prix nobel de chimie 2013 : chimie et modélisation

publié le 25.10.13 |par nicolas lévy

les lauréats ont développés des méthodes numériques mélangeant mécanique classique et mécanique quantique (dites qm/mm - quantum mechanics/molecular mechanics) afin de modéliser les systèmes chimiques complexes et leur réactivité.

1. les lauréats

le prix nobel de chimie 2013 a été attribué à martin karplus, michel levitt et arieh warshel pour le développement de modèles multi-échelles des systèmes chimiques complexes.



figure 1 - de gauche à droite : martin karplus, michael levitt et arieh warshel, les trois lauréats du prix nobel de chimie 2013.

auteur(s)/autrice(s) : bengt nyman licence : cc-by

2. déterminer une structure chimique complexe !

parmi l'ensemble des champs d'étude de la chimie, la biochimie est certainement celui qui connaît le développement le plus fulgurant de ces dernières années. dans le cadre de ces recherches, la détermination de la structure des protéines constitue le domaine où les efforts ont été les plus nombreux et les résultats les plus importants.

les méthodes standards de détermination de la structure des protéines font appel aux analyses des figures de diffraction obtenus par cristallographie par rayon x ou encore des couplages spin-spin obtenus par spectroscopie rmn.

néanmoins, déjà à ce stade de l'expérimentation, l'utilisation de codes informatiques basés sur des potentiels d'interaction des différents atomes du système est essentielle pour traiter ces résultats expérimentaux. en effet, au regard de la complexité de ces systèmes biochimiques, l'information expérimentale seule est, en général, insuffisante pour déterminer la structure de tels systèmes. de tels modèles théoriques et numériques constituent à présent un outil courant du chimiste expérimentateur.



figure 2 - l'expérience et les modèles théoriques et numériques constituent deux approches complémentaires pour mieux comprendre les phénomènes observés.

3. et si on allait plus loin que la structure seule ?

c'est la question que se pose maintenant les chimistes. la recherche actuelle s'occupe davantage de la fonctionnalité et de la réactivité et non plus uniquement de structures. en d'autres termes, le chimiste ne se pose plus seulement la question "a quoi cela ressemble ?" mais plutôt "comment cela se passe ?".

ces questions de réactivité sont bien difficiles à élucider en n'ayant recours qu'aux techniques expérimentales seules. si des méthodes expérimentales tels que le marquage isotopique, l'électrochimie par ultramicroélectrode ou encore la spectroscopie à la femtoseconde peuvent donner des indications et résoudre des problématiques de mécanismes réactionnels, elles deviennent rapidement peu concluantes pour l'étude de processus biochimiques complexes sans apport de la modélisation théorique.

en particulier, l'état de transition d'un processus chimique n'est pas accessible par des moyens expérimentaux mais peut être "caractérisé" par des méthodes théoriques, conduisant à des représentations de sa structure.

4. l'apport des lauréats

les lauréats ont développés des méthodes numériques mélangeant mécanique classique et mécanique quantique (dites qm/mm - quantum mechanics/molecular mechanics) afin de modéliser les systèmes chimiques complexes et leur réactivité.

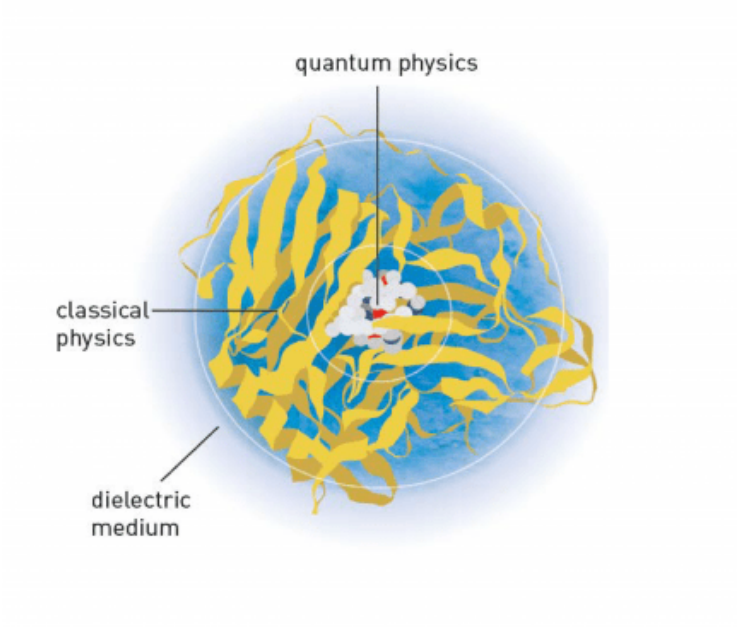


figure 3 - principe des méthodes qm/mm dans le cas d'une enzyme: le site actif de la protéine, où se déroule la réaction, est modélisé de façon quantique. le reste de la structure est modélisé classiquement.

si la description "tout quantique" d'un système est plus précise, son coût numérique en terme de temps de calcul devient trop important pour de larges systèmes. sa mise en place est donc délicate pour l'étude de système biochimique complexe. a l'inverse, la description "classique" d'un système est facile à mettre en œuvre : la détermination des grandeurs d'étude est alors rapide. mais une telle description faisant appel uniquement à la mécanique classique est lacunaire !

la force des méthodes qm/mm réside dans le fait de combiner les avantages de ces deux types de description, à savoir la précision du quantique avec la rapidité du classique. ainsi, le système étudié est décrit par la mécanique quantique dans les zones où les effets quantiques sont déterminants à la compréhension du processus. le reste du système est quant à lui décrit par la mécanique classique.

5. ressources en ligne

- modélisation, simulation numérique : de boltzmann aux expériences « in silico », par anne boutin et rodolphe vuilleumier, publié sur culturesciences-chimie
- pour compléter cet article, vous pouvez consulter le site concernant le prix nobel de chimie 2013 et en particulier les ressources données par l'académie royale des sciences de suède.

CRÉDITS

AUTEUR(S)/AUTRICE(S)

nicolas lévy

professeur agrégé de chimie, responsable du centre de préparation à l’agrégation externe de chimie (école normale supérieure de paris - sorbonne université - université paris-saclay), responsable éditorial de culturesciences-chimie de 2008 à 2014.

PARTENAIRE(S)

article édité par nicolas lévy (professeur agrégé responsable éditorial du site ens-dgesco culturesciences-chimie de 2008 à 2014), basé sur les communiqués de presse et les informations de l'académie royale des sciences de suède.