Perspective philosophique sur les relations entre structure, propriétés et fonctions

Perspectiva filosòfica sobre les relacions entre estructura, propietats i funcions

Philosophical perspective on structure, properties and functions

Bernadette Bensaude Vincent / Université Paris 1 Panthéon-Sorbonne (France)



résumé

Pour les enseignants, de chimie en particulier, il importe de bien mettre en lumière la relation causale entre structure, propriétés et fonctions : c'est un moyen de rendre intelligibles les comportements et réactions des substances individuelles, qui permet aux élèves et étudiants de mieux mémoriser la masse de connaissances qu'ils doivent acquérir et maîtriser sur une foule de matériaux. Le but de ce bref article n'est pas de faire un historique de l'introduction des notions de structure en chimie, mais plutôt d'utiliser l'histoire pour dégager les présupposés en jeu dans la séquence « structure > propriétés > fonctions ». Ces présupposés ne sont généralement pas explicités, tant ils semblent inhérents à la démarche rationnelle et explicative qui caractérise la méthode scientifique. Mais en les questionnant on peut ouvrir de nouvelles perspectives.

mots clés

Atomes, molécules, matériaux, causalité, procédé.

resum

Per als professors, particularment de química, és important destacar la relació causal entre estructura, propietats i funcions: és una manera de fer intel·ligible el comportament i les reaccions de les substàncies individuals, la qual cosa permet als alumnes i estudiants memoritzar millor el bagatge de coneixements que necessiten per adquirir i dominar tota una varietat de materials. El propòsit d'aquest breu article no és fer una introducció històrica sobre la noció d'estructura en la química, sinó més aviat utilitzar la història per desemmascarar els pressupòsits implicats en la seqüència «estructura > propietats > funcions». Aquestes suposicions generalment no es fan explícites, perquè són inherents a l'enfocament racional i explicatiu que caracteritza el mètode científic. No obstant això, el fet de qüestionar-les permet obrir noves perspectives.

paraules clau

Àtoms, molècules, materials, causalitat, procés.

abstract

For teaching purposes, of chemistry in particular, it is important to emphasize the relationships between structure, properties and functions in order to make the behaviour and reactions of individual substances intelligible, thus enabling the students to better memorize and master the load of knowledge they have to acquire about of individual substances. Rather than trying to provide a historical survey of the introduction of the notion of structure in chemistry, this brief article makes use of history to disentangle the preassumptions of the causal sequence «structure > properties > functions». These preassumptions usually remain implicit because they are integral part of the rational and explanatory approach, which is typical of science. By questioning what is usually taken for granted may in turn open up new perspectives.

keywords

Atoms, molecules, materials, causality, process.

Il est bien connu que les philosophes ont la manie de questionner ce qui va de soi, de voir des problèmes là où les autres n'en voient pas. Voici donc quelques problèmes relatifs à l'usage courant de trois concepts de base pour tout enseignement de chimie.

Structure, propriétés, fonctions: ces trois concepts ne sont pas propres à la chimie mais ils sont très précieux pour les chimistes dans la mesure où ils fournissent des outils pour maîtriser la multiplicité et la diversité des substances. Parce que la chimie s'intéresse à des individualités matérielles plutôt qu'à la matière en général comme la physique, elle serait une science purement descriptive, une sorte d'histoire naturelle, si les chimistes se bornaient à décrire les propriétés des substances connues, sans les mettre en relation avec les deux autres termes : structure et fonction. Selon la formule ironique (et probablement légendaire) qu'on attribue à Ernest Rutherford, la chimie serait analogue à une collection de timbres : « That which is not physics is stamp collecting ».

Pour les enseignants de chimie en particulier, il importe de mettre en relation structure, propriétés et fonctions pour rendre intelligibles les comportements et réactions des substances individuelles, pour permettre aux élèves et étudiants de mémoriser et de s'orienter dans la masse de connaissances chimiques à maîtriser.

Historiquement, la relation entre les propriétés des composés et la nature et proportion des composants a fourni un premier outil d'intelligibilité au niveau macroscopique. Cela correspond, en gros, à la chimie lavoisienne, laquelle repose sur la décomposition puis recomposition des corps. Mais la découverte de corps qui

ont la même composition avec des propriétés physiques, chimiques, voire biologiques différentes que Jans Jacob Berzelius dénomma isomères montre l'insuffisance de cette logique analytique. Grâce à l'introduction des notions d'atome et de molécule, une chimie structurale a pu être développée qui prend en compte la structure moléculaire des composés pour rendre intelligibles leurs propriétés. La relation structure-propriétés-fonction établit un pont entre l'échelle nanoscopique (de la structure des atomes et molécules) et l'échelle macroscopique où se déroulent nos opérations et interactions avec divers matériaux. Grâce à cette mise en relation, on peut y voir plus clair dans la jungle des matériaux ; on peut même prédire des nouvelles substances, on peut en fabriquer à la demande.

Le but de ce bref article n'est pas de faire un historique de l'introduction de cette logique structurale en chimie mais plutôt d'utiliser l'histoire pour dégager les présupposés en jeu dans la séquence « structure-d'où-propriétés-d'où-fonctions ». Ces présupposés ne sont généralement pas explicités, tant ils semblent inhérents à la démarche scientifique qui se veut rationnelle et explicative. Tentons pourtant de les expliciter et de les questionner, car cela peut conduire à ouvrir de nouvelles perspectives.

Les présupposés

Le triplet « structure-d'oùpropriétés-d'où-fonctions » est un outil pédagogique extrêmement puissant. Il permet d'éclairer non seulement la différence de propriétés physiques (conduction, semi-conduction, etc.) des corps, mais aussi leurs fonctions au sens de possibilités de liaison qui déterminent les réactions sélectives de ces corps. Ce triplet peut aussi être mobilisé de façon

plaisante dans la littérature de vulgarisation. Ainsi, par exemple, dans un best-seller de chimie populaire, Sam Kean décrit plaisamment le contraste entre friendly carbon et aggressive oxygen en raison du nombre d'électrons sur la couche externe de leurs atomes respectifs: l'oxygène ayant besoin de deux électrons supplémentaires pour satisfaire la loi de l'octet peut « dicter ses propres termes », mais le « pauvre carbone » ayant besoin de quatre électrons supplémentaires ne peut se montrer trop exigeant pour former des liaisons: il s'accroche virtuellement à presque tout (Kean, 2010, p. 34-35).

Voici donc un triplet de concepts précieux. Mais est-ce un principe effectif d'intelligibilité ou un simple artifice pédagogique ? Quand on mobilise le concept de structure pour rendre compte des propriétés d'un corps et de ses fonctions, on établit une séquence qui est strictement linéaire et, de plus, à sens unique. Ce raisonnement implique trois présupposés assez faciles à repérer :

- 1. D'abord, que la matière est composée de briques élémentaires, des atomes agencés en molécules. Cela fait partie du stock des connaissances communes que les enfants acquièrent sans problème dès leurs débuts à l'école même si les représentations qui les accompagnent sont parfois assez fantaisistes.
- 2. Ensuite, qu'on connaît leur structure grâce à des instruments de plus en plus performants pour visualiser l'invisible : ce fut d'abord la diffraction des rayons X développée par William Henry Bragg au début du xxe siècle (fig. 1), puis la microscopie électronique vers le milieu du xxe siècle et enfin la microscopie en champ proche (scanning tunneling microscope et atomic force microscope) vers la fin du xxe siècle.

3. Enfin, qu'on peut établir un lien de causalité entre la structure des atomes, leur agencement en molécules puis les fonctions de ces molécules. En d'autres termes, que l'on peut déduire de la structure à l'échelle nanoscopique des propriétés et comportements opérant à notre échelle. La simulation moléculaire pour prédire le comportement de certains matériaux avant qu'ils adviennent à l'existence physique, c'est à dire avant leur synthèse, est une pratique courante et largement développée dans l'industrie chimique et pharmaceutique.

Or chacun de ces trois présupposés appelle des remarques quant au type de raisonnement qu'il mobilise.



Figure 1. Premier spectromètre à rayons X conçu par Sir William Lawrence Bragg (1890-1971). Il fut le premier à montrer en 1921 que la structure moléculaire peut être déduite à partir du cliché de diffraction des rayons X par un échantillon de cristal.

Le chemin entre structure et propriétés

Il faut d'abord remarquer que le recours à l'atomisme dans la relation entre structure et propriété est avant tout de l'ordre de l'intuition. Cette relation a été établie bien longtemps avant que l'on puisse visualiser la structure des atomes et des molécules. Comme le remarquait Jean Perrin (fig. 2) dans l'introduction du livre où il donne une démonstration magistrale de la réalité moléculaire, « expliquer du visible compliqué, par de l'invisible simple, voilà la forme d'intelligence intuitive, à laquelle grâce à des hommes tels que Dalton ou Boltzmann, nous devons l'Atomistique » (Perrin, 1913, p. 4). La relation entre propriétés des corps et la forme des atomes qui les forment était à la base de l'atomisme antique. Pour Épicure, tous les corps sont formés d'atomes, indivisibles et invisibles qui diffèrent uniquement par leur forme. Les qualités sensibles des corps n'existent pas en elles-mêmes, elles résultent de l'assemblage des atomes individuels. Bien entendu, ces atomes antiques n'ont qu'un lien d'homonymie avec les atomes de la science actuelle, mais le raisonnement est le même en son principe : il s'agit d'expliquer le visible par des entités invisibles, ce qui est apparent au niveau des phénomènes à des structures cachées. Et de ce fait on peut réduire les qualités sensibles à des variables purement géométriques ou mécaniques telles figure et mouvement. Mais il est clair que le chemin emprunté par les atomistes antiques est d'aller du

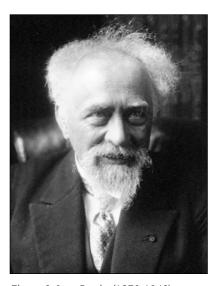


Figure 2. Jean Perrin (1870-1942).

sensible, du visible vers l'invisible en posant une hypothèse.

Il faut insister sur le caractère hypothétique des structures. Cette notion qui a permis à René-Just Haüy de distinguer des espèces de cristaux est transposée par Auguste Laurent dans l'interprétation des réactions de substitution. Laurent imagine un « noyau » atomique autour duquel se greffent divers atomes. De même, Charles Gerhardt imagine des « types chimiques » dont il tire des formules qu'il dénomme formules rationnelles. Rationnelles, car elles permettent d'induire des analogies et de classer les composés, mais ces formules structurales ne prétendent pas livrer une représentation de la réalité. Ce sont des formules, c'est à dire des façons de parler (ou plutôt des façons d'écrire) et de deviner ce qui se passe dans les combinaisons chimiques (Blondel-Mégrelis, 1996; Brooke, 1975). Contrairement à la vision intuitive d'une architecture moléculaire bien réelle qui aurait le pouvoir d'expliquer ce qui se passe aux niveaux supérieurs, les pionniers de la chimie structurale ne croient pas à la réalité physique des atomes et molécules. Pour Gerhardt, les radicaux ou groupements d'atomes n'existent pas comme des entités physiques isolables. Ce sont seulement des schèmes taxonomiques, qui manifestent des analogies, des homologies. Le radical est « le rapport suivant lequel se substituent ou se transportent d'un corps à un autre, dans la double décomposition, certains éléments ou groupes d'éléments » (Gerhardt, 1856, p. 568-569). Gerhardt, comme August von Kekulé, qui a proposé la structure hexagonale du benzène, base de tous les composés aromatiques, ne se prononcent pas sur l'existence réelle des atomes déclarant qu'on ne peut rien savoir sur la constitution réelle des substances et prévient toute représentation réaliste de ses types chimiques (Bensaude Vincent, 2008).

L'explication des propriétés par la structure ne consiste donc pas, comme on le laisse entendre dans l'enseignement, à déduire des propriétés macroscopiques de la structure et de la conformation topologique d'entités microscopiques préalables. Les formules structurales sont plutôt à voir comme des « outils de papier » (Klein, 2002) qui permettent de prévoir et de synthétiser des corps aux propriétés nouvelles. Les propriétés observées ne sont pas déduites de la structure réelle des atomes; elles sont construites à partir de ces formules grâce aux opérations de synthèse. Bachelard (1953) a beaucoup insisté sur cette originalité de la démarche chimique qu'il nomme matérialisme rationnel. Il reprend une citation de Laurent (« La chimie d'aujourd'hui est devenue la science des corps qui n'existent pas ») en la détournant de son sens polémique (critique des radicaux imaginés par ses contemporains, notamment Berzelius) pour exalter le pouvoir créateur des formules rationnelles. Les composés sont fictifs, prévus avant d'être réels. La chimie est une science qui va du fictif au factice. L'image pensée ou rêvée par Kekulé d'un hexagone du benzène avec deux doubles liaisons oscillantes a stimulé la prévision de nombreux isomères di-substitués du benzène. Koerner isole les isomères ortho-, méta- et para- du benzène répondant aux différentes positions des doubles liaisons. Mais en sens inverse, Jacobus Henricus van 't Hoff a tiré argument de la non-existence de certains isomères du méthane pour penser l'atome du carbone dans l'espace. En effet, si l'on imagine un atome plan avec quatre valences, beaucoup d'isomères sont possibles. Or la

plupart d'entre eux sont des « objets qui n'existent pas » au sens de Laurent. Donc leur non-existence invalide la théorie qui les inspire. On voit que les formules structurales fictives fonctionnent doublement comme outils de prédiction : tantôt elles sont un outil de validation par le faire, en passant « du fictif au factice », comme dit Bachelard ; tantôt elles servent à invalider, pour réfuter, par l'impossibilité de faire.

On voit donc que dans la recherche chimique les structures ne sont pas pensées comme des causes bien réelles d'où on pourrait déduire des effets non moins réels. Elles sont plutôt pensées comme des êtres fictifs ou de simples formules qui guident la pratique des synthèses. Elles sont un peu à la chimie ce que les « expériences de pensée » sont à la physique (Ramberg, 2001).

Le modèle linéaire à l'épreuve des fonctions

Le chemin structure d'où propriétés est pourtant effectivement pratiqué, mais pas nécessairement par les chimistes. Il a plutôt contribué à la transformation de la métallurgie en une science nouvelle vers le milieu du xx^e siècle : la physique du solide (Hoddeson et al., 1992). La diffraction des rayons X en donnant accès à la microstructure des métaux a permis d'établir une relation entre certaines propriétés bien connues de divers métaux et alliages avec une structure caractéristique. Puis la microscopie électronique a permis de connecter les propriétés conductrices à la présence ces défauts (sites vacants, dislocations) dans la structure électronique de ces cristaux. Comme le souligne l'un des pionniers de la science des matériaux en Grande Bretagne, Robert W. Cahn: « La catégorie scientifique de microstructure est

la contribution spécifique de la physique métallurgique à l'étude de la physique du solide, et fut par la suite étendue à la science des matériaux » (Cahn, 1987, p. 85).

Plus que la chimie, la science des matériaux, qui émerge comme une discipline à part entière dans les années 1960, semble en effet emprunter le chemin qui va de structure à propriétés, qu'elle prolonge jusqu'aux fonctions. Et il ne s'agit plus seulement de fonctions au sens chimique, mais de fonctions au sens de performances. En effet, les matériaux se définissent généralement par leurs utilisations à des fins techniques : ainsi, par exemple, le terme verre dans la langue commune désigne tout gobelet destiné à la boisson même s'il est en carton ou en plastique!

La séquence « structure > propriétés > fonctions » commande l'organisation des manuels de science des matériaux (Bensaude Vincent, 2001). Typiquement, ils commencent par quelques chapitres de physique atomique et quantique, ensuite viennent des chapitres consacrés aux diverses familles de matériaux : métaux, céramiques, matériaux pour l'électronique, etc. Comme si les propriétés et fonctions des « matériaux pour... » étaient simplement déductibles des structures. Bref, comme si des principes généraux de la science découlaient les avancées technologiques. C'est un cliché que développent bien souvent les introductions de ces manuels : ils racontent que, pendant des siècles, la connaissance des matériaux fut purement empirique, et fut acquise par des pratiques aveugles, ignorantes des raisons du choix de tel ou tel matériau. Mais au xxe siècle, tout aurait changé : la physique des solides venant éclairer les pratiques aveugles et se mettre au service des progrès techniques.

L'exposé didactique masque le contraste des démarches entre la physique et la science des matériaux. Bien que la structure électronique des atomes soit considérée comme la clé, elle ne tient pas le même rôle dans les deux contextes. Plus exactement, en science des matériaux, on n'étudie pas la structure des atomes ni les lois qui président à leur organisation, mais une configuration précise qui détermine une propriété désirée, source potentielle de performances. On s'intéresse à ce que font les structures plutôt qu'à ce qu'elles sont. C'est la fonction, au sens large de performance, qui transforme une substance chimique connue en matériau. Dans bien des cas, la recherche procède à partir de l'étude approfondie d'un matériau dont les propriétés présentent quelque intérêt dans un contexte économique ou technologique donné. Par exemple, le silicium a fait l'objet de recherches intensives du jour où ses propriétés de semi-conducteur en ont fait un matériau stratégique pour la micro-électronique naissante. Ou encore une substance aussi commune que l'alumine est devenue une vedette dans les années 1970 quand la forme alumine-β (fig. 3) a été perçue comme un matériau potentiel d'électrolyte solide pour batteries destinées à alimenter des véhicules électriques. Le capital de savoir amassé sur ce matériau, grâce à un fort investissement de recherche, on a amassé un capital de savoir sur l'alumine- β qui est devenue un matériau-modèle. À partir de ce matériau singulier, ont été dégagées les conditions structurelles générales d'une bonne conductivité ionique. Et du général, on a pu déduire que d'autres matériaux de structure analogue étaient aussi des candidats à la fonction

d'électrolyte solide. En d'autres termes, dans la science des matériaux, le passage par la structure générale n'est qu'un moment de la démarche investigatrice, encadrée aux deux bouts par l'étude des singularités. La structure entre dans la recherche comme un niveau de généralité qui permet d'aller d'une singularité à l'autre. Mais les structures ne sont objets propres de la recherche en science des matériaux que dans la mesure où elles sont supports de propriétés intéressantes.

matériau : étant donné tel ensemble de fonctions visées, définir les propriétés requises pour les accomplir puis trouver la structure optimale pour supporter ces propriétés et les procédés pour la fabriquer. Mais cette démarche linéaire est purement théorique. L'approche ingénieur bouscule le triplet conceptuel « structure > propriétés > fonctions ». Ce n'est plus un axe central, une poutre maîtresse, mais seulement la base d'un réseau de concepts qui forme la charpente de la science des

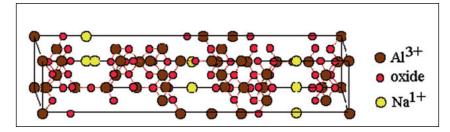


Figure 3. L'alumine- β est un oxyde ternaire ordinaire identifié comme une forme allotropique de l'alumine en 1916, dans le procédé Bayer pour la préparation de l'alumine. Dans les années 1970, l'alumine- β attire un gros effort de recherche de la part des chimistes du solide grâce à sa fonction de conduction ionique.

En effet, contrairement à la physique du solide, la science des matériaux a une orientation très appliquée. On parle d'ailleurs généralement de science et génie des matériaux. L'intime connexion d'une base scientifique et d'une approche ingénieur caractérise le profil de ce qu'on appelle désormais les technosciences. S'il est vrai que le chemin structurepropriété qui est l'axe de la physique du solide fut une étape nécessaire pour former une notion générale de matériaux à partir du concept de solide, ce n'est pas une condition suffisante. Un solide n'est pas un matériau, non seulement parce qu'il y a des matériaux liquides ou gazeux mais aussi et surtout parce qu'un matériau se définit par ses fonctions.

On pourrait certes poser ainsi le problème de la recherche d'un matériaux. Il faut en effet introduire un quatrième acteur, le procédé, car la science des matériaux ne se contente pas de concevoir sur le papier, ou sur l'écran, une belle structure en vue d'une ou plusieurs fonctions visées. Il faut la « réaliser », produire un échantillon concret palpable pour le soumettre ensuite à tous les tests nécessaires à sa mise en œuvre. Il faut donc convoquer le génie des procédés, ou chemical engineering, pour choisir une structure adaptée à la fonction visée. La relation structure-propriété n'était que l'amorce, la première étape d'une méthode bien plus complexe. En réalité, il faut aller et venir d'un terme à l'autre, considérer la faisabilité des procédés pour sélectionner une structure, chercher des compromis entre les quatre pôles (structure, propriétés, fonctions et procédés) en circulant dans un espace présenté comme un tétraèdre (fig. 4). Cette démarche qui consiste à décomposer le matériau concret selon quatre points de vue ou en fonction des quatre paramètres (structure, propriété, fonction, procédés) invite à voir le matériau comme un tout, comme un système où tout se tient.

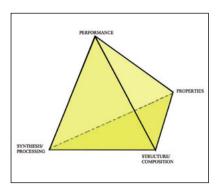


Figure 4. Ce tétraèdre illustre l'approche systémique de la science et génie des matériaux.

Mais cette approche systémique, hybride de science et d'ingénierie, ne signifie pas pour autant un renoncement aux ambitions cognitives. Car les procédés de synthèse d'un matériau affectent sa structure comme ses propriétés. C'est donc un enrichissement de la connaissance. La science des matériaux peut être source d'avancées scientifiques. Plus exactement, elle livre un autre regard sur la nature. Alors qu'une science limitée à la logique « structured'où-propriétés-d'où-fonctions » construit une représentation idéale de la nature qui atteint des principes généraux en faisant abstraction des frottements, des pertes de masse, de chaleur, de travail... le réel que construit le tétraèdre structure (propriétés, fonctions, procédés) n'est plus un idéal abstrait sans rapport avec le monde vécu de l'expérience quotidienne.

Conclusion

On voit que la séquence linéaire « structure-d'où-propriétés-d'où-fonctions » qui semble aller de soi est en fait hautement problématique. Par les présupposés qu'elle enveloppe elle modèle notre vision des corps matériels sur une rationalité scientifique qui procède du général au particulier, et déduit le comportement des matériaux singuliers des propriétés de la matière en général. Cette approche encourage le partage entre science pure et science appliquée, ou plus précisément le postulat que la technique est une résultante des avancées de la science pure. En revanche, les technosciences comme la science des matériaux, les nanotechnologies ou les biotechnologies qui sont tournées vers l'utilité, la société ou l'économie, invitent à une remise en question de ce partage et à un renouvellement des méthodes d'éducation.

Références

Bachelard, G. (1953). Le matérialisme rationnel. Paris : PUF.

Bensaude Vincent, B. (2001). « The construction of a discipline: materials science in the USA ». Historical Studies in the Physical and Biological Sciences, n° 31, part 2, p. 223-248.

 (2008). Matière à penser : Essais d'histoire et de philosophie de la chimie. Paris : Presses Universitaires de Paris Ouest.

BLONDEL-MÉGRELIS, M. (1996). Dire les choses : Auguste Laurent et la méthode chimique. Paris : Vrin.

BROOKE, J. (1975). « Laurent, Gerhardt, and the philosophy of chemistry ». Historical Studies in the Physical Sciences, n° 6, p. 405-429.

Cahn, R. W. (1987). « Solid state physics and metallurgy ».
À: Weaire, D. L.; Windsor, C. G. (éd.). Solid state science: Past, present, predicted. Bristol: Adam Hillger, p. 79-108.

GERHARDT, C. (1856). Traité de chimie organique. Vol. IV. Paris : Firmin-Didot.

Hoddeson, L.; Braun, E.; Teich-Man, J.; Weart, S. (éd.) (1992). Out of the crystal maze: Chapters from the history of solid state physics. Oxford: Oxford University Press.

KEAN, S. (2010). The disappearing spoon and other true tales of madness, love, and the history of the world from the periodic table of elements. New York: Back Bay Books.

KLEIN, U. (2002). Experiments, models and paper tools: Cultures of organic chemistry. Stanford: Stanford University Press.

Perrin, J. (1913). Les atomes. Paris : Alcan. [Cité dans la réédition Paris : PUF, 1948]

RAMBERG, P. (2001). « Paper tools and fictional worlds: prediction, synthesis, and auxiliary hypotheses in chemistry ». À: KLEIN, U. (éd.). Tools and modes of representation in the laboratory sciences. Dordrecht: Kluwer Academic Publications, p. 61-78.



Bernadette Bensaude Vincent

A été professeur à l'UFR de philosophie de l'Université Paris 1 Panthéon-Sorbonne. Parmi ses publications plus récentes, il convient de mentionner Fabriquer la vie. Où va la biologie de synthèse ? (2011), Les vertiges de la technoscience. Façonner le monde atome par atome (2009) et Chemistry. The impure science (2008). Sa recherche actuelle s'est focalisée dans l'histoire des sciences chimiques ainsi que des nano- et biotechnologiques. Courriel: bensaudevincent@gmail.com.