

# Contrôler les molécules



**Gabriel Turinici**

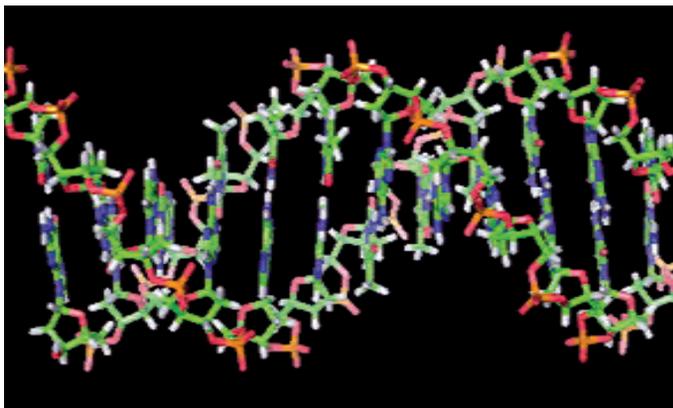
*CEREMADE, Université Paris Dauphine*

## Le sabre laser en chimie

Dans le cycle de films *La Guerre des étoiles* les personnages aux pouvoirs hors du commun ont leur propre sabre laser dont la couleur leur est propre : plutôt rouge pour les “méchants” et bleue ou verte pour les “gentils”. Pourquoi les couleurs sont elles différentes ? Laquelle est la “meilleure” ?

Aussi étonnant que cela peut paraître, les fans du cycle “La Guerre des étoiles” ne sont pas les seuls à se poser cette question : les chimistes et les mathématiciens qui travaillent à contrôler des réactions chimiques par laser le font aussi. Voyons comment ils en sont arrivés là.

Tout d’abord il y a eu le laser : une source de lumière monochromatique (chaque laser émet de la lumière ayant une fréquence unique, à chaque fréquence correspond une couleur) et qui peut focaliser beaucoup d’énergie sur un seul point. Dès les années 1970 les chimistes se sont dit : pourquoi ne pas utiliser un laser pour faire de la chimie ? Qui dit chimie dit liaison chimique : deux ou plusieurs atomes mettant en commun des électrons et se liant ainsi pour former des molécules de grande ou petite taille ; notre propre ADN n’est rien d’autre qu’une immense molécule chimique.



Brin d’ADN.

Nous observons que la molécule est formée par les multiples liaisons entre des atomes différents.

*Crédit : Wikipedia*

Mais une liaison chimique oscille avec une fréquence (donc une couleur) qui lui est propre ; comme le laser peut être fabriqué de manière à ce que sa couleur soit identique à celle de la liaison le phénomène de résonance devrait aboutir à casser celle-ci et pas les autres. Aussitôt dit aussitôt fait : les chercheurs ont testé grandeur nature leur idée mais à la place d'une précision chirurgicale sur une liaison particulière toute la molécule a été détruite.

Retour à la case départ : ce qui n'a pas marché dans cette première expérience est l'intuition. Le laser est cependant un bon outil. Les chercheurs se sont donc retroussé les manches et ont tout refait sur l'ordinateur. Ils ont joué avec les lasers et ont constaté que d'une part un laser de la bonne couleur, c'est-à-dire accordé sur la fréquence de vibration d'une seule liaison chimique ne fait que "chauffer" toute la molécule ; par contre quand ils ont testé des mélanges de lasers différents les résultats ont été bien meilleurs. Manifestement il y a matière à poursuivre mais comment ?

## **La théorie du contrôle**

C'est ici que les mathématiciens entrent en jeu. Tout d'abord, avant de trouver le laser il faut répondre à la question de principe : est-il possible de casser une liaison précise avec des lasers ?

La réponse vient de la théorie du contrôle optimal.

Prenons l'exemple de l'hélicoptère : dès 1480 Leonard de Vinci y pense et des dessins ont été retrouvés dans ses écrits. Son projet est très bien conçu avec une seule erreur (compréhensible car il n'avait aucun moyen de vérifier) de ne mettre qu'une hélice. Résultat : l'hélicoptère aurait tourné sur lui-même et se serait écrasé aussitôt.

Aujourd'hui les modèles classiques ont deux hélices : une grande, dite de sustentation, pour les déplacements verticaux et horizontaux et une autre dite de queue dont l'axe est horizontal et qui empêche de tourner en rond ; les deux hélices sont indispensables. D'autres modèles existent : certains ont deux hélices axiales superposées, d'autres deux hélices symétriques etc.

Comment sait-on construire des hélicoptères qui peuvent manœuvrer sans crainte ? Il est hors de question d'attendre la fabrication pour constater s'il s'écrase ou pas. C'est la théorie mathématique du contrôle qui permet de donner une réponse précise pour n'importe quel type d'hélicoptère (présent ou à venir) ; cette théorie peut prédire quand deux hélices suffisent à bien piloter l'hélicoptère (et comment celles-ci peuvent être placées) ; la même théorie a aussi été utilisée pour manœuvrer les satellites et nos voitures qui se garent automatiquement.



Trois types d'hélicoptères.

Il n'est pas toujours facile d'être sûr que la configuration des hélices est effectivement correcte et suffit pour complètement manœuvrer l'appareil. Ces calculs se font lors de l'étape de conception.

*Crédit : Wikipedia ; Hélicoptère*

Revenons à nos molécules : la même théorie peut prédire quels lasers sont suffisants pour complètement manœuvrer la molécule. Après avoir fait leurs calculs les chercheurs sont arrivés à la conclusion suivante : nous pouvons contrôler la molécule si nous disposons de lasers de plusieurs fréquences et si nous pouvons les combiner au souhait. Par ailleurs les lasers de fréquence plus élevée (correspondant aux couleurs vert, bleu, indigo, violet) sont plus susceptibles d'agir sur un éventail large de molécules car ils ont de plus la possibilité de faire faire des mouvements très compliqués. Mais la théorie ne dit pas comment trouver le bon laser, seulement qu'il existe.

### **Les simulations numériques et la recherche du "bon" laser**

Maintenant rassurés sur le principe qu'un laser idéal existe qui peut faire faire à notre molécule tout mouvement souhaité, il faut maintenant trouver les caractéristiques du laser recherché.

C'est ainsi que nous entrons dans le domaine des simulations numériques sur ordinateur et de leur théorie mathématique (qu'on appelle analyse numérique). Simuler l'interaction entre molécule et laser n'est pas chose facile car coûteuse en temps. Si, de plus, nous devons prendre les lasers un à un jusqu'à trouver le bon ce serait peine perdue.

Le problème est que le laser fait faire à la molécule une promenade dans un espace à grande dimension, celui de toutes les configurations possibles de la molécule; il s'apparente à la recherche d'un chemin dans un labyrinthe très complexe.

Pour expliquer comment les chercheurs ont résolu le problème, prenons l'exemple de Jean et Jeanne en visite à Paris ; Jean se trouve au Louvre et Jeanne à la Tour Eiffel et veulent se retrouver. C'est leur première visite à Paris et ne disposent pas de plan de la ville mais peuvent poser une seule question chacun. Ils peuvent demander aux passants leur chemin mais ainsi faire les expose à un grand risque d'erreur : si jamais le premier passant ne connaît pas tout le détail du voyage ? Il suffit d'un "prendre à gauche" à la place d'un "prendre à droite" pour s'égarer et ne jamais se retrouver.

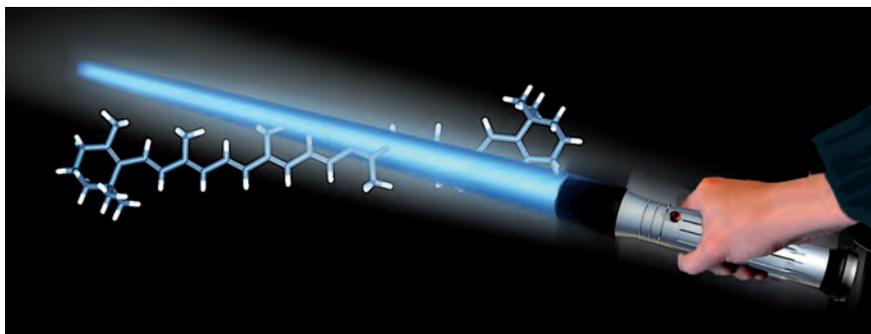
La solution est cependant simple : chacun va vers la Seine (qu'il voit à coté). Chacun demande ensuite la direction (amont ou aval) vers l'autre : Jean demande la direction vers la Tour Eiffel et Jeanne vers le Louvre ; ils se rencontreront sur les quais à mi-parcours. Une seule question simple a été posée, le risque de se tromper est petit et la précision étonnante vu la distance. La Seine joue le rôle de route simple à rallier et suivre. L'idée cruciale est de prendre deux morceaux de trajectoire : celle de Jean (du Louvre à la Seine et sur les quais vers la Tour Eiffel) et l'autre, d'une certaine façon en temps rétrograde si on veut, de Jeanne (de la Tour Eiffel vers la Seine et sur les quais vers le Louvre) ; la trajectoire finale sera la combinaison de deux bouts de trajectoire.



Itinéraire du Louvre à la Tour Eiffel.

<http://www.guidesgoursau.fr>

La même idée a été utilisée pour trouver le bon laser qui manoeuvre convenablement une molécule d'une configuration initiale (I) (la molécule à son état non modifié) vers une configuration finale (F) (la molécule avec certaines liaisons chimiques coupées ou modifiées). Un premier laser (L) est testé en partant de (I) ; sauf à avoir vraiment de la chance il n'arrive pas pile sur la cible (F), mais plutôt dans une autre configuration (FL) qui ne nous intéresse pas ; le même laser est testé à l'inverse en temps : nous obtenons une trajectoire qui arrive bien à la bonne cible (F) mais malheureusement elle ne part pas du bon point initial (I) mais d'un autre (IL). Pour récapituler : chaque laser donne deux trajectoires (I)-(FL) et (IL)-(F). Il suffit maintenant de modifier peu à peu les caractéristiques du laser (L) pour rapprocher graduellement les deux trajectoires; quand ce sera fait nous aurons fini car (IL) sera égal à (I) et (FL) à (F) donc notre trajectoire ira de (I) à (F).



Et nos sabres laser alors ? Eh bien, la pratique montre que le plus important n'est pas le couleur mais la façon de s'en servir (la modifier pour rejoindre nos deux trajectoires) ; d'ailleurs l'idéal est de disposer de plusieurs couleurs. Mais parmi les couleurs les plus utiles autant en prendre une dont la fréquence correspondante est la plus élevée... c'est-à-dire que le rouge sera battu aussi bien par le sabre vert que celui bleu. Ouf, l'honneur est sauf !

**G.T.**

*Pour en savoir (un peu) plus*

**G. Turinici** : *Comment le laser transforme les molécules,*  
Les Dossiers de la Recherche 38 (2010) 54-58.