Zeitschrift: Horizons : le magazine suisse de la recherche scientifique
Herausgeber: Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique
Band: - (1991)
Heft: 12

Artikel: La chimie in ordinato
Autor: [s.n.]
DOI: https://doi.org/10.5169/seals-970767

Nutzungsbedingungen
Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation
L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use
The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 14.07.2025

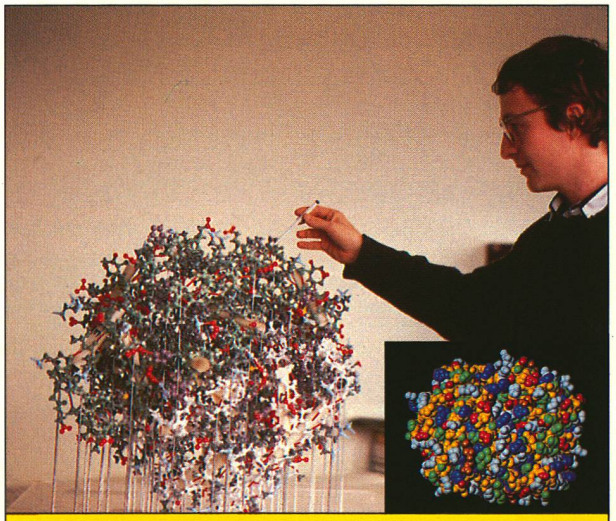
ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

La chimie *in ordinato*

La chimie est en révolution. Et l'ordinateur est une fois de plus à l'origine du mouvement. Avec lui, les chercheurs peuvent non seulement calculer les structures et les propriétés de millions de molécules, mais aussi les représenter en trois dimensions. On commence même à voir poindre des réactions chimiques sans éprouvette...

Le travail du chimiste ressemble à celui de l'architecte. A sa disposition, il a un nombre limité de matériaux – les atomes – et il les assemble pour créer une infinité de structures nouvelles. Comme l'architecte, il doit se soumettre à des règles de construction et il a besoin de visualiser ce qu'il fait : tourner une nouvelle molécule sous tous les angles pour estimer sa stabilité, observer ce qu'elle devient quand on change certains de ses atomes, imaginer comment elle va réagir lorsqu'elle entrera en contact avec d'autres substances. Cette nécessité visuelle explique le succès des «kits de Dreiding» (du nom du chimiste suisse qui les a inventés), ces boules de plastiques destinées à bâtir n'importe quelle sorte de molécule. Mais après une vingtaine d'années de loyaux services dans tous les laboratoires du monde, ces kits sont peu à peu rangés au placard, poussés par l'ordinateur...

Avec un kit, assembler à la main les 37 000 sphères de plastique de l'hémoglobine humaine demandait plus d'une semaine d'habileté ! Avec un ordinateur, tout devient simple. Par le réseau téléphonique, la machine est reliée aux grandes banques de données, dont celle des «Chemical abstracts», contenant les informations sur les dix millions de composés connus aujourd'hui, et celle de Brookhaven qui rassemble les plans de centaines de protéines. Une fois l'information obtenue, le chimiste lance un programme de modélisation moléculaire, et voit très rapidement sur l'écran l'hémoglobine en «trois dimensions». Il peut alors la faire pivoter, ou la modifier à son gré.



Il a fallu plus d'une semaine pour construire cette molécule d'hémoglobine avec un kit. Quelques secondes ont suffi à la représenter sur l'ordinateur (encadré).

S'il faut un exemple pratique pour montrer l'utilité de la «chimie assistée par ordinateur», on peut citer la fameuse *cyclosporine,* utilisée pour éviter les phénomènes de rejet lors d'une greffe d'organe. Avant sa synthèse, ses propriétés ont été simulées à l'écran.

Signe de cette révolution : les programmes informatiques de construction moléculaire figurent en nombre sur le marché. Par contre, bien plus rares sont ceux capables d'indiquer la stabilité d'une nouvelle substance, ainsi que ses tendances à former des liaisons chimiques avec d'autres. On commence seulement à voir poindre quelques applications pour la chimie organique, discipline qui s'occupe d'analyser et de synthétiser les médicaments, les textiles, les matériaux plastiques, les arômes, les parfums ou les lubrifiants.

Parmi les groupes de recherche qui développent de tels logiciels se trouve l'équipe du prof. Jacques Weber de l'Université de Genève. Sa spécialité, c'est la très prometteuse chimie *organométallique* – que certains n'hésitent pas à nommer la «chimie douce» (voir page ci-contre).

Dans les grandes lignes, ce domaine particulier de la chimie consiste à ajouter des atomes de métal à certaines substances organiques, afin de modifier – souvent radicalement – leur comportement. En procédant de la sorte, la synthèse d'un nouveau composé devient possible à des températures et des pressions plus basses, tout en produisant moins de déchets. Une fois la synthèse terminée, on recycle le métal.

Le fait de lier un atome de métal à une molécule organique (constituée surtout d'atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote) modifie passablement l'énergie de ses électrons et leur distribution spatiale. Où sont-ils ? Dans quels états sont-ils ? Un chimiste a absolument besoin de le savoir, puisque les liaisons chimiques ont

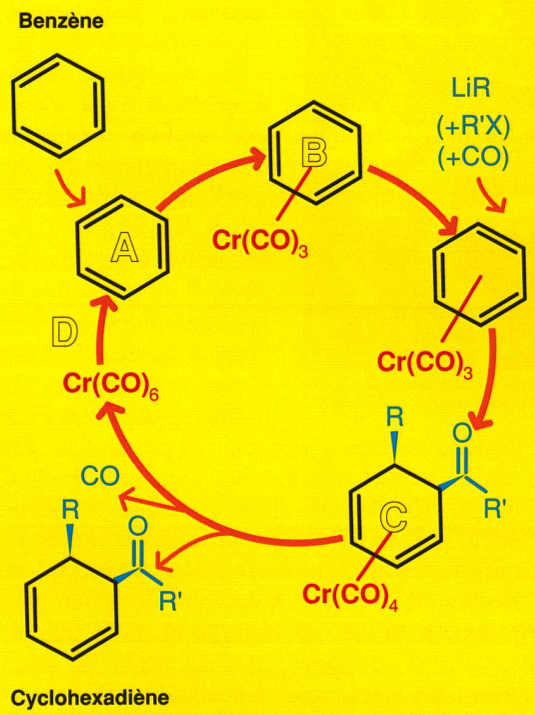
toujours pour origine un déplacement et une modification de l'énergie des électrons. Pour gagner des jours de manipulations en laboratoire, l'équipe du prof. Weber cherche donc à prédire sur l'ordinateur ce qu'il advient du nuage électronique d'un composé organique, lorsqu'il se lie à un métal. Preuve de la difficulté: aucun logiciel évolué n'existe encore dans ce domaine précis. Il faut dire que ce genre de problème consomme un temps de calcul considérable: le super-ordinateur Cray-2 de l'Ecole polytechnique fédérale de Lausanne est souvent appelé à la rescousse.

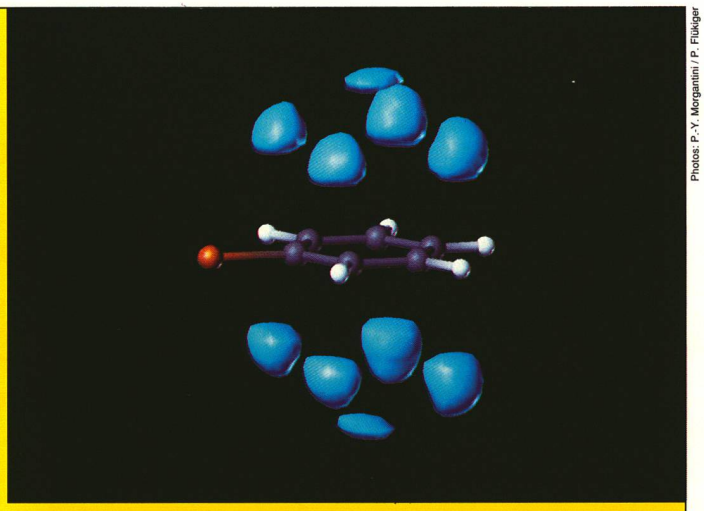
L'équipe de Genève, qui collabore avec les chimistes de Claude Daul à l'Université de Fribourg, est déjà parvenue à modéliser *in ordinato* deux réactions chimiques parmi les plus fréquentes chez les composés organométalliques (*réactions d'addition* ou *substitution électrophile et nucléophile*). Leurs résultats ont déjà été incorporés dans le puissant logiciel MOLCAD.

Ce programme est une véritable star dans le monde académique. Il a été créé à l'Université de Darmstadt (Allemagne) et se perfectionne d'année en année, au fur et à mesure que l'informatique et la théorie progressent. Sera-t-il un jour capable de décrire la forme d'une nouvelle molécule, ses propriétés, ses réactions et le chemin qu'il faut suivre pour la synthétiser? Les chimistes sont en tout cas sur la bonne voie...

Synthèse douce

Actuellement en plein développement, la chimie organométallique permet de synthétiser des composés à des températures et des pressions plus basses que d'ordinaire. A la clé, une économie d'énergie et moins de déchets – et donc moins de pollution.
La réaction ci-dessous, découverte au laboratoire du prof. Peter Kündig (Université de Genève), concerne une transformation du *benzène* en *cyclohexadiène* qui est un précurseur de synthèse très largement utilisé en chimie organique.
Normalement le benzène (A) ne réagit pas avec un composé contenant du lithium (Li-R). Mais une fois lié à un «groupe métallique» contenant du chrome $Cr(CO)_3$, il devient très réactif (B), et se lie facilement (C). Après la liaison, le groupe chromé se détache et le cyclohexadiène est formé. Le groupe chromé peut recommencer son travail avec un autre benzène (D).





Photos: P.-Y. Morgantini / P. Flükiger

En haut: représentation sur ordinateur d'une molécule de chlorobenzène. Les petits nuages bleus indiquent les zones les plus réactives de la molécule face à un composé donneur d'électrons.

En bas: un «groupe métallique» contenant du chrome $Cr(CO)_3$ a été lié au chlorobenzène. On constate que la zone de réactivité s'est largement accrue. Plus le nuage tire vers l'orange et plus la réaction est favorable. En observant ce genre d'images, un chimiste peut gagner un temps précieux, en évitant de mener de longues manipulations en laboratoire.