

SCIENCES CHIMIQUES

Bruno CHAUDRET
Odile EISENSTEIN
Jean-Louis VIOVY

LA CHIMIE : COMPRENDRE, TRANSFORMER, UTILISER LA MATIÈRE. UNE SCIENCE EN PERPÉTUEL DEVENIR

Mouadd Alami
Christian Auclair
Yves Chapleur
Agnès Delmas
Francesco di Renzo
Jean-Marc Douillard
Bruno Dubost
Eduardo Garrone
Jacky Kister
Françoise Lafuma
Maurice Leroy
Gérard Mandville
Jacqueline Mahuteau
Isabelle Rico-Lattes
Didier Roux
Jean-Pierre Samama
Jean-Michel Savariault,
Jean-Marie Tarascon
Pierre Vogel
Thomas Zemb

La chimie est une science qui s'est particulièrement développée au XIX^e siècle en association avec l'essor de l'industrie. Ses succès ont été rapides et ont conduit à des procédés qui ont permis la croissance économique des pays industrialisés, en particulier de la France. Soulignons le succès du procédé Haber (synthèse de l'ammoniac pour les engrais) qui a été un facteur essentiel du développement de l'agriculture et de l'élimination des famines endémiques en Europe. Remarquons que la chimie a joué un grand rôle dans l'industrialisation militaire. Citons enfin la synthèse de l'aspirine et des antibiotiques ainsi que les progrès de la catalyse industrielle du raffinage ou la création du nylon. De tous ces points de vue, la chimie est une science au cœur de la culture commune des Européens.

Cependant, depuis quelques années, l'industrie chimique européenne subit une crise liée à l'âge de ses usines, à l'externalisation de sa production et liée aussi, ce qui peut sembler paradoxal, à la productivité de ses procédés. De plus, elle apparaît comme un bouc émissaire de la dégradation de l'environnement et semble incompatible avec la société à risque-

zéro vers laquelle l'évolution des idées semble nous entraîner – illusion confortable. Pourtant, toutes les études récentes montrent que c'est plus la consommation effrénée d'énergie qui est la cause première de la dégradation environnementale. Et à l'inverse, nombre de progrès ont déjà été effectués pour sécuriser et rendre moins polluante l'industrie chimique. Mais c'est un fait, le rôle de la chimie n'apparaît plus explicitement dans nombre d'entreprises qui sont pourtant de véritables industries chimiques (la cosmétique, la pharmacie), font intervenir des procédés chimiques ou encore utilisent des matériaux directement dérivés de recherches récentes (industries agro-alimentaires, automobiles, aviation, télécommunication).

Les différentes sections du Département des Sciences Chimiques ont voulu montrer que – bien au contraire – la maîtrise intellectuelle des problèmes chimiques est une clé d'un développement harmonieux, durable et créateur d'emploi pour notre société. Cela s'explique par plusieurs caractéristiques propres à la chimie. Tout d'abord celle-ci n'est pas une science comme les autres, dans la mesure où *elle crée ses objets*. Ensuite il s'agit d'une science naturellement trans-disciplinaire : étudiant les lois et les matériaux fondamentaux de la nature, elle est indispensable et susceptible à tout moment de se mettre au service de toutes les autres disciplines, des sciences dures aussi bien que des sciences de l'homme. Cette connexion obligée lui permet de garder une fécondité impressionnante : de ses origines à nos jours, elle a sans cesse développé de nouveaux concepts. Cette dynamique pourrait être résumée par un projet commun pour toutes ses composantes : « comprendre et contrôler la transformation et les propriétés de la matière à toutes les échelles et dans toute la complexité possible, accomplie ou future ».

Cette fécondité n'est pas surprenante pour les observateurs extérieurs. Cette science, à la fois précise, analytique et pragmatique était dès son origine munie de tous les atouts nécessaires pour gérer les situations de *complexité*. Il ne lui manquait que les ordinateurs et la mise en commun des données pour acquérir une vue d'ensemble. Tout montre qu'elle doit

rester une base de la formation intellectuelle du XXI^e siècle. Ce que préconise Edgar Morin, dont « La Méthode » commence par les concepts de la chimie et de la thermodynamique.

1 – UNE SCIENCE QUI CRÉE

La grande aventure de la chimie a concerné, comme nous l'avons indiqué plus haut, la création de matériaux et de molécules qui ont révolutionné la société, par exemple historiquement le nylon et toujours aujourd'hui la majorité des matières plastiques, des détergents, des médicaments. Dans le même temps, la chimie a également créé les méthodologies nécessaires pour étudier ces transformations et de nouveaux concepts, concernant les mécanismes.

Aujourd'hui, la chimie est confrontée à deux défis majeurs :

- i) la recherche de nouveaux objets (matériaux ou molécules) de plus en plus complexes, ce qui nécessite la maîtrise de la synthèse à l'échelle mésoscopique ;
- ii) la recherche de transformations plus efficaces respectant l'environnement.

1.1 LA SYNTHÈSE

La synthèse chimique a connu ces dernières décennies des avancées considérables, mais elle n'est pas une *science achevée* et donc une technique. Elle est encore aujourd'hui un objet de recherche fondamentale. L'accélération de la découverte et de l'élaboration de nouvelles molécules, de nouveaux médicaments – en liaison par exemple avec la mise en évidence de nombreuses nouvelles cibles biologiques nécessite une maîtrise accrue de la conception et de la synthèse de molécules originales. Ceci

doit se traduire par de nouvelles approches de synthèse, hautement sélectives ayant des rendements élevés. Le taxol, pourtant une des drogues anticancéreuses les plus prometteuses, est obtenu avec un rendement n'excédant pas 5 %. Il est donc toujours nécessaire de poursuivre les efforts. Les réactions catalytiques peuvent dans ce domaine jouer un rôle primordial. On peut par exemple citer l'hydrogénation énantiosélective de cétones par Noyori (Japon, Prix Nobel 2003) qui en mettant en jeu un mécanisme révolutionnaire permet d'accéder à des énantiosélectivités inconcevables, il y a peu.

1.2 LA COMPLEXITÉ

La dernière décennie a vu le développement rapide de nouvelles méthodes d'assemblage de molécules à grande échelle, à un tel point que l'on commence à parler couramment de *LEGOchimie*, en associant cette science très sophistiquée au fameux jeu de nos enfants. Ceci est particulièrement remarquable dans le développement de la chimie supramoléculaire qui se transforme en une véritable « *ingénierie pour assembler des objets moléculaires par des processus associant reconnaissance moléculaire et auto-assemblage* » (J. M. Lehn). Ces assemblages peuvent être fonctionnels et par un stimulus externe donner lieu à de nouvelles propriétés telles que celles développées dans les « moteurs moléculaires ».

Cette chimie ne connaît plus les frontières thématiques du passé. Dans ces organisations se rejoignent matière molle et matière dure, organique et inorganique. La maîtrise de l'organisation supramoléculaire, des milieux organisés (micelles) permettent la synthèse de matériaux hybrides organiques/inorganiques, la formation de matériaux à porosité contrôlée en taille et en forme ou de nano-objets de taille et forme définies. Tous ces matériaux pourront être fonctionnalisés pour effectuer une tâche précise pouvant aller de la catalyse à la séparation gazeuse en passant par la déli-

vance contrôlée de médicaments, le diagnostic et la micro/nanoélectronique. Des modifications spécifiques dans des macromolécules biologiques permettent d'étudier les relations entre structure et fonction. Évidemment, ces assemblages complexes envahissent le champ des autres disciplines, comme la biologie. Le principe de reconnaissance moléculaire utilisant, par exemple des polymères ou molécules amphiphiles permet d'étudier des entités particulièrement complexes comme les protéines membranaires.

1.3 EFFICACITÉ ET RESPECT DE L'ENVIRONNEMENT

La synthèse chimique, les procédés d'élaboration et de traitement des matériaux et la mise en œuvre des produits élaborés par voie chimique se doivent de prendre en compte une approche plus respectueuse de l'environnement, en plus du maintien de leur conformité aux évolutions des exigences en matière de santé et de sécurité. Cela nécessite de rechercher des milieux réactionnels nouveaux, de nouvelles techniques d'activation, des synthèses plus sélectives et même de nouvelles réactions. Il est ainsi nécessaire de mettre au point des méthodes de synthèse basées sur le principe de *l'économie d'atome*, dans le but de minimiser les rejets et d'optimiser les ressources. Ceci peut passer, par exemple par la fonctionnalisation directe des liaisons C-H, qu'elles proviennent d'un hydrocarbure ou qu'elles soient situées dans un système complexe, en évitant la formation de sous-produits tels que les sels qui constituent un des rejets les plus difficiles à éliminer dans l'industrie chimique. Une autre démarche consiste à s'affranchir des solvants par la réalisation de synthèses à l'état solide ou dans de nouveaux milieux prometteurs comme les fluides supercritiques ou en cours d'évaluation comme les liquides ioniques. Les réactions dans l'eau apparaissent attirantes, mais peuvent créer des rejets difficiles à traiter.

À cet égard, la catalyse, science industrielle par excellence, nécessite de plus en plus une vision moléculaire de la transformation de la molécule et du rôle du catalyseur. Cette vision conduit à la formation sélective de molécules à haute valeur ajoutée et est également mise à profit pour la catalyse environnementale, une discipline en émergence dont l'importance a été démontrée par les pots catalytiques mais qui présente de nombreuses autres potentialités. Les nouveaux catalyseurs à base d'or ou de TiO_2 permettent par exemple de contrôler et de dépolluer l'air. L'efficacité énergétique accrue des procédés d'élaboration des matériaux à haute température ainsi que la réduction des émissions de gaz à effet de serre doivent pouvoir s'appuyer sur de nouveaux développements théoriques et expérimentaux en thermodynamique et cinétique chimique, en synergie avec le génie des procédés et la science des matériaux.

L'amélioration constante des méthodes expérimentales nécessite la mise au point de nouvelles techniques d'exploration. Les méthodes à haut débit peuvent permettre l'optimisation des catalyseurs ou des conditions réactionnelles alors que la miniaturisation des réacteurs peut permettre d'améliorer les rendements, d'ouvrir l'accès à des chemins réactionnels inaccessibles aux réacteurs macroscopiques, et de minimiser les risques liés au stockage et au transport de réactifs dangereux grâce à une production décentralisée au moment et sur le lieu de l'utilisation.

2 – UNE SCIENCE AU SERVICE DES AUTRES

Toutes les activités liées à la synthèse chimique peuvent conduire à des objets ou des matériaux utilisables pour de nouvelles fonctions. Nous ne détaillerons pas ici toutes les potentialités de la chimie, mais on doit se rappeler que le développement de la chimie

organique de synthèse a permis l'accès à de nouveaux médicaments. Pour être efficaces, ces molécules doivent être vectorisées et délivrées dans des conditions bien définies. Les systèmes moléculaires organisés (SMO) ont permis des avancées notables dans ce domaine et la chimie du solide peut également, au travers de biomatériaux, permettre ce type de développement.

La chimie des matériaux, qu'ils soient organiques, inorganiques ou hybrides, a conduit à des avancées remarquables, notamment dans le domaine de l'énergie (stockage intelligent des déchets). Les matériaux pour batterie sont un défi majeur de l'utilisation de l'électronique nomade alors que la combinaison de l'électrochimie, de la chimie de coordination et de la chimie du solide, contrôlées à l'échelle nanométrique, permet l'accès à de nouveaux systèmes de conversion de l'énergie solaire, un domaine qui devrait être en fort développement dans les années à venir. Notons également que les approches chimiques jouent un rôle grandissant dans les procédés actuels de la microélectronique pour la réalisation de composants de tailles toujours plus petites. Ce rôle devrait s'accroître énormément avec l'évolution vers la nano-électronique. Les recherches sur l'électronique moléculaire et sur les propriétés physiques de nano-systèmes, voire dans certains cas de molécules uniques, permettent d'ores et déjà la réalisation de fonctions définies (résistances, capacités, transistors, inductances). L'opto-électronique est un exemple – représentatif du rôle de la chimie dans les nanosystèmes – de l'implication des différents champs de la chimie (organique, chimie de coordination, chimie du solide à l'échelle nanométrique) pour des applications dans les télécommunications modernes.

3 – UNE SCIENCE QUI CRÉE SES PROPRES OUTILS

Méthodes d'analyse et compréhension théorique, ont de tout temps été intimement liées à la chimie. Résultant toujours de recherches fondamentales en physique théorique et expérimentale, ces méthodes révèlent leur pleine puissance dans leur utilisation comme outils d'analyse et de caractérisation des milieux chimiques complexes. L'illustration la plus emblématique en est sans doute la RMN. En s'appropriant une technique physique, la chimie conçoit ainsi un « outil ».

La chimie analytique, après une période difficile, retrouve une place centrale et essentielle dans la chimie moderne. Elle a bénéficié des avancées spectaculaires en spectrométrie de masse, en chromatographie, en électrophorèse et en microfluidique. Nous ne pouvons détailler ici tous les progrès réalisés dans le domaine des « outils » à la disposition des chimistes et nous nous bornerons à citer quelques exemples représentatifs par leur omniprésence et/ou leur importance croissante : l'utilisation des lasers, les ultramicroélectrodes, les méthodes d'imagerie optique, la RMN, les caractérisations de surface, les microscopies et spectroscopies à champ proches, la sonde atomique tomographique, et la chimie théorique.

Les avancées récentes remarquables dans le domaine de la résolution spatiale et temporelle permettent d'étudier des systèmes en évolution. L'amélioration des sensibilités permet de travailler sur des échantillons à très haute dilution et en particulier sur des molécules biologiques individuelles. Rappelons que le laser est devenu un outil incontournable en chimie et en biologie. Le développement des techniques femtosecondes permet de mettre en évidence des espèces à très courtes durées de vie et nous laisse entrevoir dans un avenir proche la possibilité de visualiser les réactions uni- et bimoléculaires. On peut noter que ces techniques associées au développement de sondes fluorescentes permettent la visualisation *in vivo* de cellules uniques voire de molécules uniques.

L'électrochimie permet la génération et l'observation directe de la plupart des intermédiaires mis en œuvre en chimie. Ainsi il est aujourd'hui possible de déterminer en routine une grande variété de mécanismes réactionnels complexes. Notamment l'utilisation des ultramicroélectrodes a permis d'accéder à la réactivité dans une gamme de temps de la nanoseconde dans les solvants traditionnels de la chimie. Les propriétés électrochimiques contribuent également à la compréhension des mécanismes de la chimie du vivant en comparant des métalloenzymes à leurs modèles biomimétiques.

Bénéficiant également des progrès sur les lasers et des développements en imagerie, la microscopie confocale ainsi que les approches de déconvolution optique permettent de cartographier dans les trois dimensions la matière molle et les systèmes biologiques, et de mesurer des mouvements sur des échelles subnanométriques, par exemple dans le domaine des « moteurs moléculaires ».

La RMN, technique non-destructive par excellence, a étendu son champ d'investigation de manière spectaculaire dans les dernières années, permettant l'analyse de systèmes chimiques dans tous les états de la matière. Les développements actuels concernent la gamme des champs et la création de nouvelles séquences pour la RMN en solution ainsi que la RMN à l'état solide et l'imagerie de systèmes vivants et non-vivants. Notons ici que ce dernier développement nécessite la synthèse d'agents de contraste efficaces et de leur vectorisation biochimique.

Un domaine particulièrement important et difficile à étudier concerne les surfaces et interfaces. Sans vouloir faire un inventaire exhaustif, on doit signaler un développement explosif de toutes les techniques à champ proche (AFM, STM, etc.) et de méthodes optiques d'étude et d'imagerie de surfaces, telles que les ondes évanescentes et diverses approches basées sur l'interférométrie, la réflectométrie, la résonance plasmon, dont la résolution en épaisseur peut atteindre le nanomètre. Ces avancées technologi-

ques concernent également une discipline bien établie telle que la métallurgie : ainsi la sonde atomique tomographique permet l'analyse chimique à l'échelle atomique du matériau massif.

Enfin la chimie théorique vise à comprendre l'ensemble des phénomènes qui entrent en jeu dans la réaction chimique. Son développement l'amène à être un partenaire à part entière de l'expérience. Elle a pour mission, non seulement de lui fournir des outils d'exploitation et d'interprétation des résultats, mais surtout de développer de nouveaux modes de prédiction de la stabilité et des propriétés d'espèces de plus en plus complexes et ce, dans leur environnement. La confrontation aux nouveaux défis expérimentaux est, de ce fait, devenue pour elle un moteur de développement essentiel. Cette évolution est sous-tendue par des développements de formalisme, d'algorithmique et de moyens de calculs, pour produire à la fois des modèles simples et des logiciels complexes exportables. Du traitement quantique complet de la dynamique réactionnelle de systèmes simples au traitement statistique classique de phénomènes macroscopiques, un arsenal méthodologique très riche est aujourd'hui disponible, même si son développement se poursuit et est appelé à durer.

4 - CONCLUSION

On perçoit dans cette introduction l'unité nouvelle de la chimie. Tous les chimistes ont besoin les uns des autres et sont liés par une convergence de réflexion. Si on devait établir une problématique commune, on pourrait la définir comme étant la recherche du lien entre la propriété de la brique élémentaire (molécule, nanoparticule) et la fonction de l'assemblage (réaction, reconnaissance, propriété physique ou biologique). Ceci est rendu possible par un langage commun et, de plus en plus, par le partage d'approches et de techniques communes. Le chimiste n'est plus cantonné dans sa thématique et enrichit sa recherche en s'intéressant à plusieurs sous-spécialités. Nombre d'exemples démontrent que les progrès les plus spectaculaires apparaissent comme résultant de la synergie de plusieurs sous-disciplines de la chimie aussi bien au niveau conceptuel qu'au niveau expérimental. Citons par exemple la découverte des matériaux mésoporeux ou les agents de relaxation *in vivo* constitués de complexes ou nanoparticules magnétiques associés à des bio-vecteurs.

La chimie apparaît donc aujourd'hui comme une science cohérente dotée d'un langage propre. Elle a bien sûr vocation à interagir avec les autres disciplines (physique, génie des procédés, micro et nanoélectronique, biologie, etc.). Elle ne pourra le faire de façon efficace qu'en développant librement sa dynamique interne, qui fait voler en éclats les barrières entre les sous-disciplines.

Ce court texte introductif n'a pas pour but de résumer les rapports écrits des six sections du département des sciences chimiques et n'a de sens qu'accompagné de ceux-ci. La lecture des différentes contributions des sections illustrera la richesse et la diversité de la discipline.