



*Séance solennelle de remise des prix de l'Académie des sciences - Le 25 novembre 2014*

## **Modéliser en chimie : rêver avec les électrons**

Odile Eisentein, membre de l'Académie des sciences

Monsieur le Président, Monsieur le Vice-Président, Madame et Monsieur les Secrétaires Perpétuels, Chers Confrères, Chers amis, Cher auditoire.

Rêver avec les électrons comme je vous le propose, n'est-ce pas un peu surprenant ? Est-ce possible ? Rêver avec les étoiles, nous l'avons tous fait. Rêver avec la sonde Rosetta, minuscule objet qui atteint une comète, cible tout aussi minuscule après un voyage à travers l'espace de 10 ans et qui se paie le luxe d'un rebond comme un pantin avant de se mettre un peu trop à l'ombre et de s'endormir. C'est bien sûr fascinant et nous espérons tous la voir se réveiller. Rêver avec les dinosaures et même avec leurs œufs si on a eu la chance de faire la bonne rencontre intellectuelle, comme l'a écrit cette jeune étudiante à notre cher Président, cela se conçoit aisément. Mais franchement rêver avec les électrons c'est normal docteur ? Précisons qu'il ne s'agit pas de la Fée Electricité, représentée par Dufy, qui a fasciné les salons du 18<sup>ème</sup>. Non, il s'agit des électrons des atomes composants des molécules et systèmes chimiques. Mais en quoi est-ce fascinant ? En bien voilà, un électron de plus ou de moins et on passe de l'azote à l'oxygène ou de l'azote au carbone. Et pour une telle minuscule différence, on a la chimie du méthane, la chimie de l'ammoniac et la chimie de l'eau. N'est-ce pas la chose la plus étonnante, le plus surprenante ? etc... C'est donc à la relation intime entre la structure électronique des molécules et les propriétés de celles-ci que je me suis consacrée. En quoi est-ce important ? Rappelons que tout ce qui nous entoure est chimie depuis les habits qui nous couvrent, les broderies dorées sur certains, les sièges gris ou verts sur lesquels nous sommes assis, les petits fours et le vin que nous dégusterons ensuite. C'est de la chimie car presque tout ce que j'ai décrit résulte de la transformation d'autres molécules et que la chimie est avant tout une science de la transformation. Bon, même si c'est une vision simplifiée de la réalité, le fond du problème est que les transformations subites par les molécules sont directement liées aux propriétés des électrons qui leur sont attachées. Il est donc intéressant et important de déterminer et de comprendre les liens qui relient les propriétés électroniques des molécules aux réactions dont elles peuvent être le siège.

La mécanique qui détermine le comportement des électrons est connue, il s'agit de la mécanique quantique. Cependant même si on en connaît les principes, il est difficile et même très difficile de la mettre en œuvre, et ceci d'autant plus que le nombre d'électrons est plus grand. Or essentiellement tous les systèmes chimiques qui intéressent les expérimentateurs ont un grand nombre d'atomes et donc un grand nombre d'électrons. La situation semblerait mal partie même avec les ordinateurs les plus puissants si un fait



heureux n'avait été constaté. Il n'est pas besoin d'avoir des informations de haute précision pour avoir des informations utiles. En effet, la chimie construit déjà sa logique sur l'existence de tendances et peut se passer, au moins à un premier niveau, d'une information numérique précise. Donc, qu'avons-nous donc fait ? Nous nous sommes intéressés à la chimie organométallique. C'est une chimie dans laquelle des atomes métalliques sont entourés de systèmes organiques construits surtout sur des molécules carbonées. Ces complexes organométalliques ont les propriétés de rendre possible ou plus facile des transformations entre autres molécules. On les appelle des catalyseurs. Notre but est d'étudier les réactions possibles et de déterminer comment modifier les systèmes pour que les réactions soient plus faciles, ne conduisent qu'aux produits désirés, n'utilisent pas et ne forment pas de produits toxiques et transforment intégralement les molécules de départ en molécules d'arrivée. Dans ces conditions, on a une réaction efficace, peu coûteuse en énergie, sélective, propre, respectueuse de l'environnement. Si en plus on peut remplacer les composés chimiques coûteux (en particulier les métaux rares) par d'autres moins coûteux, on a identifié un procédé économiquement viable. Voilà, c'est notre but général et nous y avons contribué à notre manière. Dans ce cadre, nous avons proposé des structures géométriques qui ne suivaient pas la doxa de l'époque et qui ont été vérifiées expérimentalement ultérieurement. Nous avons établi des interactions qui n'étaient pas connues, ce qui a donné une nouvelle vision sur des transformations qui ont été complètement repensées. Comme les progrès méthodologiques et la puissance accrue des ordinateurs donnaient un caractère de plus en plus précis à nos travaux, nous sommes passés d'établissement de tendance à des propositions plus quantitatives. Un de nos succès récents concerne la réaction de métathèse dont le mécanisme a été établi par notre confrère Yves Chauvin. Nos études théoriques ont permis de proposer une amélioration très importante d'une famille de catalyseurs sur lesquels on ne fondait plus aucun espoir. De plus, l'interprétation des résultats des études conduit à l'établissement de concepts transférables entre réactions ce qui contribue à l'enrichissement du raisonnement chimique.

Quel est l'avenir de cette discipline ? Bien sûr pas de tenter de supplanter la chimie expérimentale. Au contraire, c'est de travailler totalement en symbiose avec le monde expérimental et en fait probablement plus sous forme de trio que de sonate. L'association encore plus étroite de méthodologistes, de modélisateurs comme nous et d'expérimentateurs sera encore mieux armée pour affronter l'étude de la complexité de la chimie. Cette vision paraît maintenant attirante mais elle n'est en fait pas si simple à construire. J'ai par contre la conviction qu'elle est prometteuse.

Si je me trouve maintenant devant vous, sous cette coupole, c'est tout d'abord en raison du soutien constant du CNRS qui m'a laissé toute liberté d'action, un cadeau inestimable dont j'espère d'autres pourront bénéficier. J'ai été aussi entourée par un groupe de petite taille mais de très grande qualité. Que tous ceux qui m'ont accompagnée pendant ces années trouvent ici l'expression de ma profonde reconnaissance. Je souhaite également remercier mes mentors Nguyen Trong Anh, Lionel Salem, Jack Dunitz et Roald Hoffmann ainsi que le grand nombre de chimistes français et étrangers avec qui j'ai lié des collaborations de longue durée et des liens d'amitié indéfectible. Pour terminer je souhaite évoquer deux



dames, une chimiste et une non chimiste. La chimiste, une grande dame, affectueusement surnommée Décimètre en raison de sa petite taille a introduit les mécanismes de réaction en France et a formé de très nombreux chimistes. Vous avez bien sûr reconnu Bianca Tchoubar ; je l'ai connue et admirée mais Autres Temps, Autres Mœurs, elle n'a pas pu présenter sa vision en ces lieux. La non chimiste s'appelle Basia Lipkowitz, elle aussi venait des pays de l'Est et avec une vision très simple : l'étude est la solution de tous les maux. Je lui dois encore plus puisque c'était ma mère. Je lui dédie ces instants. Je vous remercie.

Odile Eisentein