HAL open science

Modéliser et simuler la complexité de la Chimie Le défi de la chimie théorique

Gilberte Chambaud, Claude Pouchan

To cite this version:

Gilberte Chambaud, Claude Pouchan. Modéliser et simuler la complexité de la Chimie Le défi de la chimie théorique. L'Actualité Chimique, 2014, Février-Mars 2014, 382-383, pp.7. hal-01081741

HAL Id: hal-01081741

https://hal.science/hal-01081741v1

Submitted on 10 Nov 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modéliser et simuler la complexité de la Chimie
Le défi de la chimie théorique
Gilberte Chambaud 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 XXIème siècle. Les concepts de base de la mécanique quantique, formulés au début du XXème siècle, ont servi de socle aux chimistes pour construire une chimie théorique, que l'on peut qualifier de *modélisation et simulation des objets moléculaires, macromoléculaires 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 – H_2 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 la collaboration théorie/expérience a été soulignée et elle montre la complémentarité des deux approches pour mieux comprendre la chimie.

Les modèles ainsi que les méthodes développées pour les rendre opérationnels, seront exposés dans ce numéro spécial dédié à la chimie théorique car on ne peut pas apprécier la résolution d'un problème sans connaitre 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, 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 avons à considérer 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 spectroscopie) ou à la dynamique réactionnelle (réaction chimique). Des développements importants ont été réalisés pour le traitement des très gros systèmes biologiques, qui ont été récompensés 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 verrons des systèmes moléculaires et quelques exemples sur l'état solide aux propriétés périodiques qui demandent des développements propres.

En France, la chimie théorique a été très active dès le milieu du XXième siècle, cela sera rappelé dans l'évocation historique que vous trouverez ici. Nous avons résolument construit ce numéro avec des contributions des chimistes théoriciens français, pour montrer la richesse et la diversité des activités menées dans ce domaine et sans doute menacées par notre système éducatif actuel. La communauté des chimistes théoriciens, réunissant 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'Education Nationale et de la Recherche. Ce réseau a pu être poursuivi et consolidé avec le soutien du CNRS sous forme d'un GDR RFCT et de plusieurs GDR plus spécifiques. Il va se poursuivre en s'élargissant encore dans la sub-division 'Modélisation et Simulation' créée au 1er janvier

2014 au sein de la division Chimie-Physique de la Société Chimique de France et Société Française de Physique.