Réflexions sur la chimie physique

Dimitra Markovitsi* *directeur de recherche CNRS,* **Richard Lavery**** *directeur de recherche CNRS*

Ce document est le fruit d'une discussion très large au sein du conseil de la division Chimie physique. Il débute par un bref historique de la chimie physique. Sont présentés, ensuite, les défis auxquels est confrontée la physico-chimie aujourd'hui, ainsi que son impact sur la société en général.
Une version complétée par une présentation de la formation et de la carrière des physico-chimistes sera disponible ultérieurement sur le site Web de la SFC. Par ailleurs, une page d'information destinée aux étudiants qui souhaitent entreprendre une carrière en chimie physique peut être envoyée par les auteurs sur demande.

Introduction

La chimie physique a pour but de comprendre la structure, les propriétés et les transformations de la matière, des comportements macroscopiques aux mécanismes moléculaires. Le rôle du physico-chimiste consiste à regrouper, à analyser des informations en provenance de toutes les branches de la chimie et à concevoir des modèles prédictifs. Ainsi, la chimie physique sous-tend de nombreux domaines de la science moderne et agit comme moteur pour faire avancer plusieurs domaines. En s'appuyant sur les données et les concepts de la chimie, de la physique et des mathématiques, la chimie physique contribue à des domaines aussi divers que la médecine, la biologie moléculaire, la biochimie, l'ingénierie moléculaire, le génie des procédés, la science des matériaux et les sciences de la terre et, par là même, s'enrichit.

L'histoire de la chimie physique

La chimie physique a une histoire illustre de presque trois cents ans. Jusqu'au début de notre siècle, elle a été essentiellement européenne. Pendant cette période, les physico-chimistes ont joué un rôle fondamental dans le développement des sciences physiques modernes qui ont eu un retentissement majeur sur l'industrie et sur l'évolution de notre société. Les aspects physiques des systèmes chimiques ont commencé à être étudiés dès le début du XVIIIe siècle grâce au travail de Lavoisier, Davy, Berzelius et Lomonosov. Ensemble, ils ont posé les fondements de la chimie moderne, et jeté les bases d'une notation chimique simplifiée en étudiant les processus fondamentaux tels que la combustion, la catalyse et la corrosion, et fondé les études de la réactivité et de l'analyse chimique. Déjà, à partir de cette époque, des liens forts ont été tissés avec les mathématiques et la physique, ainsi qu'avec la science naissante du vivant. Dans ce domaine, citons le travail de Lavoisier sur la chimie de la respiration et les recherches de Galvani sur le rôle de l'électricité animale qui, avec le travail de son élève Volta, ont conduit à la première pile et au développement de l'électrolyse.

Un intérêt croissant pour les gaz et les solutions ioniques s'est manifesté au début du XIXe siècle. La voie a ainsi été ouverte au développement de la théorie atomique (Dalton, Avogadro et Gay-Lussac) et à la compréhension des interactions moléculaires (van der Waals) qui ont fondé la chimie physique moderne. Ces progrès ont été fondamentaux dans l'évolution des concepts de la stéréochimie (van't Hoff et Berthelot) et de l'isomérie (von Liebig et Bunsen). Ils ont jeté les bases de la spectroscopie et contribué au déclin de la théorie de l'essence vitale. A la même époque, de grands pas ont été franchis par Faraday qui a notamment fondé l'électrochimie. D'autres noms célèbres (Gibbs, Le Chatelier, Okwald et Nernst) sont associés au développement de la thermodynamique, de la cinétique chimique et de la mécanique statistique. Ces domaines de recherche ont fortement participé à la croissance exponentielle de l'industrie chimique pendant la même période.

Ce progrès rapide s'est encore accéléré au début du XXe siècle avec la compréhension de la structure des atomes (Rutherford, Bohr, Perrin) et la découverte de la radioactivité naturelle (Becquerel et Curie) et artificielle (Joliot-Curie). Puis, la mécanique quantique a permis l'approche théorique des liaisons interatomiques et a induit des développements dans les domaines de la chimie (Lewis, Pauling, Onsager et Coulson) et de la radiochimie (Soddy et Urey). Plusieurs techniques d'études physiques ont été mises au point pendant cette période, parmi lesquelles on peut citer l'électrophorèse et la chromatographie (Tizelius), l'ultra-

* CEA/Saclay SCM, CNRS URA 331, Laboratoire de photophysique et de photochimie, 91191 Gif-sur-Yvette.
Tél. : 01.69.08.46.44. Fax : 01.69.08.34.66.
E-mail : dmarkovitsi@cea.fr
** Laboratoire de biochimie théorique, CNRS UPR 9080, IBPC, 13, rue Pierre et Marie Curie, 75005 Paris.
Tél. : 01.43.25.26.09. Fax : 01.43.29.56.45.
E-mail : rlavery@ibpc.fr

centrifugation (Svedberg), la spectroscopie de masse (Aston) et l'emploi des faisceaux moléculaires (Stern). Notre siècle a été également le témoin de nombreux développements dans la mécanique statistique et la thermodynamique des systèmes hors équilibre (Hinshelwood et Prigogine), dans l'étude du comportement des systèmes complexes et des polymères (Flory et de Gennes), de la spectroscopie (Porter et Ernst) et dans la théorie de la réactivité chimique (Marcus).

La chimie physique aujourd'hui

Aujourd'hui, les aspects classiques de la chimie physique se développent activement à travers de nombreux domaines, tels que la spectroscopie, la photochimie, la science des polymères, l'électrochimie, la radiochimie, la catalyse, la chimie analytique et la chimie théorique.

Les objets qui suscitent l'intérêt du physico-chimiste ont également évolué des états bien connus de la matière - les gaz, les liquides et les solides - vers des systèmes aussi complexes que les cristaux liquides, les colloïdes, les gels, les solgels et les aérosols. Par ailleurs, beaucoup d'attention est portée aux interactions sur des surfaces ou aux interfaces qui sont au cœur des phénomènes aussi importants que l'adhésion, le mouillage, la friction et la catalyse. Ainsi, les éléments constitutifs sont passés de simples atomes ou molécules vers des édifices moléculaires stabilisés par des forces inter- ou intramoléculaires faibles. Une application majeure de ce travail est la création de nouveaux matériaux qui possèdent des propriétés macroscopiques sophistiquées, tels que les gels et les alliages « intelligents », les nouvelles céramiques et les matériaux composites, les supraconducteurs et les ferrofluides. Remarquons, aussi, les nanostructures fascinantes qui incluent les fullerènes et les nanotubes.

L'étude structurale de ces objets est facilitée par de nombreuses avancées dans les techniques traditionnelles telles que la diffraction des rayons X. Ainsi, la diffraction aux petits angles aide à élucider la nature des systèmes moléculaires organisés. Les sources de rayonnement intense, fournies par les synchrotrons, permettent l'étude des microcristaux et des processus dynamiques, grâce à des signaux résolus dans le temps. De la même façon, le développement des champs très intenses, des techniques d'analyse multidimensionnelle et des substitutions isotopiques étendent le champ d'application de la spectroscopie RMN qui, aujourd'hui, joue un rôle majeur dans l'imagerie médicale. D'autres informations sur la structure et la dynamique peuvent encore être obtenues par la diffusion de neutrons. Au niveau le plus fin, les techniques de microscopie à champ proche (STM : microscope à balayage à effet tunnel, AFM : microscope à force atomique) permettent de pénétrer jusqu'au cœur de la matière pour révéler les atomes et les molécules individuelles. Parmi d'autres découvertes, ces techniques ont mis en lumière l'étonnante complexité des surfaces considérées auparavant comme des objets réguliers. Au-delà de l'observation, il devient même possible de manipuler des atomes et des molécules afin d'étudier leurs interactions et leurs propriétés mécaniques.

Si nous considérons les gammes de temps, les limites de l'observation ont reculé au niveau de la femtoseconde et permettent l'étude des espèces, à très courte durée de vie, des effets cohérents, des transferts de charges ou d'énergie ultrarapides... D'autre part, la compréhension des réactions chimiques sous conditions extrêmes de pression ou de température, qui ont des applications comme l'étude de plasmas, la chimie interstellaire ou la cristallisation en microgravité, constitue aujourd'hui les cibles de choix pour le physico-chimiste.

Plusieurs liens existent d'ores et déjà entre la chimie physique et la biologie structurale et moléculaire. Ils permettent de mieux comprendre l'organisation, les interactions des macromolécules biologiques et les aspects fondamentaux du métabolisme des êtres vivants. La chimie physique est aussi indispensable pour décortiquer les mécanismes de la reconnaissance moléculaire au sein de « machines moléculaires » complexes qui contrôlent, par exemple, la transcription des gènes, la division cellulaire ou la motilité. En retour, une meilleure connaissance des systèmes vivants permet la mise au point de matériaux biomimétiques et le développement de nouvelles sondes. De la même manière, plusieurs applications chimiques exploitent la sophistication et la sélectivité des enzymes et des anticorps. De nombreuses interactions existent aussi avec la médecine, où, pour ne citer que deux exemples, la photothérapie et le ciblage des médicaments progressent grâce aux recherches menées par des physico-chimistes.

Au fur et à mesure que la chimie physique avance et que la complexité des systèmes étudiés augmente, un besoin croissant pour des simulations sur ordinateur se fait sentir. Des simulations à la fois fiables et prédictives sont une aide majeure dans l'interprétation et la conception des études expérimentales. Les progrès récents dans ce domaine rendent possible une description subtile des interactions, des excitations et des réactions au niveau quantique pour des molécules de plus en plus grosses. Ils permettent également d'obtenir des représentations de plus en plus fiables de la structure, de la stabilité et de la dynamique des macromolécules et des assemblages moléculaires, en tenant compte des effets complexes liés à des solvants et des contre-ions.

L'influence sur une société en évolution

La chimie physique a un impact sur plusieurs facteurs qui influenceront la qualité de nos vies à l'avenir. En premier lieu, il faut citer le besoin de trouver des moyens nouveaux et plus efficaces de produire de l'énergie et de conserver ou de recycler des ressources naturelles non renouvelables. Dans ce domaine, beaucoup reste à faire pour améliorer les piles, les « fuel cells » et les cellules solaires. Ces développements impliquent des avancées dans les moyens de détection, de traitement et d'analyse mécanistique qui ne seront possibles qu'avec l'intervention des physico-chimistes. Le progrès dans plusieurs autres domaines dépend, aussi, d'une meilleure compréhension des processus physico-chimiques mis en jeu en médecine ou en agriculture par exemple. Enfin, les physico-chimistes contribuent directement à la préservation de notre patrimoine culturel à travers le traitement et l'analyse des œuvres d'art et des monuments historiques.