par des aqueducs. Ils avaient bien observé l'importance de fournir aux populations de l'eau de qualité, tant pour préparer les aliments que comme boisson et pour la prévention des maladies par l'hygiène corporelle. Les ouvrages mis en place pour fournir de l'eau potable étaient accompagnés par des ouvrages pour évacuer les eaux usées.

Les grandes invasions du IVe siècle ont détruit dans l'Europe romanisée cette organisation et il a souvent été nécessaire dans de nombreuses régions d'attendre la seconde partie du XIXe pour retrouver une organisation sanitaire similaire. A Londres, George Keate écrivait en 1779 : « *What is perhaps the most essential of all, the astonishing supply of water which is poured into every private house, however small, even to profusion ! The superflux of which clears all the drains and sewers and assists greatly in preserving good air, health and comfort* ». A Paris, en 1854, les travaux dirigés par l'ingénieur Belgrand, collaborateur d'Haussmann, ont enfin permis de fournir à nouveau aux populations de l'eau de qualité et d'évacuer les eaux usées (*figure 4*).

Il est de plus en plus difficile de trouver près d'un centre urbain, et à plus forte raison d'une mégapole, de l'eau de qualité potable sans traitement en quantité suffisante. Au début du XIXe siècle, on s'est rendu compte que l'addition d'une petite quantité de chlore désinfectait l'eau d'une vaste catégorie de micro-organismes pathogènes et que de plus, l'eau désinfectée ne se réinfectait pas dans le circuit de distribution lorsqu'on avait pris la précaution de prévoir lors de la désinfection un certain surplus de chlore. A noter : dès que cette précaution n'est plus suivie dans la fourniture d'eau de boisson, les épidémies réapparaissent. C'est ainsi qu'au Pérou en 1991, il y aurait eu 300 000 cas de choléra.

Amélioration des techniques analytiques

L'amélioration des techniques analytiques permet de détecter et de mesurer la présence de polluants qui n'étaient pas auparavant pris en compte (composés organochlorés...), non plus seulement au niveau de la fraction de la partie par millions comme il y a une trentaine d'années, mais au niveau de la partie par billions. C'est ainsi que les médicaments – que ce soient des analgésiques, des antirhumatismaux, des anticholestérols, des vasodilatateurs, des tranquillisants ou des antibiotiques qui comme on le sait sont utilisés à faible concentration... – sont cependant détectés et dosés dans des nappes phréatiques.

Figure 4 - Le choléra proteste vigoureusement auprès du Préfet Haussmann des grands travaux d'assainissement qui l'ont chassé de Paris (*L'Illustration*, 13 mars 1869).

Cette amélioration des limites de détection de substances a été possible d'une part par l'évolution des techniques analytiques à caractère physico-chimique (telles que la spectrométrie d'émission avec excitation plasma) et, fait nouveau, par le couplage de différentes techniques entre elles (ICP-MS, IC-MS) qui crée un effet de synergie. Enfin sont apparues des méthodes nouvelles issues de la biologie moléculaire. La bactérie *Escherichia coli* se trouve dans les déjections des humains et des animaux. Sa présence dans l'eau indique un risque de propagation de germes transmissibles par voie oro-fécale : virus hépatite A ou E, vibrions du choléra. La méthode classique nécessite une identification par une mise en culture longue (plusieurs jours) et coûteuse. La société Aquabiolab utilise une sonde moléculaire marquée par une substance fluorescente qui se lie à *E. Coli* et permet de localiser et de dénombrer ces bactéries au microscope.

On a pendant longtemps, par précaution, « potabilisé » l'eau en utilisant un excès substantiel de réactifs (chlore...) compte tenu de l'imprécision avec laquelle on connaissait les concentrations en différents polluants. Une meilleure connaissance tout d'abord des polluants présents, ensuite de leur concentration, permet de mieux adapter la dose de réactifs aux caractéristiques de la ressource et de diminuer des réactions secondaires (par exemple avec le chlore) qui sont revues ultérieurement.

Les informations ainsi recueillies par l'utilisation de ces nouvelles méthodes analytiques ont été apportées aux toxicologues et législateurs afin que la législation et la réglementation soient adaptées vers davantage d'exigences.

Un cas particulièrement important est celui-ci : l'eau de surface utilisée par les fabricants d'eau potable contient en général des matières humiques provenant comme on le sait du monde végétal. On a observé dès 1974, à Amsterdam,

que le chlore réagissait avec elle pour former des trichalométhanes (THM) dont les plus courants sont le chloroforme, le bromodichlorométhane (BDCM), le dibromochlorométhane (DBCM) et le bromoforme. D'autres sous-produits chlorés ont été identifiés tels que le 3-chloro-4-dichlorométhyl-5-hydroxy-2-5H-furanone (MX). Les concentrations de ces substances vont de quelques ng/L dans le cas de MX à plusieurs centaines de µg/L dans le cas de THM. Ces sous-produits, suscitant des craintes au point de vue santé publique, ont incité à traiter la matière organique présente dans l'eau par un autre oxydant que le chlore, par exemple l'ozone. De nouveaux progrès en techniques analytiques ont permis de constater qu'un tel traitement induit lui aussi la formation de sous-produits, certes en moindre quantité que précédemment. La crainte que ces sous-produits donnent au point de vue toxicité a incité à « potabiliser » les eaux brutes par une méthode complémentaire utilisant des membranes qui ne provoquent pas la production chimique de coproduits et qui sera exposée plus loin.

Adoption de normes plus exigeantes

C'est ainsi que peu à peu en analysant des eaux brutes, en les traitant, en analysant l'eau traitée, l'Union Européenne a dressé une liste actuellement de 132 substances considérées comme toxiques (Directive du 3 novembre 1998). L'Organisation Mondiale de la Santé (OMS) a aussi un rôle important dans l'élaboration de normes pour l'eau potable. Les domaines particuliers récemment pris en compte sont la présence :

- de trihalométhanes sur laquelle nous reviendrons,
- de certains micro-organismes pathogènes,
- de pesticides.

Une directive européenne limite à 0,1 mg/L la concentration maximale d'un pesticide et à 0,5 mg/L la concentration totale en pesticides dans l'eau. Plus récemment, les métabolites provenant de la décomposition des pesticides ont même été pris en compte.

Les molécules de nombreux pesticides récents sont solubles et ne s'absorbent pas. La conséquence est que les procédés traditionnels de traitement utilisant la floculation, décantation et filtration sur sable déjà évoquées [1]... ne sont pas efficaces et il a été nécessaire de faire appel à des procédés physiques d'élimination de ces molécules mentionnés auparavant et décrits ci-après.

Au stade atteint par les possibilités analytiques, ne faudrait-il pas davantage établir les normes de potabilité de l'eau en fonction de la toxicologie plutôt qu'en fonction de ces possibilités analytiques, sachant que les deux sont liés et que l'on estime avoir des connaissances insuffisantes sur la toxicologie chez les humains, sur de nombreux produits et en particulier de leurs mélanges ?

Nouvelles technologies de production d'eau potable

Pour satisfaire les besoins en eau potable de la mégapole de la région parisienne, on a utilisé pour la première fois les techniques de nanofiltration sur de l'eau de surface à l'usine de Méry qui fabrique de l'eau potable à partir de l'eau de l'Oise et alimente 800 000 habitants de 39 communes situées au nord-ouest de l'Ile-de-France.

En amont de Méry, des unités industrielles de chimie sont implantées sur l'Oise... ainsi que des exploitations agricoles.

Figure 5 - Coupe d'un module : la filtration tangentielle de l'extérieur vers l'intérieur du module s'effectue à une vitesse de quelques cm/h.

Notre premier contact avec cette usine remonte à 1973. Le procédé de fabrication d'eau potable était alors : filtration de l'eau de l'Oise sur sable, floculation au moyen d'un sel d'aluminium, décantation, ozonisation. Une grande partie des matières en suspension était éliminée et on dégradait ensuite la matière organique présente au moyen d'ozone, ce qui présentait déjà un progrès par rapport à l'utilisation du chlore seul.

Ce procédé est ensuite devenu insuffisant compte tenu de la dégradation des caractéristiques de l'eau de l'Oise provenant d'activités agricoles, les nouvelles techniques analytiques ayant détecté de petites quantités de pesticides. En définitive, le procédé adopté pour traiter l'eau est le suivant : on envoie sous pression l'eau à purifier à travers une membrane dont le diamètre des pores est plus petit que le diamètre des molécules, en particulier des pesticides à éliminer (*figure 5*). Les membranes utilisées sont en polyamide composite perforées par un bombardement d'électrons (*figure 6*). A Méry-sur-Oise, la surface totale des

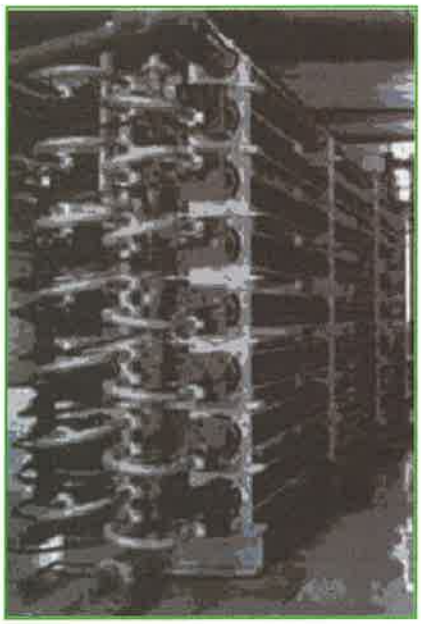


Figure 6 - Unité de nanofiltration.

membranes est de 340 000 m^2. La membrane retient des matières organiques mais aussi une partie du calcium. Les équilibres chimiques sont modifiés et il faut éliminer le gaz carbonique libéré, compte tenu en particulier de la corrosion qu'il pourrait provoquer.
La désinfection de l'eau est achevée ultérieurement par un traitement aux UV rendu possible par la grande limpidité de l'eau obtenue par la nanofiltration.
L'eau d'une rivière comme l'Oise ne constitue pas, il s'en faut, une matière première aux caractéristiques constantes sur le plan microbiologique, chimique et physique... C'est ainsi que compte tenu de l'évolution de la température de l'eau, la pression d'injection de celle-ci dans les membranes de 8 bars en été doit être élevée à 15 bars en hiver.
L'eau obtenue est caractérisée par une faible teneur en matière organique, ce qui permet en particulier d'abaisser la quantité de chlore utilisée pour protéger l'eau dans le circuit de distribution et donc d'améliorer ses propriétés gustatives.
Ces technologies pourront bien sûr bénéficier d'améliorations dans les années à venir.

Protection des ressources en eau potable – combat contre le gaspillage

Elle a lieu en amont et en aval de la production d'eau potable.

En amont de la production d'eau potable
En remplaçant dans des productions industrielles des produits toxiques tels que le plomb, le mercure, le cadmium ou des solvants aromatiques, on décroît la probabilité de pollution dans les ressources en eau potable. Un cas exemplaire est constitué par les encres d'imprimerie, les métaux lourds et les hydrocarbures aromatiques, utilisés autrefois et remplacés par des colorants non toxiques et par de l'huile végétale.
Il existe des situations où, pour des raisons diverses, le producteur de déchet toxique, qu'il soit industriel, agricole ou municipal, n'est pas le mieux placé pour gérer des déchets. C'est pourquoi depuis 1976, se sont peu à peu développées en France des entreprises qui, bénéficiant d'un effet d'échelle, valorisent thermiquement ou sous forme de matières premières des déchets qui leur sont confiés par des producteurs divers (*figure 7*).

Figure 7 - Où le déchet toxique... se transforme en électricité.
Dans cet incinérateur européen, les déchets les plus toxiques sont brûlés et produisent de l'électricité sans apport d'énergie extérieur. Ph. © Merex.

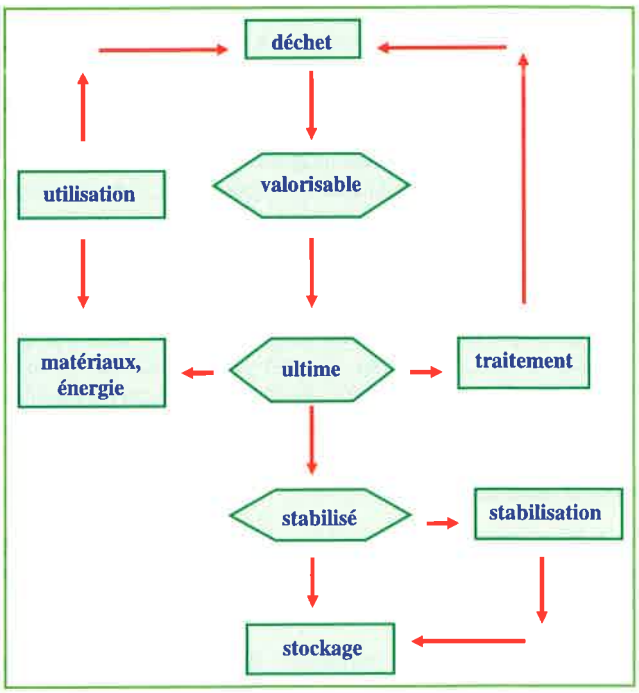


Figure 8 - Les choix essentiels de la gestion des déchets.

Dans ces entreprises, le traitement des déchets est mené jusqu'au bout en inertant par exemple les déchets d'épuration de fumée de la combustion de déchets (*figure 8*).
Un indice de la qualité du service fourni par ces entreprises nées en France (SARP Industries, Tredi...) est leur implantation dans toute l'Europe, en Asie, en Afrique, ainsi qu'en Amérique du Nord et du Sud.

En aval de la production d'eau potable (lutte contre le gaspillage)
Une autre méthode de protection des ressources en eau potable dont l'importance économique et écologique est parfois sous-estimée est de minimiser les pertes dans les circuits de distribution d'eau potable, soit en France une longueur de 800 000 km de canalisation distribuant 5,6 milliards de m^3.
En Europe de l'Est, certains réseaux perdent de l'ordre de 50 % de l'eau transportée ; ils peuvent bénéficier de l'expertise des sociétés françaises (Vivendi Water, Ondeo...) aptes à rénover les réseaux car elles ont œuvré sur ce problème en France il y a déjà plusieurs dizaines d'années.
L'industrie chimique facilite les opérations de rénovation et de pose faites par les fabricants et distributeurs d'eau potable en produisant en particulier les polyéthylènes moins cassants que les matériaux traditionnels.

Une gestion de l'eau par bassins hydrographiques
Le territoire arrosé par un fleuve et ses affluents constitue un bassin hydrographique ; la quantité et la qualité de l'eau disponibles dépendent des activités qui y ont lieu en amont.
La Loi française sur l'eau du 16 décembre 1964 a créé dans chacun des six grands bassins hydrographiques de la France un établissement public, l'Agence de l'eau. Celle-ci s'appuie sur un outil de concertation, le Comité de Bassin, où l'on retrouve les élus, les usagers, les représentants de l'État et du mouvement associatif.
Un bassin hydrographique tel celui du Rhin sera, on s'en doute, géré à l'avenir dans un contexte européen par

l'incitation financière et l'assistance technique, de façon à ce optimiser les ressources en eau et à minimiser les causes de pollution.
Les fonds des Agences proviennent des redevances perçues en fonction des quantités d'eau prélevées et de la pollution rejetée par les différents utilisateurs.
Cette organisation administrative initialement française a fait école puisque 50 pays adhèrent actuellement au Réseau International des Organisations de Bassin.
Rappelons que la gestion du service d'eau potable d'une commune française comme celle du service d'eau usée peuvent être déléguées pour une durée allant jusqu'à 20 ans à une entreprise qui est en mesure de la faire bénéficier de son expérience, de ses moyens de recherche-développement et de son réseau international.

Conclusion

« *Je donnerais le Musée du Louvre, les Tuileries... pour être dans une petite maison au centre d'un petit enclos où j'aurais de l'eau* » (Proud'hon).

Pendant ces vingt dernières années, des résultats importants ont été obtenus à l'échelle internationale en matière de fourniture d'eau potable et d'épuration d'eaux usées. Plusieurs autres aspects du sujet d'un grand intérêt n'ont pas pu être développés dans un souci de concision.
Les résultats obtenus en matière de fourniture d'eau potable courante ont été rendus possibles par la mise en œuvre de nouvelles techniques à caractère chimique et physico-chimique. Toutefois, la complexité scientifique, technique et économique du domaine ne doit pas être sous-estimée, compte tenu des propriétés intrinsèques de chaque « ressource ». On ne peut pas étudier de façon similaire un projet de production d'eau potable ou d'épuration d'eaux usées situé sur le bassin du Rhône et sur celui du Rhin. Il serait cependant intéressant pour des raisons économiques d'essayer de minimiser le nombre de réalisations sur mesure comme ont réussi à l'effectuer d'autres industries.
Les pays en voie d'industrialisation pourraient bénéficier encore davantage des techniques existantes dans la mesure où des moyens de financement appropriés seront dégagés ; l'enjeu est la vie d'une vingtaine de milliers d'enfants qui mourraient prématurément chaque jour par suite d'un manque d'accès à de l'eau de qualité, la mort prématurée d'adultes, l'état sanitaire des élevages. Pas de développement durable sans santé publique, pas de santé publique sans fourniture aux humains et aux animaux du « service » eau potable et du traitement des eaux usées correspondantes. Ces deux services seront de plus en plus liés de façon à recycler davantage l'eau dans les zones dont la pluviométrie n'est pas favorable.

Remerciements

L'auteur remercie :
Jean-Loup Bussière (docteur en pharmacie et professeur à l'université d'Angers), Jean-Pierre Deburge (docteur en médecine), Michel Dutang (Vivendi Environnement), Bertrand Gontard (ingénieur civil des Mines), P.L. Girardot (Vivendi Environnement), Jean-Jacques Marcos (ingénieur informaticien), Dorothée Romain (docteur vétérinaire), Jean-François Saglio (ingénieur général des Mines) et Éric Schmieder (inspecteur général au Ministère de la Santé).

Références

[1] Pichat P., Les problèmes de l'eau, *L'Act. Chim.*, nov. **1976**, p. 18 et déc. **1976**, p. 17.
[2] *Le Grand Livre de l'Eau*, Manufacture et Cité des Sciences et de l'Industrie, Paris, **1990**.

Pour en savoir plus

- Decrosse A., *Toute l'eau du Monde*, Du May, **1990**.
- Ghislain de Marcilly, *L'eau*, Collection Domino, Flammarion, **1995**.
- Nowak F., *Le prix de l'eau*, Economica, **1995**.
- Pichat P., *La gestion des déchets*, collection Domino, Flammarion, **1995**.
- Girardot P.L., *Sur l'application du principe pollueur payeur*, 22 octobre **2001**.
- O'Neill G., The use of toxicology in the strategic planning and operational control of drinking water desinfection processes, *TSM*, *7-8*, juillet-août **1997**, p. 37.
- *L'Act. Chim.*, numéro spécial « l'Environnement », novembre **1999**.
- Postel S.L., Gretchen C., Ehrlich D.P.R., Human appropriation of renewable fresh water, *Science*, 9 février **1996**, vol. *271*, p. 785.
- Blanchy S. *et col.*, *Eau et Santé à Madagascar*, Journées de l'eau, 16-21 novembre **1992**.
- *Population et changement*, Environnemental Rapport **2001** du Fonds des Nations Unies pour la population (FNUAP).
- Sacher F., Lange F.T., Brauch H.J., Blankenhrorn I., Pharmaceuticals in groundwater. Analytical methods and results of a monitoring program in Baden, Wurtemberg, Germany, *J. Chromato. A*, Elsevier Science, **2001**, *938(1-2)*, p. 199.
- Paparacovan I., Waste water reuse in Limassol as an alternative water source. Severage orf of Limassol - Amathus,, Limassol, Cyprus 3608, *Desalination*, Elsevier Science, **2001**, *138(1-3)*, p. 55.
- *E. Coli* indicateur de contamination fécale détectée en deux heures, 14 janvier **2002**, http:/www.pasteur.fr/actu/presse/com/communiqué coli.html.
- Galuska C.M., Reel D.V., *Water reuse cooperation blooms in the desert*, Proceedings Annual Conference American Water Works Association, NV, États-Unis (computer optical disk 2001, 2192-2209).

Philippe Pichat
est attaché scientifique à la direction de SARP Industries*, filiale de Vivendi Environnement dans le traitement des déchets, expert agréé par la Cour de cassation, expert près la Cour administrative d'appel de Paris et membre du comité de rédaction de *L'Actualité Chimique*.

* Zone portuaire, 427 route du Hazay, 78520 Limay.
Tél. : 01 34 97 26 05/25 57. Fax : 01 34 97 26 06.

Production et distribution de l'instrumentation scientifique

Conséquences pour les acteurs et les partenaires

Patrick Arpino et Colin Droniou

Il est sans doute loin le temps où le chimiste concevait lui-même tous les appareillages nécessaires à ses expériences. Aujourd'hui, il est un consommateur d'équipements de plus en plus élaborés, qui non seulement soulagent son labeur des tâches les moins valorisantes, mais qui surtout améliorent la qualité de son travail. Les instruments étendent les doigts du chimiste bien au-delà de ses capacités visuelles et lui permettent de manipuler, identifier, doser, combiner les molécules avec une finesse qui s'améliore chaque année ; il suffit de constater les récentes avancées dans la qualité des équipements récents lors des grandes expositions scientifiques (Pittcon, Analytica, Achema, Forum Labo, Interchimie, Salon du Laboratoire...). Comme la plupart des grands secteurs industriels, celui de l'instrumentation scientifique – tant les fabricants des petits équipements de laboratoire que ceux des grands instruments (spectromètres de masse, RMN...) – a subi les profonds bouleversements de la mondialisation, occasionnant fusions, regroupements, disparitions d'entreprises, parfois centenaires. Les sites de productions, mais aussi les réseaux de commercialisation, de distribution de pièces détachées et les centres d'entretien ont été profondément modifiés au cours de la dernière décennie.

Ce sujet est-il étranger au monde académique ? Le chercheur est-il indifférent à ces bouleversements économiques, s'efforçant de s'équiper du meilleur appareil à son goût, au plus bas coût – les budgets d'équipement sont là pour le modérer – et susceptibles d'être utilisés longtemps (10 ans, voire 20 ans pour certains gros appareillages) ? Ce serait ne pas voir les transformations dans l'organisation des sites de recherche, ainsi que des modifications de leurs relations avec leurs fournisseurs. Passé la période autosuffisante évoquée en préambule, les centres universitaires se sont d'abord équipés d'ateliers techniques – soufflage du verre, ateliers de mécanique et d'électronique – situés au sein, ou proches de leurs bâtiments. A titre d'exemple, la Montagne Sainte-Geneviève à Paris fut longtemps un microcosme socio-économique instructif. A côté des centres de recherches prestigieux de l'École polytechnique, Normale Sup, Collège de France, etc., eux-mêmes disposant d'ateliers techniques performants capables de concevoir et réaliser des appareillages complexes, il se trouvait à proximité une multitude de petites entreprises et commerces – fournisseurs d'équipements, d'accessoires, de pièces détachées – qui vivaient en symbiose avec les équipes universitaires. Le chercheur n'avait en quittant son laboratoire qu'à traverser quelques rues, muni du bon de commande signé par son patron de laboratoire, pour obtenir les éléments nécessaires à son travail. Ce tissu s'est progressivement émietté au fil des récentes années, soit les entreprises sont sorties de Paris *intra muros*, soit elles ont disparu. Quelques-unes unes subsistent encore, reliques de cette période révolue, comme cet atelier de mécanique au milieu du boulevard Port-Royal.

Aujourd'hui, les écrans d'ordinateurs, les moyens de communication à distance avec les entreprises, les recherches bibliographiques et la fréquentation des expositions permettent de s'équiper sur le marché planétaire, non sans conséquences lorsque, à l'occasion de fusions ou d'acquisitions d'entreprises, des lignes de produits sont purement abandonnées, laissant les laboratoires avec des équipements récents mais plus susceptibles d'être entretenus. La complexité croissante des matériels et la réduction des équipes techniques propres aux laboratoires ont souvent pour conséquence qu'il ne devient plus possible de réparer ou modifier des équipements tombés en panne sans l'assistance des fabricants. Récemment, on a vu également se réduire le nombre de sites d'activités chez plusieurs constructeurs : réduction ou abandon des représentations régionales, puis nationales, pour ne maintenir que quelques centres importants recouvrant de larges secteurs géographiques.

Les échanges mutuels et valorisants qui ont longtemps prévalu entre fabricants d'appareillages et équipes universitaires sont un autre aspect du problème. Tant les universitaires, par les possibilités de bourses d'étude (BDI, contrats CIFRE, contrats de partenariat), que les entreprises de toutes tailles, en recrutant des personnels qualifiés et préalablement évalués au cours de leurs recherches en thèse, en valorisant des idées développées en milieu industriel, ont longtemps bénéficié de cette symbiose. Les évolutions actuelles du secteur de l'instrumentation ne peuvent pas rester sans conséquences sur ces relations dans le futur.

Devant des conséquences importantes prévisibles, la rédaction de *L'Actualité Chimique* a jugé utile d'engager une réflexion sur le sujet. Elle y fut initialement incitée par une lettre adressée cette année à la rédaction par Francis Pithon, pour lancer un cri d'alarme sur la situation de certains fabricants français d'équipements du laboratoire. Plutôt que de reproduire sa lettre, la rédaction a préféré missionner un de ses collaborateurs, Colin Droniou, pour interroger plus longuement Francis Pithon, et le compte-rendu de cette rencontre est publié ci-après. Au cours des prochains mois nous irons également rechercher les avis d'autres acteurs concernés par ces questions, et dont les opinions peuvent être différentes. Les réactions des lecteurs de *L'Actualité Chimique* sont également vivement encouragées !

Interview de Francis Pithon, ex-président de Fabrilabo : « L'Europe, la solution pour les fabricants d'appareils » !

Francis Pitho, ex-président de Fabrilabo.

Les besoins français dans le domaine de l'appareillage de laboratoire et des produits consommables ne représentent, avec un milliard d'euros, qu'environ 5 % des besoins mondiaux. Dans l'Hexagone, les laboratoires achètent 80 % de leur matériel à l'étranger. Francis Pithon, ex-président de Fabrilabo, le syndicat professionnel des fabricants et négociants de matériel de laboratoire, pose un regard critique mais en connaisseur sur le secteur. Pour lui, le problème n'est pas propre au domaine de la recherche, mais résulte essentiellement de relations « franco-françaises » entre chercheurs et industriels. La solution passe par une harmonisation à l'échelle européenne.

Comment se positionnent dans le monde les fabricants français d'appareils de laboratoire ?

Il est évident que la France ne pèse pas bien lourd dans le secteur. Un classement fait apparaître les différentes entreprises en fonction de leur chiffre d'affaires (voir *tableau*). Le premier industriel français, Jouan, ne se classe qu'en 72e position, tandis que les 7 premières places sont occupées par des Américains. Agilent, le premier de ce classement produit autant que ce que la France consomme.

Quelles sont les raisons de cette situation difficile chez nos industriels ?

Chez nous, le contexte n'est pas favorable à l'industrialisation. En France, il manque un maillon dans les relations entre recherche et production. Mais ce souci ne nous est pas propre. Malgré nos scientifiques de qualité, nous ne savons pas (ou ne voulons pas) valoriser le produit de nos travaux par l'industrialisation. Ce fait est encore plus marqué dans le cadre du transfert d'un centre de recherche public vers une PME. Ce qui explique que beaucoup de sociétés se créent puis disparaissent très rapidement. Ceci conjugué au manque d'animation des pouvoirs publics entraîne la situation actuelle. Mais un rebond rapide est possible. Pour cela, il faut prendre conscience du problème au niveau européen et se structurer à cette échelle. Aussi paradoxal que cela puisse paraître, un tel aménagement serait moins lourd qu'une organisation nationale *stricto sensu* car la politique d'animation européenne est cohérente. Le marché européen est un espace économique viable alors que le marché « local » français ne l'est plus, ce qui a mis en difficulté quelques PME.

Comment font donc les autres pays pour s'en sortir ?

Il y a d'abord des pays, comme les États-Unis ou le Japon, très forts en instrumentation avec un marché intérieur important. D'autres choisissent de se spécialiser sur un créneau très pointu. C'est typiquement le cas des Pays-Bas, tirés par Philips, l'entreprise nationale phare. Enfin, de nouveaux pays apparaissent dans le secteur grâce à une très forte politique volontariste tournée exclusivement vers l'exportation, les marchés intérieurs ne suffisant pas. C'est ce qui se passe en Italie, en Espagne ou au Danemark, pour ne citer qu'eux.

Quelle est l'importance de cette problématique dans le microcosme scientifique français ?

Je suis persuadé qu'au même titre qu'un pays doit faire de la recherche, il est nécessaire que celle-ci participe au développement de ses propres outils avec les industriels, chargés de la promotion dans le monde entier. Cette collaboration est la clé du succès, et pour la recherche, et pour l'industrie.

Au cours des siècles précédents, ces deux fonctions étaient assurées par la même personne, et la mise au point de son outil était la première tâche du chercheur. Nous avons ensuite assisté à de nombreuses collaborations : la société

Classement des fabricants de matériel de laboratoire (publié sur www.instrumenta.com).

Nom	Rang	Nationalité	Chiffre d'affaires (dollars)
Entreprises mondiales			
Agilent	1	USA	> 1 milliard
Applied Biosystems Group	2	USA	> 1 milliard
Thermo electron	3	USA	> 1 milliard
Amersham Biosciences	4	USA	900 millions - 1 milliard
PerkinElmer	5	USA	900 millions - 1 milliard
Waters	6	USA	800 - 900 millions
Millipore	7	USA	600 - 700 millions
Shimadzu	8	JAP	600 - 700 millions
Invitrogen	9	USA	600 - 700 millions
Apogent	10	USA	500 - 600 millions
Entreprises européennes			
Mettler-Toledo	13	CH	400 - 500 millions
Sartorius	18	ALL	300 - 400 millions
ABB Analytical	21	CH	200 - 300 millions
Eppendorf	25	ALL	200 - 300 millions
Qiagen	29	NL	200 - 300 millions
Foss	40	DK	150 - 200 millions
Philips Analytical	43	NL	150 - 200 millions
FEI	49	NL	100 - 150 millions
Inficon	51	CH	100 - 150 millions
Oxford Instruments Analytical	54	UK	100 - 150 millions
Entreprises françaises			
Jouan	72	FRA	60 - 80 millions
Duckert/Roucaire and T&M	124	FRA	30 - 40 millions
Lancer	130	FRA	30 - 40 millions

SETARAM a développé les microcalorimètres mis au point par Tian Calvet. Tacussel a construit le Biopulse avec F. Gonon et l'équipe du professeur Jouvet pour la mesure *in vivo* de certains neurotransmetteurs. Et il existe encore de nombreux exemples de synergies entre la recherche publique et des industriels.
Mais la situation aujourd'hui est très différente. D'abord parce que « l'énergie d'activation » nécessaire pour lancer un nouvel instrument est 100 fois plus importante qu'il y a 30 ans. Ensuite, un certain nombre de chercheurs pensent que seul compte le coût d'un appareil, mais avec cette logique on en arrivera bientôt à sous-traiter la recherche à l'étranger pour réaliser des bénéfices. Ma remarque est sans doute provocatrice mais elle présente l'avantage de défendre un tissu de PME/PMI recensant environ 10 000 personnes.
Le nouveau contexte international demande une autre pratique de la part des différents acteurs si l'on veut réussir à faire entendre la voix des PME/PMI...

Dans ce contexte, quel est le rôle de Fabrilabo ?
Fabrilabo est un syndicat professionnel qui se charge de représenter les entreprises qui fabriquent en France, et d'en défendre leurs intérêts. C'est un peu le « à plusieurs, on est plus forts » ! Ce n'est pas du « lobbying », en terme péjoratif, mais une force de proposition auprès des pouvoirs publics pour présenter les besoins de cette industrie. Nous participons aux travaux de normalisation, comme ceux concernant en ce moment la norme européenne CEN332 qui vise les appareils de laboratoire. Nous assurons aussi la présidence du groupe AFNOR sur les « mesures en continu pour l'eau » afin de défendre les intérêts des partenaires français dans le cadre de travail du comité ISO/TC 147. Dans le domaine des normes, nous sommes souvent en « conflit » avec les Américains qui défendent les leurs, et cherchent à transformer les normes ASTM en ISO. Les enjeux économiques de ces sujets sont importants pour notre industrie car ils concernent le contrôle de qualité des produits qui sont fabriqués chez nous. Nous avons vu que la maîtrise des outils de recherche a des conséquences sur celle-ci. La maîtrise des normes et des outils de mesures est un enjeu pour la distribution des produits. D'où l'importance de notre implication dans la normalisation.
Nous intervenons aussi activement dans l'animation de l'association européenne des fabricants d'appareils de laboratoire EUROM II.

Comment vous situez-vous par rapport aux autres organismes professionnels de votre domaine ?
Il y en a deux en France : Fabrilabo et le CIFL. Nous avons des points communs comme la distribution de nos produits en France. En revanche, nous avons des sensibilités différentes au sujet de la promotion hors de France. Par exemple, nous souhaiterions des actions de marketing actives à l'étranger pour promouvoir nos produits et un salon en France qui attire les étrangers. Nous avons tout intérêt à faire venir les clients étrangers à Paris ; car les décider à venir en France c'est déjà un premier pas vers l'acquisition de technologie « made in France ». C'est bien connu, « on est toujours meilleur quand on joue à domicile » !
Un salon doit tout faire pour attirer les industriels étrangers sur notre sol pour assurer ensuite la promotion des sciences et technologies françaises. Nous avons l'exemple de ce qui se pratique outre-Rhin, où les salons organisent même des manifestations à l'étranger mais financées par les Allemands. C'est le cas d'Achemamerica, Analytica China, Analytica India et d'autres encore.
De plus, chaque exposant et visiteur d'Achema (salon allemand) contribue à la recherche grâce au prix du billet d'entrée et aux m^2 d'exposition qu'il paye (à hauteur de 6,5 €/m^2). Les Allemands ont parfaitement compris les synergies qui existent entre recherche, technologie, commercial et salons.

Les importations sont malheureusement trop nombreuses. Qu'en est-il des exportations ?
Les chiffres ne sont pas aussi mauvais que pour les importations puisqu'on exporte 50 % de notre production, ce qui n'est pas si mal. Pour avoir un standing de niveau mondial, on devrait cependant tourner autour de 80 %. Néanmoins, on vend aussi à des pays chez qui nous sommes également acheteurs. Concernant les États-Unis, nous importons l'équivalent de 200 millions d'euros et nos exportations en retour se montent à environ 50 millions d'euros. Il est à noter que la situation n'est pas homogène. Certains de nos membres se concentrent essentiellement sur les ventes à l'étranger.

Comment assurez-vous la promotion des produits français à l'étranger ?
Nous organisons beaucoup de salons et de conférences à l'étranger ; moi-même, je me considère un peu, sans prétention aucune, comme « l'ambassadeur de la technologie et de la recherche française » ! Mais nous souffrons beaucoup de notre « image », telle que je la définissais précédemment, même si ce phénomène à tendance à se résorber depuis 10 ans. On nous reproche toujours de parfaitement conceptualiser les inventions, mais de manquer le passage à la réalisation. Comme le déclarait le Général de Gaulle en campagne : « *De toute façon, l'intendance suivra...* ». Cette image résume bien la situation. Or pour être présent dans le reste du monde, nous avons besoin d'une infrastructure collective pour aider nos PME dans ce secteur.

Quelles sont les particularités, bonnes ou mauvaises, de nos produits ?
Dans certains secteurs, les entreprises françaises ont complètement disparu. De façon générale, notre offre n'est pas complète et suffisante. Par exemple, en vue des tests antidopage qui auront lieu aux JO de Pékin, Agilent a décroché un gros contrat. Ils sont en effet en mesure de fournir à ces laboratoires tout le matériel nécessaire, de la plus petite éprouvette jusqu'au plus gros appareil de mesure. Nous n'en sommes pas capables. Comme en plus nous ne développons pas assez les applications, nous n'avons pas de grands projets nationaux en instrumentation. Procédé qui permettrait d'insuffler un nouvel élan, comme c'est le cas pour la lutte antiterroriste de l'autre côté de l'Atlantique...
Cependant, il ne faut pas noircir le tableau. Nos produits sont de qualité et à un bon rapport qualité/prix, et jouissent d'une bonne image chez leurs utilisateurs.

Quels sont justement les rapports entre fournisseurs et utilisateurs ?
De plus en plus, la responsabilité se déplace sur le constructeur. Avant, l'acheteur prenait possession de son appareil et c'était à lui d'en optimiser les capacités et de développer les applications. Maintenant, il faut fournir du

« prêt à un emploi déterminé ». On appuie sur une commande, l'appareil se met en marche et donne directement le résultat. Certaines entreprises développent des « hotline », serveurs en ligne qui se chargent de répondre aux questions des clients dans tous les domaines. Ce service peut être facturé. Le système des contrats-maintenance est aussi au goût du jour. L'appareil est vendu avec son application et sa maintenance. Le prix est global et il n'est plus possible de distinguer le matériel du service.
Cette partie de notre profession devient de plus en plus importante et c'est aussi un facteur de différentiation.

Quels sont vos souhaits pour le futur ?
Il faut d'abord, je le répète, une assise européenne. Avec un support politique, je suis persuadé qu'une telle action porterait des fruits rapidement.
Je souhaite aussi ardemment que nous, c'est-à-dire constructeurs, chercheurs et pouvoirs politiques, développions notre capacité à maîtriser les outils de recherche et du contrôle de qualité.
Il serait bon de s'inspirer de ce qui se fait à l'étranger. Aux États-Unis bien sûr, qui, on l'a vu, sont puissants et imposent leurs normes via leurs programmes ambitieux. Les autres exemples à suivre sont ceux des Allemands qui utilisent le levier des salons pour pousser leur instrumentation, et des Espagnols qui se donnent le droit de subventionner les associations de constructeurs pour l'export.
Finissons en avec cette culture française de compétition et de sélection par les concours qui a tendance à stériliser la créativité !

Je souhaite que mon point de vue d'ex-président de Fabrilabo, mais aussi d'industriel et de membre actif de la partie électrochimie de la division Chimie analytique de la SFC, suscite des réactions, quelles qu'elles soient, parmi les lecteurs de *L'Actualité Chimique*. Le mieux serait que, via vos colonnes, un débat constructif s'installe autour de cette question !

P. Arpino

C. Droniou

Patrick Arpino
ENSCP, est président de la division Chimie analytique de la SFC et membre du comité de rédaction de *L'Actualité Chimique**.

Colin Droniou
est journaliste stagiaire à *L'Actualité Chimique**.

* 250 rue Saint-Jacques, 75005 Paris.
E-mails : p.arpino@sfc.fr
droniou@edspciences.org

Information aux annonceurs

L'ACTUALITÉ CHIMIQUE est lue chaque mois par plus de 20 000 chimistes (étudiants, enseignants, ingénieurs et cadres du secteur public et de l'industrie, dirigeants d'entreprise...)

PROFITEZ DE CE LECTORAT CIBLÉ ET DE QUALITÉ POUR PUBLIER VOS ANNONCES

EDP SCIENCES

CONTACT PUBLICITAIRE :
Céline HOARAU
Tél. : 01.69.18.75.75
hoarau@edpsciences.org

EDP Sciences
Z.A. de Courtabœuf
17, avenue du Hoggar - BP 112
91944 LES ULIS Cedex A
Fax : 01.69.86.07.65
www.edpsciences.org

Alkylation réductrice d'un aminoacide

Jean-Christophe Hannachi

Summary **Reductive alkylation of an amino acid**
This paper deals with the synthesis of a secondary amine from L-valine, using a reductive alkylation. After obtention of an imine, and reduction with sodium borohydride, the L-N-benzylvaline is purified by crystallization. This experiment allows to talk about important subjects with students, as racemization or purification of a pure enantiomer.

Mots-clés **Alkylation réductrice, aminoacide, protection, composé énantiopur.**
Key-words **Reductive alkylation, amino acid, protection, enantiopur compound.**

Cette manipulation de chimie organique s'adresse à des étudiants en 2e année de classes préparatoires aux grandes écoles (filière physique-chimie). Du point de vue expérimental, elle utilise des montages classiques de chimie organique et met particulièrement en avant la technique de purification par recristallisation. En effet, le produit de départ utilisé est un L-aminoacide qui doit conduire à un composé optiquement pur. Cette expérience soulève le problème, très actuel, de l'obtention des molécules chirales et de l'éventuelle racémisation lors d'une réaction. Elle permet ainsi de discuter certaines notions, comme l'estimation d'un excès énantiomérique par mesure du pouvoir rotatoire, ou des méthodes à la disposition des chimistes pour extraire un composé optiquement pur d'un mélange, plus ou moins enrichi, de deux énantiomères ; ceci passe généralement par une recristallisation. Le temps de manipulation n'est pas très long mais avec les compléments, la séance peut durer 4 heures et illustrer de nombreux points relatifs au programme de cette classe. Les élèves parviennent sans difficulté à réussir cette synthèse peu capricieuse ; le produit se présente après purification sous la forme de belles paillettes brillantes.

Présentation de la réaction

La réaction étudiée permet de transformer une amine primaire, ici la L-valine, en L-N-benzylvaline **1**. Le protocole utilisé a été établi très récemment [1], suite à des travaux sur la synthèse de dérivés hydrazinés d'aminoacides [2]. Le groupe benzyle ajouté sur l'aminoacide permet de protéger la fonction amine vis-à-vis de certains réactifs (par exemple, contre la condensation avec un aldéhyde pour conduire à une imine), il pourra être retiré par hydrogénolyse sur palladium. Quitt a pour la première fois effectué une benzylation de L-aminoacide par alkylation réductrice [3]. Le protocole présenté ici s'inspire de sa méthode, mais il présente plusieurs avantages dont surtout une grande tolérance quant aux fonctions éventuellement portées par la chaîne latérale de l'aminoacide [1].

La réaction passe par l'obtention d'une imine intermédiaire **2**, qui est ensuite réduite par le borohydrure de sodium. On effectue alors une hydrolyse acide, le produit **1** précipite (*schéma 1*). La purification se fait par recristallisation dans un mélange eau/acide acétique.

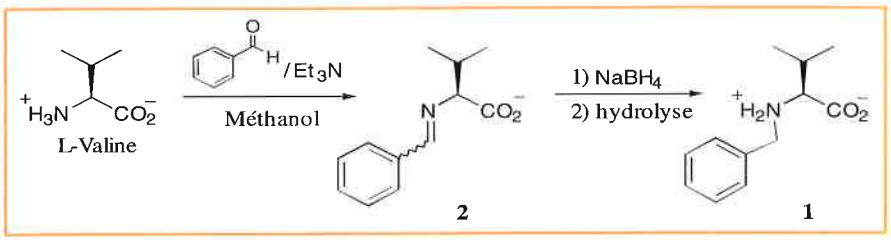


Schéma 1.

Mode opératoire

Pour réaliser cette expérience en TP, si on ne dispose pas de hottes, il faut surtout faire attention lors de la manipulation de la triéthylamine en raison de son odeur très désagréable. J'utilisais pour ma part un seul poste de prélèvement dans un lieu sûr, les erlenmeyers étant ensuite bouchés. Certains composés sont toxiques et dangereux (méthanol, borohydrure de sodium, acide acétique), mais leur manipulation ne présente pas de difficultés particulières. Les réactifs utilisés sont commerciaux (aucune purification supplémentaire n'est nécessaire) et ce TP est peu onéreux vu les quantités engagées.

Synthèse de 1

Dans un erlenmeyer rodé de 100 mL muni d'un barreau aimanté, peser 590 mg de L-Valine (5,0 mmol), ajouter 10 mL de méthanol puis 0,75 mL de benzaldéhyde (7,3 mmol). Sous une hotte bien ventilée, ajouter 1 mL de triéthylamine (7,1 mmol), puis boucher l'erlenmeyer. Laisser réagir sous vive agitation à température ambiante ; le solide disparaît progressivement et au bout de 30 minutes, la solution est limpide. Refroidir alors le mélange réactionnel à 0 °C et ajouter en cinq minutes 235 mg de borohydrure de sodium

(6,2 mmol) ; laisser réagir 30 minutes toujours à 0 °C (du fait du dégagement gazeux, on prendra la précaution de ne pas boucher l'erlenmeyer).
L'hydrolyse acide se fait en utilisant 30 mL d'une solution aqueuse glacée d'acide acétique à 10 % (en volume), l'ajout se fera lentement à 0 °C. A la fin de l'hydrolyse, contrôler le pH du milieu réactionnel à l'aide de papier pH (on doit avoir une valeur proche de 5). Le produit qui a précipité est ensuite filtré sous vide puis lavé abondamment à l'eau ; on obtient un solide blanc.

Purification

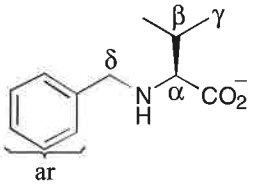
Le composé **1** est purifié par recristallisation. Disposer celui-ci dans un ballon de 100 mL et ajouter 30 mL d'eau. Munissez le tout d'un réfrigérant à eau et porter le mélange à reflux. Ajouter, par le haut du réfrigérant, de l'acide acétique pur par petites portions jusqu'à ce que le milieu devienne limpide à reflux (ceci nécessite une dizaine de mL d'acide acétique). Ramener la solution à température ambiante, des cristaux apparaissent (il est parfois nécessaire de gratter légèrement avec une tige en verre). Après filtration sous vide et lavage à l'eau, on récupère 540 mg de L-N-benzylvaline **1** ; il se présente sous la forme de belles paillettes brillantes. Rendement : 52 %.

Caractérisation

Sur banc Kofler, le produit se sublime vers 250-255 °C.
Pouvoir rotatoire :

$[\alpha]_D^{25} = +18{,}4$ (c = 1,5 ; HCL 6 mol/L)

RMN (D_2O + NaOH), spectromètre à 200,13 MHz :
δ : 0,69 (d, J = 7 Hz, $3H^{\gamma}$) ; 0,73 (d, J = 7 Hz, $3H^{\gamma}$) ; 1,63 (m, $1H^{\beta}$) ; 2,67 (d, J = 5,5 Hz, $1H^{\alpha}$) ; 3,35 et 3,59 (système AB, J = 12,5 Hz, $2H^{\delta}$) ; 7,15-7,22 (m, $5H^{ar}$)



Discussion

Cette alkylation réductrice est un point de départ possible pour aborder avec les élèves différentes notions relatives au programme des classes préparatoires option physique-chimie. Sur la transformation effectuée, on constate que la stratégie employée garantit la fixation d'un seul groupement benzyle sur l'amine. Une méthode concurrente, plus simple, consisterait à utiliser du bromure de benzyle en milieu carbonate. Mais, en plus de **1**, on obtiendrait inévitablement d'autres produits (par exemple la N,N-dibenzylvaline) du fait d'alkylations successives. Ainsi, le problème de la polyalkylation des amines, développé en cours, reçoit ici une solution expérimentale simple.
D'autre part, par le biais de la réduction de **2**, on peut introduire la fonction imine et insister sur le parallèle étroit qui existe entre les fonctions C=O et C=N–. On voit ici que $NaBH_4$, qui parvient à transformer les aldéhydes et les cétones en alcool, effectue une transformation similaire sur l'analogue azoté. En utilisant des arguments connus des élèves, le mécanisme d'une telle transformation peut même être abordé.
La synthèse de l'imine est aussi intéressante car elle fait appel à des notions de chimie des solutions et de thermodynamique. En effet, on peut résumer le mécanisme d'obtention de **2** par le *schéma 2*.

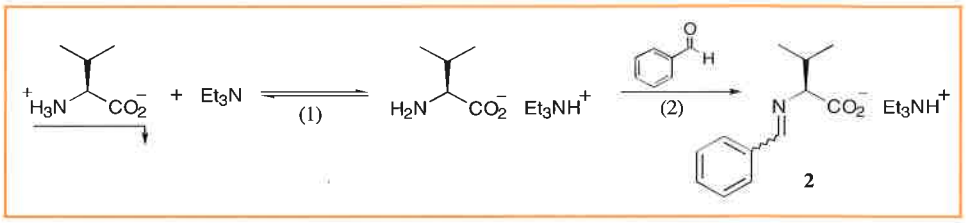


Schéma 2.

Au départ, la valine n'est pas bien soluble dans le méthanol. Une partie du composé est toutefois solubilisée suivant l'équilibre (1), équilibre acido-basique peu déplacé. La fraction d'aminoacide qui passe en solution réagit selon (2) pour conduire à l'imine (conjuguée donc particulièrement stable), ce qui déplace l'équilibre (1). Ceci s'observe aisément lors de la manipulation, la valine solide disparaît peu à peu. L'équilibre (1) faisant intervenir un solide, on comprend qu'une agitation vigoureuse favorise la réaction.
Le *schéma 2* permet également de justifier le choix de la triéthylamine comme réactif. D'abord, c'est une excellente base organique, très accessible et peu onéreuse. Mais aussi, elle constitue sous forme de triéthylammonium un contre ion relativement lipophile qui va permettre à la valine déprotonée de passer en milieu organique alors qu'elle est anionique. L'utilisation de triéthylamine en TP présente l'avantage de montrer à la paillasse un réactif qui intervient souvent dans les cours magistraux. L'illustration la plus connue des élèves est son utilisation pour piéger l'acide chlorhydrique résultant de l'action d'un chlorure d'acyle sur une amine (non tertiaire !).

Questions

De nombreuses questions découlent directement de la discussion ci-dessus, au niveau du problème de la monoalkylation des amines, du rôle de la triéthylamine, de la disparition progressive de la valine et du mécanisme d'action de $NaBH_4$ sur une imine. Il est également possible d'aborder beaucoup de questions acido-basiques sur les aminoacides, et en particulier le lien entre le pH du milieu et leur forme prédominante.
Sur le détail, on peut ajouter :
- Peut-on remplacer la triéthylamine par de la soude ?
- Lors de l'ajout de $NaBH_4$, quel est le gaz qui se dégage ?
- Aurait-on pu utiliser $LiAlH_4$?
- Qu'est devenu le benzaldéhyde en excès ?
- Quelle est l'impureté la plus probable qu'on retire lors de la recristallisation ?
- Évaluer le pH après hydrolyse à l'acide acétique. Justifier alors le choix de ce réactif.
- Quel est le rôle de l'acide acétique lors de la recristallisation ?

Voire un petit exercice :

• On dissout 10,0 mg de N-benzylvaline dans 2 mL d'acide chlorhydrique 6 mol.L^{-1}. Le pouvoir rotatoire mesuré sur une cuve de 10 cm (à 25 °C, sur la raie D du sodium) vaut α = 0,093 °. Le produit est-il optiquement pur ? Quelle aurait été la proportion de chaque énantiomère si on avait trouvé, dans les mêmes conditions, un pouvoir rotatoire deux fois plus petit ? Quel aurait été alors l'excès énantiomérique ?

Pour aller plus loin

D'autres problèmes, plus difficiles, peuvent apparaître lors de l'étude de cette réaction. Au niveau du spectre RMN, on constate que les groupes méthyle de la valine n'ont pas le même déplacement chimique, ce qui peut surprendre un élève. En réalité, on voit ici un effet de la diastéréotopie des méthyles qui ne sont plus équivalents : ils donnent deux doublets distincts liés au couplage $^3J_{\beta\gamma}$. L'analyse du $-CH_2-$ du groupe benzyle est plus complexe encore mais passe par le même type d'argument.

Du point de vue synthétique, cette alkylation réductrice peut conduire à une racémisation (partielle) du centre asymétrique. La réaction nécessitant un milieu basique, on peut imaginer un mécanisme qui passerait par la déprotonation du carbone en α pour conduire à la perte de l'information stéréochimique. Le *schéma 3* présente l'exemple sur la L-valine.

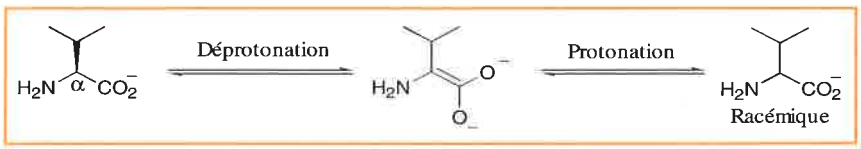


Schéma 3.

Dans notre cas, ce phénomène reste limité car les hydrogènes en α d'un carboxylate sont peu acides. Mais il n'en serait pas de même avec d'autres espèces, par exemple un dipeptide, où la racémisation pourrait alors devenir importante si l'on ne prenait pas de précautions particulières. Pour limiter cette évolution indésirable, la réaction se fait dans un milieu modérément basique, contrôlé par le couple $^+HNEt_3/NEt_3$.

Si toutefois la réaction conduit à la N-benzylvaline partiellement racémisée, le dernier point à aborder est l'obtention du composé optiquement pur à partir du mélange. Les diagrammes binaires solide-liquide de deux énantiomères (E_1 et E_2) présentent l'avantage d'être simples car symétriques. Deux situations principales existent, plus ou moins favorables au chimiste. E_1 et E_2 peuvent donner uniquement des phases solides pures, on parle alors de *conglomérat* (diagramme avec un eutectique central). La purification est alors aisée car on pourra cristalliser un seul énantiomère et laisser le racémique dans les eaux mères. Malheureusement, le cas le plus fréquent est l'existence en phase solide d'un composé défini (E_1,E_2), il s'agit d'un *racémique vrai*. Le résultat d'une recristallisation sera fonction de l'excès énantiomérique du mélange à purifier mais aussi de la position des fractions molaires des points eutectiques. Ainsi, un mélange peu enrichi optiquement aura toutes les chances de cristalliser le composé défini (donc un solide racémique), les eaux mères ne pourront pas dépasser en pureté la composition de l'eutectique.

Conclusion

L'alkylation réductrice des amines permet de résoudre de façon élégante le problème de la polyalkylation des amines. Elle intervient de plus en plus fréquemment en chimie, avec des adaptations selon le substrat sur lequel on travaille (utilisation de $NaBH_3CN$...). Un signe de ce succès est l'apparition de cette réaction dans une épreuve récente de concours [4]. Ce TP permet d'aborder cette transformation en la reliant, par de nombreux aspects, aux connaissances des élèves. Il peut également servir de point de départ pour discuter des difficultés rencontrées dans la synthèse de composés optiquement purs, contrainte actuellement incontournable en pharmacologie.

Notes et références

[1] Hannachi J.-C., thèse de doctorat, École normale supérieure de Lyon, **1999**.
[2] Vidal J., Damestoy S., Guy L., Hannachi J.-C., Aubry A., *Chem Eur. J.*, **1997**, *3*, p. 1691.
[3] Quitt P., Hellerbach J., Vogler K., *Helv. Chim. Acta*, **1963**, *32*, p. 327.
[4] École normale supérieure de Cachan, session 2000, option PC, 2e problème de l'épreuve de chimie.

Jean-Christophe Hannachi
est professeur de chimie en PC au Lycée Gay-Lussac de Limoges*.

* 12 boulevard Georges Périn, 87000 Limoges.
E-mail : jean-christophe.hannachi@mageos.com

La science sur la bonne longueur d'onde

Colin Droniou

Si les livres sont souvent représentés comme d'indispensables et poussiéreux accessoires appartenant à de respectables chercheurs en blouses et barbes blanches, les ondes, au contraire, ont une image plus « tendance » et sont susceptibles de toucher un public plus large. Comme tous les moyens sont bons pour parler des sciences, les radios ont développé des émissions attrayantes pour tous types d'auditeurs, de l'enfant curieux au chercheur éclairé, en passant par le novice béat. Vous trouverez ici un petit tour d'horizon de ce que l'on peut trouver sur les différentes fréquences.

France Culture

Depuis la rentrée de septembre, la programmation scientifique de France Culture a été considérablement modifiée. Les deux émissions qui existaient jusqu'à présent ont soudainement laissé la place à une émission hebdomadaire animée par Stéphane Deligeorges le jeudi matin, entre 9 h 05 et 10 h 30. Le présentateur et son équipe articulent leur émission autour de trois thèmes : des portraits de grands scientifiques qui ont marqué ou marquent notre temps, une rubrique sur l'histoire des sciences et une partie concernant l'actualité scientifique de la semaine.
A l'heure où nous imprimons la revue, nous ne disposons pas de plus d'informations. Pour que vous puissiez vous faire une idée de l'esprit et de l'ambiance qui y régnaient, nous avons tenu à vous présenter les deux émissions précédentes.

« Continent sciences »

Stéphane Deligeorges vous accueillait tous les jeudis matin pendant 55 minutes en compagnie de son invité. Cette émission, créée en septembre 1999, s'adressait aux adultes et aux étudiants, mais nécessitait un certain niveau scientifique.
Un expert était invité par l'animateur pour éclairer les auditeurs sur un point scientifique précis. L'émission était organisée en 3 blocs de difficulté croissante, l'ensemble restant cependant accessible à tous, d'autant plus que les experts en question rendaient l'émission captivante.
Un des objectifs consistait à laisser tous les domaines scientifiques s'exprimer, même si, comme le déplore S. Deligeorges, « *la chimie n'est pas aujourd'hui sur le devant de la scène* ». Cependant, comme les sujets choisis ne l'étaient pas en fonction de l'actualité chaude, les sciences de la matière pourraient se voir accorder une part plus importante dans sa nouvelle émission. Quant aux participants, il s'agissait le plus souvent de jeunes chercheurs peu connus, issus du secteur public, qui profitaient par exemple de la sortie de leur ouvrage pour faire parler d'eux et de leur discipline, tout en développant parfois des thèses personnelles. L'important étant, pour S. Deligeorges, de « respecter le jeu du dialogue ». Par sa connaissance pointue du domaine, le chercheur apportait toute sa crédibilité à une émission tournée vers les applications scientifiques.
Cette fonction d'animateur représentait beaucoup de travail de compréhension de la part du journaliste qui, après avoir longtemps étudié la philosophie des sciences, a dû se former « sur le tas ». Grâce au climat de confiance rapidement établi, les nombreux experts qui sont passés dans le studio ont été heureux de faire partager le fruit de leurs recherches, et l'animateur qui profitait de sa préparation en amont (lectures d'articles, visites de laboratoires, rendez-vous multiples) avoue avoir profité de ces multiples entretiens pour satisfaire sa curiosité et approfondir des sujets passionnants.

« In vivo »

Créée en 1999 par Jean-Didier Vincent, cette émission en direct occupait les ondes pendant 55 minutes également, le mardi soir cette fois-ci. Depuis septembre 2001, Lucy Kukstas avait « repris le flambeau ». Afin de ne pas égarer ses auditeurs, l'animatrice respectait une organisation quasi immuable. Chaque semaine, elle articulait son intervention autour de 4 rubriques, en fonction de l'actualité scientifique du moment. Cette émission, destinée à un public averti comme le sont généralement les auditeurs de France Culture, proposait des sujets de culture scientifique : « *La science est quelque chose de complexe et nécessite des bases. On ne peut pas transmettre des connaissances en 5 minutes, mais on peut expliquer l'importance des résultats* », explique L. Kukstas.

Lucy Kukstas, l'œil aiguisé, « cuisine » son invité.

Pendant 20 à 25 minutes, lors de la rubrique « Tendances », l'animatrice développait les dernières théories et présentait les différentes analyses qui font leur chemin dans ce milieu

hermétique pour le grand public. Puis, pendant environ 15 minutes, les experts scientifiques choisis par l'équipe faisaient le point sur l'actualité chaude de la semaine, sans oublier de présenter les colloques et autres expositions à venir. Suivait une revue de presse des revues scientifiques d'une dizaine de minutes. Lors de la dernière rubrique, L. Kukstas faisait une critique constructive d'un site Internet scientifique. Ainsi, une soirée ne se limitait pas à l'exploration d'un seul domaine.
Chaque semaine, 4 à 5 personnes, dont 2 ou 3 invités, s'asseyaient autour de la table. Pour la majorité d'entre eux, c'étaient des chercheurs issus des grands organismes tels que le CNRS, l'INRA ou des académiciens et le plus souvent, ces participants étaient ravis d'être reçus à une telle émission. Même si la chimie, jugée trop « théorique » et « sans intérêt immédiat », n'était pas toujours très présente, l'animatrice nous avait promis de combler ses lacunes.
Si l'émission a pu parfois paraître « hermétique », c'est qu'un des objectifs premier de l'émission était de « parler de la science comme en parlent les scientifiques ». Mais L. Kukstas a fait des efforts démesurés pour produire une émission plus ouverte, abordable et intéressante. « *Bien qu'au début, on devait « parler science entre scientifiques », ce n'est plus le cas, et c'est pour cette raison que l'on fait venir des journalistes.* »
Rien de plus facile que de parler sciences pour l'animatrice qui est docteur en neurologie. Avec son délicieux accent britannique trahissant ses origines, elle a travaillé un an à l'Institut Pasteur puis pour des laboratoires pharmaceutiques avant de réaliser son rêve. Elle confesse même qu'elle voulait « *absolument intégrer la rédaction, car elle adore la radio* ». Bernard Sillion, qui a participé à l'émission du 18 juin dernier, en qualité de rédacteur en chef de *L'Actualité Chimique*, mais aussi d'expert sur les polymères, a pu lui aussi s'en rendre compte. Quant à Lucy Kuktas, elle a tenu parole !

France Info

« Info sciences »

Marie-Odile Monchicourt, prête à « entrer en scène ».

Sur 105.5, la science, c'est Marie-Odile Monchicourt et réciproquement. Au quotidien, et plusieurs fois par jour, elle bénéficie d'une minute et cinquante secondes pour présenter sa chronique. L'animatrice rend compte d'une actualité scientifique ou renseigne ses auditeurs sur l'état des recherches dans un domaine précis. Dans le jargon, il s'agit d'informations « chaudes ».
Tout comme les flashs d'information générale, cette chronique existe depuis les débuts de la radio, et cette responsable « fétiche » en a toujours eu la charge. Pour plaire à un public particulier, composé essentiellement de « décideurs et d'automobilistes », elle a adapté le niveau de l'émission : « *Même si la chronique est connue dans le milieu scientifique, les auditeurs ne sont pas uniquement des chercheurs* », souligne-t-elle. Cela nécessite donc de rendre « accessible » à tous le contenu des flashs.
« MOM » est « totalement indépendante » de la rédaction dans le choix de ses thématiques, mais celles-ci restent proches de l'actualité. Aux dires mêmes de l'animatrice, cette émission doit servir de « vecteur » entre le chercheur et le public, car elle est faite à la fois pour promouvoir leurs travaux et pour sensibiliser le public aux problématiques sous-jacentes.
Après s'être aidée de son « invité » pour donner du « punch » et du « réalisme » au montage de la chronique, celle-ci est validée par la rédaction. Aujourd'hui, M.-O. Monchicourt reconnaît que la chimie est bien plus présente qu'elle ne l'a été jusque-là, car elle sensibilise les auditeurs à des problèmes d'environnement ou de pollution par exemple : « *C'est l'image même de la chimie qui a changé, car elle permet d'expliquer et de comprendre des phénomènes et n'est plus systématiquement montrée du doigt à la moindre catastrophe écologique* ».

« Profession chercheur »

Pendant le week-end, Marie-Odile Monchicourt est créditée de deux minutes et vingt secondes pour présenter cette deuxième émission scientifique. Le format est différent, le contenu aussi. Il s'agit là de s'intéresser de près à un chercheur et de faire le portrait de son activité. Initiée il y a 5 ans par Pascal Delannoy, la journaliste scientifique de France Info a aujourd'hui pris le relais et présente ces courtes interviews.
Après avoir obtenu l'accord du chercheur, l'animatrice le sollicite pour préparer son émission et lui soumet les questions qu'elle souhaite lui poser. L'objectif est double. Le spécialiste a du temps pour affiner et rendre ses réponses pertinentes, et M-O. Monchicourt peut se faire expliquer précisément les différentes nuances. Tout le monde y gagne donc. Pour cette présentatrice éclairée, il n'y a jamais eu « de problème » avec les scientifiques : « *En général, les chercheurs sont de grands sensibles qui sont contents de faire parler d'eux et que l'on s'intéresse à eux* ». D'autant plus que certains « *ont du mal à sortir spontanément de leur milieu* », poursuit-elle. Il existe cependant d'excellents « savants-communiquants » qui fréquentent régulièrement la radio. Ainsi du côté des chimistes, Hervé This est un partenaire fidèle qui présente mensuellement au micro ses travaux sur la gastronomie moléculaire.
Le seul problème éventuel est la gestion du temps. Pour la journaliste, habituée à vivre et travailler dans l'urgence, il n'est pas toujours aisé de planifier des rendez-vous avec des chercheurs qui ont besoin de « lenteur » pour mener à bien leurs travaux. Ce problème d'organisation reste mineur, et Marie-Odile le résout quotidiennement tant bien que mal avec un minimum de prévoyance. « Prévoir, c'est savoir », dit le dicton…

France Inter

« Les p'tits bateaux »

« *Allo les p'tits bateaux, c'est Rudy au téléphone, je vous appelle pour savoir si la température est la même au Pôle Nord et au Pôle Sud* ». Une centaine d'enfants laissent chaque semaine leurs questions sur le répondeur de l'émission, au 01 56 40 43 57. Pendant 30 minutes, Noëlle Bréham et son équipe, aidées par des savants, y répondent le dimanche soir. Mais il ne s'agit pas uniquement d'une émission pour un public jeune. « *Souvent, on entend*

Journaliste scientifique : un métier, deux parcours !

Marie-Odile Monchicourt : « metteur en scène de l'information »

A la manière d'un électron, la trajectoire de « MOM » est pour le moins surprenante. Jeune étudiante, elle s'oriente vers des cours d'art dramatique. Cette discipline la mène sur les ondes de France Inter dès 1977 pour présenter des petits sketchs dans « *L'Oreille en coin* ». Petit à petit, elle anime de plus en plus d'émissions. Un producteur de France Culture la remarque et lui propose de « faire des sciences » pour la première fois. Alors que rien ne la prédestine à cela, la journaliste accepte et voit là l'occasion de conjuguer ses goûts pour la mise en scène et les histoires de sciences. Le cocktail est détonnant, mais c'est un succès. En 1989, elle migre sur France Info en tant que chroniqueuse scientifique. Cet exercice, nouveau pour elle, l'oblige à respecter une certaine « rigueur » et à « faire la synthèse épurée » des informations qu'elle recueille. Tout ça n'est pas pour lui déplaire et elle le considère même cela comme une évolution professionnelle intéressante : « *Cet exercice fait partie des transformations de la presse audiovisuelle, ce qui oblige à s'adapter* ».

Journaliste devenue scientifique, Marie-Odile est avant tout une « comédienne de la science ». Pour ne pas avoir obtenu son bac, point de passage obligé des études supérieures, elle n'en a pas moins réussi sa vie qu'elle mène comme elle l'entend !

Christian Sotty : « la révolution scientifique par l'humour »

Ce journaliste de RFI – qui a sûrement interdit à ses collègues d'entrer dans son bureau sans arborer un immense sourire – se définit comme un « saltimbanque de la Science ». Pourtant, autrefois, il a failli être perdu pour la cause scientifique.

Une chose est sûre : le journalisme, c'est sa passion. Après un bac sciences et techniques, il se tourne vers une école de journalisme, heureux alors de s'être débarrassé de la chose scientifique. Une fois ses études terminées, ce spécialiste de la politique internationale passe 3 ans en Europe de l'Est comme correspondant. De retour en France, en 1973, il entre à l'Agence Centrale de Presse aux Informations générales, et non au service étranger comme il l'aurait souhaité. Et pour combler un vide, on lui demande de traiter… les sciences et techniques, en raison de son passé ! Faisant alors contre mauvaise fortune bon cœur, il joue le jeu… et se passionne. Comme beaucoup de ceux qui vont devenir les « grands » du journalisme scientifique, il a deux coups de cœur : l'environnement et l'espace. Après 17 ans d'agence, il retrouve deux amis à RFI et lance sur cette radio le 1er avril 1985 « Microméga , magazine hebdomadaire des sciences et techniques ». Un magazine souvent éclat de rire et bonne humeur, où la science côtoie l'humour, pour le plaisir des invités… et des auditeurs !

Aujourd'hui, il traverse sa vie « comme un étudiant », apprenant sans cesse au contact des chercheurs qui l'entraînent à la « pointe de flèche » dans tous les domaines scientifiques. Et avec lui, ses millions d'auditeurs sur toute la planète…

Et quand, au début, le directeur de l'information et des programmes de RFI lui avait fait remarquer qu'un anagramme « phonique » du nom de son émission était « méga moquerie », que croyez-vous qu'il fit ? Son caractère jovial a resurgi et il a ri de ce bon mot que n'aurait pas renié Voltaire !

Noëlle Bréham répond aux « P'tits bateaux ».

les parents qui soufflent la question dans le dos de leur fils. Ce sont des questions qui les intéressent aussi, mais ils ne veulent pas dévoiler leur ignorance », explique la responsable.

Les questions sont collectées par thèmes, puis soumises à un expert qui en retient 5 ou 6 et se charge d'y répondre. En 5 minutes maximum, chaque réponse doit être claire et compréhensible par les jeunes auditeurs. Quand le chercheur est prêt, il passe alors, le mardi en général, devant le micro pendant une heure environ, en compagnie de Noëlle Bréham qui le guide dans son explication. La coordinatrice des « P'tits bateaux » fait particulièrement attention au choix de ses invités : « *Le savant doit savoir parler dans un micro. Certains sont très brillants dans leur domaine, mais si leur voix « ne passe pas » à la radio, cela pose un problème. De même, certains ne se sentent pas à l'aise et cela s'entend* ». C'est pour cette raison que le reste de l'équipe est chargé de rencontrer le savant au préalable afin de le « briefer » et de « vérifier la voix ». L'animatrice profite du temps de passage de son invité pour le présenter brièvement ainsi que ses travaux les plus récents.

Quant à la chimie, elle est bien plus présente qu'on ne le pense, mais cela se traduit dans la bouche des enfants par des questions « pratiques » ou des « applications » de phénomènes : « *Pourquoi est-ce que l'eau de mer est transparente ? Comment est-ce que les blancs montent en neige ?* »

Comme Noëlle Bréham le souligne, « *entendre toutes ces questions permet de mesurer l'ampleur de son manque de connaissance* ». Écouter l'émission permet de combler ces vides.

Radio France Internationale

« Le monde change »

« *Tous les jours en direct, et pour tout le monde* » ! Les objectifs de Patrick Chompré, animateur de l'émission, sont clairs. Pendant 20 minutes quotidiennes, cette petite équipe s'adresse à « tous les gens curieux » et leur présente un aspect d'un domaine scientifique. Cette programmation existe depuis le 1er novembre 1999, et a été créée par Patrick Chompré afin de répondre aux attentes des

Patrick Chompré, un présentateur « détendu » !

auditeurs de RFI. Elle est rediffusée la nuit pour les autres zones du globe.
La présentation peut prendre deux visages. Soit l'équipe se fait aider d'un spécialiste qui commente la problématique abordée, le tout étant entrecoupé « d'encadrés sonores » préparés par le rédaction, soit il s'agit d'un reportage réalisé par une personne de l'équipe. Une fois par mois, P. Chompré invite l'auteur d'une publication scientifique qui présente ses recherches. En général, ces spécialistes sont rapidement mis dans l'ambiance de la radio car l'enregistrement a lieu à midi, au moment où toute la rédaction est « *en pleine effervescence à cause de la préparation du journal* ». Il est cependant arrivé une fois au responsable de devoir improviser, car son invité s'était « perdu » dans les couloirs de la radio…
Concernant le fond de l'émission, le plus difficile est de « *savoir trouver les bonnes questions, car en général, mes intervenants donnent les bonnes réponses* ». Cependant, les industriels ne sont pas les plus nombreux à participer, car « au goût du chef », ils ont trop tendance à « se vendre ». L'émission aborde toutes les sciences, y compris les sciences humaines et sociales. Les sciences « dures » ne représentent que les deux cinquièmes de l'ensemble de la programmation. En effet, pour P. Chompré, « *elles sont difficiles à faire comprendre au grand public, et l'on ne peut pas toujours tout expliquer simplement* ».
L'animateur est assisté d'une nombreuse équipe, composée d'une assistante, d'un réalisateur, de reporters régionaux et de chroniqueuses. Mais comme il le dit lui-même, cela ne l'empêche pas d'avoir chaque jour « *le nez dans le guidon* » pour respecter les délais.

« Microméga »

« *Qu'avez vous mangé ce matin au p'tit dej ?* » Le rituel est immuable. Pour régler le niveau des micros, Christian Sotty pose systématiquement la même question aux scientifiques qu'il reçoit. L'objectif est de les mettre en confiance. « *La glace, c'est le micro. Il faut donc briser la glace et la carapace des invités. Et pour cela, rien de tel que l'humour* », poursuit-il.

Christian Sotty traque l'info… dans *L'Actualité Chimique* !

Une diffusion le samedi, une rediffusion le dimanche, voilà « Microméga ». Et pendant toute une tranche horaire, vous pouvez l'entendre sur RFI. « *L'émission suit l'actualité, s'adresse à Monsieur Tout-le-Monde, et se décompose en deux fois 20 minutes avec généralement 4 acteurs* ». En compagnie de son complice Jean-Yves Casgha, Christian Sotty décortique l'information scientifique de la semaine qui a retenu son attention. Un passage obligé : l'enregistrement du jeudi après-midi. Avec un souci majeur : le respect de l'auditeur qui doit comprendre tout ce qui se dit. Un réflexe de journaliste d'agence de presse sûrement. RFI est écoutée partout dans le monde, et les discussions doivent être limpides et passionnantes pour les auditeurs.
Petit rituel : au début de chaque mois, C. Sotty réalise une revue de presse des magazines spécialisés présents en kiosque. Toujours avec son complice J.-Y. Casgha, il détaille alors deux articles de chaque titre pendant environ 8 minutes.
D'une manière générale, les chercheurs qui recueillent ses faveurs ne sont pas forcément connus du grand public. Ils sont là pour donner leur avis d'expert et rendre les problèmes accessibles à tous. Ce qui explique que de jeunes enseignants soient régulièrement invités. En tout cas, « Microméga » est là pour leur donner la parole, car comme le rappelle l'animateur, « *les savants ne pensent pas toujours à communiquer* ». Et d'ajouter avec un sourire qui ne le quitte jamais : « *Ces gens exceptionnels ont le savoir et le savoir-faire… mais il leur manque parfois le faire-savoir* ».
Sur le contenu de ses émissions, un regret : ne pas traiter davantage de chimie. Bien sûr, « *il n'est pas facile de parler aisément de cette discipline da façon à intéresser les foules* ». Mais, pour que tout change, il suffirait d'un effort de la part des professionnels du secteur – une volonté de communiquer sans crainte, simplement. Et lorsque l'actualité de la chimie apporte de l'eau à son moulin et que la communication s'instaure, c'est un journaliste heureux…

Colin Droniou
est journaliste stagiaire à *L'Actualité Chimique**.

* 250 rue Saint-Jacques, 75005 Paris.
E-mail : droniou@edspciences.org

Où, quoi, quand, qui ?

France Culture : 93.5 FM
www.radiofrance.fr/chaines/france-culture/sommaire/
France Info : 105.5 FM
www.radiofrance.fr/chaines/info2000/accueil/
• « Info sciences » : l'actualité scientifique pour tous présentée par Marie-Odile Monchicourt du lundi au mercredi, à 13 h 51, 15 h 51, 17 h 51, 19 h 12, 20 h 19, 22 h 42 et 0 h12 ; le jeudi à 13 h 51, 15 h 21, 19 h 12, 20 h 21 et 0 h 12 ; le vendredi à 15 h 49, 17 h 42, 19 h 12, 20 h 19, 21 h 19, 22 h 42, et 0 h 12.
• « Profession chercheur » : interview d'un chercheur par Marie-Odile Monchicourt le samedi à 5 h 57, 7 h 57 et 11 h 57.
France Inter : 87.8 FM
www.radiofrance.fr/chaines/france-inter01/direct/
• « Les p'tits bateaux » : des savants répondent à vos questions sélectionnées par Noëlle Breham le dimanche à 19 h 30.
Radio France Internationale : 89.0 FM
www.rfi.fr
• « Le monde change » : le magazine de la connaissance présenté par Patrick Chompré du lundi au vendredi, à 12 h 10 et 23 h 40.
• « Microméga » : le magazine des sciences et des techniques présenté par Christian Sotty le samedi à 20 h 10 et 20 h 40 et le dimanche à 9 h 10 et 9 h 40.
**Adresse postale des fréquences : Maison de la radio, 116 avenue du Président Kennedy, 75016 Paris.*

Des chimistes à la Fête de la science anglaise

Pierre Aldebert, Grégory Chauve, Sandrine Dorthe et Céline Monteiro

Pierre en pleine démonstration : jelly + bicarbonate + acide tartrique = délice.

Regardez, ça gélifie...

La Fête de la science, qui a lieu partout dans l'Hexagone ce mois-ci, a démarré il y a 10 ans chez nous, et fait depuis école dans d'autres pays européens. Ainsi est née la « National science week » en Grande-Bretagne. En 2001, 1 500 scientifiques britanniques ont initié plus de 1,4 million de personnes à la science. En 2002, la recherche française se devait de participer à un événement de cette importance ! A l'initiative conjointe du responsable du bureau scientifique de l'Ambassade de France à Londres, Gilbert Balavoine, et de la DIST au CNRS, 4 chercheurs du Cermav (Grenoble) ont donc représenté la France à Londres du 7 au 11 mars dernier. Notre groupe avait déjà l'expérience de l'animation scientifique devant le grand public français. Lors de la dernière Fête de la science, nous avions parlé de gélifiants, épaississants et autres produits emblématiques de la matière molle notamment à la Cité des Sciences de la Villette ou Place Victor Hugo à Grenoble. Restait donc à réitérer nos présentations, en conservant le côté simple et ludique comme il est d'usage dans ces manifestations, tout en expliquant les réactions chimiques en jeu, mais en anglais, Ladies and Gentlemen !

A Londres l'événement a attiré beaucoup de groupes scolaires. En particulier, à l'occasion du « Science discovery day », le 7 mars, notre stand a vu défiler plusieurs centaines de collégiens dans l'enceinte du prestigieux Royal Albert Hall. Le week-end, notre laboratoire itinérant s'est installé dans une petite salle jouxtant l'entrée du Florence Nithingale Museum. Plus confidentiel, l'endroit permettait un contact plus proche avec un public restreint mais visiblement conquis. Le petit stand de dégustation de confitures étonnantes, préparées par nos soins, invitait le chaland passant dans le hall à identifier la saveur ainsi piégée (café, thé, bière, lait... ?)... avant d'être amené dans notre labo pour découvrir, avec Sandrine, tous les petits secrets pour réussir les confitures !

Elle les initiait ensuite aux épaississants et aux gélifiants. Un peu de farine de konjac versée dans de l'eau, et on obtient une solution visqueuse ; si l'on chauffe et que l'on ajoute un sel, on obtient un gel.

Gels de konjac prêts à être... triturés.

A côté, Céline et Grégory, aidés par Aude Sirven, l'attachée scientifique Sciences de la Vie de l'Ambassade de France, montraient des gélifications instantanées... Magique le coup du polymère superabsorbant des couches culottes ! Comment figer instantanément de l'eau liquide ? Un peu de ce polymère synthétique est ajouté à de l'eau dans un tube... On retourne le tube : l'eau ne coule plus ! On ajoute un peu de sel : l'eau redevient liquide !... Spectaculaire aussi le « fil d'eau » ! On mêle quelques gouttes d'une solution de chlorure de calcium à une solution d'alginate, ce qui permet de tirer instantanément hors du liquide un « fil d'eau », en fait une sorte de spaghetti.

C'est vrai, l'eau ne coule plus !

Pierre s'amusait quant-à-lui à créer chimiquement des mousses comestibles à partir de la mythique « jelly » (gelée anglaise). Chacun sait que cette dernière, tout comme les bonbons gélifiés français, après avoir été de la vacherie est devenue, depuis les événements que l'on connaît, de la cochonnerie puisque le collagène utilisé est aujourd'hui d'origine porcine. Il s'est même risqué à faire boire des breuvages aux couleurs et saveurs incertaines, mais avec de l'eau minérale bicarbonatée bien de chez nous. Il y avait encore bien d'autres choses montrant que la matière molle, c'est pas dur...

Visiblement, nous n'étions pas les seuls à trouver la chose amusante. Alors, amis anglais, on vous dit bon appétit et à l'année prochaine !

Pierre Aldebert, **Grégory Chauve**, **Sandrine Dorthe** et **Céline Monteiro**, sont chercheurs au Cermav*.

* Centre de recherches sur les macromolécules végétales, Domaine universitaire, 601 rue de la Chimie, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9.
Tél. : 04 76 03 76 03. Fax : 04 76 54 72 03.

Recherche et développement

Le Prix européen Descartes pour de nouveaux catalyseurs

Le Prix Descartes est l'un des prix majeurs au niveau européen visant à promouvoir la recherche européenne résultant de la coopération transnationale. Lancé en l'an 2000 et atteignant un montant de un million d'euros, il contribue à susciter la reconnaissance publique que les scientifiques européens méritent pour leurs découvertes scientifiques et technologiques.

Parallèlement, le prix a pour objectif de sensibiliser davantage le public à la recherche scientifique et à son importance dans notre vie quotidienne. Le Prix Descartes récompense ainsi des projets scientifiques exceptionnels, qui abordent les problèmes actuels et futurs des citoyens, que ce soit en matière de santé, de sécurité, d'environnement ou d'énergie.

L'équipe lauréate du Prix Descartes 2001 a mis au point de nouveaux catalyseurs qui possèdent des propriétés les rendant adaptés à une exploitation industrielle. Ces catalyseurs se substitueront à des méthodes de fabrication de niveau inférieur, ce qui engendrera des processus commerciaux plus rentables et plus écologiques. Ils ouvrent la voie à une large gamme de produits pharmaceutiques et agrochimiques.

L'équipe est dirigée par le professeur North (King's College, Londres), en coopération avec le professeur Belokon (Institut de Nesmayanov, Moscou), le Dr. Saghiyan (Institut de Recherche Biotechnologique du Ministère de l'Industrie d'Arménie), le Dr Brown (université d'Oxford), le professeur Kagan (université Paris-Sud) et le Dr Börner (université de Rostock).

Les chercheurs ont finalement résolu l'un des défis clés auxquels sont confrontés les chimistes : la production de la seule « partie » souhaitée d'un produit chimique, entraînant ainsi une quantité moindre de déchets chimiques et des coûts minimums.

De nombreux produits chimiques peuvent être envisagés comme s'ils possédaient deux « parties ». Les moyens traditionnels de traiter ce problème sont coûteux et peu efficaces. La découverte de l'équipe internationale de chercheurs représente une contribution significative pour le développement de catalyseurs capables de produire la « partie » souhaitée du produit dans une mesure beaucoup plus large que la « partie » non souhaitée (appelés catalyseurs asymétriques). Cette recherche a engendré le **développement de plus de cinquante nouveaux catalyseurs** couvrant un certain nombre de réactions chimiques pour lesquelles aucun catalyseur valable n'existe à l'heure actuelle.

L'équipe lauréate du Prix Descartes 2001.

Les catalyseurs les plus réussis sont actuellement commercialisés activement par Avecia (le producteur majeur de produits chimiques fins au Royaume-Uni), qui a lancé formellement l'un des catalyseurs (CACHyTM) en février 2002 et est également responsable du maintien et de la défense des brevets. Jusqu'à présent, Avecia a suscité l'intérêt d'un grand nombre de compagnies chimiques dans le monde, qui seront à même d'utiliser les nouveaux catalyseurs pour concevoir des méthodes alternatives de synthèse de certains produits pharmaceutiques et agrochimiques.

La découverte de l'équipe Descartes entraînera des économies pour les industries pharmaceutique et agrochimique. De plus, les nouvelles technologies produisent très peu de déchets chimiques en comparaison avec les procédés non-catalytiques, ce qui engendrera une diminution de la pollution. Les produits pharmaceutiques préparés en utilisant les catalyseurs asymétriques pourraient s'avérer meilleur marché pour les utilisateurs finaux que ceux produits avec d'autres technologies. Ces technologies peuvent également être employées pour préparer des produits agrochimiques, contribuant à l'augmentation de la productivité des exploitations agricoles et aidant ainsi à lutter contre la malnutrition.

Le réseau de scientifiques, provenant du Royaume-Uni, de Russie, de France et d'Allemagne, continue à l'heure actuelle à découvrir et à développer de nouveaux catalyseurs, en vue de leur utilisation par l'industrie chimique européenne. Ils ont en outre formé 27 jeunes scientifiques, afin de travailler dans ce domaine important de la chimie, contribuant de la sorte directement à la compétitivité européenne.

Au mois de novembre dernier, le réseau a reçu le Prix européen Descartes pour sa découverte remarquable. La récompense financière de 300 000 euros permet de financer la recherche pour les trois prochaines années. Lors de la réception du Prix, le Dr North (chef de projet) s'est réjoui de « *la reconnaissance internationale de la qualité et de l'importance du travail effectué au sein de son groupe de recherche et de ceux de ses partenaires* ».

Le prochain Prix Descartes sera décerné le 5 décembre 2002 à Munich, à l'Office européen des Brevets.

- Le Prix Descartes fait partie du Programme d'amélioration du potentiel humain de recherche (1998-2002) de la Direction Générale Recherche : http://www.cordis.lu/improving/home.html
  Site web du Prix Descartes : http://www.cordis.lu/descartes

Des poudres dans tous leurs états

De la pyrotechnie aux biomatériaux en passant par l'aéronautique et le spatial, la start-up toulousaine SOLEA s'est spécialisée dans les procédés de production mettant en œuvre les milieux métalliques pulvérulents. Fondée par un ancien doctorant du Laboratoire de génie chimique (CNRS-université Toulouse III- Institut national polytechnique de Toulouse), cette société a développé un procédé de production de poudres de titane et un procédé de fabrication de structures métalliques poreuses à partir de matériaux composites obtenus par métallurgie des poudres. Le champ des

applications est important. Développées initialement en aluminium pour des applications de matériel embarqué, ces structures imitent de manière frappante la structure naturelle de l'os humain. Réalisées en titane, parfaitement biocompatibles, elles pourraient à terme être fixées sur des prothèses orthopédiques pour assurer une adhérence maximale des tissus osseux sur les prothèses ou venir en renforcement des substituts osseux.

- SOLEA, Z.I. Estarac, 31360 Boussens. Contact : Christophe Desnoyer. Tél. : 05 61 87 57 52. Fax : 05 61 87 10 90. info@solea-sas.com. www.solea-sas.com
Source : *Lettre de Forum Labo*, juillet **2002**.

Nanotechnologie : effet sur l'environnement ?

La National Science Foundation (NSF) annonce la création de deux nouveaux centres « Nanoscale science and Engineering center » qui se partageront 5 millions de dollars par an.
Pendant le même temps, des critiques apparaissent (ETC Group, Canada) qui soulignent les risques de nanostructures pouvant franchir les barrières cellulaires. Le débat est important aux États-Unis et le « Center for biological and environmental technology » à Rice University souhaite associer à tout développement sur les nanotechnologies une étude sur l'impact environnemental. Sur un budget de 5 millions de dollars consacré aux nanotechnologies, l'Environmental Protection Agency en réservera une partie sur ce sujet.

- Source : *Lettre des matériaux*, Ambassade de France, Washington, 1.09.**2002**.

Classification périodique : le 118 était un faux !

L'élément chimique doté de 118 protons et mis au point en 1999 par des chercheurs californiens s'est avéré être une supercherie : il y a 3 ans, 15 scientifiques du Lawrence Berkeley National Lab. annoncent avoir obtenu un nouvel élément chimique en bombardant une cible de plomb avec des ions de Krypton. Ses « découvreurs » affirment alors que l'élément en question possède 118 protons et 176 neutrons. En août dernier, après 2 ans d'essais infructueux de vérifications dans différents laboratoires, le « 118 » est retiré de la table de Mendeleïev.
Cette décision était la bonne. Le 15 juillet 2002, le LBNL a fait savoir que les résultats de 1999 avaient été truqués par l'un des savants. Pour la presse américaine, toujours friande d'investigation, le fautif serait un chercheur limogé en novembre 2001.
Ce qu'elle ne cherche pas à savoir cependant, c'est comment les 14 autres scientifiques, qui ont tout de même signé l'article, se sont laissés abuser…

- Source : *Libération*, 16 juillet **2002**.

Le carbone-14 orphelin

Le physicien canadien Martin Kamen s'est éteint le 5 septembre dernier à l'âge de 89 ans, suite probablement à une leucémie contractée par des expositions répétées à la radioactivité. En compagnie du chimiste Samuel Ruben (tous deux de l'université de Californie), il était devenu célèbre en 1940 pour avoir découvert le fameux isotope et contribué à révolutionner la datation archéologique.

Industrie

Du diesel à très faible teneur en soufre

Husky Energy a installé les nouveaux internes de réacteur EquiFlow et les catalyseurs de la série HR 400 d'Axens dans le but de produire du diesel à très basse teneur en soufre à la raffinerie de Prince George située en Colombie Britannique, au Canada.
La marque EquiFlow| désigne la ligne d'internes de réacteur d'Axens destinés aux unités neuves ou existantes dans les domaines de l'hydrotraitement des distillats, de l'hydrocraquage et de l'hydrotraitement des résidus.

- www.axens.net

Roche cède sa division Vitamines et chimie fine à DSM

Le groupe suisse Roche (produits médicaux) et la société hollandaise DSM (produits des sciences de la vie et matériaux de performance) annoncent que DSM projette d'acquérir la division Vitamines et chimie fine de Roche.
Cette division du groupe Roche est le premier fournisseur mondial de vitamines et de caroténoïdes. Son chiffre d'affaires annuel s'est élevé à 2,4 milliards d'euros en 2001. La division, qui emploie actuellement 7 500 personnes et exerce son activité dans le monde entier à partir de son siège de Kaiseraugst (Suisse), deviendra une unité de DSM. Le rachat devrait être finalisé dans le courant du premier trimestre 2003.

DuPont Chemical Solutions Enterprise rachète l'activité Protection de surfaces d'Atofina

DuPont, qui fabrique et commercialise des traitements protecteurs de surface et des tensio-actifs de spécialité sous les marques DuPont|Teflon® et Zonyl®, enrichit ainsi sa ligne de plus de 40 nouvelles références, et notamment des produits commercialisés auparavant sous les marques Forafac® et Foraperle® d'Atofina.
Par cette acquisition, DuPont Chemical Solutions Enterprise devient le plus gros producteur intégré de produits de spécialité à base de télomères fluorés pour les applications de protection de surfaces en Amérique du Nord et en Europe.

- www.dupont.com

Solvay : une stratégie gagnante

M.A. Michielsen, président du Comité exécutif de Solvay, a annoncé début septembre que le groupe belge se porte bien : les résultats nets du 1er semestre 2002 (240 millions d'euros) sont en hausse de 15 % par rapport à 2001. C'est le résultat de la stratégie de croissance cohérente énoncée en 2001 : renforcement du leadership dans toutes les activités, en développant constamment leur compétitivité et l'innovation, et développement plus rapide du secteur pharmaceutique et des spécialités issues des trois autres secteurs : chimique, plastiques et transformation.
Pour l'ensemble de l'exercice 2002, Solvay devrait enregistrer une progression à deux chiffres de ses résultats. Le groupe n'envisage pas d'acquisition précise pour la fin de l'année, mais n'exclue pas d'initiatives dépendant des opportunités qui se présenteront et qui s'intégreront dans sa stratégie.

139 ans après sa création par le Belge Ernest Solvay, le groupe chimique et pharmaceutique est présent sur les 5 continents avec, dans 50 pays, plus de 400 établissements et près de 30 000 collaborateurs, dont 2 500 chercheurs.
Pharmacie, chimie, plastiques, transformation : dans ses quatre secteurs d'activité, le groupe est leader mondial ou européen sur de nombreux marchés : carbonate de soude, sel, chlore, eau oxygénée et persels, matières plastiques ou médicaments.

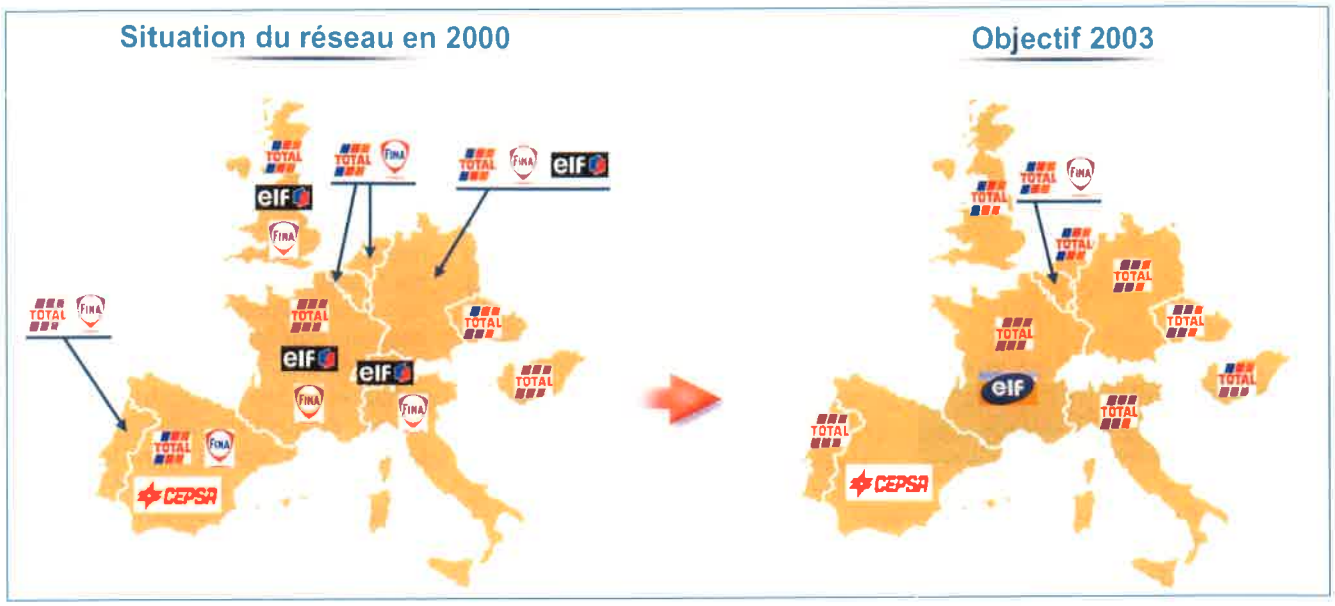


Figure 1 - Marketing : poursuite de l'unification des réseaux à la marque Total.
. Capitaliser sur la notoriété de la marque Total en Europe et fidéliser la clientèle (carte GR et eurotrafic).
. Coût limité : 150 M sur la période 2000-2003 (dont 50 M déjà réalisés au 30/06/2002).

L'heure des comptes semestriels pour TotalFinaElf (TFE)

La présentation des résultats d'un grand groupe permet de faire le point sur l'état des finances certes, mais également sur les actions passées et les projets en cours. En septembre dernier, TotalFinaElf a donc présenté son dernier bilan.

Côté finances, même si la conjoncture internationale est plus que morose et que le chiffre d'affaires de TFE enregistre une baisse de 10 %, le moral est bon car, parmi les « majors », le résultat net par action (en $) de TFE présente une meilleure résistance :

- moins 16 % entre le 2e trimestre 2001 et le 2e trimestre 2002 contre moins 38 % en moyenne pou les autres « majors » ;
- moins 26 % entre le 1er semestre 2001 et le 1er semestre 2002 contre moins 47 % en moyenne pour les autres « majors ».

Bilan et projets : on note que l'activité de production des hydrocarbures est en hausse (+ 11 %). En ce qui concerne le secteur gaz/électricité, les faits marquants de ce semestre sont :

- le renforcement du rôle d'opérateur de transport de gaz en France avec le transfert de la pleine propriété des réseaux GSO (participation de TFE : 70 %) et la croissance des ventes de gaz et d'électricité (Royaume-Uni et Espagne) ;
- le rétablissement des contrats en $ pour l'exportation de gaz et d'électricité en Argentine (des négociations sont en cours pour la livraison domestique de gaz et d'électricité) ;
- la centrale électrique de Taweelah (Abu Dhabi) démarre et celle de Bang Bo (Thaïlande) est en voie d'achèvement.

Pour le raffinage, on constate un équilibre entre l'offre et la demande dû, entre autre, aux hivers doux en Europe et aux États-Unis qui ont permis la diminution de la demande. Les marges du 1er semestre 2002 ont fortement baissé. La fermeture de raffineries envisagée sur un plan international ne concerne pas celles de TFE pour le moment et les marques Total, Elf, et Fina vont être réaménagées en Europe (*figure 1*).

La chimie, dans un environnement très déprimé pour la pétrochimie, voit une légère amélioration de ses marges depuis mai 2002. Les restructurations dans ce secteur se poursuivent afin d'améliorer les performances et la suppression de 10 % des postes en France dans ce secteur est envisagée.

La maîtrise des risques et le respect de l'environnement restent les priorités du groupe (*figure 2*). Pour améliorer la sécurité des sites industriels chimiques ou pétrochimiques, TFE fera appel à un « œil externe » pour la certification. D'autre part, Total Énergie qui fabrique et exploite des panneaux solaires devrait ouvrir une seconde usine à Toulouse. Des projets de développement d'énergie éolienne sont également à l'étude et des essais sur de très grandes éoliennes pour de futures installations off shore sont actuellement en cours à Dunkerque, en concertation avec les riverains.

. www.totalfinaelf.com

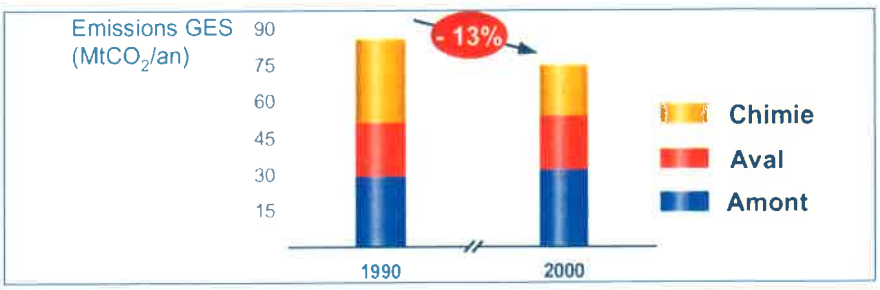


Figure 2 - Renforcement des programmes de maîtrise des risques et de respect de l'environnement.
. Renforcement de la sécurité industrielle : ré-appréciation périodique des risques et des procédures sur tous les sites industriels, programme additionnel d'investissement : + 500 M sur 4 ans (salles de contrôle blast-proof, protections anti-incendie sur bacs de stockages et sphères GPL, sûreté des sites...).
. Émissions de gaz à effet de serre : réalisation du Groupe : - 13 % ; engagements du Groupe 1990-2005 : - 20 % sur les émissions à la tonne produite ou traitée.
. Axes de progrès : objectif de « torchage zéro » pour tous les nouveaux champs (réinjection ou valorisation des gaz associés), réduction des rejets liquides et gazeux, promotion des énergies renouvelables (biocarburants, éolien, photovoltaïque).

L'INPI en direct

L'Institut National de la Propriété Industrielle (INPI) a mis en place un nouveau service destiné à être le relais pour toute demande d'information.
INPI Direct est à votre écoute sur le n° indigo : 08 25 83 85 87 (0,15 € TTC/mn).

- contact@inpi.fr
  www.inpi.fr

Hygiène-sécurité environnement

Sécurité et dialogue social dans les industries chimiques

Un accord concernant la « sécurité dans les industries chimiques » a été signé le 10 juillet dernier par l'UIC, les fédérations associées et 4 fédérations syndicales de salariés. Il contribuera à renforcer la prévention et la sécurité dans toutes les entreprises par, entre autre, le management de la sécurité au travail, l'évaluation *a priori* des risques professionnels et le développement de l'information et de la formation (initiale, continue, des entreprises extérieures) à la sécurité.
Cet accord prend d'autant plus d'importance qu'il intervient dans le contexte difficile issu notamment du drame de Toulouse et du projet de loi sur les risques technologiques.

Les fluorocarbones en ligne

Le nouveau site www.fluocarbons.org présente les principales applications et les caractéristiques technologiques, de sécurité, économiques et réglementaires des fluorocarbones (HFC), composés-clés des frigorigènes, gaz calorifuges, aérosols médicaux et autres matériaux respectant l'environnement. Il a été réalisé par le Comité technique européen sur les fluorocarbones (EFCTC) en association avec le Conseil européen de l'industrie chimique (CEFIC).

Colloque sur les sites et sols pollués

L'Ademe (Agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie) organise, les **12 et 13 décembre prochains** à la Maison de la Chimie (Paris 7e), la première rencontre nationale de la recherche sur les sites et sols pollués par les substances chimiques ou radioactives : bilan de 6 années de recherche et perspectives.
Ce colloque s'adresse à tous les acteurs concernés par la problématique « sites et sols pollués », et plus particulièrement aux organismes de recherche publics ou privés, aux exploitants de sites industriels, aux sociétés d'études et de travaux dans le domaine des sites et sols pollués, aux laboratoires d'analyses ainsi qu'aux professionnels du traitement des déchets.

- Renseignements : Ademe, Service communication, Évelyne Perréon-Delamette.
  Tél. : 02 41 20 42 30. Fax : 02 41 20 41 98.
  evelyne.perreon@ademe.fr
  www.ademe.fr

Acrylamide et alimentation

L'Agence française de sécurité sanitaire des aliments (AFSSA) diffuse sur son site Internet un point d'information et une synthèse sur l'acrylamide : produits générés dans les matrices alimentaires et leur toxicité, hypothèses pour la formation d'acrylamide, données toxicologiques, évaluation de l'exposition, études et recherches pour approfondir les connaissances.

- http://www.afssa.fr, rubrique « actualité ».

Enseignement, formation et emploi

Les bourses Marie Curie, c'est quoi ?

Ce sont tout simplement des subventions qui couvrent les frais de voyage et de séjour dans un autre pays en tant que membre d'une équipe de recherche. Elles peuvent être obtenues par des chercheurs, des institutions de recherche et des entreprises (aussi petites soient-elles) de l'Union européenne et des 15 pays actuellement associés au 5e Programme-cadre de R & DT. Ce sont les candidats eux-mêmes qui choisissent le thème de leurs recherches. Il existe deux types de subventions : les bourses individuelles et les bourses d'accueil.
Les **bourses individuelles** sont réservées aux chercheurs. Avant de déposer une candidature, ceux-ci doivent trouver une équipe de recherche qui soit prête à les accueillir et définir un projet de recherche commun. Ces bourses s'adressent principalement à des post-doctorants, âgés de 35 ans ou moins. Mais elles permettent aussi à des chercheurs confirmés de contribuer à renforcer la capacité de recherche dans les régions moins favorisées de l'Union européenne ou de resserrer les liens entre le monde universitaire et celui de l'industrie.
Les **bourses d'accueil** sont octroyées à des institutions qui peuvent alors recruter elles-mêmes leurs propres chercheurs invités. Divers programmes sont spécifiquement destinés à la formation doctorale (séjours sur des sites de formation Marie Curie), à la formation à la recherche dans un cadre industriel (bourses d'accueil en entreprises), ou au développement de capacités dans les régions moins favorisées de l'Union (bourses d'accueil de développement). Ces programmes offrent diverses possibilités : un jeune chercheur peut opter pour de courts séjours dans le cadre de ses études de doctorat au sein d'un site de formation ou pour une formation à plus long terme dans le secteur de l'industrie. Les chercheurs post-doctorants peuvent choisir entre la formation dans un cadre industriel et l'utilisation de leurs connaissances et de leur expérience pour améliorer les compétences d'un groupe de recherche dans une région moins favorisée de l'Union européenne. La Commission encourage vivement les femmes à souscrire aux bourses Marie Curie.
Depuis 1990, plus de 8 500 bourses Marie Curie ont été décernées. La somme allouée se situe entre 1 200 et 3 000 par mois. Aujourd'hui, sous le 5e Programme-cadre pour la recherche et le développement technologique qui couvre la période 1998-2002, l'Union européenne a presque doublé leur budget.
Les boursiers d'hier et d'aujourd'hui se sont regroupés au sein d'une association dont le site offre une profusion d'informations et de l'aide pour tout ce qui concerne les aspects pratiques des problèmes de mobilité :
http://www.mariecurie.org

- Des appels à candidatures sont publiés par la Commission sur www.cordis.lu/improving
  Source : Office des publications officielles des communautés européennes.

Programme d'enseignement de l'EECA

L'École Européenne de Chimie Analytique (EECA) propose différentes formations en novembre et décembre prochains : interprétation des spectres de masse en impact électronique et en ionisation chimique, spectrométrie d'absorption atomique, identification des molécules organiques, analyse sensorielle, spectrométrie de masse et

techniques couplées, spectrométrie d'émission plasma ICP, échantillonnage, prélèvement et préparation des échantillons pour une analyse chimique, etc.
Ces modules d'enseignement concernent les ingénieurs et cadres des industries chimiques, pharmaceutiques et agroalimentaires qui souhaitent compléter leurs connaissances ou découvrir les acquis les plus récents des méthodes chimiométriques et physico-chimiques d'analyse.

- Renseignements : EECA, Service Formation, BP 429, 75233 Paris Cedex 5. Tél. : 01 47 07 18 99. Fax : 01 47 07 33 17. EECA@Formation-Conseil.com www.Formation-Conseil.com

Réunions des Clubs du Cercle des Sciences Analytiques

Les réunions du CSA concernent les ingénieurs et les cadres désireux d'échanger leurs idées sur les problèmes rencontrés et les perspectives de développement des sciences analytiques.
- **7 novembre 2002** à Paris : Éléments difficiles en spectrométrie atomique.
- **7 novembre 2002** à Orléans : Progrès réalisés en vue de la caractérisation des dioxines.
- **14 novembre 2002** à Paris : Choix des méthodes statistiques de traitement des données de profil sensoriel en fonction des objectifs de l'étude.
- **15 novembre 2002** à Paris : Le point sur la validation des méthodes.
- **15 novembre 2002** à Paris : Effet des traitements thermiques sur la qualité et la sécurité des laits diététiques.
- **13 décembre 2002** à Paris : Certification informatique de l'analyse chimique pour la pharmacie et l'agroalimentaire.

- Renseignements : CSA, Service Formation, BP 429, 75233 Paris Cedex 5. Tél. : 01 47 07 18 99. Fax : 01 47 07 33 17. CSA@Formation-Conseil.com www.Formation-Conseil.com

Formations en rhéologie

La cellule UPPA-MAT de l'université de Pau propose quatre stages de formation interentreprises pour l'année 2003 :
- Introduction à la rhéologie (2,5 jours),
- Pratique de la rhéologie (3,5 jours),
- Perfectionnement en rhéologie (2 jours),
- La rhéologie appliquée à l'agroalimentaire (2,5 jours).

- Pour plus de détails (programme détaillé, dates et inscription), contacter Isabelle Alibert. Tél/fax : 05 59 80 14 21. isabelle.alibert@univ-pau.fr www.univ-pau.fr/UPPAMAT

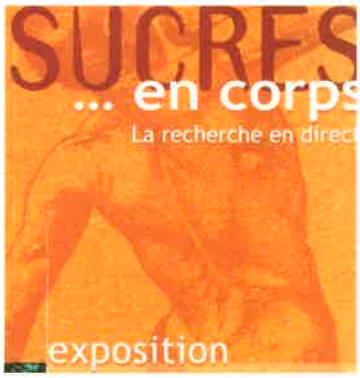
Un site emploi dédié à l'environnement

Pour déposer son CV, présélectionner des candidats ou déposer une offre d'emploi sur le site, candidats ou recruteurs peuvent ouvrir gratuitement un compte sur ce nouveau site d'emploi entièrement dédié à l'environnement et au développement durable.
Emploi-Environnement propose également un dictionnaire des métiers de l'environnement, des liens utiles, un forum de discussion et des actualités sur l'emploi en environnement.

- http://www.emploi-environnement.com

La chimie au quotidien

Sucres... en corps du 1er octobre 2002 au 5 janvier 2003



Le Palais de la découverte présente « Sucres... en corps », une exposition destinée à emmener le grand public à la découverte des sucres dans le corps humain. D'où viennent les sucres ? Où vont-ils ? A quoi servent-ils ?
Cette exposition ludique et interactive est faite pour que le visiteur prenne conscience qu'une meilleure santé passe par une meilleure connaissance de soi, de son organisme et de son alimentation. Depuis leur fabrication par les végétaux jusqu'à leur utilisation comme carburant dans les cellules, le sucre et les sucres dans le corps dévoilent leurs secrets.
L'exposition est organisée autour de cinq espaces : le glucose, carburant de nos cellules ; les acteurs de la régulation hormonale, les glucides et le sport ; les glucides dans l'alimentation ; le diabète.

- Palais de la découverte, avenue Franklin D. Roosevelt, 75008 Paris. Tél. : 01 56 43 20 21. www.palais-decouverte.fr
www.exposition-sucres.com

La Cité des sciences accueille Sciences-Actualités !

La Cité des sciences et de l'industrie consacre 700 m² à l'actualité scientifique et propose divers services en 3 langues (français, anglais et espagnol) dans son nouvel espace : « Sciences-Actualités ». Les contenus sont également accessibles sur Internet. L'objectif de cette initiative est double : informer le grand public sur des sujets d'actualité, et présenter les mécanismes et l'univers de la presse.
Sciences-Actualités est composé de plusieurs rubriques. Au choix, on peut y trouver des brèves scientifiques issues des 5 continents, ou des articles plus approfondis détaillant les problèmes de santé, d'environnement... Mais aussi une revue de presse internationale présentant les différentes façons de traiter l'actualité à travers le monde, des dossiers thématiques tous les 3 mois, des images sur les faits d'actualité marquants, des « unes » historiques de journaux liées à l'avancée des sciences et techniques, le point de vue des acteurs de la science, les chercheurs... et même un atelier presse pour se familiariser avec l'écriture informatique.
Sciences-Actualités est ouvert du mardi au samedi de 10 h à 18 h et le dimanche jusqu'à 19 h.

- Cité des sciences et de l'industrie, 30 avenue Corentin-Cariou, 75930 Paris Cedex 19. Tél. : 01.40.05.70.00. www.cite-sciences.fr/actu

A propos de *L'Actualité Chimique*

- Le numéro spécial sur les matériaux (mars 2002), très apprécié, a été récemment cité dans *Matériaux et Techniques* (n° 1-2, 2002) et dans *CNRS Info* (n° 403, juillet 2002).

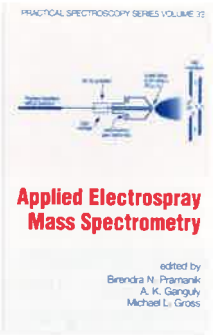
- D'autre part, le numéro spécial de décembre 2001, *L'hydrogène, carburant de demain ?*, qui fait office de référence dans le domaine, a fait l'objet de deux émissions de radio scientifiques : *Microméga* en début d'année, et *Le Monde change* en juillet dernier (thème : l'hydrogène est-il un carburant propre ?).

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. Villermaux 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

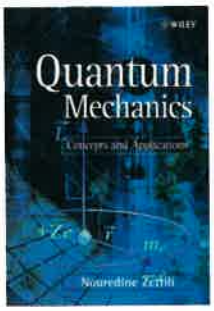


Applied electrospray mass spectrometry
Practical spectroscopy series, vol. 32
Birendra N. Pramanik, A.K. Ganguly et Michael L. Gross (ed.)
434 pages, 185 $
Marcel Dekker, New York, 2002

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 persévérer à tenter de résoudre les problèmes posés.

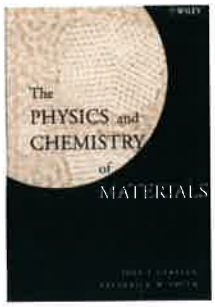
Après une introduction très classique qui aborde les origines de la mécanique quantique et s'appuie sur l'expérience des doubles fentes pour introduire la dualité onde-particule, on trouve un chapitre dédié aux mathématiques associées ; on y trouve ce qui est nécessaire sur les opérateurs et leur représentation 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 orbitalaires, 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.

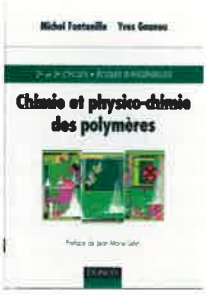
La quatrième partie qui s'intitule « Surfaces, films minces, interfaces et multicouches » a pour objectif de montrer les effets de discontinuités dans la structure chimique et physique sur les propriétés des matériaux, avec deux aspects : minimiser certains problèmes liés aux surfaces et interfaces, 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 2e et 3e 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 (2e partie du XIXe 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 physicochimie 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 coulures 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 Informatique[1]

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.

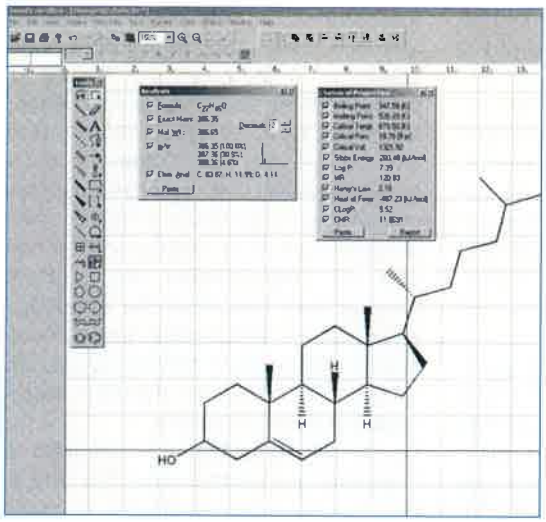


Figure 1.

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 publications[2]. 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 utilitaires 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 « choletérol » 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 :

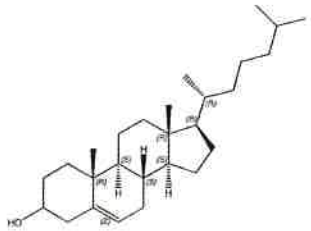
17-(1,5-Dimethyl-hexyl)-10,13-dimethyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16, 17-tetradecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-3-ol.

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 ^{13}C 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 [cm³/mol]	387 [cm³/mol]
Gibbs Energy	-137.18 [kJ/mol]	n.d. (non disponible)
Log P	1.80	2.03
MR	31.24 [cm³/mol]	42.20 [cm³/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.ritme.com

[2] http://chemnews.cambridgesoft.com/features/special.cfm?Code=R

Revues

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, Louisette 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 6e élément, par Gérard Vacher, Béatrice Ricard et Myriam Pallière.
- 50e 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 Gölitz's, « Back to the future » : http://www.wileyvch.de/vch/jounals/2002/editorials/edit_2002_15.pdf

L'INRA et le développement durable

A l'occasion du 2e 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 voeux pour le futur.

SFC Eurochem Toulouse 2002 : un essai à transformer...

Toulouse, 8-11 juillet 2002

Le contexte

Après Bordeaux (1997) et Rennes (2000), Toulouse s'était proposée, dès l'automne 2000, pour organiser en 2002 le rassemblement des membres de la SFC. Avec, au moment de l'élaboration de l'Espace Européen de Recherche à la Commission Européenne, une initiative très intéressante : celle d'associer à l'organisation de la manifestation trois sociétés sœurs européennes – la Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), la Royal Chemical Society (RSC) et la Société Chimique Suisse (SCS) –. Cet élargissement fut remis en cause, rediscuté et clairement réaffirmé après l'explosion à l'usine AZF de Toulouse.

Mais cette actualité locale a conduit aussitôt les organisateurs à prendre une seconde initiative, plus courageuse encore : celle d'ouvrir un débat public et d'organiser une confrontation entre les besoins de la société et la place de la science en général, celle de l'industrie chimique en particulier.

Le bilan officiel de l'explosion dans l'usine AZF, rappelons-le, fait état de 30 morts, de plus de 2 000 blessés, dont 226 hospitalisés, sans compter les dégâts matériels. Vu du périphérique, le spectacle autour du site est vraiment désolant ! Aussi n'est-il pas étonnant que la tragédie continue à diviser l'opinion publique !

C'est donc une cité meurtrie par l'explosion du 21 septembre 2001, mais pleinement responsable des enjeux, qui a accueilli dignement en juillet dernier une communauté chimique rassemblée pour un congrès d'ouverture, vers les scientifiques européens d'une part, vers les collègues de l'industrie de l'autre.

Le congrès

Reconnaissons d'emblée que les autorités scientifiques et politiques, présentes à la cérémonie d'ouverture, se sont toutes appropriées cette double ouverture. Une belle unanimité s'est dégagée des discours, courts mais

graves, des autorités locales – le président de l'université Paul Sabatier, Raymond Bastide et celui de l'Institut National Polytechnique, Roland Morancho, ou le représentant du maire de Toulouse, François Cholet... – et nationales – le président de la SFC, François Mathey, le directeur de la technologie du ministère de l'Éducation nationale, Alain Costes...–.

Ancien directeur du LAAS de Toulouse, ce dernier a rappelé avec force la nécessité du « dialogue efficace entre recherche et industrie » pour assurer la vitalité de l'Europe dans la compétition mondiale. D'une manière plus sensible et très intelligente, Nicole Belloubet-Frier, rectrice, chancelier des universités, a appelé de ses vœux la « nécessaire réconciliation entre science et société ». Prononcés à côté du site d'AZF, de tels encouragements avaient valeur de symboles. La cité paraissait à nouveau apaisée.

Cette année, le colloque avait donc deux composantes. Commençons par la partie non purement recherche. Près du tiers des interventions (en résumé les symposia 10 à 13 du *tableau I*) était consacré respectivement à l'industrie, à l'enseignement de la chimie (du primaire à l'université) et à la présentation de quelques exemples de contribution de la chimie à la qualité de la vie des citoyens.

L'UIC, par la bouche de son précédent président René Deleuze, a voulu transmettre un double « message », des évidences. L'industrie doit tenir compte du contexte stratégique dans lequel elle opère avec des ressources pétrolières limitées dans le temps (exposé de Jean-Louis Schilansky de l'Union Française de l'Industrie Pétrolière) et une mondialisation qui doit, dans le domaine des grands intermédiaires, tenir compte de la montée des pays du Golf et de l'Asie (Marie-Pierre Chevallier, Atofina).

L'industrie est aussi condamnée à innover pour rester compétitive. Exemples ? Des nanoparticules – développées, avant que l'on utilise le mot, pour le renforcement des pneumatiques ou comme anti-UV dans les crèmes solaires (Patrick Maestro, Rhodia) et des matières plastiques pour des économies d'énergie dans le bâtiment (Herbert Fisch, Association of Plastics Manufacturers in Europe).

La journée consacrée à l'enseignement de la chimie s'est appliquée à expliquer les évolutions de programmes en France et à comparer les systèmes de formation en France et en Allemagne, avec une inquiétude commune : la désaffection des jeunes pour des formations scientifiques. Un effort particulier dans le domaine expérimental réussira-t-il à enrayer la désaffection ? Herbert Roesky (Göttingen) avait trouvé un titre imagé pour nous en convaincre : « Chemistry without experiments is like France without wines ! ». Regrettons cependant que ces discussions se soient déroulées dans des séminaires parallèles et qu'ainsi le dialogue n'ait pu s'établir véritablement.

La séance consacrée aux besoins de la société a donné l'occasion d'exorciser, en partie, la tragédie toulousaine. Sans revenir sur les causes de l'explosion, nous avons retenu deux aspects d'un même constat : la difficulté de la communauté scientifique à se faire entendre de la société civile. Georges Guiochon, qui avait préparé sa thèse sur le nitrate d'ammonium et qui enseigne à Knoxville, a profité d'une question d'un participant pour dire qu'il avait du mal à croire à la thèse développée dans le rapport d'expertise publié récemment. Par ailleurs, les scientifiques toulousains se plaignaient

amèrement de ne pas avoir été interrogés par la presse locale et les autorités judiciaires. Cette méfiance réciproque est malsaine et il faudra attendre les évolutions de l'enquête judiciaire pour connaître les causes de ce sinistre.

Sur le plan scientifique, le programme a offert une vision complète de la chimie. Le panorama allait de la synthèse (de chimie organique, d'hétéroatomes, de polymères...), aux applications (dans les sciences de la vie, les matériaux, ou pour l'accès à de nouvelles sources d'énergie comme les piles à combustibles) en passant par les moyens ou les outils pour optimiser ces synthèses (la catalyse et la chimie de coordination, la modélisation moléculaire et la simulation...).

Les conférences plénières retenues par les organisateurs étaient d'un très bon niveau. Incontestablement, le label Eurochem a contribué à attirer des conférenciers de niveau mondial et à les motiver pour préparer des contributions intéressantes.

Il était normal qu'au pays de Paul Sabatier (prix Nobel de chimie, avec son compatriote Grignard en1912 !), la catalyse ait été à l'honneur. La conférence d'ouverture de Barry M. Trost (Stanford University, États-Unis) était consacrée à la catalyse homogène par les complexes du ruthénium. Il remplace la notion de sélectivité par celle d'économie d'atomes, en phase avec les économies de ressources. Robert Schlögl (Fritz Haber Institute, Max-Planck Society, Berlin) a choisi la réaction d'oxydation du butane en anhydride maléique pour illustrer les progrès récents en matière de catalyse hétérogène d'oxydation. Il a rappelé que le concept du compromis taux de réaction/force des interactions, que Sabatier avait développé pour une réaction catalytique globale, s'appliquait toujours mais, à présent, à chacune des étapes intermédiaires.

Les conférences de Wilfred F. van Gusteren (Federal Polytechnic School, Zurich) et d'Alan Fresht (University of Cambridge, Royaume-Uni) se complétaient admirablement. Le premier a montré comment la simulation des interactions et les conformations de petites molécules peptidiques pouvaient se vérifier par dichroïsme circulaire, tandis que le second a utilisé la RMN pour suivre le repliement et la dénaturation de protéines.

Fritz Vögtle (Université de Bonn, All.) a basé sa conférence sur les dendrimères, ces nouvelles configurations de molécules sphériques obtenues par synthèse convergente ou divergente, et dont les applications, grâce à l'effet d'amplification de la fonction active, vont des réactifs de diagnostic – déjà commercialisés par Schering comme agents de contraste pour l'angiographie et Roche pour la détection de métastases – à la valorisation de fonctions photoactives dans les capteurs. Bref, des contributions qui font honneur à la qualité de la recherche européenne.

A l'opposé, bon nombre de communications présentées n'avait, en général, d'intérêt que pour le conférencier. Mais n'est-ce pas le rôle des cessions parallèles d'offrir une tribune aux chercheurs ?

Le point commun à tous ces exposés ? La volonté du physico-chimiste de suivre et de caractériser l'agencement atomique jusqu'à l'échelle nanométrique ou mésoscopique, qu'il s'agisse d'une précipitation d'un solide minéral ou d'un complexe organominéral, ou de la cristallisation d'un polymère synthétique ou d'une protéine. Le physicien ou le biologiste intervient ensuite pour appréhender la fonctionnalité ou les propriétés d'usage des édifices moléculaires soigneusement élaborés.

Tableau I : Les 13 thématiques du congrès.

Symposium 1	New trends in organic chemistry
Symposium 2	Catalysis and coordination chemistry
Symposium 3	Computing for chemistry and with molecules
Symposium 4	Heteroatom chemistry
Symposium 5	Chemistry of life
Symposium 6	Polymers and dendrimers
Symposium 7	Organized molecular systems
Symposium 8	Solid state chemistry and chemistry of materials
Symposium 9	Chemistry and energy/environment
Symposium 10	Chemical education
Symposium 11	Large experimental systems
Symposium 12	Industrial challenges and societal needs
Symposium 13	Basic research and societal needs

Commentaires

A l'issue de ce congrès, nous esquisserons quatre commentaires personnels.

• **Un constat d'abord : le bien-fondé et le courage des organisateurs de nous avoir proposé un congrès qui sorte de l'ordinaire**, par la volonté de s'adresser à l'ensemble de la communauté chimique. Celle-ci repose effectivement sur quatre piliers : les chercheurs pour trouver les innovations, les industriels pour les développer, les enseignants pour former les jeunes et les jeunes pour assurer la relève. Au-delà de la pluridisciplinarité, c'est la dynamique du système qui est ainsi mise en lumière. Les organisateurs ont eu raison de réunir ces quatre familles d'acteurs et nous devons les féliciter pour leur initiative. Pour parodier Clémenceau : « *la recherche est trop importante pour être confiée aux seuls chercheurs* », qui ont l'occasion de se rencontrer lors de leurs colloques scientifiques. Ils doivent dialoguer avec les industriels et avec les enseignants pour échanger, c'est-à-dire faire partager et apprendre.

Pour le moment, ce dialogue n'a été qu'esquissé, compte tenu de la structure du congrès. C'est dommage, car tout au long de celui-ci, nous avons été impressionnés par la demande d'informations, la curiosité des enseignants, et l'assiduité des jeunes devant leurs posters et lors de leurs rencontres avec des industriels. Bojan, Nemanja, Jovana et Milena, jeunes lauréats de 17 ans des Olympiades Bios de St-Petersbourg, avaient fait le déplacement à Toulouse, en commençant par un voyage en car de 36 heures de Vranje à Paris ! Ils étaient ravis de pouvoir exposer leurs posters à côté de chercheurs reconnus. Des enseignants venant d'Afrique ont aussi apprécié de venir à Toulouse pour partager leurs expériences. Le rôle de ces congrès est aussi de donner des opportunités à des collègues moins favorisés.

• **Une conviction aussi : c'est bien au niveau européen que ce dialogue doit s'établir**. C'est là qu'il sera le plus riche et le plus utile pour l'avenir de l'industrie chimique européenne. Avec près de 30 000 entreprises, employant 1,7 million de personnes, générant un chiffre d'affaires annuel de 463 milliards d'euros et un excédent de 53 milliards d'euros, l'industrie chimique européenne est leader mondial. Elle doit le rester ! L'expérience Eurochem doit donc se poursuivre.

• **Un regret ensuite : que l'appel des organisateurs n'ait été entendu qu'en partie.** Les collègues étrangers (une participation timide avec 15 % seulement des participants) et les industriels (moins de 5 % de présents) n'étaient pas au rendez-vous.
Les absents n'ont pas pris conscience de la valeur symbolique de la tenue de cette manifestation communautaire à Toulouse, neuf mois seulement après la déflagration d'AZF. Reconnaissons que le silence de la communauté chimique, lors et depuis l'accident, a été mal perçu par la population, et le mystère qui persiste autour des causes de l'accident nuit à la crédibilité de la profession.
• **Une question enfin : ne faut-il pas revoir la forme de ce type de congrès pour qu'il puisse mieux répondre aux objectifs recherchés ?** Les organisateurs du futur Eurochem devront se poser la question. L'intérêt de colloques généralistes, où il est possible de suivre l'évolution des principaux domaines de la chimie, est évident et nécessaire. Eurochem peut et doit combler ce vide, en réaménageant son organisation. Suppression des séances parallèles, redéfinition des thématiques – davantage basées sur des problèmes concrets que sur des disciplines scientifiques –, exposés et discussion des vrais problèmes d'actualité –, association plus étroite des industriels à la définition du programme, conférences industrielles mieux ciblées. Voilà quelques-unes des pistes à creuser pour que l'essai puisse être transformé !

Conclusion

En résumé, l'expérience Eurochem doit se poursuivre. Remercions et félicitons encore les organisateurs locaux, avec à leur tête Philippe Kalck, d'avoir donné le *la* et la société Icom, une société de communication locale, de l'avoir mis en musique. Leur accueil fut chaleureux et l'organisation de la manifestation bonne, malgré le jeu de piste qui consistait à trouver, dans les délais, la salle de la conférence de son choix. Le domaine de Rangueil est vaste ! Les étrangers n'ont pas eu tort de souligner le caractère trop franco-français des sessions non purement scientifiques. Mais fallait-il briser la spontanéité devant le nombre limité d'étrangers ?
Par contre, l'effort fait par les conférenciers français pour présenter leurs exposés en anglais dans les sessions scientifiques a été remarqué et salué par nos visiteurs étrangers. Les français sont rodés pour le prochain Eurochem. Puisse le prochain organisateur se déclarer rapidement. Les efforts des pionniers toulousains n'auront pas été vains. Ce sera leur plus belle récompense.

Gilbert Schorsch

Encadré 1 - **Les « atouts » toulousains.**

Avec 110 000 étudiants – la 2e concentration d'étudiants en France après Paris –, Toulouse, où les lignes de montage de l'avion européen, l'A 380, viennent tout juste d'être inaugurées, offre l'image d'une ville jeune et dynamique, au centre d'une agglomération de 800 000 personnes.

L'enseignement, la recherche et l'industrie y jouent un rôle complémentaire. Jugeons-en :
Trois universités - *Toulouse 1 pour le droit et les sciences sociales, Le Mirail ou Toulouse 2 pour les lettres et les sciences humaines, l'université Paul Sabatier à Rangueil ou Toulouse 3 pour les sciences, la médecine et la pharmacie* - et un Institut National Polytechnique - *qui rassemble trois écoles d'ingénieurs respectivement pour l'électrotechnique, l'électronique, l'informatique, l'hydraulique et les télécommunications (ENSEEIHT), pour les arts chimiques et technologiques (ENSIACET), pour l'agronomie (IENSAT)*, assurent les formations dépendant de l'Éducation nationale.
Trois écoles dépendent du ministère de la Défense : pour l'aviation et l'espace (l'ENSAE), pour l'aviation civile (l'ENA), pour la construction aéronautique (l'ENSICA).
Enfin, l'École vétérinaire dépend du ministère de l'Agriculture.

Pour la recherche publique, le CNRS gère à Toulouse un certain nombre de laboratoires propres : le Laboratoire de l'automatique et de l'architecture des systèmes (LAAS), celui du génie chimique (LGC), le Centre d'élaboration des matériaux et d'études structurales (CEMES) et celui de la chimie de coordination (LCC) et dans le domaine biologique, l'Institut de biologie cellulaire et de génétique (IBCG). Le Centre national d'études spatiales (CNES) y a localisé un de ses plus importants laboratoires de recherche. La recherche privée s'est bien sûr installée à proximité de ces importants moyens de recherche : Motorola et Siemens pour l'électronique, l'Aérospatiale pour la construction aéronautique, Matra et Thalès pour les systèmes de défense, Pierre Fabre pour la dermatologie et pour la pharmacie, y ont établi des centres de recherche.
Toulouse était donc parfaitement qualifiée pour revendiquer l'organisation de ce congrès européen.

Encadré 2 -

Une distribution des prix qui plébiscite le mélange des cultures !

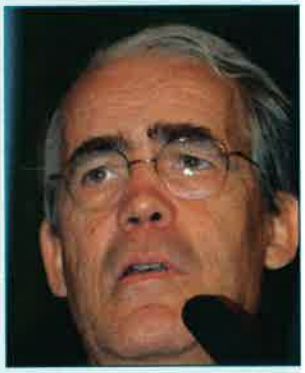
Les grands congrès donnent toujours l'occasion de distinguer des contributions scientifiques marquantes. Eurochem n'a pas failli à la règle. Il a même indiqué la recette et le passage obligé de toute distinction future : le mélange des cultures. Jugeons-en par les distinctions remises.

• Le prix de la Fondation Otto Wallach à Pierre Potier

Nulle remise de prix ne pouvait mieux marquer ce premier Eurochem !
Une fondation allemande (celle d'Otto Wallach, une sommité allemande de la chimie des substances naturelles) distingue un scientifique français de renom. Avec sa double formation de pharmacien et docteur ès sciences physiques, Pierre Potier, le plus emblématique des chimistes français actuel, méritait cette distinction qui s'ajoute à beaucoup d'autres. C'est un chercheur qui a trouvé. En effet, il peut s'enorgueillir d'être le père de deux anticancéreux actuellement sur le marché, développés par Pierre Fabre (la Navelbine pour le traitement du cancer du poumon) et par Rhône-Poulenc (le Taxotère pour le cancer du sein, dont le chiffre d'affaires actuel dépasse un milliard d'euros !). Par la suite, il n'a pas hésité à assumer des responsabilités administratives et techniques. Après avoir dirigé l'Institut des Substances Naturelles de Gif-sur-Yvette, il a été nommé directeur de la Technologie au ministère de l'Éducation nationale. Il est actuellement président de la Fondation de la Maison de la Chimie.
Le prix lui a été remis, lors de la cérémonie d'ouverture, par Wilhelm Pickenhagen, en présence de Wolfram Koch, prochain délégué général de la GDCh.

• Le prix Le Bel 2001 à Jean-Yves Lallemand

Jean-Yves Lallemand, qui enseigne à l'École polytechnique, est l'exemple de l'organicien qui, par passion, s'est intéressé et a fait un détour par la RMN dont il est devenu un spécialiste mondialement reconnu. Cette double compétence lui vaut à présent de maîtriser à merveille les subtilités de la chimie organique en s'appuyant sur sa spécialité d'analyste, comme il l'a expliqué lors de la remise du prix par son collègue de Polytechnique, François Mathey, président de la SFC.



• Le prix Süe 2001 à Jacques Védrine

Le récipiendaire du prix Süe, Jacques Védrine, spécialiste de la catalyse, a expérimenté une double compétence culturelle. Après une carrière bien remplie en tant que directeur de recherche au CNRS à l'Institut de la catalyse à Lyon, il n'a pas hésité à se remettre en cause en acceptant un poste de professeur à l'université de Liverpool. Dans sa réponse, il a fortement conseillé aux jeunes et aux moins jeunes de l'assistance de tenter de tels parcours à l'étranger !

Encadré 3 - **Quelques réactions à chaud.**

Réactions de deux professeurs étrangers

• « An important step in the right direction ! It has been a while since an invitation to give a lecture at a conference has given me so much pleasure as the one for Eurochem 2002 in Toulouse. With the help of other chemical societies, our French colleagues from the Société Française de Chimie have opened their traditionally nationally held conference in order to make it an European forum for all aspects of chemistry. This marks the beginning of a lengthy but necessary way to a lasting improvement of European chemistry's position in the world. This not only depends on actually gained knowledge and its significance for science and economy but also to an increasing degree on its « marketing » in the sense of higher visibility.
With all due respect to the partly excellent research being done at other places in this world, especially in the US and Japan, European chemistry has no reason to accept a middle ranking. Wherever appropriate, a more offensive marketing based on a healthy self-confidence should be practiced, like the one successfully exercised for decades on Europeans rather to our disadvantage. I see this to be the real importance of Toulouse's small revolution here. General European events could develop into high ranking forums and yet achieve the goals of national conferences thus taking their place as serious contenders to the world-wide reaching conferences of the American Chemical Society. Although many would not have believed it possible, the French actually promoted the use of English at the conference, not only in theory but in practice and at the expense of their own beautiful language, in order to help realize this idea. »

A. Dieter Schlüter
(Technische Universität, Berlin)

• « The SFC Eurochem meeting was striking in many ways but one stood out forme. For years now the ACS meetings have dominated the chemistry conference landscape, with other national meetings far behind in terms of attendance and media exposure. Now Toulouse seems to have created a David to match Goliath in time. It is an interesting coincidence that Toulouse hosts the EuroConsortium Airbus which has challenged the dominance of the US Giant Boeing with notable success. Interestingly, the US model has not been followed with regard to the timetabling of Symposia. Rather than cram invited speakers into a day (or two), they have been interspersed with young talent so that the Symposia run over the duration of the conference. The pros and cons of this approach deserves to be debated and evaluated so that the next Eurochem can be planned accordingly.
On technical aspects, I can only comment on the Symposium I was invited to since I felt a loyalty towards it throughout (meaning that all other Symposia were missed as a result). The theme of « Computing for chemistry and molecules for computing » was a most interesting juxtaposition of subjects especially because it brought together hard computational scientists and experimentalists using traditional techniques (e.g. NMR, optical absorption and emission spectroscopy, magnetics, inorganic and organic synthesis) in novel ways. Sitting through the entire Symposium gave me a very broad education which is bound to assist in future thinking. The plenary lectures and posters also were valuable parts of this education. »

Prasanna de Silva
(Queen's University, Belfast, Northern Ireland)

Celle d'un industriel français

« D'un point de vue industriel, ce congrès présentait une partie importante sur les catalyses, homogène et hétérogène, pour la synthèse organique ainsi que sur les voies d'accès, chimique ou biochimique, à des composés à applications médicales (soins, diagnostics...).
Le volet environnemental s'est retrouvé, pour partie, dans le souci de « l'économie » d'atomes, développé par Barry Trost.
Les mécanismes de catalyse homogène et les processus à la surface du catalyseur, pour la catalyse hétérogène, restent souvent mal connus. Pourtant, des progrès pourront permettre d'améliorer la sélectivité et/ou la productivité des procédés industriels. Exemples développés ? Celui de l'acide acétique par carbonylation du méthanol ou celui de l'anhydride maléique par oxydation du butane.
Une activité importante continue à s'exercer dans la recherche de structures moléculaires à application médicale.
Les dendrimères en font partie. Leur propriété de complexant pour les espèces chargées positivement (proton, cations métalliques) peuvent avoir des applications en imagerie médicale et en diagnostic spécifique.
La nature reste encore une source à ne pas négliger dans la recherche de ces structures. Des molécules cytotoxiques de la famille du taxotère à usage antitumoral ont été données en exemple.
L'aspect environnement a été peu abordé dans les différentes communications. C'est dommage, car l'environnement a bien été mentionné comme un des soucis majeurs de l'ensemble des orateurs de la séance d'ouverture. Il contribue à la défense de notre activité, la production industrielle de produits chimiques, qui se retrouvent dans de multiples applications de notre vie quotidienne. On notera cependant quelques communications dans le domaine du traitement des déchets radioactifs par exemple.
L'« économie d'atomes » et celle des matières premières est essentielle en matière de maîtrise de l'impact sur l'environnement. La présentation qui nous a été faite fait appel, par exemple, à la catalyse par des complexes du Ru et à des réactions de cycloaddition. Ce domaine reste encore à explorer avant de pouvoir dégager des applications industrielles où les rendements chimiques viendront conforter l'approche fondamentale utilisée.
Globalement donc, un congrès intéressant pour les idées qui y ont été développées. Si le souci de développer davantage les préoccupations industrielles se maintient, il sera nécessaire, pour attirer davantage d'industriels, que les présentations soient plus concrètes. L'application ou au moins l'objectif d'application, et la stratégie pour l'atteindre devront apparaître plus clairement dans les exposés. Au même titre que les approches environnement et sécurité. »

Bernard Chabaud
(SNPE, Toulouse)

12-13 novembre 2002

Filières et recyclage 2002

Le colloque des professionnels sur les produits en fin de vie

Paris

Date limite d'inscription : 25 octobre 2002.

- Evelyne Perreon, Ademe.
  Tél. : 02 41 20 42 30. Fax : 02 41 20 41 98.
  evelyne.perreon@ademe.fr
  http://www.aderne.fr

Nouvelles dates

26-30 novembre 2002

Expoquimia, Equiplast & Eurosurfas 2002

International chemical plastics, rubber and surface treatment exhibition

Barcelone (Espagne)

- www.expoquimia.com
  www.equiplast.com
  www.eurosurfas.com

13 novembre 2002

Vers une économie du carbone

Paris-La-Défense

Marché des permis d'émission et mécanismes de flexibilité : des outils à disposition de l'entreprise pour atteindre les objectifs du protocole de Kyoto.

- Audrey Meunier, AFITE.
  Tél. : 01 40 23 04 50. Fax : 01 40 23 05 39.
  bureau@afite.org
  http://www.afite.org

13-15 novembre 2002

Carbon black world 2002

Nice

- Intertech Conferences.
  Tél. : +1 (207) 781 9800. Fax : +1 (207) 781 2150.
  info@intertechusa.com
  http://www.intertechusa.com

13-15 novembre 2002

TICE 2002

Technologies de l'information et de la communication dans les enseignements d'ingénieurs et dans l'industrie

Lyon

Date limite de soumission : 15 mars 2002.

- TICE 2002. Tél. : 04 72 43 64 78.
  Fax : 04 72 43 64 79. tice2002@insa-lyon.fr
  http://tice2002.insa-lyon.fr

14 novembre 2002

Le conditionnement des produits pharmaceutiques et cosmétiques

Interaction contenant-contenu et effet sur la durée de vie des produits

Paris

- Société des Experts Chimistes de France.
  Tél. : 01 48 76 17 24. Fax : 01 48 76 60 15.
  expert-chim@wanadoo.fr

14-15 novembre 2002 sfc

SFC Environnement 2002

Aspects analytiques et électrochimiques

Paris

Groupes Environnement et Électrochimie

(*L'Act. Chim.*, juillet 2002, p. 46)

- Jean-François Fauvarque.
  Tél. : 01 40 27 24 20. Fax : 01 40 27 40 74.
  fauvarqu@cnam.fr

15 novembre 2002

Drug hunting symposium

New targets, new tools and new drugs

Bruxelles (Belgique)

- LD Organisation.
  Tél. : +32 (10) 45 47 77. Fax : +32 (10) 45 97 19.
  secretariat@ldorganisation.com

20-23 novembre 2002

Educatec

Salon professionnel des équipements, systèmes, produits et services pour l'éducation et la formation

Paris

- Groupe Mm.
  Tél. : 01 41 18 86 18. Fax : 01 45 06 29 41.
  http://www.educatec.com

20-23 novembre 2002

3rd Italian-French Meeting

Organic chemistry towards interfaces

Pise (Italie)

- Anna Aglietto. anna@dcci.unipi.it
  http://www.dcci.unipi.it/~elit/tifmoc

21 novembre 2002 sfc

Maîtrise des risques industriels pour une chimie sûre et durable

Paris

(*L'Act. Chim.*, octobre 2002, p. 63)

- SCI. Tél. : 01 53 59 02 16. Fax : 01 45 55 40 33.
  jgrolere@wanadoo.fr
  http://www.scifrance.org/congres/maitrisedesrisquesindustriels/

22 novembre 2002 sfc

12e Journée Chimie Grand Sud-Ouest

Montpellier

26-29 octobre 2002

50e Journées nationales de l'Union des Physiciens

Physix et Chimix au pays des volcans

Clermont-Ferrand

Conférences au programme :

- *Le pneu, comment ça marche ?*, par Guy Tondeur (Michelin).
- *Matériaux nouveaux à base de bio-polymères*, par Paul Colonna (INRA).
- *Matériaux polymères : photoprotection*, par Jacques Lemaire (CNEP).
- *Merck Sharp Dhome : une industrie pharmaceutique en Auvergne*, par David O'Connel (Merck Sharp Dhome).
- *Optique sans lumière*, par Wanda Kaminski (Paris 7).
- *Une nouvelle optique*, par Didier Felbacq (LASMEA).
- *Modélisation physique des risques volcaniques*, par Benjamin Van Wyk de Vries (OPGC).

- http://www.cnam.fr/hebergement/udp

Sections Aquitaine/Languedoc-Roussillon/Midi-Pyrénées

(*L'Act. Chim.*, août-sept. 2002, p. 85)

- J.-L. Olivé. Tél. : 04 67 14 72 48.
  GSO@enscm.fr
  http://www.enscm.fr/GSO/

26-29 novembre 2002

NanoTech 2002

6th Annual European conference on micro and nanoscale technologies for the biosciences

Montreux (Suisse)

- http://www.NanoTech-Montreux.com

26-29 novembre 2002

Pollutec 2002

18e Salon international des équipements, des technologies et des services de l'environnement

Lyon

- info@imfdus.de
  http://www.pollutec.com

29 novembre 2002 sfc

1er Forum JSPS

Strasbourg

Section Alsace

(*L'Act. Chim.*, août-sept. 2002, p. 85)

- Patrick Pale.
  Tél. : 03 88 41 60 42. Fax : 03 88 41 60 42.
  ppale@chimie.u-strasbg.fr

2-5 décembre 2002

IUPAC polymer conference on the mission and challenges of polymer science and technology

Kyoto (Japon)

- Seiichi Nakahama.
  Tél. : +81 (3) 5734 2138. Fax : +81 (3) 5734 2887.
  snakaham@polymer.titech.ac.jp

4-5 décembre 2002 sfc

Chimiométrie 2002

Paris

Groupe Français de Chimiométrie

(*L'Act. Chim.*, avril 2002, p. 61)

- jgrolere@wanadoo.fr
  http://www.chimiometrie.org

9-10 décembre 2002 sfc

9e Journées de formulation

Lyon/Villeurbanne

Groupe Formulation

(*L'Act. Chim.*, août-sept. 2002, p. 85).

- Marie-Hélène Lara.
  Tél. : 04 72 44 81 21. Fax : 04 72 44 83 19.
  lara@cpe.fr

9-11 décembre 2002

Molécules du futur : les défis de la synthèse organique

15e Entretiens du Centre Jacques Cartier

Villeurbanne

- Josiane Prot, CPE Lyon.
  Tél. : 04 72 43 26 21. Fax : 04 72 43 14 08.
  http://Jacques-Cartier.univ-lyon1.fr/index.html

11-14 décembre 2002

EMEC3

3rd European meeting on environmental chemistry

Genève (Suisse)

- Montserrat Filella.
  montserrat.filella@cabe.unige.ch
  www.unige.ch/emec3/

21-24 janvier 2003

IFPAC 2003

17th International forum process analytical chemistry

Phoenix (AZ, États-Unis)

- Robert S. Zutkis, InfoSciences Services Inc.
  Tél. : +1 (847) 548 1800. Fax : +1 (847) 548 1811.
  infoscience@ais.net
  http://www.ifpac.com

Formation doctorale
Chimie organique fine

Villeurbanne

Les conférences ont lieu à 16 h dans le petit amphithéâtre de l'ESCPE-Lyon, domaine scientifique de La Doua, 43 bd du 11 Novembre 1918.

- **24 octobre 2002** : *Préparation industrielle du LY 333531, actif dans le traitement des rétinopathies, via un intermédiaire clé « Bis-mésylate » obtenu par une réaction d'hétéro Diels-Alder couplée à une résolution enzymatique*, par Jean-Claude Caille (PPG-Sipsy, Avrillé).
- **7 novembre 2002** : *De nouvelles cavités moléculaires pour la reconnaissance d'espèces neutres ou chargées*, par Jean-Pierre Dutasta (CNRS, ENS-Lyon).
- **14 novembre 2002** : *Accès général aux hétérocycles par cyclisation électrophile mettant en jeu des réactifs halogénés*, par Gérard Rousseau (CNRS/Univ. Paris-Sud).
- **28 novembre 2002** : Conférence de Thierry Schlama (Rhodia-CRL, St Fons). Titre non connu à ce jour.

- Bernard Cazes. Tél. : 04 72 44 85 39. cazes@univ-lyon1.fr

5-6 février 2003

Forum Horizon Chimie 2003

Paris

Forum réservé aux élèves ingénieurs et 3e cycle.

- ESPCI. Tél. : 01 45 35 41 82.
  http://www.forum.espci.fr

11-14 mars 2003

SITS 2003

Salon international des traitements de surfaces et revêtements

Paris-Nord Villepinte

- Exposium.
  Tél. : 01 49 68 54 81. Fax : 01 49 68 54 84.
  sits@exposium.fr
  http://www.sits.com

27-28 mars 2003

Congrès européen Matériaux bois polymères

Bordeaux

- Véronique Chauvel, CTBA.
  Tél. : 05 56 43 63 95. Fax : 05 56 43 63 02.
  woodpolymer@ctba.fr
  http://www.ctba.fr

2-4 avril 2003

ISE 2003

9th International seminar on elastomers

Kyoto (Japon)

- http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~kohjshin/index.htm

13-15 mai 2003

SEP 03

5e Congrès biennal francophone sur les techniques séparatives

Lyon

- contact@sep03.org
  http://www.sep03.org

19-21 mai 2003

8e Colloque international du Comité AISS Recherche

Outils pour l'application des directives européennes sur la santé au travail - Exemple du risque chimique

Athènes (Grèce)

- Elinyae.
  Tél. : +30 (10) 820 0220. Fax : +30 (10) 820 0222.
  mtrianti@elinyae.gr

15-20 juin 2003 sfc

HPLC 2003

27th International symposium on high performance liquid phase separations and related techniques

Nice

(*L'Act. Chim.*, août-sept. 2002, p. 86)

- MCI. Tél. : 01 44 53 72 20. Fax : 01 44 53 72 22.
  congres@mci-salons.fr
  www.hplc2003.com

17-19 septembre 2003 sfc

FRPM'03

9th European meeting on fire retardancy and protection of materials

Lille-Villeneuve d'Ascq

(*L'Act. Chim.*, août-sept. 2002, p. 86)

- Secrétariat FRPM'03.
  Tél. : 03 20 43 49 25. Fax : 03 20 43 65 84.
  frpm03@ensc-lille.fr
  http://www.ensc-lille.fr/actu/frpm/frpm03.html

SFC Eurochem 2002 est sur CD-Rom

- Le CD-Rom des abstracts des communications du congrès SFC Eurochem Toulouse 2002 est actuellement disponible au prix de 20 € (frais de port inclus).
- Un autre CD-Rom « Souvenirs du congrès SFC Eurochem Toulouse 2002 » contenant des photos, des extraits vidéo et le bilan du congrès est en cours de réalisation et sera disponible en octobre au prix de 10 € (frais de port inclus).

• Pour les recevoir, adresser votre règlement (chèque ou virement bancaire) à l'ordre de SFC Eurochem 2002, à l'adresse suivante : Jean-Gérard Wolf (trésorier SFC Eurochem 2002), Université Paul Sabatier, bât. 2R1, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse.

Club Histoire de la chimie

15 novembre 2002

Réunion du club

Paris

Le club Histoire de la chimie se réunira à 14 h 30 au siège de la SFC (250, rue Saint-Jacques, Paris 5e). La réunion sera consacrée à des « communications libres » où de jeunes chercheurs présenteront leurs travaux en cours.

• Marika Blondel-Mégrelis, marika.blondel-megrelis@libertysurf.fr

Clubs de jeunes

Lyon

Nouveau bureau

Président : Mikaël Berthod
Trésorier : Iyad Karame

• Mikaël Berthod, Laboratoire de catalyse et de synthèse organique, UMR 5622, bât. CPE, 43 bd du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne. Tél. : 04 72 44 81 20. mberthod@yahoo.fr

Parrainages

21 novembre 2002

Maîtrise des risques industriels pour une chimie sûre et durable

Paris

L'image de l'industrie chimique française et sa perception par le public ont été affectées depuis plusieurs années par un certain nombre d'incidents et de dysfonctionnements très médiatisés. La catastrophe de Toulouse a fortement accentué cette situation. Une Commission d'enquête parlementaire a formulé 90 propositions pour réduire les risques industriels et pour traiter leurs conséquences.

Ce colloque a pour objectif d'établir les origines des risques liés aux conditions de production et de manipulation des produits chimiques. Les chimistes et les sociétés savantes y engagent un débat sur la sûreté de fonctionnement, sur la maîtrise des risques et sur leur degré d'acceptabilité par la société civile (voir *L'Act. Chim.* août-sept. 2002, p. 85).

Le colloque se tiendra à la Maison de la Chimie sous la présidence de Hubert Curien, président de l'Académie des sciences avec au programme :

- Les risques industriels et la politique (allocution de François Loos, ministre délégué au Commerce extérieur, ancien président de la Commission d'enquête parlementaire sur la sûreté des installations industrielles).
- Présentation du colloque, par François Mathey (président de la SFC).
- Des propositions pour réduire ensemble les risques industriels, par le Ministère de l'écologie et développement durable.
- Sécurité, nouvelles interrogations et facteur humain, avec Claude Gilbert directeur de recherche-CNRS) et René Amalberti (professeur, Hôpital du Val de Grâce).
- Industrie chimique et sécurité avec Roger Grollier Baron (président de l'ADICRA).
- Témoignage sur la pratique de la maîtrise des risques dans les grands pays européens avec Jurgen Wettig (responsable de la Direction Seveso à la Commission européenne).
- Intensification de la communication, prise en compte des risques majeurs dans le cadre de l'engagement de progrès, avec Yves Guitton (UIC Rhône-Alpes).
- Table ronde animée par Jean-Philippe Pineau (INERIS) sur : L'évolution de la maîtrise des risques et quel futur ?
- Culture du risque : approche multidimensionnelle, par René Deleuze (président de l'Institut Européen de Sécurité Industrielle).
- Table ronde animée par Victor Sanchez (SPI-CNRS) sur : Le développement et diffusion de la culture du risque : sensibilisation de l'enseignement et de la recherche.
- Maîtrise des risques : perspectives d'action ?, par Jacques Cheylan (président de la SFGP, Aventis-Pasteur-Mérieux).

• SCI. Tél. : 01 53 59 02 16. Fax : 01 45 55 40 33. jgrolere@wanadoo.fr http://www.scifrance.org/congres/maitrisedesrisquesindustriels/

Bon anniversaire Monsieur Julia !

Notre ancien président Marc Julia fêtera son changement de décennie ce mois-ci. La rédaction et l'ensemble de la SFC lui souhaitent un bon anniversaire.

6-11 juillet 2003

EuroCarb 12

12th European carbohydrate symposium

Grenoble

Cette manifestation couvrira la majorité des domaines scientifiques concernant les glucides, les polysaccharides et les glycoconjugués. Les domaines de la synthèse et de la biosynthèse, des méthodes d'élucidations analytiques et structurales, de la biochimie, biologie et chimie médicinale, des biotechnologies et de l'environnement, ainsi que leurs applications industrielles y seront principalement abordés.

Date limite de soumission des communications : 1er décembre 2002.

• Secrétariat EuroCarb 12. CERMAV-CNRS. Tél. : 04 76 03 76 03. Fax : 04 76 54 72 03. eurocarb12@cermav.cnrs.fr http://eurocarb12.cermav.cnrs.fr/

Plis cachetés

La SFC a reçu les plis cachetés suivants (droits de garde 15 par pli cacheté déposé) :

- Le 24 juillet 2002, de Rhodia Chimie (réf. LPC 2017), enregistré sous le n° 378.
- Le 24 juillet 2002, de Rhodia Chimie (réf. LPC 2018), enregistré sous le n° 379.
- Le 9 septembre 2002, de Rhodia Chimie (réf. LPC 2023), enregistré sous le n° 380.
- Le 16 septembre 2002, de Rhodia Chimie, enregistré sous le n° 381.

Décès du professeur Alain Chambaudet

Nous apprenons avec émotion le décès d'Alain Chambaudet survenu le 4 août dernier.

Le professeur Alain Chambaudet était directeur du Laboratoire de microanalyse nucléaire à l'UFR des sciences et techniques de Besançon. Nous adressons à ses proches nos très sincères condoléances.

La rédaction

A propos du n° 7 de *L'Actualité Chimique*

Un éditorial remarquable qui mériterait d'avoir plus d'écho auprès des journalistes vilipendant la chimie dans sa globalité (en oubliant les médicaments).
Il pourrait s'enrichir un jour d'un **exemple des nombreux services rendus par la chimie à toute l'électronique** (du haut et du bas) en commençant par les puces avec un passage par les chlorosilanes, le polissage, les attaques chimiques (aqueuses ou plasma)... et un volume effarant d'effluents au gramme produit ! **On est encore loin de la chimie douce**. Et je ne parle pas de la chimie de l'arsenic pour l'AsGa ou de la purification de la phosphine pour l'InP.
L'article sur Wacker montre bien cette interdépendance chimie/électronique.

Pour **l'électrolyse de l'eau**, mon ami Robert Durand (un fin connaisseur du sujet depuis 25 ans) oublie que si dans le domaine de l'électrolyse de l'eau (au demeurant modeste), on achète quelques électrolyseurs à l'étranger, la France reste (encore) leader en technologie de l'électrochimie industrielle avec l'aluminium et les alcalins. Or son labo ignore superbement cette chimie (d'en bas) des sels fondus (à vocation diaboliquement lucrative) pour se consacrer à une chimie virtuelle (d'en haut ?) ; moralité, faute de soutien scientifique, la France risque aussi un jour d'importer des cellules de Norvège... Heureusement, quelques irréductibles (dont le directeur de l'ENSEEG) essaient encore de sauver ce savoir-faire français (et risquent même d'être appuyés par le nucléaire !). Quant à l'électrolyse de l'eau, je m'interroge sur sa portée écologico-énergético-économique : faut-il faire de l'hydrogène avec un rendement de 50 % à partir du nucléaire ou de l'hydraulique (barrages donc méthane) pour diminuer les gaz à effet de serre ?

Mais tout cela n'est pas très médiatique aujourd'hui...

Yves Bertaud
directeur adjoint
Agence Rhône-Alpes
pour la maîtrise des matériaux

« La SFC dans la cour des grands », suite du débat...

J'ai lu avec intérêt *L'Actualité Chimique* de juillet 2002 et plus particulièrement la réponse faite par Monsieur Pierre Vermeulin au sujet de votre éditorial et du message du Secrétaire général de la SFC « La SFC dans la cour des grands ? ».
Je suis diplômée d'un BTS chimie depuis juin 2001 et malgré toutes mes démarches auprès des grandes entreprises chimiques, je n'arrive pas à trouver un poste de technicien dans lequel je pourrais mettre au profit d'une entreprise mes qualités opérationnelles et mes connaissances et les enrichir.
Alors je reste d'autant plus consternée quand M. Pierre Vermeulin explique que dans les 5 à 10 ans à venir, plus de la moitié des scientifiques en poste dans les centres de recherche vont partir à la retraite (certes rien à voir avec un BTS mais peut-être pourrions-nous les seconder).
La chimie et ses techniques m'ont toujours passionnée, mais à l'heure d'aujourd'hui, il semble que c'est un cercle réservé à certains ; **il ne suffit pas de rendre plus attractives les carrières scientifiques mais de faire en sorte que les entreprises aient la volonté d'embaucher et fassent confiance aux jeunes diplômés** ; l'expérience demandée ne pourra être effective que lorsque nous aurons pu démontrer nos qualités et notre esprit d'initiative.

Véronique-Ingrid Martin
martinmiguel@wanadoo.fr

Espérons que ce courrier pourra retenir l'attention d'un DRH... !
Bernard Sillion

Exploitation chimique des substances renouvelables

Numéro spécial novembre-décembre 2002

Au sommaire :
L'utilisation directe
Les transformations chimiques
Les fermentations

Alfa Aesar®

Un des Leaders mondiaux dans la Production des Produits chimiques,
Métaux et Matériaux pour la Recherche

Une gamme de plus de 15000 produits:

COMPOSES INORGANIQUES, COMPOSES ORGANOMETALLIQUES,
COMPOSES ORGANIQUES, ELEMENT PURS, ALLIAGES,
COMPOSES DE METAUX PRECIEUX ET CATALYSEURS,
TERRES RARES, FLUX ANALYTIQUES, CERAMIQUE,
APPAREILS DE LABORATOIRE, STANDARDS AA/ICP
et encore plus.

Demandez gratuitement notre Catalogue !

Pour en savoir plus, visitez notre site internet:
www.alfa-chemcat.com • Email: gcat@matthey.com
Numero Vert: 00800 4566 4566 • Fax Vert: 00800 4577 4577
Johnson Matthey GmbH

3rd EUROPEAN MEETING ON ENVIRONMENTAL CHEMISTRY

EMEC3

DECEMBER 11-14, 2002 GENEVA/SWITZERLAND

Welcome

It is with great pleasure that we invite you to the 3rd European Meeting on Environmental Chemistry, to be held in Geneva, Switzerland from December 11 to 14, 2002.

EMEC3 will address the current and future status of environmental chemistry. The program will include keynote lectures and podium and poster sessions covering recent developments in the study of undisturbed ecosystems and anthropogenic impacts.

Geneva is well known for its hospitality and the Local Organising Committee has worked with enthusiam to allow you to fully experience the wintertime charm of this great city.

We sincerely hope that the Scientific Program will allow each of you to take part in creative discussions while also enjoying our beautiful city, its people and its surroundings.

Topics

Undisturbed (eco)systems and anthropogenic impacts

* Characterisation of natural and affected environments
* Environmental processes
* Analytical tools (emphasis on stable isotopes, tracers, hyphenated techniques, intercalibration)
* Eco-toxicology

Pollution treatment

* Green chemistry and environmentally friendly synthetic pathways
* Source pollution treatment
* Remediation and control

Development of new environmental tools

* Automated analytical techniques
* Analytical techniques for on field/in situ measurements
* Modelling

Teaching environmental chemistry

Local Organising Committee

Montserrat Filella, University of Geneva (Chairman) - Didier Perret, EPFL, Lausanne (Co-chairman) - Kristin Becker, EPFL, Lausanne - Brigitte Elbisser, ACE - Eric Lichtfouse, ACE - Jean-Luc Loizeau, CESNE, University of Geneva - Pascale Nirel, Service cantonal d'hydrobiologie, Geneva - Marylou Tercier, CABE, University of Geneva.

Contact

Montserrat Filella
Département de Chimie Minérale,
Analytique et Appliquée
Université de Genève
Quai Ernest-Ansermet 30
CH-1211 Genève 4
Switzerland
fax: 0041-22-7026069
e-mail: montserrat.filella@cabe.unige.ch

www.u-bourgogne.fr/ACE