

Modéliser et simuler la complexité de la chimie

Le défi de la chimie théorique

Gilberte Chambaud (*coordinatrice du numéro*) et Claude Pouchan

La chimie théorique, avec sa partie conceptuelle et sa partie numérique s'appuyant sur des moyens de calcul en constant développement, est devenue un outil incontournable pour le développement de la chimie au XXI^e siècle. Les concepts de base de la mécanique quantique, formulés au début du XX^e siècle, ont servi de socle aux chimistes pour construire une chimie théorique, que l'on peut résumer en *modélisation et simulation des objets moléculaires, macromoléculaires, des agrégats et des matériaux*. L'activité de la chimie théorique, c'est l'ensemble des développements méthodologiques qui permettent de tirer de l'information concrète et des données mesurables d'une équation purement mathématique dans laquelle n'entrent que les masses et charges des électrons et des noyaux des atomes considérés. Partant de systèmes très simples – H₂ est la molécule test en chimie théorique –, les chimistes ont réussi la prouesse d'oser et de pouvoir s'attaquer maintenant aux molécules et aux environnements de la vie. Il y a encore du chemin à parcourir avant de modéliser mathématiquement la vie, mais les progrès sont incessants et considérables. Cette démarche assidue est fructueuse parce qu'à chaque étape de son évolution, la chimie théorique s'est confrontée aux expériences et a avancé en dialogue avec les expérimentateurs. Dans chacun des articles de ce numéro thématique, la collaboration théorie/expérience a été soulignée, montrant la complémentarité des deux approches pour mieux comprendre la chimie. Mieux encore, la chimie théorique peut apparaître aujourd'hui comme une discipline prédictive permettant de guider l'expérimentation, voire dans certain cas de la remplacer.

Les modèles, ainsi que les méthodes développées pour les rendre opérationnels, seront exposés dans ce numéro consacré à la chimie théorique car on ne peut pas apprécier la résolution d'un problème sans connaître l'outil avec lequel on le traite. Parmi les applications, nous verrons comment sont combinées et gérées précision et complexité dans un parcours allant des petites molécules isolées ou en interaction avec un environnement donné, jusqu'aux systèmes les plus complexes que la modélisation est capable de traiter aujourd'hui.

La chimie se consacre à l'étude des molécules et des matériaux : elle s'attache à les identifier, à connaître leurs propriétés et à comprendre leur évolution, soit par réaction, soit par modification de leur structure interne. Les molécules étant formées par association d'atomes, eux-mêmes constitués de noyaux et d'électrons, nous verrons d'une part la structure électronique définissant l'état global du système (état fondamental ou excité), et d'autre part les mouvements des noyaux donnant lieu à la dynamique interne (conformation et spectroscopies) ou à la dynamique réactionnelle (réaction chimique). Des avancées importantes ont été réalisées pour le traitement des très gros systèmes biologiques, elles font appel à l'utilisation de diverses méthodes couplées au développement d'approches multi-échelles permettant à partir du nanoscopique une description du système à l'échelle mésoscopique, voire macroscopique. Ce sont ces approches qui ont été récompensées en 2013 par le prix Nobel de chimie.

Lorsque la complexité d'un système augmente, nous verrons que la seule considération des grandeurs énergétiques n'est plus suffisante et qu'il faut y associer les concepts d'entropie et de statistique. Nous aborderons des systèmes moléculaires et quelques exemples sur les systèmes organisés aux propriétés périodiques, qui demandent des développements propres et permettent d'aborder les propriétés et la réactivité aux interfaces, comme c'est le cas en catalyse hétérogène.

En France, la chimie théorique a été très active dès le milieu du XX^e siècle ; cela sera rappelé dans l'évocation historique que vous trouverez ici. Nous avons résolu construit ce numéro avec des contributions des chimistes théoriciens français, pour montrer la richesse et la diversité des activités menées dans ce domaine, peut-être menacées par notre système éducatif actuel. Loin de donner une vision exhaustive de la chimie théorique, ce numéro sera complété en cours d'année par des aspects plus spécifiques. La communauté des chimistes théoriciens, qui réunit des chimistes et des physiciens, s'est regroupée pour une large part dès 2006 dans le Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT)*, structure fédérative soutenue par le Ministère de l'Éducation nationale et de la Recherche. Ce réseau a pu être poursuivi et consolidé avec le soutien du CNRS sous la forme du GdR RFCT et de plusieurs groupements de recherche plus spécifiques. Cette communauté a maintenant trouvé une nouvelle identité, en s'élargissant encore, dans la subdivision « Modélisation et Simulation » créée le 1^{er} janvier 2014 au sein de la division Chimie-physique, structure associée à la Société Chimique de France (SCF) et à la Société Française de Physique (SFP).

*www.chimie-theorique.cnrs.fr



G. Chambaud

Gilberte Chambaud

est professeur au Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Échelle, Université Paris-Est Marne-la-Vallée*. Ancienne directrice de l'Institut de Chimie du CNRS, elle est vice-présidente de la SCF depuis 2012.



C. Pouchan

Claude Pouchan

est professeur dans l'Équipe Chimie-Physique de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour**. Il est actuellement directeur adjoint de l'Institut de Chimie.

* Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Échelle, Équipe de Chimie Théorique, 5 boulevard Descartes, F-77454 Marne-la-Vallée Cedex 2.

Courriel : gilberte.chambaud@u-pem.fr

** Université de Pau et des Pays de l'Adour, UMR 5254, IPREM, Équipe Chimie-Physique, Hélioparc, 2 avenue du Président Angot, F-64053 Pau Cedex 09.

Courriel : claude.pouchan@univ-pau.fr