


Pourquoi et comment, la chimie est-elle devenue quantique ?

2011
C
CHIMIE

Thomas CAUCHY (K036)

Année Internationale de la
CHIMIE
2011


1 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



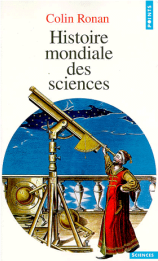
Thèmes abordés

Qu'est ce qu'une science ?
Être chercheur ?
La chimie et son objet !
Un soupçon d'histoire de la matière...
Atome, molécule et quantification.
Efficacité fait force de loi !

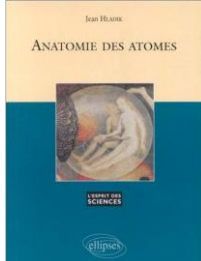
2 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



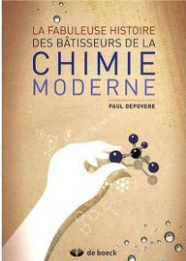
Bibliographie



Auteur : Colin Ronan
poche, prix autour de 11C




Auteur : Jean Hladik
poche, prix autour de 7C



Auteur : Paul Depovere
poche, prix autour de 11C


3 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Plan de la conférence

- I. Chercheur et science** (15 minutes)
- II. Exemple de vieux problème** (15 minutes)
- III. La matière avant la méca Q** (25 minutes)
- IV. Nécessité de la méca Q** (25 minutes)


4 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Plan de la conférence


- I. Chercheur et science**
- II. Exemple de vieux problème**
- III. La matière avant la mécanique quantique**
- IV. Nécessité de la mécanique quantique**

5 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Un chercheur a-t-il besoin d'une science, si il a la pierre philosophale ?

6 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



La dame et le sulfure de Hg

Site : Mawangdui, Région du Ch'ang-sha (Chine)
3 tombes de la dynastie Han (-200 av JC), Dame Xin Zhui, très bien conservée ni embaumée ni momifiée !



Immergé dans du sulfure de mercure, dans une enceinte hermétique (charbon et argile blanche) atmosphère saturée en méthane et tempérée: **conditions anaérobies**



7 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Les colonnes de Fer de Delhi

Site : Qûtb Minâr, Delhi (Inde)
Pilier de fer de 7 mètres de haut du IV^e siècle composé de 98% de Fe
Résiste à la corrosion depuis 1600 ans !



Jusqu'au XIX^e pas d'équivalent européen.
Haute teneur en phosphate catalysa la couche FeOOH



8 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Empirisme

La science chimique s'est développée par mise en fût et fermentation de dizaines de milliers d'années d'expériences :



Cuisine
dès l'invention de la cuisson
Herbiers, Aliments, poisons



Amphore grecque
IXe siècle avant JC
Poterie : matériaux, émail, pigments



Coupe en argent ; Fars, Iran
3000 ans avant JC
Métallurgie : matériaux, trempe, alliage

Liste non exhaustive : verrerie, rites mortuaires, médecine et élixir de vie, distillation et alcool

9 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Connaissances

Sans règles connues et claires :

- la connaissance est un outils de pouvoir
- transmission au sein de confréries et de sectes
- le secret est gage de survie

10 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Curiosité

Pourquoi demande le curieux :

- observations et quête de réponse
- réponses spirituelles



Hg



Cu



Cu (autres versions)

- rationalisation

11 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Plan de la conférence

- I. Chercheur et science
- II. Exemple de vieux problème
- III. La matière avant la mécanique quantique
- IV. Nécessité de la mécanique quantique

12 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



150 ans de Santonine, ou l'objet de la chimie

13 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Origine et utilisation

Le nom commun de l'*Artemisia cina*, « semen contra », vient du latin « *semen contra vermes* » ou « graine contre les vers ». La fleur de cette plante contient de la **santonine**, un vermifuge efficace contre le ver solitaire et d'autres vers parasites de l'intestin comme les oxyures et les ascarides.



Artemisia Cina

Remède particulièrement connu et populaire jusqu'au XX^e siècle.

Dans *Encyclopedia Britannica* (1911), la posologie indiquait une prise quotidienne de 2 à 5 gramme.

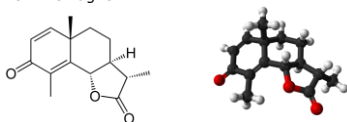
Souvent sous forme d'infusion.

14 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

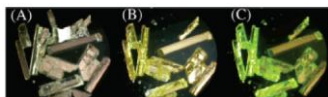


Purification, synthèse

Les cristaux de Santonine (donc de composé pur) sont obtenus pour la première fois par Johann Trommsdorff (1770-1837) en 1834 alors pharmacien en Allemagne.



Structure désormais connue.
Première documentation d'un réaction photochimique :



15 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Chimie industrielle



Avec son cousin Charles Erhardt, ils ouvrent une entreprise pharmaceutique

Charles Pfizer and Company

à Brooklyn en 1849 avec un seul produit :
de la **Santonine cristallisée diluée en sirop**.

Charles Pfizer
(Karl Pfizer)
1824-1906
né à Ludwigsburg
(Allemagne)



Pfizer est à l'heure actuelle l'une (top 3) des plus grosses entreprises pharmaceutique avec 50 milliards de \$ de revenus

16 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Réaction à la lumière

Cristaux de Santonine soumis à un rayonnement lumineux

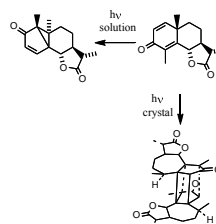


17 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Caractérisation

Le problème a du attendre la compréhension de la structure de la Santonine à l'état solide (Matsuura 1968)



18 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Point de vue récent

Miguel Garcia-Garibay, Professeur de Chimie à l'université de Californie, Los Angeles (UCLA). Extrait d'une conférence à Angers en Octobre 2010.



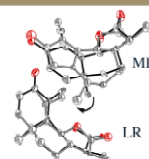
Que la lumière soit !



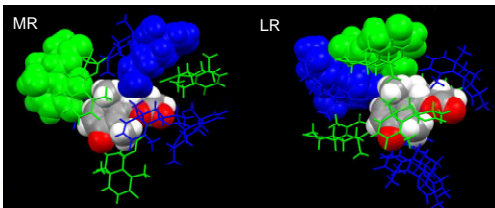
19 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Point de vue récent

Two distinct molecules in the crystal react at different rates



Their reactivities are determined by their different reorganization energies

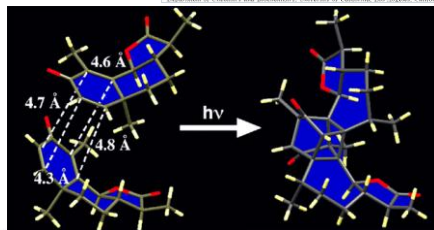


20 |

Point de vue récent

Caractérisation de la réaction chimique à l'état solide :

JACS
COMMUNICATION
Published on the Web 07/02/07
The Photoarrangement of *o*-Santonin is a Single-Crystal-to-Single-Crystal Reaction: A Long Kept Secret in Solid-State Organic Chemistry Revealed
Arunkumar Natarajan, C. K. Tsai, Saeed I. Khan, Patrick McCarron, K. N. Houk, and Miguel A. Garcia-Garibay
Department of Chemistry and Biochemistry, University of California, Los Angeles, California 90024-1509



21 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Chimie et objet

La chimie s'est choisie son périmètre au XVIIIe et XIXe siècle :

- Molécules sous toutes ses formes ou états
- Interactions et réactions entre molécules
- Propriétés des molécules



22 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Plan de la conférence

- I. Chercheur et science
- II. Exemple de vieux problème
- III. La matière avant la mécanique quantique
- IV. Nécessité de la mécanique quantique



23 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Petite histoire de la matière avant l'horreur quantique



24 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Oh les beaux cristaux !

Essai d'une théorie sur la structure des cristaux, 1784

Abbé, humble, professeur méticuleux et timide !
Collège de France, directeur de la collection du Muséum
d'Histoire Naturelle...



René-Just Haüy
1743-1822
Saint-Just en
Chaussée
(Oise, France)



Pyrite (FeS_2)
La Rioja, Espagne



Fluorite (CaF_2)
Pakistan

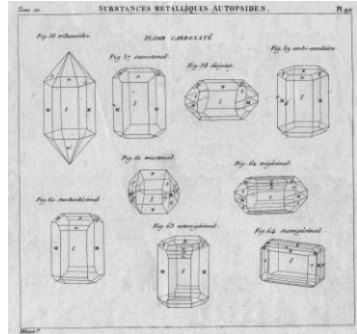
25 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Oh les beaux cristaux !



René-Just Haüy
1743-1822
Saint-Just en
Chaussée
(Oise, France)

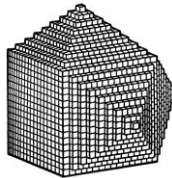


26 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Oh les beaux cristaux !



René-Just Haüy
1743-1822
Saint-Just en
Chaussée
(Oise, France)



« Le minéral n'est qu'un assemblage de molécules
similaires, réunies par l'affinité ; son accroissement
se fait par juxtaposition de nouvelles molécules qui
s'appliquent à sa surface. »

27 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Chacun ses gaz

Pompes à vides et instruments pour manipuler les gaz
Suivit une compétition scientifique : qui a découvert l'oxygène ?



Robert Hooke
1635-1703
Royal Society,
Londres
(Angleterre)
(en fait Van Helmont)



Carl Wilhelm Scheele
1742-1786
Uppsala
(Suède)



Joseph Priestley
1733-1804
Leeds
(Angleterre)



Antoine de Lavoisier
1743-1794
Paris

Voir la pièce de théâtre *Oxygen* écrite par Carl Djerassi
et Roald Hoffmann (prix Nobel de chimie)

28 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

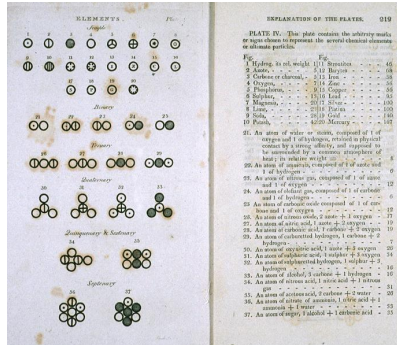


Les atomes selon Dalton

Redéfinition du modèle atomique :



John Dalton
1766-1844
Manchester
(Angleterre)



29 |

Tableau périodique



Dmitri Mendeleiev
1834-1907
Université de
Saint-Petersbourg
(Russie)

Proposition de classification périodique des éléments selon leur
masse atomique en 1869. Reconnu pour avoir prévu les éléments
inconnus.



30 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Catalogue IKEA de la chimie

Périodicité, famille chimique, comportement, propriétés et réactivité ...

1																	18																																																																												
1																	2																																																																												
H																	He																																																																												
1.00794																	4.002602																																																																												
2	3	4											5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																																																																			
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne																																																																												
6.941	9.0122											10.811	12.011	14.007	15.999	18.998	20.180																																																																												
11	12											13	14	15	16	17	18																																																																												
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar																																																																												
22.990	24.305											26.982	28.086	30.974	32.063	35.453	39.948																																																																												
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																																																																												
39.098	40.078	44.956	47.867	50.942	51.996	54.938	55.845	58.933	58.933	63.546	65.38	69.723	72.64	74.922	78.96	79.904	83.798																																																																												
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																																																																												
85.468	87.62	88.906	91.224	92.906	95.96	101.07	102.91	106.42	107.87	112.41	114.82	118.71	121.76	127.60	126.90	131.29																																																																													
Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																																																																													
132.91	137.33	138.905	140.12	140.91	144.24	144.912	150.36	151.96	157.25	158.93	162.50	164.93	167.26	168.93	173.05	174.967																																																																													
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																																																													
223.018	226.025	227.028	232.037	231.036	238.029	237.043	244.041	247.045	250.108	252.083	257.103	261.108	265.105	269.101	273.103	277.103																																																																													

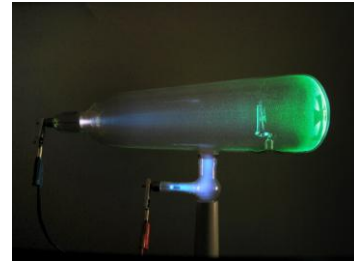
31

Elektron



© The Nobel Foundation
Joseph J. Thomson
1856-1940
Université de Cambridge (Angleterre)

Prix Nobel de physique 1906 : « in recognition of the great merits of his theoretical and experimental investigations on the conduction of electricity by gases »



Tubes de Crookes, matérialité des rayons cathodique



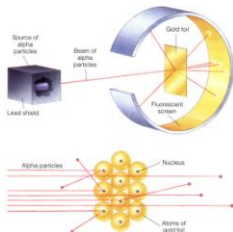
32 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

L'atome selon Rutherford

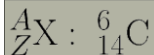


© The Nobel Foundation
Ernest Rutherford
1871-1937
Victoria University, Manchester (Angleterre)

Prix Nobel de chimie 1908 : « for his investigations into the disintegration of the elements, and the chemistry of radioactive substances »



Rappel: notation nucléide



X symbole chimique
A nombre de masse
Z numéro atomique



33 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Plan de la conférence

- I. Chercheur et science
- II. Exemple de vieux problème
- III. La matière avant la mécanique quantique
- IV. Nécessité de la mécanique quantique



34 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Comment la physique est venue foutre la m*** et nous a « sauvé » !



35 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Mécanique quantique ?

La mécanique quantique s'appuie sur 2 piliers :

Quantification des échanges d'énergie



Berlin, Siegestsäule (Colonne de la Victoire) (Creative Commons)

Dualité onde/corpuscule de la matière



36 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Place dans l'histoire

Rôle clé du point de vue théorique et philosophique :

2 grandes révolutions théoriques du XX^e siècle :

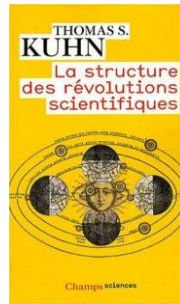
- Relativité
- Mécanique quantique :
 - Lien entre lumière et matière
 - Modèle atomique
 - Prix Nobel 1918, 21, 22, 29, 32, 33, etc.
 - Fin du déterminisme du XVIIIe siècle

37 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Révolution scientifique

Point de vue de Thomas Kuhn



Histoire des sciences non linéaire

Expériences non expliquées ⇒ nouvelles théories
⇒ affrontement ⇒ réécriture de la physique ⇒ cycle

Un paradigme n'est pas LA Vérité, c'est indémontrable ! C'est juste la meilleure description jusqu'à la prochaine crise.

38 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Difficile à comprendre ?

Malgré les dires, la difficulté est d'ordre philosophique :

« For those who are not shocked when they first come across quantum theory cannot possibly have understood it. »

Niels Bohr, (cité par Werner Heisenberg), *Physics and Beyond* (1971)

« I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics. »

Richard Feynman, *The Character of Physical Law* (1965)

« Quantum theory was split up into dialects. Different people describe the same experiences in remarkably different languages. This is confusing even to physicists. »

David Finkelstein, *Physical Process and Physical Law*, (2004).

« Evolution has shaped the human brain to allow it to understand and deal effectively with macroscopic phenomena. The human nervous system was not developed to deal with phenomena at the atomic and molecular level, so it is not surprising if we cannot fully understand such phenomena. »

Ira N. Levine, *Quantum Chemistry* (2000)

39 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Théorie des Quanta



© The Nobel Foundation

Max Planck
1858-1947
Université de Berlin
(Allemagne)

ANNALEN DER PHYSIK.
9. Ueber das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum; von Max Planck.
(In anderer Form mitgeteilt in der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Sitzung vom 18. October und vom 14. December 1900, Verhandlungen 2. p. 202 und p. 207. 1906.)

Prix Nobel de physique 1918 : « in recognition of the services he rendered to the advancement of Physics by his discovery of energy quanta »

Planck est **obligé** de postuler que la quantité d'énergie échangée entre la matière et le rayonnement ne peut pas prendre toutes les valeurs possibles. Multiple entier d'une valeur minimale d'énergie, appelé **quantum d'énergie**.

$$\Delta E = h\nu \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

40 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



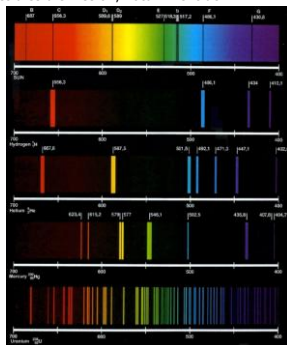
Première quantification : Bohr



© The Nobel Foundation

Niels Bohr
1885-1962
Université de Copenhague
(Danemark)

Problème des raies spectrales d'émission, notamment de H*



41 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales

Première quantification : Bohr



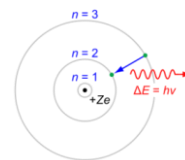
© The Nobel Foundation

Niels Bohr
1885-1962
Université de Copenhague
(Danemark)

Prix Nobel de physique 1918 : « for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them »

Bohr, post-doc chez Rutherford, propose un modèle atomique utilisant la quantification de l'énergie de Planck. C'est un modèle planétaire dont les orbites sont quantifiées (n nombre quantique principal est un entier).

Réf. : N. Bohr, *Philos. Mag.*, 1913, 26, 1



42 | 16 novembre 2011
L1 MPCIE : Connaissances scientifiques générales



Onde et corpuscule



© The Nobel Foundation
Albert Einstein
1879-1955
Kaiser-Wilhelm
Institut für Physik,
Berlin
(Allemagne)

Prix Nobel de physique 1921 : « for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them »

Einstein utilise l'idée de Planck et postule l'idée de **corpuscule de lumière** maintenant appelé photons correspondant à un quanta de lumière.

Réf. : A Einstein, *Ann. Phys.*, 1905, 11, 132



© The Nobel Foundation
Pierre de Broglie
1892-1987
Université de La
Sorbonne, Paris

Prix Nobel de physique 1929 : « for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them »

Thèse de doctorat « Recherche sur la théorie des quanta » soutenue le 25 Novembre 1924.

L'idée essentielle qui est développée par de Broglie est de **généraliser le caractère onde et corpuscule à la matière**. A toute particule de masse m , animée de la vitesse v , on peut associer une onde !

43 | 16 novembre 2011

LI MPCIE : Connaissances scientifiques générales

L'équation de Schrödinger



© The Nobel Foundation
Erwin Schrödinger
1887-1961
Université de Berlin
(Allemagne)

Prix Nobel de physique 1933 : « for the discovery of new productive forms of atomic theory »

L'équivalent des lois de Newton en mécanique classique est l'équation de Schrödinger. Elle décrit l'évolution d'un système physique et de l'ensemble de ses propriétés.

Réf. : E. Schrödinger, *Phys. Rev.*, 1926, 28, 1049

Forme indépendante du temps :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

44 | 16 novembre 2011

LI MPCIE : Connaissances scientifiques générales



La matière est une onde

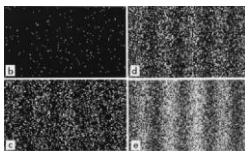
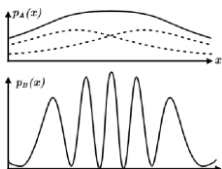


© The Nobel Foundation
Clinton Davisson
1881-1958
Laboratoire Bell,
New York (USA)

Prix Nobel de physique 1937 : « for their experimental discovery of the diffraction of electrons by crystals »

Davisson et Germer publie en 1927, la preuve d'un phénomène de diffraction d'un faisceau d'électron. La démonstration expérimentale de la thèse de de Broglie est l'une des plus importantes expériences de physique du XX^e siècle.

Réf. : C. Davisson, L.H. Germer, *Phys. Rev.*, 1927, 30, 705



Contrairement à la lumière, on peut compter les électrons, mais il y a diffraction!

45 | 16 novembre 2011

LI MPCIE : Connaissances scientifiques générales

(Expérience visible au Palais de la découverte à Paris)

Moralité pour la chimie :

- Alors c'est une onde ou un corpuscule?
- Les deux mon général! Et ni l'un ni l'autre... Un cylindre peut apparaître comme un rectangle ou comme un cercle selon le point de vue. Pourtant ce n'est ni l'un ni l'autre.



© The Nobel Foundation
Paul Dirac
1902-1984
Université de
Cambridge
(Angleterre)

Prix Nobel de physique 1933 : « for the discovery of new productive forms of atomic theory »

« The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble. It therefore becomes desirable that approximate practical methods of applying quantum mechanics should be developed, which can lead to an explanation of the main features of complex atomic systems without too much computation. »

6 April 1929

46 | 16 novembre 2011

LI MPCIE : Connaissances scientifiques générales

