

Mathématiques de la planète Terre 2013 et chimie

Christiane Rousseau



C'est au printemps 2009, alors que j'étais directrice du Centre de recherches mathématiques (CRM), l'un des trois instituts de recherche en sciences mathématiques au Canada, que j'ai lancé **Mathématiques de la planète Terre 2013** (MPT 2013) [1]. Au départ, l'initiative consistait en une année d'activités scientifiques sur le thème par les quatorze instituts de recherche nord-américains en sciences mathématiques. À cela devaient se greffer quelques conférences grand public ou autres activités de vulgarisation. L'initiative s'est immédiatement imposée, jusqu'à prendre l'ampleur d'une Année internationale et recevoir le patronage de l'UNESCO, attirant l'intérêt des mathématiciens mais également des autres disciplines. Pourquoi ? Mon interprétation est que la communauté scientifique internationale était mûre pour cela. Comme chercheurs, nous sommes interpellés par le réchauffement planétaire, la dégradation de l'environnement et l'augmentation de la population mondiale sur une planète aux ressources limitées. Les bouleversements qui pourront en résulter dans la météo, le climat, les écosystèmes, la gestion des ressources, etc. ne sont plus une utopie.

Nous sommes conscients de l'ampleur des défis pour l'espèce humaine devant un futur incertain difficile à décrire et quantifier, et de la complexité des questions de recherche associées, qui sont souvent multidisciplinaires. En même temps, en tant que scientifiques, nous choisissons nos questions de recherche en fonction de nos compétences disciplinaires : MPT 2013 permet de décortiquer plusieurs des questions scientifiques reliées aux enjeux planétaires, et de faire découvrir les différentes facettes et outils requis pour les analyser. Ce faisant, nous espérons ainsi convaincre de nouveaux chercheurs de se pencher sur les problèmes planétaires et encourager la mise en réseau des chercheurs œuvrant dans le domaine et la collaboration multidisciplinaire.

Plus largement, nous sommes curieux de mieux connaître notre planète, entre autres son origine, ses climats passés, et pourquoi elle supporte une telle biodiversité. MPT 2013 contribue donc à enrichir notre culture scientifique et, pour plusieurs d'entre nous, notre enseignement.

Je suis moi-même une mathématicienne pure, mais je suis passionnée par la vulgarisation scientifique. Dans ce créneau, j'ai l'habitude de choisir des sujets loin de mon domaine de recherche. Mon rôle est alors de décrypter les publications scientifiques, d'en extraire les grandes idées, puis de les communiquer. J'aime bien dans cette tâche mettre en évidence la démarche scientifique, ou encore les grands principes unificateurs en science et, durant cette année 2013, je le fais beaucoup plus intensément qu'à

l'ordinaire. J'ai l'habitude de dire que le thème de MPT 2013 est très créatif ; en effet, lorsque l'on commence à énumérer quelques sujets en relation avec ce thème, notre interlocuteur se met souvent à en trouver d'autres et à se prendre au jeu lui aussi. Dans ma carrière, j'ai cependant eu peu l'occasion de me pencher sur les applications mathématiques en chimie, si ce n'est un petit article sur la géométrie des fullerènes dans la revue *Accromath*.

Accepter cette invitation de *L'Actualité Chimique* d'écrire un article sur « les mathématiques de la planète Terre et la chimie » est donc pour moi un défi et me donne l'occasion de m'instruire un peu plus. Où commencent et où se terminent les mathématiques, la chimie et la physique ? J'aime bien me représenter la science comme un continuum sans frontière définie, et les quelques sous-thèmes de MPT 2013 que je vais aborder et dans lesquels mathématiques et chimie se rejoignent auront une composante physique non nulle. J'ose espérer que ceci stimulera l'intérêt pour cet événement et une plus grande collaboration des mathématiciens, chimistes et physiciens.

Le premier grand thème de MPT 2013 que nous proposons est « Une planète à découvrir ». Ceci inclut la compréhension de la formation de notre planète et la détermination de son âge. Ce n'est pas d'hier que l'on utilise la désintégration radioactive pour dater les roches. Le XIX^e siècle est déjà témoin d'une grande controverse autour de l'âge de la Terre. Les calculs de Lord Kelvin lui attribuaient moins de 400 millions d'années, en contradiction avec les observations des géologues et la toute nouvelle théorie de l'évolution de Darwin. Kelvin avait calculé le temps de refroidissement nécessaire pour obtenir la croûte solide en se basant sur le gradient de température. Il n'avait cependant pas tenu compte des mouvements de convection à l'intérieur du manteau qui ralentissent sensiblement ce refroidissement. Il avait également fait l'hypothèse qu'il n'y avait pas de source de chaleur, ce qui s'est avéré faux lorsqu'on a découvert la radioactivité.

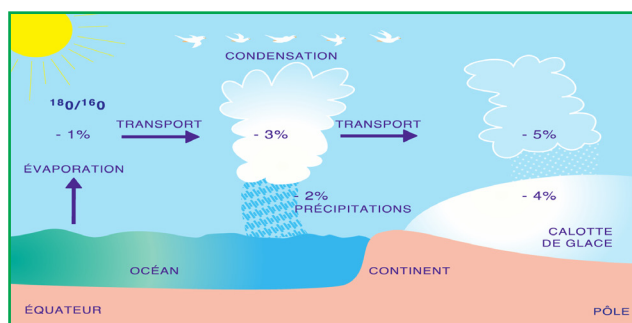
Il est maintenant admis que le système solaire s'est formé il y a environ 4,57 milliards d'années, ceci en datant ses plus anciennes roches solides. Mais quand la vie a-t-elle pu apparaître ? Là encore, la chimie vient à la rescousse. On a retrouvé en Australie occidentale des zircons témoignant du fait que la croûte terrestre s'était formée 70 millions d'années après la formation du système solaire. Le rapport élevé $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ dans des zircons âgés de 3,91 à 4,28 milliards d'années suggère que l'ingrédient essentiel de la vie, l'eau, était présent dans la croûte terrestre supérieure lorsque le système solaire avait 288 millions d'années. Selon une autre étude, de l'eau pourrait même avoir été présente sur la Terre après seulement 164 millions d'années. Un rapport isotopique plus élevé de $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans de petites inclusions de graphite de roches sédimentaires

du Groenland âgées de 3,85 milliards d'années témoigne d'activité biologique avant que le système solaire ait 718 millions d'années. Ceci donne une fenêtre pour l'apparition de la vie entre 288 et 718 millions d'années après la naissance du système solaire. Cette fenêtre est très intéressante ; en effet, cette période est antérieure à une période de bombardement intense de la Terre et des autres planètes par des météorites. Ces bombardements entraînent l'expulsion de matériel terrestre et les scientifiques s'intéressent à la capture potentielle de tels fragments par d'autres planètes. Il a été montré que la vie peut survivre à un tel transfert lorsque le fragment est assez gros. Rien ne permet donc d'exclure que la vie sur Terre soit arrivée d'une autre planète, ou encore que la Terre ait exporté la vie ailleurs dans le système solaire.

Plus intéressant, à l'époque, l'amas d'étoiles auquel appartient le Soleil ne s'était pas encore dispersé. Les travaux récents du mathématicien Edward Belbruno et des astronomes Amaya Moro-Martín et Dmitry Savransky [2] montrent que des échanges de matériaux contenant des germes de vie ont aussi pu se produire entre le système solaire et d'autres systèmes solaires voisins. Le mécanisme décrit par ces scientifiques est un transfert très lent, tout en douceur, sur plusieurs dizaines de millions d'années, qui augmente beaucoup, non seulement la probabilité de capture par un autre système solaire, mais également celle de préserver l'intégrité du matériau transféré. Un tel transfert a pu se produire pendant plusieurs centaines de millions d'années durant la période de dispersion de l'amas d'étoiles auquel appartient notre Soleil.

Jacques Laskar, de l'Observatoire de Paris, est un spécialiste de la mécanique céleste, et plus particulièrement du système solaire. Il a entre autres montré que les planètes internes – Mercure, Vénus, la Terre et Mars – ont des mouvements chaotiques, et qu'on ne pouvait exclure dans quelques milliards d'années une collision de planètes, ou encore l'expulsion d'une planète du système solaire. Si on se limite à un horizon futur ou passé plus rapproché, on observe cependant des cycles assez réguliers, appelés cycles de Milankovitch : ainsi, l'orbite elliptique de la Terre oscille entre une forme presque circulaire autour du Soleil et une forme plus allongée. Lorsque l'orbite est plus allongée, la Terre passe plus de temps loin du Soleil et une période de glaciation se développe. Un deuxième cycle, venant de l'oscillation de l'angle de l'axe de la Terre avec le plan de l'écliptique, se superpose au précédent et vient moduler le phénomène. Peut-on jumeler ces calculs mathématiques aux anciens climats de la Terre, en particulier aux périodes glaciaires mises en évidence par le géologue Louis Agassiz dès 1840 et que l'on peut observer dans les sédiments ?

La chimie est venue à la rescousse dans les années 1970 lorsqu'on a décidé de dater précisément ces différents épisodes climatiques. La méthode consiste à analyser les rapports isotopiques $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ dans les sédiments marins. Les molécules d' ^{16}O s'évaporent plus facilement et, après transport par les nuages, précipitent sous forme de neige sur les pôles (voir figure). Ceci diminue la quantité d' ^{18}O en période froide dans les océans, augmentant ainsi le rapport $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$. Comment mesurer ce rapport ? Les foraminifères, des organismes microscopiques, utilisent l'oxygène de l'eau dans la sécrétion de leur squelette calcaire. À leur décès, leur squelette se dépose au fond de l'océan, témoignant ainsi du rapport isotopique $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ de l'époque. Des forages de plusieurs kilomètres de profondeur permettent de trouver ces couches successives et d'interpréter leur



Avec l'aimable autorisation de J. Laskar, d'après [6]. DR.

rapport isotopique $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ pour découvrir les anciens climats de la Terre sur des dizaines de millions d'années.

Notre planète a une atmosphère et ses propriétés découlent des différents gaz qui la composent. La modélisation mathématique est importante pour comprendre l'évolution de la composition de l'atmosphère et évaluer les mesures à prendre pour protéger la Terre. La communauté internationale a su se mobiliser pour changer ses comportements et contribuer à la préservation et restauration à long terme de la couche d'ozone. Le mécanisme d'évolution de la couche d'ozone est connu. Pendant la nuit polaire, l'ozone est détruit par différents polluants comme le chlore et le brome, si bien qu'au pôle Nord, la couche d'ozone est à son minimum en mars. Par contre, dès que le Soleil revient, il contribue à la restauration de la couche d'ozone en transformant l'oxygène en ozone.

Le mécanisme des gaz à effet de serre (GES) est aussi bien connu. Le Soleil envoie sa chaleur (sous la forme de lumière visible) vers le sol. Les rayons pénètrent l'atmosphère et chauffent la Terre. Cette dernière se met alors à irradier de la chaleur (sous la forme d'ondes infrarouges) vers l'espace. Les gaz de notre atmosphère n'absorbent pas le rayonnement du Soleil et la majeure partie d'entre eux laisse passer le rayonnement terrestre. Par contre, les gaz à effet de serre absorbent en partie les ondes infrarouges émises par la Terre : la chaleur irradiée par la Terre est alors absorbée par l'atmosphère qui doit ensuite la rediffuser vers l'espace. Pourquoi l'absorption se fait-elle dans un sens et pas dans l'autre ? C'est parce que l'absorption dépend de la fréquence du rayonnement et celle-ci est plus petite dans le rayonnement terrestre que dans celui du Soleil. Les gaz à effet de serre ont mauvaise presse ; pourtant, sans eux, notre planète serait trop froide pour supporter la vie. De plus, l'ozone à haute altitude, un GES, protège notre planète des rayons ultraviolets. Et les gaz à effet de serre ne sont même pas nécessairement nocifs, puisque 75 % d'entre eux ne sont que de la vapeur d'eau. Certains sont plus puissants que d'autres ; c'est le cas du méthane, dont on s'attend qu'il soit relâché en très grande abondance dans l'atmosphère lors de la fonte du pergélisol et du réchauffement de l'océan Arctique. Modéliser l'effet à long terme des GES selon leurs propriétés chimiques, leur évolution dans l'atmosphère, en incluant leur destruction à long terme, est une des composantes de la recherche sur les changements climatiques.

Pour bien comprendre la circulation de l'eau dans les océans, on doit appeler la chimie à la rescousse. L'eau de surface s'enfonce près du pôle Nord et reste ensuite en profondeur pendant plusieurs siècles avant de refaire surface en Antarctique : on appelle « âge » de l'eau des profondeurs le temps écoulé depuis sa dernière présence en surface. Cet

âge est calculé à l'aide du ^{14}C ; celui-ci est présent dans l'atmosphère et l'eau de surface en contient. Il commence sa décomposition lorsque l'eau s'enfonce. L'eau des profondeurs peut avoir jusqu'à 800 ans.

On parle beaucoup du fait que les océans puissent être un puits de carbone en absorbant le CO_2 , mais il faut tenir compte du fait que la quantité de CO_2 que peuvent retenir les océans est plus grande lorsque l'eau est froide. Dès que l'eau se réchauffe, les océans commencent à relâcher leur CO_2 dans l'atmosphère.

Beaucoup de roches terrestres sont des cristaux et leurs propriétés physico-chimiques dépendent souvent de la manière dont les atomes sont agencés dans l'espace. À l'origine, on parlait de cristal lorsque les atomes sont disposés aux sommets d'une maille élémentaire et que le matériau global est invariant sous des translations dans trois directions indépendantes. Il se peut que ce soient les seules transformations géométriques sous lesquelles le cristal est invariant. Pour le mathématicien, c'est le cas générique. Mais de nombreux cristaux sont aussi invariants sous des symétries par rapport à un plan, ou encore par rapport à des rotations. L'ensemble des transformations géométriques sous lesquelles un cristal est invariant est un objet mathématique appelé *groupe de symétrie* du cristal. Les mathématiciens ne s'intéressent pas au groupe comme tel, mais à sa structure : combien a-t-on de symétries ou de rotations indépendantes, quelles sont leurs compositions ? Cet objet abstrait est un *groupe de cristallographie*. Il en existe 32, qui fournissent un outil de classification des cristaux. Il est alors intéressant de mettre le doigt sur les propriétés physico-chimiques d'un cristal qui sont directement liées à la structure de son groupe de cristallographie.

Les Nations unies ont déclaré 2014, Année internationale de la cristallographie. Pour les chimistes, les mathématiciens et les cristallographes, c'est une manière naturelle de renforcer un rapprochement qui s'est amorcé autour des mathématiques de la planète Terre.

Les cristaux ont la propriété que leur spectre de diffraction est discret. Les quasi-cristaux ont aussi cette propriété ! La découverte des quasi-cristaux par Daniel Shechtman en 1982 (qui lui a valu le prix Nobel de chimie en 2011) a amené l'Union internationale de cristallographie à modifier sa définition du terme de *cristal* : un cristal est un matériau au spectre de diffraction discret. Comme les quasi-cristaux sont souvent thermodynamiquement instables, on les observe rarement dans la Nature. Le premier cas remonte à 2009 dans des échantillons de roche provenant de Koriakie. Le mode de croissance d'un quasi-cristal passionne les scientifiques, tant mathématiciens que chimistes et cristallographes.

À cheval sur la physique et la chimie, l'exploration des impulsions laser ultrabrèves est un sujet d'avenir dont les applications pourraient être multiples. Les expériences en laboratoire montrent que les impulsions laser intenses et ultrabrèves se propagent dans l'atmosphère par la création successive de solitons, et on vient même de découvrir que des impulsions laser intenses dans des gaz peuvent créer des vagues scélérates. On sait aussi que de telles impulsions peuvent déclencher des tempêtes ou des ouragans à des distances de quelques kilomètres, et on est intéressé à savoir si l'on ne pourrait pas plutôt utiliser ces impulsions pour contrôler des perturbations atmosphériques. Ces phénomènes non perturbatifs et hautement non linéaires induits par des impulsions laser intenses et ultrabrèves dans l'atmosphère requièrent une étude d'équations aux dérivées

partielles (EDP) hautement non linéaires, et le travail conjoint de mathématiciens, chimistes et physiciens. Le Centre de recherches mathématiques (CRM) organisera du 10 au 14 mars 2014 un atelier sur ces questions : « Modèles et méthodes mathématiques en filamentation au laser » [3]. Ce type de recherche se fait également en France au Laboratoire d'optique appliquée de l'École Polytechnique (voir [4]).

Les mathématiques jouent un rôle essentiel dans la chimie et la physique théorique des processus photochimiques-photophysiques atmosphériques, notamment avec l'équation de Schrödinger, ou encore l'équation de Dirac, pour traiter les effets relativistes couplés à l'équation de Maxwell du laser. Une nouvelle branche d'avant-garde de la chimie théorique est née récemment : la science attoseconde, dévouée au contrôle de l'électron dans la matière. La contribution des mathématiques à ces nouveaux sujets vient du fait que l'électron se comporte comme une onde, ce qui est décrit par les équations aux dérivées partielles multidimensionnelles et complexes citées plus haut. Notons qu'il existe au Québec un centre national du laser, ALLS (Advanced Laser Light Source), où les effets non perturbatifs de l'interaction laser-matière font l'objet de recherches expérimentales de haut niveau.

Je profite de l'occasion pour mentionner que les techniques mathématiques permettant d'étudier les mouvements planétaires autour d'un astre ont aussi des applications en chimie : un atelier sur les problèmes des corps célestes, atomiques et moléculaires (CEMAD 2013) s'est tenu dans le cadre de MPT 2013 [5].

Pendant toutes ces années de préparation et de travail sur MPT 2013, j'ai pu apprécier la complexité des grandes questions scientifiques reliées au changement climatique et au développement durable. Nous, les mathématiciens, sommes des spécialistes de la construction de modèles et de la résolution de problèmes. Un modèle est une représentation simplifiée du phénomène que l'on veut étudier. L'art de la modélisation est d'introduire dans le modèle les ingrédients essentiels et de laisser tomber les détails superflus, de manière à voir ressortir les caractéristiques du phénomène et étudier son évolution. Mais quels sont ces ingrédients essentiels ? Les mathématiques ne nous le disent pas... Le danger est réel de donner un vernis de science à des conclusions justes fournies par un modèle non pertinent. Comme MPT 2013 devient « à la mode », ce danger ne doit pas être sous-estimé. Cela renforce ma conviction que nous devons travailler en partenariat avec les autres disciplines.

Références

- [1] www.mpt2013.org
- [2] Belbruno E., Moro-Martín A., Malhotra R., Svransky D., Chaotic exchange of solid material between planetary systems: implications for lithopanspermia, *Astrobiology*, **2012**, 12, p. 754.
- [3] Modèles et méthodes mathématiques en filament laser : www.crm.umontreal.ca/2014/Filamentation14/index.php, organisé conjointement par André Bandrauk (chimiste et membre du CRM) et les mathématiciens Emmanuel Lorin (Carleton, Canada) et Jerome V. Moloney (Arizona, E.-U.).
- [4] http://loa.ensta-paristech.fr/laser-ultrabref_lang_FR_menu_3
- [5] www.pims.math.ca/scientific-event/130729-cmad2
- [6] Jousseume S., *Climats d'hier à demain*, CNRS Éditions, **1993**.



Christiane Rousseau

est vice-présidente de l'Union mathématique internationale (IMU)* et l'instigatrice et la coordonnatrice de MPT 2013.

* www.mathunion.org

Courriel : rousseac@dms.umontreal.ca