

Livres

Modélisation moléculaire

H. Toulhoat

J1011 à J1015

Techniques de l'Ingénieur, 2007

Peut-être parce qu'elle n'est guère l'objet d'enseignements universitaires aux premiers ou seconds cycles, la modélisation moléculaire est un domaine de la chimie qui reste relativement méconnu. C'est une situation qu'il serait judicieux de voir modifiée, car elle occupe déjà une place importante dans la chimie (en particulier dans l'industrie chimique), et au rythme où progressent les ordinateurs, ses apports vont sans nul doute modifier notre discipline en profondeur – de sa recherche scientifique à ses applications industrielles.

La publication dans *Les Techniques de l'Ingénieur* par Hervé Toulhoat, adjoint au directeur scientifique et professeur à l'Institut Français du Pétrole, de cinq chapitres (environ 140 p.) sur la « modélisation moléculaire », apparaît ainsi comme une initiative importante qu'il faut connaître et faire connaître. S'étendant, d'une manière concise sans concessions, des racines de la discipline (en physique statistique, en mécanique quantique, en mathématiques appliquées), jusqu'aux applications qu'en fait aujourd'hui à grande échelle (ce que l'on ignore généralement) la grande industrie de la chimie et des matériaux, ces chapitres placent bien la modélisation moléculaire dans son positionnement original transversal à toute la chimie.

Le but de la modélisation est bien affiché : devenir un outil permettant de prévoir les propriétés de la matière – propriétés étant pris au sens le plus macroscopique qui soit, celui de sa réactivité chimique, mais aussi propriétés d'usage des produits de l'industrie chimique – à partir des structures atomiques et électroniques des molécules constitutives. Les « bases théoriques » (première partie) commencent donc par des rappels de physique statistique (la simulation de Monte Carlo par exemple), puisqu'elle fait le lien entre constituants microscopiques et ensembles macroscopiques. Mais les paramètres à utiliser proviennent de l'échelle microscopique ; vient donc l'exposé des techniques des calculs d'énergie d'ensembles de particules en interaction : techniques de la mécanique classique (« consistent force field », modèle AUA de l'atome équivalent), mais très vite surtout de la mécanique

Itinéraire de chimistes**1857-2007****150 ans de chimie en France avec les présidents de la SFC**

L. Lestel (coord.)

584 p., 39 € (**membres SFC : 27,30 €**)

EDP Sciences, 2008

Il aura fallu presque trois ans pour que le projet, initié par Josette Fournier, prenne la forme de ce bel ouvrage dans lequel une cinquantaine de chimistes et d'historiens racontent, à travers la vie de ces personnalités scientifiques, l'histoire de la chimie française.

Bravo et merci au Comité éditorial (Marika Blondel-Mégrelis, Roger Christophe, Danielle Fauque, Laurence Lestel, Marie-Claude Vitorge), aux auteurs, et à toutes celles et ceux qui, par leur soutien et leur dévouement, ont permis la sortie de cet ouvrage.

• À commander chez votre libraire ou chez EDP Sciences. Vous pouvez également vous le procurer directement au siège de la SFC (contact : Marie-Claude Vitorge, marie-claude.vitorge@sfc.fr). Voir p. 51.

quantique (l'équation de Schrödinger et le casse-tête des méthodes numériques de sa résolution). Le deuxième chapitre poursuit d'une manière plus spécialisée la présentation de ces méthodes de base ; à partir des méthodes de Hartree-Fock, puis de la fonctionnelle de la densité, se sont développées nombre de méthodes cherchant à approcher les précisions nécessaires pour que la modélisation moléculaire puisse répondre aux questions plus appliquées. Certaines d'entre elles sont exposées, sans objectif d'exhaustivité, mais pour faire comprendre le mouvement actuel des recherches dans le domaine, qui veut tirer parti de la progression des puissances de calcul pour construire des modèles atomistiques toujours plus représentatifs.

Le troisième chapitre (toujours dans les « bases théoriques ») nous conduit vers l'autre facette de la modélisation moléculaire : celle des propriétés de la matière ; car les modèles, conquis de haute lutte au prix de concepts sophistiqués et d'efforts numériques élaborés, sont là pour faire le lien entre les « propriétés d'ensemble » d'assemblées moléculaires et la structure des constituants. L'exposé illustre bien comment le calcul classique des propriétés mécaniques ou des propriétés thermodynamiques, fait traditionnellement par les chimistes au moyen de paramètres empiriques ou tirés d'analogies, peut se nourrir maintenant de quantités moléculaires calculées, approchant de vraies prévisions déductives. La même démarche est appliquée aux propriétés spectroscopiques des systèmes moléculaires, puis aux processus réactifs élémentaires. Les méthodes générales et la puissance des calculateurs conduisent à la constitution d'impres-

sionnantes bases de données – les descripteurs moléculaires – qui deviennent de vrais outils d'aide à la décision pour de grosses entreprises chimiques, permettant par exemple d'étayer leurs politiques de gestion de brevets ou généralisant les méthodes QSAR (« quantitative structure activity relationship ») d'exploitation des corrélations entre structures et propriétés : elles sont très utilisées par exemple pour la gestion des toxicités à l'Homme ou à l'environnement des molécules issues de l'activité humaine, mais le plus souvent encore empiriques.

La deuxième partie, « Mise en œuvre : exemple d'applications physico-chimiques », serait aussi une excellente façon d'aborder l'ensemble des chapitres, car elle illustre les apports concrets de la modélisation moléculaire à de nombreux domaines de grande importance pratique. Successivement : le calcul thermochimique du polymorphisme des hydroxydes d'aluminium, les équilibres en phase fluide (exemple du système benzène-disulfure d'hydrogène), l'adsorption pour prévoir la sélectivité des interactions d'hydrocarbures avec les zéolithes, l'influence de la nature des adsorbats pour rationaliser le contrôle de la morphologie des poudres cristallines dans les procédés de production (avec de belles démonstrations sur la forme de cristaux d'oxyde de titane déposés sous différentes conditions), la prévision des efficacités de divers ligands dans des réactions de catalyse homogène, la catalyse hétérogène et la définition de nouveaux catalyseurs (ou l'optimisation de systèmes catalytiques) illustrée par l'hydrodésulfuration par des sulfures de molybdène et cobalt, la rationalisation grâce à la modélisation moléculaire s'appuyant sur le principe de Sabatier de la



Dans les mains de Laurence Lestel, le 8 janvier 2008 à la SFC : le premier exemplaire !



21^e Édition du prix Roberval

Prix francophone du livre et de la communication en technologie

Au départ : 450 auteurs candidats et 94 œuvres sélectionnées en provenance de 15 pays ; et comme chaque année, le jury, assisté d'experts, d'universitaires et d'industriels, a eu bien du mal à choisir les lauréats parmi les 25 œuvres nominées, toutes de grande qualité. La cérémonie de remise des prix s'est tenue le 23 janvier dernier, au Palais de la découverte. Nous ne mentionnons ici que ce qui peut intéresser nos lecteurs chimistes, et vous invitons à découvrir sur le site les autres œuvres retenues et récompensées dans les diverses catégories.

- Prix Enseignement supérieur : *Les nanosciences : nanomatériaux et nanochimie*, par P. Houdy, C. Bréchnac, M. Lahmani (Belin).
Mention spéciale : *Science des aliments : biochimie, microbiologie, procédés, produits* (2 vol.), par R. Jeantet, T. Croguennec, G. Brulé, P. Schuck (Tec & Doc Lavoisier).

Était nommé *Les nouvelles microscopies : à la découverte du nanomonde*, par L. Aigouy, C. Frétnigny, Y. De Wilde (Belin).

- Prix Grand public : mention spéciale pour *L'énergie nucléaire, comprendre l'avenir*, par B. Barré, P.-R. Bauquis (Éditions Hirlé).

- Prix Multimédia : étaient nommés *Nanotechnologies et santé* de C. Girard (CNRS – Sagascience), et *Guide de préparation des échantillons pour la microscopie électronique en transmission* de J. Ayache, L. Beaunier, J. Boumendil, G. Ehret, D. Laub (Publications de l'Université de Saint-Étienne).

- Prix Télévision : était nommé *Le retour du nucléaire* de M. Masson, J. Richard (Radio-Canada).

Roselyne Messal

• <http://prixroberval.uto.fr>

recherche de nouveaux catalyseurs pour toute une classe de réactions d'importance très actuelle (comme l'activation électrochimique de l'eau), la définition de descripteurs moléculaires pour prédire nombre de propriétés (exemple de la diffusion en phase liquide venant confirmer le modèle intuitif d'Einstein !) ou, objectif pratique évident, le nombre de cétones des hydrocarbures pour optimiser la combustion diesel. Cette énumération impressionnante dans sa diversité, mais aussi dans l'importance des questions abordées, permet de faire sentir le rôle de la modélisation moléculaire dans l'industrie d'aujourd'hui : donner des atouts pour la réussite d'enjeux industriels.

Elle est ainsi devenue indispensable. Faisant bien entendu l'objet de nombreuses recherches méthodologiques, comme en témoigne le développement de méthodes permettant de traiter les changements d'échelles temporelles (nécessaires pour aboutir à la compréhension de la réactivité catalytique) ou spatiales pour s'appliquer aux fluides complexes (émulsions, micelles, cristaux liquides) actuellement très recherchés par l'industrie, la modélisation moléculaire est en train de confirmer les promesses utopiques qu'osaient faire ses promoteurs.

Le chimiste, qu'il soit enseignant, chercheur scientifique ou ingénieur dans l'industrie, trouvera beaucoup de satis-

faction à mieux connaître et mieux comprendre ce domaine grâce à la lecture des exposés d'Hervé Toulhoat. Ces chapitres sont bien adaptés à ceux qui voudraient entrer dans le domaine (un ultime chapitre fournit ainsi un précieux catalogue des logiciels accessibles aux praticiens). Il permet par ailleurs, certes au prix d'un certain effort (il ne s'agit pas de vulgarisation), de prendre la mesure des tendances nouvelles capitales qui ont lieu dans la façon dont notre discipline est pratiquée. Pour des raisons scientifiques, techniques et culturelles, l'effort doit être fait car il est clair que, bien que resté ignoré de la plupart des non-spécialistes, le domaine de la modélisation moléculaire est porteur d'une réelle révolution déjà en cours dans la chimie.

Paul Rigny

• http://www.techniques-ingenieur.fr/dossier/modelisation_moleculaire_mise_en_oelig_uvre/J1014



Feedstock recycling and pyrolysis of waste plastics

J. Scheirs, W. Kaminsky (eds)

785 p., 200 £

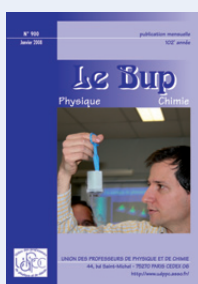
Wiley, 2006

Cet ouvrage est édité par J. Scheirs, spécialiste du recyclage des plastiques, déjà éditeur de *Polymer recycling : science, technology and applications* (Wiley, 1998), et par W. Kaminsky, spécialiste de la catalyse et de la pyrolyse des polymères. Bien documenté, avec beaucoup de références de publications, de brevets ainsi que de schémas et photographies de procédés industriels, il traite de la pyrolyse des polymères en vue de produire diesel, essence, kérosène et lubrifiants. Il est divisé en six grandes parties : introduction détaillée, catalyse (métallocène...) appliquée au craquage, qualité des carburants, types de réacteurs, récupération des monomères, développements en Asie.

L'intérêt de la pyrolyse qui est mis en avant est l'application à des déchets ni lavés, ni triés. En plus d'études concernant souvent la pyrolyse d'un polymère seul (chapitre sur la pyrolyse du PEhd non mélangé à d'autres déchets...) ou en mélanges binaires, il y a des exemples de pyrolyses de mélanges complexes, comme celle des déchets ménagers (HDPE, LDPE, PP, PVC, PS,

Bulletin de l'Union des professeurs de physique et de chimie (le « Bup »)

La rédaction de *L'Actualité Chimique* a sélectionné pour vous quelques articles.



N° 900 (janvier 2008)

- Étude informatisée de la compression d'un gaz, par F. Bruot.
- La science illustrée, par D. Menillet, L. Mordenti, C. Girard.
- Quelques maquettes sur le thème des énergies renouvelables, par S. Celles.
- Est-il bien raisonnable de conserver du dibrome dans nos armoires de réactifs ?, par M. Ficheux.
- Le dichromate de potassium et la prévention du risque chimique, par J.-L. Vignes, C. Tamain.

• Sommaires complets, résumés des articles et modalités d'achat sur <http://www.udppc.asso.fr>

PET, inertes) où les résultats sur un polymère peuvent diverger de ce qui aurait été obtenu s'il avait été traité seul. D'autre part, la qualité des carburants et lubrifiants qui peuvent être obtenus par des procédés de pyrolyse industrielle va dépendre de la composition des déchets traités. Quant à la récupération des monomères, elle est surtout intéressante lorsque ceux-ci sont chers (méthyl méthacrylate, MMA), ou contenus dans des polymères fortement présents sur les marchés comme le PET.

À l'heure où l'on demande de plus en plus aux projets de recherche d'intégrer les aspects « analyse de cycle de vie » et « toxicologie », l'ouvrage donne quelques références sur ces aspects et fournit aussi des données économiques. On pourra également apprécier le chapitre consacré aux perspectives offertes par les procédés de pyrolyse sous micro-ondes qui semblent pouvoir donner des résultats encourageants sans catalyseurs métallo-cènes dont les impacts environnementaux peuvent être problématiques.

Pour ceux qui s'intéressent au « recyclage matière » des polymères, qui s'applique aussi à des mélanges non triés et non lavés (en travaillant sur le couple compatibilisation/procédé de mise en œuvre), ainsi qu'à l'intégration

de traceurs (visant à améliorer le tri) dans les polymères, cet ouvrage peut fournir des données sur la stabilité des polymères en présence de métaux... On peut aussi y trouver des données utilisables pour mieux gérer les différences de viscosité de polymères recyclés en mélanges, par exemple en réduisant la viscosité d'un des polymères pour avoir des viscosités des constituants du mélange proches.

Valérie Massardier

À signaler



ChemSusChem
Chemistry & Sustainability,
Energy & Materials

Le nouveau journal interdisciplinaire d'EUCHEM Soc (Editorial Union of Chemical Societies), dont le premier numéro devrait sortir ce mois-ci, a mis en ligne ses premiers articles – à découvrir sur le site de Wiley InterScience* – et lance un **appel à contributions** autour des thèmes

couvrant son domaine de prédilection : la chimie et le développement durable (biocatalyse, biotechnologies, énergies renouvelables, photovoltaïque, captage et stockage du dioxyde de carbone, hydrogène et piles à combustible, et bien d'autres sujets encore...).

*www.chemsuschem.org



FutuRIS 2007
La recherche et l'innovation en France

Sous la direction de J. Lesourne,
D. Randet
470 p., 27 €
Éditions Odile Jacob, 2008

Cet ouvrage est le fruit des travaux menés par la plate-forme FutuRIS (Futur, Recherche, Innovation, Société) qui rassemble acteurs et experts de la recherche et de l'innovation. Les lecteurs y trouveront un bilan actualisé de la situation française, ainsi qu'une réflexion sur le futur.

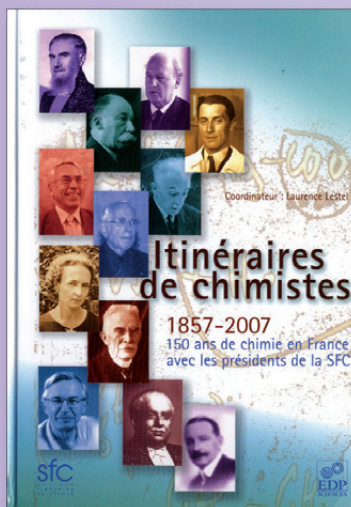


Itinéraires de chimistes 1857-2007



150 ans de chimie en France avec les présidents de la SFC

Coordonné par Laurence Lestel



À travers les portraits de quatre-vingt-huit personnalités de la chimie française, ce livre retrace non seulement l'histoire de la Société française de chimie, qui fête en 2007 son cent cinquantième anniversaire, mais aussi le parcours scientifique exceptionnel d'une communauté d'hommes et femmes qui écrivit, une à une, toutes les pages de la chimie moderne. Les soixante-quinze présidents qui se succédèrent à la tête de la SFC reflètent bien la diversité et la richesse de ces personnalités : les plus célèbres (Dumas, Berthelot, Moissan) comme ceux qui le sont moins ; leurs parcours d'industriels (Poulenc, Thesmar, Paul), d'enseignants ou de chercheurs ; leur reconnaissance par leurs pairs de leurs qualités scientifiques (quarante-quatre furent académiciens). Ils représentent tous les courants de la chimie française, de la chimie organique à la chimie du solide, en passant par la chimie analytique ou le nucléaire.

Autant de parcours exceptionnels et de travaux remarquables que ce livre restitue à travers des notices biographiques décrivant, pour chacune de ces personnalités, sa biographie, ses travaux scientifiques et son rôle en tant que président de la Société. Sont également adjoints les présidents d'honneur ainsi que les huit prix Nobel français de chimie qui comptèrent Marie Curie et Irène Curie, sa fille, parmi leurs lauréats ; un seul d'entre eux, Moissan, fut président de la Société.

Écrit par une cinquantaine de chimistes et d'historiens et coordonné par Laurence Lestel, chimiste et historienne, actuelle présidente du Club d'histoire de la chimie de la Société française de chimie, ce livre intéressera les chimistes et les historiens des sciences qui souhaitent découvrir le fantastique essor de la chimie française.

• Parution Janvier 2008 • ISBN : 978-2-86883-915-2
• 584 pages (couleur) • Prix Membres SFC : 27,30 € TTC (au lieu de 39 € TTC)

www.edpsciences.org

www.sfc.fr