

Simulations numériques et réalité expérimentale en chimie quantique : qui croire ?

Gabriel Turinici
Professeur à l'Univ. Paris Dauphine

Les découvertes modernes en biologie et médecine, de l'existence d'un code génétique (ADN) propre à chaque individu à la transmission des messages à l'intérieur du corps (contrôle somatique, émotions, développement, vie et mort des tissus et cellules, ...) et à la production d'énergie (digestion), ont révélé la nécessité de comprendre en détail les processus chimiques qui servent de base matérielle à la vie. Sur un plan complètement différent, les transformations chimiques (e.g. les moteurs à combustion des voitures, avions, etc) restent toujours une des sources incontournables d'énergie et motivent le travail des chercheurs en chimie.

Naturellement, des nouvelles expériences de laboratoire ont vu le jour et leur nombre est en constante augmentation. Mais comment comprendre leurs résultats, comment les étendre demain à d'autres situations sans faire à chaque fois d'autres expériences ? Prenons par exemple le cas d'un médicament : son action doit être connue à l'avance et ne devrait pas être le résultat incertain d'une réaction propre à chaque patient...

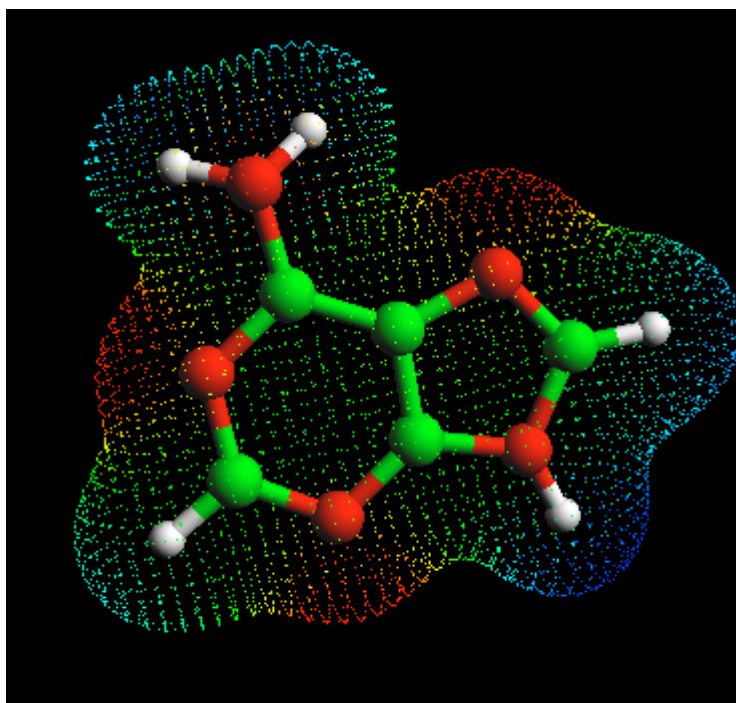


Figure 1 :

L'adenine, une des molécules qui codent l'information génétique de notre ADN. Les simulations numériques permettent de prédire la disposition des noyaux et des électrons

Il s'agit donc de donner une base théorique à ces connaissances empiriques et, d'une manière un peu contradictoire, de connaître à l'avance ce que sera le résultat réel dans chaque cas précis. Cet outil alternatif de validation et compréhension est la simulation numérique. Son histoire est simple : l'équation de Schrödinger, découverte au début du siècle dernier, donne toutes les informations nécessaires sur l'évolution future d'une molécule (un ensemble d'atomes avec leurs électrons) à partir d'un instant initial donné. Malheureusement cette équation est très difficile à résoudre au-delà des molécules les plus simples. Afin de trouver des approximations de la solution, les chercheurs ont identifié tout d'abord des modèles plus simples à traiter (cf. le Prix Nobel de chimie décerné en 1998 à Walter Kohn et John A. Pople¹) et par la suite des méthodes innovatrices pour analyser et résoudre numériquement ces équations. Les mathématiciens français sont d'ailleurs bien placés dans cette course : sous l'impulsion de P.-L. Lions, des groupes se sont formés et leurs travaux commencent à être mondialement reconnus².

Au-delà de la contemplation des phénomènes chimiques, l'objectif peut être également d'influencer, si besoin, les résultats d'un processus en cours ; il s'agit ici de « contrôler » les molécules par des moyens optiques tels que les impulsions laser³. Encore plus loin, des travaux récents⁴ cherchent à obtenir des informations sur les molécules en comparant leur évolution réelle avec l'évolution prédite par des simulations numériques ; le tout est piloté par une autre simulation numérique qui tente d'identifier les trajectoires les plus révélatrices (et contrôle, par ailleurs, la molécule pour qu'elle suive celles-ci).

¹ Le prix récompense le « développement de la théorie de la fonctionnelle de la densité et pour le développement des méthodes computationnelles en chimie quantique ».

² C. Le Bris et Eric Cancès à l'École des Ponts, Maria Esteban, Eric Séré, J. Dolbeault à l'Université de Paris Dauphine, Y. Maday, X. Blanc à UPMC Paris 6, M. Lewin à Cergy, P. Rouchon à l'ENSMP, J.P. Puel à Versailles...

³ **A. Assion, et al.** *Science* 282 (5390), pp. 919-922, 1998 ; R.S. Judson, H. Rabitz *Phys. Rev. Lett.* 68, 1500 - 1503 (1992) ; **H. Rabitz, R. de Vivie-Riedle, M. Motzkus, K. Kompa** *Science* 288. (5467), pp. 824-828, 2000.

⁴ JM Geremia, H Rabitz *Phys. Rev. Lett.* 89, 263902 (2002), **C.L. Bris, M Mirrahimi, H Rabitz, G Turinici**, *COCV* 2007.