

La recherche en chimie : évolution et perspectives

Entretien avec Paul Caro

Culture technique ¹ : Paul Caro, vous avez consacré, depuis les années 50 jusqu'à aujourd'hui, toute votre carrière à la recherche en chimie. Comment avez-vous perçu et vécu l'évolution de cette recherche ?

Paul Caro : Ce qui caractérise la recherche en chimie par rapport à ce qu'elle était autrefois, c'est le poids énorme qu'a pris l'instrumentation. Dans les vingt dernières années est apparue une masse d'instruments à des fins analytiques – la majorité des instruments sont analytiques – et à des fins d'observation. Le chimiste dispose donc aujourd'hui d'instruments qui sont basés sur la maîtrise de l'interaction rayonnement matière, dans la mesure où l'on a appris à manier les faisceaux d'électrons puis les faisceaux de photons, car dans l'intervalle il y a eu l'invention du laser, et avec lui l'accès à une lumière cohérente et monochromatique. La nature de l'instrumentation a, du coup, en partie changé, des possibilités se sont ouvertes. Cette maîtrise de l'interaction rayonnement matière a été rendue possible par deux progrès : l'un, c'est la technique de la maîtrise du vide qui a énormément progressé, et l'autre, c'est évidemment la micro-électronique. Moyennant quoi, après cette interaction rayonnement matière, ce que l'on a aujourd'hui, c'est de l'imagerie. C'est, d'une part, une analyse

de l'énergie des particules absorbées ou réémises, une spectroscopie ; mais, d'autre part, on a aussi de nombreuses techniques d'imagerie directe qui donnent, par exemple, la position des atomes ou la position du phénomène observé directement dans l'espace. Par conséquent, le chimiste a acquis des sortes de prothèses, au sens physiologique du terme, qui lui permettent de pénétrer au cœur de la matière ou d'avoir des messages, en direct le plus souvent, et même pour des atomes à des teneurs très faibles.

LES OUTILS DU CHERCHEUR

La relation entre le chercheur et la matière qu'il traite a donc complètement changé. Je prendrai comme exemple le cas de la séparation des terres rares que j'ai beaucoup étudié. Au début, on utilisait au laboratoire la susceptibilité magnétique comme critère de pureté. C'était déjà une première dans la mesure où l'on se servait d'une technique physique pour suivre un processus de purification chimique. Évidemment, on ne le faisait pas avec la sophistication qui existe actuellement pour l'analyse du même problème. Aujourd'hui, le contrôle de la séparation des terres rares se fait avec une méthode d'interaction du type de celles dont je parlais tout à l'heure, qui est la fluorescence X qui permet d'avoir directement un signal spécifique de l'atome que l'on étudie. Tous ces outils ont complètement modifié la pratique de la recherche qui fonctionne à travers une instrumentation qui est l'interface entre la matière et le chercheur. Par ailleurs, il y a de plus en plus une tendance à l'étude des micro-systèmes. Ainsi, le développement de la microscopie électronique a permis d'aller de plus en plus loin dans la conquête des dimensions : on sait aujourd'hui travailler à un niveau aussi faible que celui des distances interatomiques. Avec des instruments modernes, avec la nouvelle génération de microscopie, qui n'est plus une extension du sens de l'œil mais une extension du sens du toucher, avec les microscopes à effet de pointe dérivés de l'effet tunnel, on en arrive à manier un atome dans un ensemble et donc à faire une composition atome par atome.

Culture technique : Pour la catalyse, ce doit être très précieux ?

Paul Caro : Pas forcément pour la catalyse. S'il y a un domaine où l'instrumentation n'a pas trop pénétré, qui reste empirique, c'est justement celui de la catalyse, parce que la catalyse fonctionne dans des conditions où tout est complexe : il y a une réaction chimique, souvent dans des conditions où l'observation n'est pas très facile. Aussi, en catalyse, on trouve encore la trace de cette chimie empirique qui était l'art des anciens chimistes, qui était une sorte d'art de recettes : on savait que pour un mélange à 30 % ça marchait, qu'à 35 % ça ne marchait plus, mais dans le fond on ne se préoccupait pas trop de savoir pourquoi. Actuellement, on a des méthodes qui essaient de mettre en relations les structures et les propriétés, ou la réactivité et les structures, et, dans le cas de la catalyse, c'est la réactivité et la structure des surfaces. Il y a beaucoup de méthodes

pour étudier les surfaces, mais peu seulement donnent des informations en direct, pendant que la réaction catalytique se fait. Aussi tombe-t-on dans la prospective, parce que le développement de méthodes de contrôle dépend du développement des capteurs : technique de prise d'informations sur place, en direct, sur les concentrations, par exemple, et pas seulement sur la température et la pression, mais aussi sur la géométrie de surface, et la mesure des états excités. Ensuite il faut combiner tout cela, au besoin après avoir récupéré l'information avec une instrumentation sophistiquée. Aujourd'hui, avec les fibres optiques par exemple, qui permettent de véhiculer des photons au lieu de véhiculer des électrons, on peut avoir une instrumentation sophistiquée qui travaille à distance. On peut, par exemple, envoyer un signal laser d'excitation par une fibre optique, et puis récupérer le spectre sur un spectrographe RAMAN de haut de gamme. L'exemple n'est peut-être pas le meilleur, du fait qu'il y a aussi le spectre RAMAN de la fibre, dû à l'excitation. Mais on peut faire cela avec les techniques de fluorescence, on peut faire fluorescer un ion au bout d'une fibre, récupérer son signal et l'analyser justement avec le spectrographe RAMAN, parce que c'est un très bon spectrographe. On voit très bien qu'il y a une combinaison de l'instrument et du capteur qui conduit à une tentative de maîtrise de la réaction chimique en temps réel. Quand on joint cela à l'électronique, qui maintenant arrive à contrôler des événements au niveau de la pico-seconde, l'instrumentation permet de découper les signaux, de voir ce qui se passe. C'est très intéressant parce que beaucoup d'événements chimiques dépendent de la séquence dans le temps, et on voit très bien que cet immense développement de l'électronique, qui permet d'accéder par exemple à la spectroscopie dans des laps de temps aussi petits que la pico-seconde, va ouvrir des connaissances nouvelles dans les mécanismes réels des réactions. Et, comme beaucoup de réactions passent par des états excités dont la durée de vie est très brève, que l'on connaît donc très mal à cause de cela, on perçoit très clairement que c'est dans cette direction-là que se feront les futures études. On apprendra alors à travailler sur des états excités que l'on ne connaît pas encore très bien actuellement, mais qui sont des étapes intermédiaires indispensables des processus chimiques.

Culture technique : Mais, finalement, cette avancée dans l'expérimentation ne concerne-t-elle pas surtout la morphologie et les propriétés de surface, car beaucoup de méthodes analytiques modernes sont des méthodes qui se font par examen de surfaces ou d'objets solides sous vide, ce qui exclut les milieux habituels de la chimie qui sont soit des milieux gazeux, soit des milieux liquides ?

Paul Caro : Oui, mais c'est alors que les capteurs interviennent pour repérer la présence d'une molécule ou d'une autre avec une sensibilité qui peut être assez grande. L'un des enjeux de l'instrumentation, c'est d'avoir une connaissance des choses qui ne soit pas seulement une connaissance superficielle ou de matière mince. Pour avoir des images par transmission, avec le microscope électronique, il faut fabriquer des éclats ou des couches minces ; effectivement, on peut avoir l'impression d'en rester à une

vue partielle du problème. Il n'empêche que beaucoup de réactions chimiques sont des réactions de surface, donc cela reste un paramètre essentiel. Mais une des grandes modifications des outils des chimistes est quand même l'apparition du laser, et surtout du laser à colorant, du laser accordable. Avec ce laser qui permet de fixer la longueur d'onde, on va pouvoir cibler un état d'énergie d'une molécule, voire d'un isotope, et faire ainsi des choses très précises. Donc, à partir de là, on peut effectuer des mesures d'absorption, et même, dans un milieu gazeux un peu complexe, on aura accès à des contrôles par la spectroscopie infrarouge par exemple. Je crois que l'un des objectifs de la chimie, c'est la mesure de tous les composants d'une réaction, en temps réel ; c'est un des rares moyens d'influencer une chose, de comprendre réellement ce qui se passe. Mais ces techniques sont encore dans l'enfance, parce que pour beaucoup de réactions catalytiques, on ne sait toujours pas vraiment comment ça se passe. Maintenant on commence à disposer d'outils, et le fait d'étudier des systèmes sous vide qui sont accessibles, donne une idée des mécanismes possibles. Quand on connaît ces derniers, on peut chercher à voir s'ils ne sont pas présents aussi dans des milieux moins accessibles directement, et donc on peut élaborer de nouvelles techniques, de nouvelles méthodes. Ainsi, tous les jours, les méthodes de résonance se développent, et avec les résonances magnétiques nucléaires de plus en plus d'atomes sont accessibles. Des techniques comme la microscopie acoustique se développent également. Elles permettent d'aller un peu au-dessous de la surface pour observer un alliage ou un matériau. Ainsi commence-t-on à disposer d'un arsenal formidable de méthodes physiques qui sont des outils pour suivre les constituants individuels des espèces en présence.

UN NOUVEAU MOYEN : LA SIMULATION

Culture technique : Mais, avec ce progrès phénoménal de l'instrumentation, peut-on encore rester avec les mêmes outils théoriques, est-ce que cela n'amène pas à se reposer des questions ?

Paul Caro : Oui, et c'est très clair. Je n'ai pas parlé jusqu'à présent de la deuxième évolution de la méthode en chimie. Autrefois, il y avait d'un côté des théories et de l'autre l'expérience ; maintenant, entre la théorie et l'expérience, s'est insinuée une troisième composante qui est la simulation. Pourquoi la simulation ? Quand j'ai commencé ma carrière en chimie, il n'y avait pas d'ordinateur. Dès son apparition, il est devenu un outil indispensable, surtout pour la simulation. Que fait l'ordinateur ? Il prend un corpus théorique, et il essaie de simuler les résultats obtenus par l'expérience, que ce soit un spectre, une vitesse de réaction, il tente de simuler la donnée expérimentale. On commence à voir émerger l'idée qu'on ne peut apporter de crédit à la donnée expérimentale que lorsqu'on l'a simulée ; c'est très clair pour les images de microscopie électronique à haute résolution : ne sont

reçues par le chercheur, comme correspondant à un objet, que les images qui ont pu être simulées par le calcul ; il y a des raisons profondes à cela car elles sont souvent obtenues dans des conditions ambiguës, si bien qu'à un objet dont on ne connaît pas la nature correspond une infinité d'images. Il faut donc « re-simuler » l'infinité d'images pour trouver celle qui correspond bien à l'objet. C'est le problème du modèle confronté à la simulation et à l'expérience. Des modèles de plus en plus sophistiqués ont été engendrés simplement parce que c'étaient des modèles accessibles au calcul. Il faut bien voir que, pour un système chimique, être obligé de traiter une équation qui comprend un millier d'inconnues n'est pas un problème très sévère aujourd'hui, alors qu'il y a encore quelques années c'était un défi. On traite aujourd'hui des systèmes avec une très grande quantité de composantes très rapidement, même sur un ordinateur de bureau, alors qu'il y a dix ans il fallait recourir au CIRCE². On a actuellement accès dans notre pratique au traitement de problèmes dont on n'avait même pas l'idée il y a quelques années, par exemple le traitement des configurations électroniques des terres rares. Quand je faisais de la séparation de terres rares, on ne se posait pas la question parce que les moyens de calcul n'existaient pas. On savait bien qu'il y avait pour chacune des terres rares une couleur spécifique, mais on n'en voyait ni la cause ni l'intérêt. Puis, on s'est rendu compte que la couleur correspondait à un phénomène électronique exceptionnel, responsable aussi du magnétisme, qui est vite devenu important parce que la technologie l'utilisait, parce qu'il y avait le laser, la télévision couleur, les convertisseurs des écrans de rayons X. Nous avons connu toute une série d'avancées techniques, et ce problème-là est devenu un problème de recherches. Mais avec lui en même temps s'est introduite une sophistication mathématique que l'on ne soupçonnait pas il y a trente ans.

Culture technique : Malgré tout, ce qui fait la spécificité de la recherche en chimie, par rapport aux recherches dans les autres sciences, n'est-ce pas quand même encore une très grande part de l'expérimental ?

Paul Caro : C'est une des questions qui se discutent aujourd'hui, à cause de la simulation, parce qu'une des choses que la chimie a bien maîtrisées, c'est la structure de la matière principalement dans l'état solide. On ne connaissait pas il y a trente ans les structures des composés inorganiques. Puis un énorme travail de zoologie a été réalisé pour établir ces structures, et maintenant il y a toute une systématisation, une classification, tout un ensemble de choses qui font que les structures minérales sont aujourd'hui bien classifiées. Aujourd'hui, le même effort est en cours pour les structures organiques, et de plus en plus de structures commencent à être connues. Industriellement, on se rend compte qu'on a besoin de connaître les structures de molécules complexes, comme les protéines. D'énormes efforts sont faits sur les structures, l'arrangement des atomes dans l'espace, et on construit même de grands instruments pour cela. L'un des objectifs de l'ESRF³ de Grenoble, c'est la structure des protéines, des grandes molécules biologiques, parce qu'avec des intensités de

faisceaux X très élevées – on revient à l'instrument – on obtient d'un seul coup des structures complexes qui ne peuvent être obtenues par d'autres méthodes. Aussi, comme on a la possibilité de les calculer, c'est toujours l'association instrument-ordinateur-image qui joue. À partir de ces techniques d'établissement des structures, on arrive à fabriquer des images qui représentent des molécules. L'un des intérêts de l'ESRF, c'est que cette grande intensité du faisceau permet de prendre des clichés en fonction du temps et de suivre l'évolution des molécules. Donc, non seulement on a la structure, mais encore la dynamique structurale, et c'est là un des enjeux de ce projet. On voit la déformation des molécules au cours d'une réaction chimique.

Aujourd'hui, l'ordinateur sait manipuler l'image. On a ainsi présenté à la Cité des sciences et de l'industrie, le 25 mai dernier, ce qu'on appelle des univers virtuels, systèmes dans lesquels on présente à l'expérimentateur des images, et où muni d'un gant avec palpeurs, il peut manipuler l'image sur l'écran et se déplacer manuellement dans un espace virtuel. Quelle est la première application de cela ? c'est justement la réactivité des molécules, parce que le chercheur muni de deux gants et de deux molécules pourra manier ces molécules qui pourront être des modèles réels mais aussi des molécules qu'il inventera. On voit alors très bien qu'une partie de la chimie va se transférer dans cet espace virtuel. C'est toujours une expérimentation, mais c'est une expérimentation virtuelle. Peut-être ensuite passera-t-on à la réalisation expérimentale réelle. On va entrer dans une nouvelle époque, et on y est déjà un peu, celle de la dynamique moléculaire. Des problèmes comme celui de l'eau peuvent conduire à de bonnes simulations sur ordinateur. C'est la limite du calcul qui freine la méthode : aujourd'hui les ordinateurs les plus puissants ne peuvent traiter plus de 1200 molécules d'eau ; pour une simulation moléculaire c'est encore un peu ridicule, car cela ne représente aucun cas réel. On s'achemine dans la chimie vers une action de plus en plus abstraite : le couplage instrumentation, calcul, image et manipulation d'images. Il est même envisagé que l'image puisse avoir un *feed back*, c'est-à-dire qu'elle puisse renvoyer les sensations depuis l'espace virtuel en question ; c'est un moyen pour la chimie d'entrer dans le spectacle. Deux films, l'un japonais l'autre américain, ont présenté à la Géode des modèles moléculaires. Le spectateur se promène dans ces images géantes, et même pour un chimiste c'est intéressant : il se trouve au cœur des structures cristallines ! On va donc ainsi passer de la prothèse à l'engagement physique du chimiste dans l'espace virtuel moléculaire qu'il va pouvoir pénétrer. On voit ce que cela peut amener pour la catalyse, dans la mesure où le chimiste sera en position de faire le voyage de Gulliver, de se promener au cœur des systèmes atomiques. Évidemment, dans ces systèmes de calcul, il n'y a que ce que l'on y met au départ, mais cela va dépendre du travail que l'on arrivera à faire dans la maîtrise des ordinateurs avec les systèmes flous que l'on nomme systèmes intelligents, dans lesquels on ne fixe pas à l'avance toutes les possibilités. On se rend compte clairement qu'il y a aussi un jeu possible pour la chimie.

UN NOUVEL EFFORT THÉORIQUE

Culture technique : Ainsi sur ces quarante dernières années, le champ de la recherche en chimie a beaucoup évolué. Comment peut-on préciser cette évolution ?

Paul Caro : Le volume de recherche a beaucoup augmenté dans la mesure où une discipline est apparue : la chimie de coordination. Autour des éléments de transition on a vu émerger l'étude de produits, les complexes comme on les appelait autrefois, qui ont connu des moments forts avec Werner au début du siècle. Mais ce n'est plus comparable car ce sujet s'est trouvé pourvu dans les années 60 d'un arsenal mathématique, théorique : le poids énorme de la théorie des groupes pour tout ce qui concerne l'étude la chimie de coordination n'existait pas à l'époque de Werner. Les méthodes des mathématiques ont envahi la chimie, par les questions de structure, par les problèmes qui se sont posés autour des notions d'orbitales moléculaires, de toutes les questions de symétrie en général, d'où l'importance de la théorie des groupes et de toutes les théories de la réactivité chimique : les règles d'Hoffmann dérivent de la théorie des groupes, donc toute cette partie de la chimie, qui est très abstraite, est devenue indispensable.

Culture technique : Elle a remplacé peu à peu cette expérimentation...

Paul Caro : Elle a remplacé quelque chose qui n'était que de l'empirisme. On observait un complexe rose, un complexe bleu, on se disait que c'était du cobalt dans les deux cas, et on ne réalisait pas du tout les raisons pour lesquelles c'était bleu ou rose. Il a fallu la théorie des groupes, la prise de conscience de ce qu'était un élément de transition, de la nature de la géométrie de ces orbitales un problème qui n'est pas très compliqué, mais qui est du cinquième ordre pour que les scientifiques raisonnent ce problème autrement, et ils ont ainsi appris à « manipuler » ces complexes, à tirer sur les côtés, à appuyer sur l'axe pour changer la position respective des orbitales...

Culture technique : N'arrive-t-on pas un peu à bout de l'expérimentation, à partir du moment où s'élabore une compréhension basée sur des théories ? Quand on ouvre aujourd'hui les revues scientifiques du temps jadis on voit que des savants de l'époque passaient un temps considérable à décrire des formes cristallines, à mesurer des angles, à observer des faces, c'était un travail assez remarquable avec une part expérimentale difficile, compte tenu de l'époque. Aujourd'hui, on ne ferait plus tout cela, et pourtant on n'a pas épuisé le champ du possible. Est-ce que pour les complexes il est nécessaire de couvrir une telle surface, dont l'ampleur apparaît à la lecture des revues scientifiques actuelles ? Est-ce que cela va déboucher sur quelque chose ?

Paul Caro : A l'époque où les gens mesuraient les angles dans les cristaux, ils n'avaient pas une claire idée des méthodes qui permettent de déterminer les structures ; en effet, les angles des cristaux sont liés aux structures, c'était le reflet d'un certain besoin de définition des

structures. Maintenant, les problèmes structuraux sont presque automatiquement résolus. En revanche, pour ce qui concerne l'application aux éléments de transition et à la chimie en général des théories moléculaires, on est obligé de constater que les théories sont encore très élémentaires, bien qu'elles apparaissent comme des corpus formidables. Elles ne peuvent prendre en compte tout ce qu'il faudrait pour approcher de la réalité. Il y a beaucoup d'approximations parce que, si on sait assez bien calculer ce qui se passe autour d'un atome, on sait moins le faire en l'étendant à tous les atomes du composé. On n'est pas très adroit pour calculer les interactions entre un centre moléculaire et un autre. Pourquoi ? Parce que les ordinateurs sont encore limités. Je disais tout à l'heure qu'on ne sait pas calculer les configurations de plus de 1 200 molécules d'eau, et l'eau est une molécule extraordinairement simple. Quand on s'adresse à des systèmes plus complexes que l'eau, c'est pire ! Beaucoup d'articles ont été écrits sur ce sujet, qui reflètent des positions conflictuelles, des théories différentes, des niveaux de complexité différents, des interprétations qui sont parfois orthogonales, parce qu'elles correspondent à des degrés différents d'approximation. On peut espérer que les systèmes informatiques seront un jour suffisamment puissants pour tenir compte de toutes les réalités d'un système moléculaire et les calculer intégralement, et donc simuler parfaitement toutes les propriétés physiques, chimiques, de façon à permettre de prévoir, ce qui est clairement l'un des objectifs de la chimie.

Culture technique : Vous pensez qu'il y a encore un travail de science naturelle ?

Paul Caro : Non, je pense surtout qu'il reste à faire un formidable travail théorique. C'est assez clair, par exemple, dans l'étude de la réactivité chimique, puisqu'il faut calculer ce qui se passe quand deux molécules se rapprochent ; ce sont des questions très difficiles. On voit que c'est dans ce micromonde que l'on essaie d'approcher par l'observation, grâce à l'instrumentation, et aussi par la simulation, que sont les clefs véritables de la compréhension des choses. Cet effort va continuer. Il est encore à l'état élémentaire. Même ces théories que l'on trouve dans la littérature scientifique, et qui paraissent si compliquées, sont encore, dans neuf cas sur dix, très primaires, c'est-à-dire qu'elles fonctionnent encore sur des systèmes inventés il y a vingt ans. Par exemple, la technique de calcul de Hückel, dont on en parle encore comme d'une merveille, est en fait une approximation sommaire, et un jour ou l'autre quelqu'un va trouver mieux. Il y a déjà des méthodes supérieures, mais on se heurte à des coûts de calcul, à la capacité d'organiser ces calculs. De plus, l'instrumentation devient de plus en plus fine, tout ce qui fait appel aux ondes radios, par exemple, a une précision de mesure qui dépasse de beaucoup la capacité de simulation des calculs actuels ; les mesures expérimentales ont souvent beaucoup d'avance sur la capacité de simulation, donc la simulation a encore des progrès à faire.

Culture technique : Est-ce à dire que lorsque l'on arrivera à la simulation parfaite, ce sera la fin de la chimie ?

Paul Caro : Je ne crois pas, parce que le nombre de combinaisons est infini, et on tentera toujours de nouvelles combinaisons, marier la carpe et le lapin, mais on saura dans quelles conditions approcher ces choses-là.

Culture technique : Est-ce que l'on peut dater, à quelle échéance ?

Paul Caro : Tout dépendra de la capacité des ordinateurs, soit de nouveaux systèmes style ordinateurs neuronaux, soit d'astuces de gens qui font des arrangements d'ordinateurs pour les calculs. La question de l'augmentation de la capacité des ordinateurs dépend de la capacité à miniaturiser, ce qui veut dire essentiellement évacuer la chaleur. Pourra-t-on y parvenir avec la génération de semi-conducteurs actuels, ou faudra-t-il attendre que les supra-conducteurs permettent de résoudre ces questions ?

Culture technique : A l'heure actuelle, le champ de recherche de la chimie n'est donc pas rétréci ?

Paul Caro : Non, il y a cet énorme problème que posent les composés biologiques et moléculaires qui sont des mondes de complexité. Il y a des atomes métalliques dont le rôle est mal connu. Cela demande une observation directe, car bien souvent on ne peut pas imaginer quels sont les mouvements des molécules, et c'est l'observation qui révèle la subtilité des mouvements d'encastrement des molécules. Un autre paramètre que l'instrumentation maîtrise très mal, c'est la mesure dynamique, la mesure dans le temps. On attend l'ESRF pour avoir des rayons X en séquence dans le temps, mais on peut dire la même chose pour l'observation au microscope électronique qui est faite sur des objets fixes, et avec lequel on peut espérer qu'on aura bientôt le moyen de faire une observation dynamique. Là, on va se rendre compte de phénomènes qu'on ne soupçonnait pas. Par exemple, beaucoup de structures chimiques, du moins dans le domaine minéral, semblent être fixées au moment de leur naissance. Les cristaux de carborundum en sont un exemple classique. Ce carbure de silicium a une infinité de structures. Les vapeurs de silicium et de carbone mélangées se condensent sur une paroi froide. Ce sont les conditions à l'instant de naissance qui fixent la structure. Les techniques de dépôts en phase vapeur de matériaux réfractaires, qui sont très importantes pour l'industrie de l'espace, ont obligé les scientifiques à se poser la question de l'observation de l'instant de naissance d'un cristal. Alors, ils font appel à des techniques lasers, à des mesures de ce qui se passe dans la première couche moléculaire qui se condense sur la surface, et ils arrivent à mesurer les paramètres des molécules qui arrivent sur cette surface. Cette observation doit être faite d'une façon dynamique. On voit clairement que ce sont des « manip » acrobatiques, que le paramètre dynamique dans une réaction, dans la synthèse d'un composé, va devenir un objectif de recherche important.

Culture technique : Cette compréhension, vous nous l'avez montré, est importante dans les problèmes que pose la conquête de l'espace. Mais la connaissance dynamique des structures n'est elle pas plus générale ? Si on connais-

sait par exemple la structure des protéines, on pourrait peut-être créer des médicaments par la méthode du *drug design* ?

Paul Caro : C'est vrai, mais là il y a une autre raison, c'est l'interférence du droit et de la science qui a de plus en plus d'importance. Si la structure des protéines est devenue si importante, c'est que beaucoup de ces protéines sont utilisées comme médicaments. Or, la loi américaine, en particulier, exige pour la validité d'un brevet le dépôt de la structure. Donc, pour affirmer ses droits sur un produit, il ne suffit pas de donner la formule, mais il faut donner la structure. C'est une raison qui n'a rien à voir avec le *drug design*, mais une raison légale. On comprend pourquoi la structure commande l'activité du produit, il peut y avoir quarante produits pour la même formule et qui ne sont pas également actifs. Les raisons du législateur américain sont logiques.

DES ORIENTATIONS POUR L'AVENIR

Culture technique : Vous introduisez cette idée de finalité, et il y a tout de suite un certain nombre de questions qui viennent à l'esprit : aujourd'hui, devant ce champ très vaste, n'y-a-t-il pas des choix à faire étant donné que, si le domaine de l'expérimentation ne va pas en se limitant, les capacités de recherche, elles, sont finies ? s'il y a des choix à faire, comment les faire et qui doit les faire ? Le chercheur ? le politique ? Mais aussi quelle est la part qui incombe à la recherche fondamentale, quelle est la part qui revient à l'industrie ou aux gens qui développent ? Où est la fracture ? On dit souvent que la recherche fondamentale est du domaine de la recherche publique, et que la recherche appliquée est du domaine de l'industrie, mais c'est un peu simple. Le problème se pose-t-il, et, si oui, comment le résoudre ? Il y a sans aucun doute des priorités : par exemple le développement des programmes spatiaux a exigé le développement de matériaux qui résistent dans l'atmosphère... Qui doit gérer ces priorités ?

Paul Caro : Je ne pas sûr que les pouvoirs publics soient conscients du problème, mais je crois qu'il faut qu'il y ait un secteur où les chercheurs puissent être libres de suivre leur fantaisie à condition que celle-ci ne soit pas stérile, qu'elle s'accompagne du cortège d'instrumentation, de calcul, d'imagerie, des moyens dont je parlais tout à l'heure. C'est comme cela que l'on engendre des affaires qui ne sont pas dans des plans technocratiques, parce que l'on est obligé de constater qu'en général rien de neuf ne sort des plans préparés à l'avance. Je crois qu'il n'y a guère que le transistor qui résulte d'un effort de recherche organisé, tout le reste est apparu comme cela, par la fantaisie de chercheurs qu'on avait laissés libres. Le dernier exemple, ce sont les supraconducteurs à haute température critique. Si IBM n'avait pas eu un secteur de recherche libre, peut-être serait-on passé à côté de cette découverte.

Culture technique : Mais cela rentre quand même dans une finalité générale. Dans l'exemple des chercheurs

suisse d'IBM, leur recherche n'était pas totalement gratuite...

Paul Caro : Oui et non ; dans la mesure où l'on peut se demander si ces chercheurs y croyaient eux-mêmes. Ils cherchaient à étendre un domaine qui existait déjà, mais qui était tout petit et obscur, comme souvent. Il y avait des oxydes supraconducteurs, qui avaient été étudiés par Dupont de Nemours il y a 30 ans, qui étaient une curiosité. Ils sont partis de là et ont eu la surprise de découvrir que la température critique était beaucoup plus élevée que celle qu'ils avaient imaginée. Si on ne les avait pas laissés libres de chercher des composés un peu étranges, on n'aurait pas découvert cette classe de composés. Il faut qu'il soit possible de laisser des gens rôder et suivre leurs idées. Mais il ne faut pas que ce soit seulement de la fantaisie, il faut que les chercheurs soient fortement soutenus par l'état de l'art, au niveau instrumental. C'est indispensable. Dans un laboratoire de recherche sur les oxydes, on ne peut pas demander de seulement fabriquer un oxyde qui tienne à 6000° C, c'est un objectif trop étroit. L'industrie, par contre, peut s'attaquer à de tels problèmes.

Culture technique : Avec de tels objectifs au niveau industriel, on s'aperçoit que très souvent, même s'ils ne sont pas atteints, ils polarisent et font trouver un certain nombre de choses... Je pense au cas du silicium, c'était un problème, je ne sais pas si cela l'est toujours, la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique. Je pense qu'à certaines époques, si on s'était fixé un objectif tel que : « *je veux trouver un produit qui fasse de l'électricité moins cher que les centrales atomiques ou les centrales au charbon* », on n'y serait sans doute pas arrivé. Mais le fait de poser cet objectif a canalisé un certain nombre de chercheurs, et a abouti dans un certain nombre de cas au moins à des solutions partielles.

Paul Caro : C'est une exemple amusant, parce qu'effectivement il y a eu pas mal de recherches sur la conversion photovoltaïque. On a cherché le rendement, et on est arrivé à une limite, qui n'est pas ridicule d'ailleurs, ce qui a permis d'équiper des installations éloignées des sources d'énergie classiques. La recherche fondamentale va peut-être arriver dans ce domaine à quelque chose qu'elle n'avait pas prévu, c'est-à-dire à de nouveaux types de composants électroniques qui ne seront plus des convertisseurs de photons en électrons, mais qui seront des bases de circuit ou des bases pour faire circuler l'électron. Ce qui caractérise la société depuis le début du siècle, c'est la domestication de l'électron et du photon, comme autrefois on a domestiqué les chevaux et les vaches, et naturellement il faut apprendre à les manipuler. L'électron se manipule sous vide, c'est le tube cathodique de nos TV, mais aussi dans la matière, c'est le transistor. Il reste encore des progrès à faire dans la manipulation de l'électron, trouver des systèmes plus petits, miniaturisés. Et puis d'un autre côté il y a le photon : au début c'était l'éclairage fluorescent, maintenant, on a appris à le faire circuler aussi dans la matière, on fabrique des composants optiques... Ce sont des objectifs de recherche que l'industrie peut atteindre. L'industrie peut se dire : « *Est-ce que je*

peux gagner quelque chose à avoir des composants électroniques qui diminuent le temps de calcul ? » Cela pose des problèmes de matériaux, de techniques de gravure. Moi, je crois que l'industrie a intérêt à poser des problèmes précis. Par exemple : « *Qu'est-ce que je vais gagner à fabriquer un luminophore pour un tube fluorescent qui me donne une lumière plus blanche ?* » Il y a un exemple tout à fait précis, la recherche n'a pas réussi à « tuer » le tube cathodique. Ce qui est un problème de fond puisque nos relations avec l'image animée sont conditionnées par le tube cathodique qui est un objet qui reste petit, et que l'on ne peut pas faire en grandes dimensions, par suite des limitations dues au verre, au poids que cela entraîne. Les recherches n'ont pas abouti. On n'a jamais réussi à faire un luminophore bleu qui soit suffisamment intense pour être compétitif avec la qualité de l'image qu'on obtient sur un tube cathodique. On fait des recherches sur la TVHD parce que l'on sait que l'on n'aura pas dans l'immédiat un écran plat de grandes dimensions. Mais supposons qu'un laboratoire découvre un luminophore bleu extraordinaire : à ce moment-là, la question peut se reposer très vite, et comme le disque vynile a disparu en quelques années avec l'apparition du CD, la disparition du tube cathodique de la télévision pourrait être très rapide, et nos relations avec l'image seraient changées, et cela c'est fondamentalement un problème de chimie. Il s'agit de la conversion électron-photon ou photon-électron, mais, après tout, il y a peut-être la possibilité d'une conversion photon-photon qui permettrait d'avoir une image lumineuse. C'est un problème qui a déjà été abordé, mais pour l'instant c'est un échec de la recherche. Il y a certes des écrans plats, cela existe, mais c'est insuffisant et pas compétitif avec le tube cathodique. Ce peut-être une stratégie pour demain, et pourquoi pas une stratégie industrielle. Mais il faudra que l'industrie dispose de gros laboratoires de recherche et d'un grand potentiel scientifique.

Culture technique : Mais alors, cela ne suppose-t-il pas que les industriels fassent de la recherche assez fondamentale dans un cas pareil ?

Paul Caro : Peut-être, mais prenons l'exemple du Japon. Il n'est pas évident que la stratégie japonaise soit tout à fait simple. Leur stratégie est peut-être d'écouter ce qui se fait dans la recherche fondamentale libre, dont je parlais tout à l'heure, qui existe surtout dans les pays occidentaux, et de récupérer ce qui peut être une base pour un développement, parce que ce n'est pas la recherche fondamentale qui va fabriquer un luminophore bleu qui soit compétitif. Elle va donner l'idée de ce que peut être ce luminophore bleu compétitif, et c'est l'industrie qui va le mettre au point, de même que les supraconducteurs, ce ne sont pas les laboratoires de recherche qui vont les transformer en produits industriels. Il n'est pas évident que l'industrie en question soit obligée de faire de la recherche fondamentale, il faut qu'elle la surveille. Mais une fois qu'elle a trouvé la bonne idée, il faut qu'elle ait un laboratoire de développement puissant qui permette de poursuivre cette idée, puisqu'on dit que le développement coûte dix fois plus cher que la recherche, et l'industrialisation du projet dix fois plus que le développement.

Culture technique : Y-a-t-il encore beaucoup de sujets de ce genre ? Certains viennent à l'esprit, par exemple le stockage de l'énergie électrique pour lequel la chimie a tout de même connu un échec.

Paul Caro : Pas vraiment, c'est une bonne question. Ce problème a progressé considérablement puisqu'on envisage maintenant d'avoir des batteries plus ou moins réversibles qui sont basées sur des hydrures de nickel et de terres rares qui stockent l'hydrogène et qui peuvent fonctionner comme des accumulateurs. Ils ont encore l'inconvénient d'être des matériaux lourds, mais on peut concevoir qu'en ce qui concerne le stockage de l'énergie, la technologie existe déjà. C'est plus un problème économique.

Culture technique : Vous pensez au transport ?

Paul Caro : Non, je pense au stockage qui peut être fixe. L'Électricité de France a souvent caressé l'idée de techniques alternatives de production d'électricité. Mais je crois que pour les problèmes de stockage, on peut penser que la technologie existe plus ou moins. De même, un effort formidable a été fait pour tuer le plomb dans les accumulateurs en fabriquant des batteries avec des polymères organiques conducteurs. Les problèmes qui se posent alors sont ceux de la reproductibilité, de la durée de vie, mais, d'après ce qu'on dit, les hydrures de nickel paraissent bien partis pour apporter des solutions industrielles, cela fait déjà quinze ans qu'on les utilise. Je crois que le stockage de l'énergie est un problème en bonne voie, (je n'en dirai pas autant de l'écran plat), et on va voir apparaître des batteries légères, et puis des systèmes de stockage efficaces.

Culture technique : Ce qui a coincé, n'est-ce pas encore de la chimie, par exemple dans les piles à combustible qui n'ont pas débouché sur quelque chose de courant, si l'on excepte les utilisations pour l'espace ?

Paul Caro : C'est une question économique. La pile à combustible existe et fonctionne, mais, dans les conditions économiques actuelles du prix du pétrole, elle n'est simplement pas rentable, et de plus il faut stocker l'hydrogène et l'oxygène. Les problèmes ne sont pas seulement du domaine économique mais aussi du domaine social, car il faudrait limiter la vitesse des automobiles à 90 km/h. Il faut avoir des engins lourds qui aillent moins vite. Il n'y a pas de barrières techniques. Mais la solution a un coût économique ou social tel, qu'elle n'est pas utilisable.

Culture technique : Pour l'espace, on n'a pas les mêmes contraintes économiques et sociales...

Paul Caro : Non, sans doute, mais il y a d'autres domaines de recherches importants. Il est clair que de grands progrès sont à attendre de la chimie, par exemple dans l'interaction chimie-biologie. Il est évident qu'on va y faire les découvertes les plus spectaculaires. On connaît encore mal les mécanismes biologiques, ceux des maladies un peu importantes. On peut espérer trouver quel rôle joue tel produit chimique ou tel élément en trace dans une chaîne de réactions biologiques, on trouvera sûrement,

LA CHANCE DE LA CHIMIE

pourquoi pas, la molécule miracle qui va, par exemple, retarder le vieillissement. On peut penser que le vieillissement a des supports chimiques et que l'on va découvrir ces molécules responsables du vieillissement, trouver les mécanismes et les ralentir. Déjà, on voit des progrès dans cette direction. Tous ces projets énormes que l'on fait actuellement, comme le séquençage du génome, reposent finalement sur des techniques chimiques ou sur des techniques d'observation directe telles que la microscopie à effet contact dont on peut penser qu'elle progressera. Il y a encore un problème de zoologie, puisqu'il faut déterminer les molécules, leurs réactions. C'est un travail énorme !

Culture technique : Oui, mais un travail à forte connotation chimique.

Paul Caro : Oui, mais ce n'est pas autre chose qu'un travail de chimie ; il faut identifier des molécules, et les techniques des connaissances moléculaires ou d'identification des molécules ont énormément progressé. Aujourd'hui, on sait faire la séquence de la synthèse d'une protéine de manière plus ou moins automatique, et c'est un énorme progrès. On sait non seulement reconnaître les molécules, mais on sait les associer, on sait faire du « Lego » avec ces molécules-là. Cela va progresser terriblement. On sait très bien qu'il faut sacrifier des milliers de bœufs, de chevaux, de moutons pour identifier la molécule naturelle qui est responsable de tel processus biologique, mais, une fois identifiée, les chimistes arrivent parfois en huit jours à en faire la synthèse. Cela s'est produit pour plusieurs hormones qu'il fallait isoler du système naturel avec des procédures de traitement monstrueux, mais une fois séparé l'agent actif, on a fait sa structure, et peu après les chimistes de synthèse l'ont reproduit. Des choses comme cela vont continuer, sauf si la modélisation progresse suffisamment.

Culture technique : C'est donc là que se trouvent les sujets d'avenir : énergie, communication et biologie ?

Paul Caro : C'est de l'interface chimie-biologie que l'on peut attendre les progrès les plus spectaculaires.

Culture technique : Dans toutes les recherches qui tournent autour des procédés, il y a toujours l'espoir d'arriver à faire des réactions que l'on fait aujourd'hui par des méthodes meilleures, moins gourmandes en énergie, des « méthodes douces » comme celles qu'utilise la nature.

Paul Caro : Cela dépendra surtout des progrès dans la compréhension du mécanisme des catalyseurs. On ne sait pas pour le moment, car on n'a pas appliqué tout l'arsenal théorique de modélisation et tout l'arsenal expérimental à des réactions catalytiques. Il y a beaucoup d'empirisme. Il faut que la catalyse sorte un peu de la préhistoire, comme l'a fait la chimie du solide au cours des vingt dernières années ou comme est en train de le faire la biologie avec toutes ces techniques dont on a parlé, ou qui arrivent à maîtriser des molécules complexes.

Culture technique : Ce qui nous frappe, à l'issue de cet entretien, c'est l'extraordinaire optimisme qui se dégage. Or, depuis que nous sommes en train de monter ce numéro, les chimistes que nous avons rencontrés nous disent que ça va mal, que la chimie connaît un certain malaise. Ce que vous nous dites sur l'avenir de la chimie, c'est au contraire quelque chose tout à fait riant, très passionnant pour les chimistes et aussi pour le bien de l'humanité. Le malaise est lié sans doute à la reconnaissance de la chimie, mais n'est-il pas surtout un malaise des enseignants qui ne se sentent pas reconnus ?

Paul Caro : Il faut bien comprendre que la chimie a plusieurs problèmes : par dessus tout, elle a un problème de langage. Elle s'exprime à travers des formules. Il y a un rejet de la formule comme étant un savoir codé, une marque de pouvoir. Mais on constate que la chimie commence à produire des images, c'est une chance parce que ces images sont des représentations des formules. Les formules contiennent des propositions quantitatives mais aussi, comme cela arrive par exemple pour les formules développées en chimie organique, elles contiennent une représentation de la forme et de la disposition des atomes. Aujourd'hui, on les voit directement. Je pense que la chimie a une carte formidable à jouer avec ces images. Ce sont les films dont je vous parlais qui exportent des images chimiques. Ce sera peut-être lent. Les astronomes n'ont-ils pas mis cent ans à se construire une auréole auprès du public ?

Culture technique : Oui, mais les astronomes avaient quelque chose à montrer.

Paul Caro : La chimie a aussi maintenant des images à montrer ! Elle a même des images qui ont des aspects spectaculaires ! On peut penser que peu à peu, comme les astronomes ont habitué les hommes au voyage dans l'infiniment grand, les images de la chimie peuvent habituer au voyage dans l'infiniment petit et rendre familier tout le zoo de la classification périodique. Les gens ne savent pas ce que c'est que tout cela. On peut essayer de créer peu à peu une habitude. Et puis il y a des choses dans la chimie qui posent encore un problème, le sens à donner au chiffre, au nombre. Le mythe de la pureté, par exemple, est un obstacle énorme, car on ne comprend pas que pour un chimiste la pureté est relative. La pureté se définit par rapport à quelque chose, il n'y a pas de pureté absolue, or il y a un mythe de la pureté absolue, on veut de l'eau pure. L'eau pure, cela n'existe pas et c'est très difficile de le faire comprendre. La chimie se heurte constamment à ce problème de la pureté associée au chiffre, lui-même fourni par la mesure.

Culture technique : N'y-a-t-il pas là un problème de popularisation ?

Paul Caro : Oui, de popularisation, de vulgarisation. C'est un problème crucial, un problème majeur, auquel il faut s'attaquer d'une manière systématique et technique. Et je pense qu'il faut encore s'appuyer sur l'image, il faut

encourager les cinéastes à faire des films spectaculaires avec les images de la chimie. Les gens seront très surpris, ils ne verront pas trop ce que c'est, mais peu à peu, avec l'habitude, ces images deviendront familières, et la génération suivante aura compris. Cet aspect visuel manquait à la chimie, mais maintenant il existe : on voit des colonnes d'atomes, on peut les virtualiser, on peut même en faire des jeux vidéo. Donc, il y a une énorme ouverture de l'image : la chimie, c'est de l'image !

Culture technique : C'est ce qui vous rend finalement optimiste ?

Paul Caro : Oui, tout à fait, et je suis persuadé que si l'on arrive à personnaliser, à faire comprendre d'abord, à isoler les personnages élémentaires de la chimie, à faire comprendre les images, on arrivera à faire passer les messages.

Notes

1. Cet entretien a été réalisé par Pierre Bouy et André Grelon le 17 mai 1991, à la Cité des sciences et de l'industrie.

2. CIRCE : Centre de calcul du CNRS.

3. ESRF : European Synchrotron Research Facility.