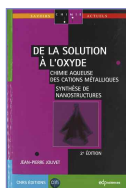


## Livres



**De la solution à l'oxyde**  
**Chimie aqueuse des cations**  
**métalliques**  
**Synthèse de nanostructures (2<sup>e</sup> éd.)**  
 J.-P. Jolivet  
 444 p., 65 €  
 EDP Sciences/CNRS Éditions  
 Collection Savoirs actuels, 2015

La première édition de cet ouvrage, parue en 1994, avait déjà marqué la communauté des nombreux chimistes concernés par la synthèse d'oxydes divisés, autant dans les laboratoires académiques que dans les laboratoires industriels. Cette classe de matériaux trouve en effet une très vaste gamme d'applications, depuis la catalyse hétérogène (supports et phases actives) jusqu'aux pigments, en passant par les précurseurs de céramiques, les matériaux pour l'optique, le magnétisme, l'électronique... En outre, ils sont omniprésents dans notre environnement, et aussi bien les mécanismes de leur genèse que leurs propriétés de volume et de surface sont au cœur de bien des questions de chimie environnementale, de géochimie, voire de biologie et de cosmochimie.

Les progrès considérables réalisés en quelques décennies dans la synthèse de nanostructures d'oxydes de composition chimique, taille et morphologie contrôlées, autorisent de grands espoirs, autant pour l'accès à des propriétés d'usage exacerbées ou nouvelles, que pour offrir des systèmes modèles mieux définis à des stratégies expérimentales visant la compréhension de phénomènes. Notre ami Jean-Pierre Jolivet, professeur émérite à l'Université Pierre et Marie Curie (UPMC), est l'un des acteurs reconnus de ces progrès, avec ses collègues et ses élèves du Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée (LCMC). Ensemble, ils ont concrétisé la célèbre « chimie douce », piste ouverte par Jacques Livage au milieu des années 1970. Ce livre a pour base le cours dispensé par Jean-Pierre pendant de longues années aux étudiants du master « Matériaux » de l'UPMC, mais tout en conservant sa vocation pédagogique, il est devenu une véritable somme à l'usage des professionnels.

Cette deuxième édition augmente la première de vingt ans de résultats nouveaux, fruits d'une intense activité sur un front de recherche à l'échelle mondiale, au sein duquel le LCMC a constamment gardé un rôle éminent, capitalisant de ce fait une information de première main. L'introduction (chapitre 1) met d'emblée l'accent sur les propriétés spécifiques des nanoparticules et les extraordinaires enjeux de leur élaboration rationnelle. Ceci contribue à motiver le lecteur pour suivre le parcours ardu mais très méthodique auquel l'invite son professeur : ce parcours convoque l'ensemble des connaissances de socle en chimie et physique exigées d'un étudiant à l'issue de la licence et invite de surcroît à les approfondir. Le chapitre 2 décrit l'eau, à la fois le plus simple et le plus complexe des solvants, et la spéciation des cations en solution aqueuse. Le chapitre 3 décrit les mécanismes de condensation conduisant aux polycations et polyanions par les voies d'oligomérisation et oxolation des cations hydroxylés. Le suivant est consacré aux aspects thermodynamiques, cinétiques et structuraux de la formation des oxydes en solution, détaillant les effets de valence et de position des cations dans le tableau périodique. Le chapitre 5 expose l'état des connaissances sur la chimie et la physico-chimie de surface des oxydes, en considérant plus particulièrement les interfaces oxyde-solutions et les caractéristiques qui stabilisent la dispersion des nanoparticules, la réactivité des surfaces, l'adsorption, et enfin le contrôle de la taille et de la morphologie des nanoparticules.

Les chapitres suivants (6 à 8) illustrent pour des systèmes spécifiques mais de grande importance industrielle ou par leur rôle dans la nature, le puissant éclairage des principes de base précédemment exposés : aluminés (y compris ces « aluminés de transition » qui constituent le principal support des catalyseurs en raffinage et pétrochimie) et aluminosilicates (y compris les argiles et les zéolithes) ; les oxydes de fer, dans toute leur versatilité ; les dioxydes de Ti, Mn et Zr, choisis pour la richesse de leurs chimies, liée à leur polymorphisme, et pour l'importance de leurs applications (catalyse et photocatalyse pour  $\text{TiO}_2$ , matériaux d'électrodes pour  $\text{MnO}_2$ , céramiques et conducteurs ioniques à haute température pour les zircons  $\text{ZrO}_2$ ).

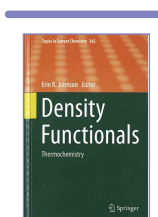
La conclusion est concise mais d'une grande densité conceptuelle : avec cette « antisèche » en tête, l'étudiant

pourra affronter tous les contrôles, et l'ingénieur tous les projets, à condition évidemment d'avoir bien étudié et bien digéré l'ensemble au préalable !

Près de 800 références sont indiquées en fin d'ouvrage, classées par premier auteur dans l'ordre alphabétique et appelées au fil du livre par ce nom d'auteur et l'année de publication. Le lecteur bénéficie également d'un index, toujours fort utile, tandis que les versions en couleur de nombreuses figures, parfois fort belles, sont reportées dans un cahier final d'une dizaine de pages.

Un très bel outil de travail, de connaissance, de réflexion : l'œuvre d'une vie. Merci Jean-Pierre.

Hervé Toulhoat



**Density functionals**  
**Thermochemistry**  
**Topics in current chemistry 365**

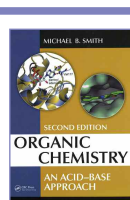
E.R. Johnson (ed.)  
 189 p., 200,44 €  
 eBook : 154,69 €  
 Springer, 2015

Avec l'explosion de l'utilisation des modélisations employant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), cet ouvrage spécialisé permet d'apprécier la qualité des résultats de modélisation publiés ces dernières années dans de nombreux domaines, de la chimie à la physique, la biologie ou les matériaux. Divisé en sept chapitres, il est le fruit de la contribution de nombreux auteurs, dont certains sont renommés comme John P. Perdew, Axel D. Becke ou Stephan Grimme.

La DFT est une théorie exacte qui relie la densité électronique d'un système chimique à son énergie. Elle permet de prédire *ab initio* les propriétés thermodynamiques de molécules, ce qui est d'intérêt fondamental dans de nombreux domaines. Bien que son existence soit démontrée, la forme de la fonctionnelle reliant densité électronique et énergie n'est pas connue, et de nombreuses propositions d'approximation ont été faites. L'utilisation de ces fonctionnelles approximées conduit nécessairement à une erreur sur l'estimation des grandeurs thermodynamiques calculées.

Après une présentation de la théorie et du zoo des fonctionnelles proposées dans la littérature, le premier chapitre s'attache à évaluer l'erreur commise par des fonctionnelles récentes sur des données thermodynamiques de référence et des réactions chimiques « de la vraie vie », plus représentatives de l'usage de ces fonctionnelles. Ce chapitre démontre clairement les avancées récentes dans le développement de nouvelles fonctionnelles plus précises, conduisant à une erreur d'environ 2 kcal/mol pour des systèmes étendus (plus de cinquante atomes). Le second chapitre se focalise sur la chimie de surface, soulignant les limitations des approximations toujours couramment utilisées dans le domaine (« generalized gradient approximation »). Le troisième s'attaque à une problématique qui a suscité de nombreux développements ces dernières années : l'inclusion des interactions de van der Waals dans l'évaluation de l'énergie par les fonctionnelles. Dans chacun de ces chapitres, la validation de nouvelles fonctionnelles passe par une comparaison à des données de référence et une évaluation statistique de l'erreur commise. Le quatrième chapitre souligne la difficulté de cet exercice et combien le choix du jeu de données de références et des critères de qualité peut influencer les conclusions. Cette analyse peut s'étendre à tout domaine scientifique nécessitant la validation d'un modèle ou d'un jeu d'approximation et intéressera de nombreux lecteurs. Les deux derniers chapitres abordent des développements récents visant des systèmes fortement corrélés ou magnétiques et s'adressent aux spécialistes du domaine. Par son contenu de référence, ce livre trouvera naturellement sa place sur les étagères des laboratoires de recherche qui produisent ou utilisent des résultats DFT.

Carine Michel



**Organic chemistry (2<sup>nd</sup> ed.)  
An acid-base approach**  
M.B. Smith  
1155 p., 86 £  
CRC Press, 2016

La seconde édition de ce gros ouvrage présente des nouveautés intéressantes pour les lecteurs, étudiants en apprentissage de la chimie organique.



### La Lettre de l'Académie des sciences n° 37-38

La séance solennelle commémorant **les 350 ans de l'Académie des sciences (1666-2016)** s'est tenue le 28 juin dernier sous la coupole de l'Institut de France. Huit académiciens, comme autant de sections de l'Académie, ont retracé l'histoire de leur discipline en mettant en lumière les étapes importantes qui ont été franchies et en rendant hommage aux principaux scientifiques, français ou étrangers, qui ont concouru à l'évolution, voire à la révolution, de leur discipline. Ce numéro spécial (printemps-été/automne-hiver 2016) présente les actes de cette grande journée dédiée à l'histoire des sciences, notamment l'allocution de Jacques Livage : « La chimie, science de la matière : comprendre et créer ! ».

Saviez-vous quels ont été les deux premiers chimistes à l'intégrer en 1666 ? **Claude Bourdelin** (1621-1699), académicien chimiste en 1666, pensionnaire chimiste, premier titulaire nommé par Louis XIV le 28 janvier 1699, et **Samuel Cottereau du Clos, dit Duclos** (vers 1598-1685), médecin du roi et chimiste, académicien chimiste en 1666. Ils travaillèrent aussitôt ensemble à l'examen des eaux minérales du royaume [1].

• À découvrir sur :

[www.academie-sciences.fr/fr/La-Lettre-de-l-Academie-des-sciences/350-ans-de-science.html](http://www.academie-sciences.fr/fr/La-Lettre-de-l-Academie-des-sciences/350-ans-de-science.html)

[1] Dorveaux P., Apothicaires membres de l'Académie royale des Sciences. I. Claude Bourdelin, *Bulletin de la Société d'Histoire de la Pharmacie*, 1929, 64, p. 289, [www.persee.fr/doc/pharm\\_0995-838x\\_1929\\_num\\_17\\_64\\_10611](http://www.persee.fr/doc/pharm_0995-838x_1929_num_17_64_10611).

Celle-ci est abordée par types de mécanismes réactionnels en général. Des figures des chimistes cités sont présentes assez souvent dans le texte, et des exemples d'applications aux produits naturels illustrent abondamment chaque chapitre.

L'approche acido-basique est privilégiée et les notions de nucléophilie-électrophilie sont introduites progressivement. La rétrosynthèse est définie avec des exemples simples, et des exercices progressifs permettent des analyses plus vastes après le chapitre de la chimie organométallique qui est présenté de façon simple et précise. Les deux chapitres sur les oxydations et les réductions sont très pédagogiques. De plus, des exercices d'application sont proposés aux lecteurs, avec des solutions accessibles sur un site web dédié. Un glossaire précis des abréviations utilisées et un index détaillé complètent l'ouvrage. La qualité de la typographie et des figures est à mentionner.

Un regret cependant : il manque parfois l'aspect orbitalaire dans l'interprétation des mécanismes réactionnels qui n'est seulement présenté que lors des réactions de Diels-Alder et péricycliques.

En résumé, un ouvrage utile destiné aux étudiants qui cherchent à « apprivoiser » la chimie organique.

Jean-Pierre Foulon

### À signaler



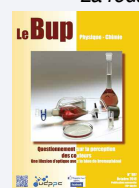
### Chimie verte Concepts et applications

J. Augé, M.-C. Scherrmann  
505 p., 69 €  
EDP Sciences, Collection  
Savoirs actuels, 2016

Comment les concepts de chimie verte peuvent conduire à élaborer une chimie innovante avec des objectifs économiques, environnementaux et éthiques, donnant au chimiste une place prépondérante dans la société : les réactions décrites dans cet ouvrage mettent en exergue l'économie d'atomes, la prévention des déchets, la recherche de catalyseurs efficaces, l'optimisation du milieu réactionnel, des réactifs et des procédés, l'efficacité du traitement post-réactionnel, pour une chimie pleinement respectueuse de l'environnement.

### 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° 987 (octobre 2016)

- Les multiples visages des orbitales moléculaires, par A. Moncomble et V. Tognetti.
- Questionnement sur la perception des couleurs : une illusion d'optique avec le bleu de bromophénol, par J. Piard, J.-P. Placial-Marzin et C. Doré.

• Sommaires complets, résumés des articles et modalités d'achat sur [www.udppc.asso.fr](http://www.udppc.asso.fr)