



*Séance solennelle de l'Académie des sciences / 21 juin 2011  
Réception des nouveaux Membres sous la coupole de l'Institut de France*

**La simulation à l'échelle moléculaire,  
une clef pour une chimie et une énergie propre**  
Philippe Sautet

Monsieur le président,  
chères consœurs, chers confrères,  
chers collègues, chers amis

2011 est l'année internationale de la chimie. Mais pourquoi fait-on de la chimie ? Tout d'abord pour comprendre les principes qui gouvernent la construction et la transformation de la matière. Tout est molécule. L'air est molécule. Cette table est constituée de molécules. Les organismes vivants sont aussi formés de molécules complexes et les réactions chimiques sont à la base des mécanismes de la vie. Les molécules sont fascinantes, par leur petite taille tout d'abord, on pourrait compter 1 million de milliards de milliards de molécules dans ces 20 litres d'air. Elles sont merveilleuses par leur forme, leur géométrie à trois dimensions qui a inspiré certains artistes, sculpteurs par exemple. La chimie c'est ainsi l'art de former et de rompre les liaisons entre les atomes pour construire des molécules et des solides. Mais ici je vais certainement vous décevoir, je ne fais pas vraiment de la chimie, je suis en fait... un simulateur. Les molécules sont constituées d'électrons et de noyaux atomiques, et la danse des électrons autour des noyaux est régie par l'équation fondamentale de la physico-chimie quantique, l'équation de Shrödinger, connue depuis 1925. Pourquoi continuer à travailler sur une équation vieille de 86 ans ? Parce qu'elle n'a pas de solution analytique, sur un tableau noir, et qu'il faut déterminer des solutions approchées sur des supercalculateurs. Le chimiste quanticien reçoit ici le secours du physicien pour les principes, du mathématicien pour les algorithmes numériques, de l'informaticien pour les calculateurs et leurs logiciels. Depuis

1990, l'évolution de la chimie quantique a été fulgurante, combinant avancée théorique des méthodes et progrès informatique des machines. Des systèmes de plus de 1000 atomes sont aujourd'hui accessibles avec une bonne précision. Ceci permet ainsi d'obtenir des éclairages nouveaux, complémentaires de l'expérience, sur des questions de chimie, mais aussi de géochimie, ou de biochimie.

Mais on fait aussi de la chimie parce que les molécules sont utiles à notre société. Elles jouent un rôle clef dans le domaine de la santé, principe actif ou outil d'aide au diagnostic. La chimie tient aussi une place forte dans la création de matériaux à propriétés avancées ou de capteurs. Elle a toujours accompagné le secteur de l'énergie, par exemple dans le domaine du raffinage pétrolier et joue aujourd'hui un rôle clef pour la mise en place des énergies nouvelles ainsi que pour les procédés de stockage de l'énergie comme les batteries. J'avancerais même que la chimie est utile pour l'environnement par sa capacité d'analyse des polluants et ses procédés de dépollution comme le pot catalytique.

Cependant malgré ce rôle très positif, la chimie a aujourd'hui une image très négative auprès de la société, l'image d'une activité parfois polluante et dangereuse, utilisant des réactifs agressifs et générant des déchets. Pourquoi cette chimie à double visage. Si l'industrie chimique est parfois polluante, c'est tout simplement parce que nous ne comprenons pas assez la chimie. Notre société aujourd'hui exige un progrès scientifique respectueux de la nature, préservant l'environnement et les ressources de la planète. Afin de conjuguer chimie et environnement, il est impératif de mieux comprendre le mécanisme intime des réactions chimiques pour piloter au mieux la création de molécules utiles, en évitant les sous-produits ou déchets. Ceci permettra de construire l'usine chimique du 21<sup>ème</sup> siècle, propre et économe en énergie.

Pour piloter les réactions chimiques, les rendre plus faciles, moins consommatrices d'énergie et éviter la formation de déchets, le chimiste a un atout clef: la catalyse. Mon activité scientifique de simulation à l'échelle moléculaire, parfois intensive sur les plus gros calculateurs, vise à comprendre les mécanismes des réactions chimiques et le rôle du catalyseur.

Les travaux récents sont centrés sur les catalyseurs solides. Un premier aspect concerne l'étude de la surface des particules catalytiques, lieu où les liaisons de la molécule vont être

rompues et formées, dans les conditions de la réaction catalytique, lorsque cette surface est soumise à une pression de gaz. Avec mes collègues, nous avons ainsi montré que dans certains cas la surface du solide pouvait alors être totalement modifiée. Le palladium est un catalyseur universellement reconnu dans le domaine de l'hydrogénation sélective de molécules présentant une triple liaison comme l'acétylène. Nous avons montré cependant que, dans les conditions de la réaction, la surface est transformée en une couche de carbure de palladium. Ainsi le catalyseur sélectif ce n'est pas le palladium, comme cela a été supposé pendant très longtemps, mais ce carbure de surface formé pendant la réaction. Cette compréhension est essentielle pour concevoir de nouveaux catalyseurs.

L'autre volet concerne l'exploration du chemin suivi par la réaction catalytique sur la surface du catalyseur, permettant de comprendre la sélectivité de réactions comme l'hydrogénation de molécules conjuguées. Lorsque sur sa route la réaction arrive à une bifurcation et peut suivre deux voies, comment le catalyseur peut-il l'inciter à tourner à droite vers le produit A, ou bien à aller à gauche vers le produit B ? La sélectivité totale dans le produit souhaité est une des clefs pour une chimie plus efficace et plus propre. La simulation fournit de concepts et des guides pour y arriver.

La chimie jouera un rôle majeur pour l'approvisionnement énergétique, défi fort de notre société, et pour le développement des énergies renouvelables, nécessaires pour limiter les émissions de dioxyde de carbone et leur impact sur le réchauffement climatique. Mes projets récents appliquent la simulation quantique à la conception de matériaux pour capter l'énergie solaire et la transformer en hydrogène, ou à la compréhension des mécanismes de la transformation catalytique des molécules issues de la biomasse, deux sources renouvelables d'énergie ou de matière première.

La recherche est aujourd'hui une activité collective. Je remercie les 240 collègues qui m'ont accompagné dans ces travaux, tout particulièrement Françoise Delbecq, David Loffreda, Daniel Simon, Marie Laure Bocquet, Miquel Salmeron et Pascal Raybaud. Je remercie tous les étudiants qui m'ont fait confiance, à une étape clef de leur formation scientifique. Je remercie tous les maîtres qui m'ont instruit, depuis l'école primaire jusqu'à une autre école avec Ngyuen Trong Anh, Bernard Bigot, Odile Eisenstein et Christian Joachim. Un remerciement tout particulier pour Bernard Bigot qui m'a lancé dans la carrière scientifique lorsqu'il a monté l'Ecole Normale Supérieure de Lyon et l'équipe de Chimie Théorique à

l'Institut de Recherche sur la catalyse en 1988. Un grand merci au CNRS outil français formidable de recherche scientifique. Enfin rien ne serait possible sans le soutien et la grande compréhension de ma famille et de mon épouse Nicole.

Je vous remercie.