



«La chimie, ça reste une science expérimentale!»

Entretien avec le professeur Jacques Weber



Prof. Jacques Weber

- Né en 1940
- Professeur en chimie physique à l'Université de Genève jusqu'en 2005
- Pionnier de l'utilisation de l'informatique en chimie
- Nombreux Prix et honneurs; Dr h.c. de l'Université de Fribourg
- Membre du Comité de la Société Suisse de Chimie entre 1992 et 2002
- Membre du Conseil de la SCS Foundation depuis 2008

En allemand, un professeur qui est en charge d'un doctorant est appelé «Doktorvater» (père d'un doctorant). Que signifiait pour vous accompagner le parcours intellectuel d'un jeune chercheur (d'une jeune chercheuse)?

Beaucoup de choses! Un jeune doctorant a déjà des bonnes connaissances en chimie. Faire un doctorat signifie perfectionner des connaissances pour qu'elles soient plus complètes, plus profondes dans un domaine donné. Accompagner un doctorant, c'est lui enseigner les bases de cette spécialisation jusqu'à ce qu'il les maîtrise. L'autre aspect, c'est lui faire faire un travail de recherche dans ce domaine précis en se servant des connaissances qu'il aura acquises en travaillant avec moi. L'idéal c'est qu'il puisse petit à petit le faire tout seul, indépendamment de moi, et qu'il se mette en contact avec d'autres chercheurs, même d'autres disciplines. Il est nécessaire d'introduire le doctorant dans le milieu de la chimie de haut niveau.

À côté de l'aspect scientifique, il y a aussi un aspect personnel – le doctorant a des doutes voire des crises. Là aussi le «Doktorvater» peut jouer un rôle...

Cela peut arriver aussi, surtout si les doctorants ne sont pas Suisses. C'est bien de les entourer un peu: les inviter à la maison, sortir un peu avec eux... Mais ce sont des étudiants, donc ils se rendent compte par eux-mêmes que finalement c'est assez facile de discuter dans la maison avec d'autres qui proviennent du même pays, pour qu'ils ne se sentent pas trop seuls.

Dans quelle famille êtes-vous né?

Je suis né à Genève dans une famille très simple. Mon père était typographe, ma mère était femme au foyer. Financièrement, pour moi, entreprendre des études universitaires se révélait un véritable challenge, parce que j'ai un frère aîné qui faisait déjà des études en mathématique jusqu'au doctorat. Bien que les frais d'études fussent relativement modestes, mes parents ont fait un gros sacrifice pour que mon frère et moi puissions faire des études, les rentrées financières étant complétées par nous-mêmes par des leçons privées ou au Collège, des petits travaux, etc.

Vous avez fait vos études ainsi que votre doctorat en physique. Vous êtes devenu ensuite physico chimiste. Qu'est-ce qui vous a fait franchir la frontière disciplinaire?

J'ai fait mon diplôme en physique dans un domaine qui était en fait déjà de la chimie physique, sur le magnétisme d'ions paramagnétiques placés comme impuretés dans des solides.

Ce choix s'est-il fait par hasard ou par volonté?

Il se trouvait que mon directeur de thèse, Roger Lacroix, s'intéressait à cela.

«Ma première idée était d'étudier la médecine!»

Vous avez fait une maturité classique, avec le grec. Vu votre carrière professionnelle, n'était-ce pas une erreur de choisir le grec? Ma première idée était d'étudier la médecine! À l'époque, le latin était une condition nécessaire pour faire des études en médecine. Le grec n'était pas obligatoire, mais il m'intéressait...

Qu'est-ce qui vous intéressait précisément?

Ce qui m'intéressait, c'est de pouvoir lire les plus fameux textes de l'Antiquité grecque. En plus, j'avais de bonnes notes. Mais finalement, vu la durée des études de médecine et la situation financière de mes parents, je suis parti pour des études plus courtes. J'ai d'ailleurs hésité sur ce que j'allais faire à l'université jusqu'à l'avant-dernière année avant la maturité. Je n'excluais pas une formation en lettres.

Plus tard, dans vos études en sciences, est-ce que le grec vous a été utile?

Je dirais oui; ça aide à rédiger un texte. D'ailleurs c'est aussi vrai pour le latin. Ces langues anciennes aident les élèves plus tard quand ils doivent passer à un français évolué; le vocabulaire s'enrichit!

Veillez expliquer à un non-spécialiste en quoi précisément consiste le rapport entre la chimie et la physique dans la chimie physique!

On pourrait dire que c'est de la chimie; on travaille sur des molécules et des matériaux. Mais on étudie la chimie par des techniques aussi bien expérimentales que théoriques qui sont issues de la physique. Les premiers appareils de résonance magnétique nucléaire étaient issus plutôt de la physique que de la chimie!

Quelles autres notions, théories et méthodes sont communes à ces deux disciplines?

(réfléchit) On en trouve beaucoup dans le domaine expérimental. Par exemple, le laser est un outil qui a été développé par des physiciens et qui maintenant est beaucoup utilisé par les chimistes. Aujourd'hui la chimie bénéficie énormément des développements qui ont été effectués dans l'expérimentation physique. Pour la théorie c'est un peu la même chose parce qu'on travaille dans ces cas, chimie ou physique, sur la compréhension de propriétés de systèmes qui sont formés d'atomes. On peut décrire ces atomes à l'aide de fonctions d'onde.

Quelle signification a la théorie dans la chimie?

Elle est devenue de plus en plus importante. Grâce à des méthodes théoriques tirées de la physique – la physique quantique

– on peut calculer et représenter des phénomènes moléculaires. Les modèles tirés de la physique nous permettent de mieux comprendre les propriétés chimiques.

Quel rôle joue la mathématique dans la chimie physique?

La mathématique est encore sur un autre niveau que la physique. Elle fournit la base qui nous permet de résoudre les équations physiques. C'est ici qu'on doit parler de l'informatique, parce qu'elle aide à résoudre les équations de la physique.

«*La miniaturisation des ordinateurs fut une rupture.*»

Vous avez suivi de près le développement des moyens informatiques depuis les années 1970 jusqu'à aujourd'hui. Quels ont été les changements les plus marquants?

On a commencé dans les années 1960 à utiliser les premiers ordinateurs apparus sur le marché pour résoudre les équations. Au fur et à mesure que l'informatique s'est développée – d'ailleurs à une vitesse incroyable! – on a pu résoudre des molécules toujours plus grosses, toujours en utilisant les mêmes méthodes.

C'était un effet graduel; est-ce qu'il y a eu des ruptures?

Oui, par exemple le jour où l'on a commencé à faire travailler des ordinateurs en parallèle pour qu'ils deviennent plus puissants.

Y a-t-il eu d'autres changements abrupts?

La miniaturisation des ordinateurs fut une autre rupture. Ceci permettait aux chimistes d'entamer leurs calculs sur ordinateur de façon beaucoup plus simple. Je me souviens que pour ma thèse de doctorat, je montais chaque jour au Cern pour sortir les résultats dans leur centre de calcul, où l'on avait droit à une certaine quantité d'heures de travail... On était vraiment lié au progrès de l'informatique. Il nous permettait de calculer des molécules de plus en plus grandes. Aujourd'hui, on peut souvent faire les mêmes calculs sur des portables.

Est-ce que certains appareils ont marqué votre travail?

Oui; il est devenu important de représenter graphiquement les molécules qu'on a calculées à l'aide d'écrans graphiques.

C'était quand?

Vers la fin des années 1980. À l'université, à la fin des années 1970, on disposait de la première machine graphique de haut niveau, un ordinateur de la marque «Vector General» qui était connecté à un écran pour produire des images formées de lignes calligraphiques.

Est-ce qu'aujourd'hui on se sert encore des grands centres de calcul, ou est-ce que tout se fait sur des PC?

Il y a deux philosophies; les Américains ne jurent toujours, et avec des bonnes raisons, que par leurs immenses centres. Ils en ont besoin pour la météo, et la chimie a suivi ce mouvement. Comme alternative, on construit aussi ce qu'on appelle des «clusters», des machines qui s'appuient sur un réseau de plusieurs ordinateurs, généralement parallèles, moins puissants, avec lesquelles on arrive à peu près au même résultat. Ça coûte beaucoup moins cher de travailler sur des petites machines, mais pour certains problèmes (météo, corps solides, etc.) les grosses restent indispensables.

Dans quels domaines la chimie assistée par l'ordinateur a rendu inutile la chimie expérimentale?

(rit) C'est une question qui a suscité beaucoup de discussions, souvent violentes, entre les chimistes... Je ne dirais pas que la



chimie assistée par ordinateur a rendu inutile l'expérience. Elle contribue fortement à l'interpréter, voire la prédire, mais pas à la remplacer.

Le premier Prix Nobel attribué à un chimiste théoricien remonte à 1998; les lauréats étaient Walter Kohn et John A. Pople. Ceci a beaucoup frappé les chimistes expérimentateurs. Ils se sont rendu compte peut-être qu'on pourrait répéter leurs expériences par la théorie ou que la théorie pourrait aider à comprendre leurs expériences. Dans les années 1970, il y a eu des discussions passionnées; les expérimentateurs nous disaient que ce que nous faisons ne servait à rien, que nous n'avions aucune preuve de nos résultats... Le but principal de la théorie, c'est de prédire. Si j'arrive à prédire la forme, les propriétés d'une molécule avant que l'expérimentateur puisse le dire, alors là, je suis fort! Bien sûr, parfois on utilise la théorie au-delà de ce qu'elle peut donner. C'est ce que je dis toujours à mes étudiants: ne surestimez pas la puissance de la théorie. La chimie, ça reste une science expérimentale!

Avant de devenir professeur ordinaire à l'Université de Genève, vous avez travaillé pendant longtemps comme chargé de cours. Etiez-vous moins ambitieux que vos collègues?

Pas du tout. Mais pendant longtemps il n'y avait pas de poste libre à Genève. Honnêtement je n'étais pas malheureux dans le sens où j'avais beaucoup de liberté. J'avais déjà un crédit au Fonds National. Je pouvais faire mes calculs; j'avais beaucoup de collaborations avec des chercheurs étrangers. Mais je n'avais pas le titre d'un professeur, ce qui peut être gênant quand on travaille dans une université.

«*Quand j'ai vu comment les Américains travaillaient, cela m'a vraiment ouvert les yeux ...*»

Avez-vous songé à postuler auprès d'une autre université?

Oui, et je l'ai fait, sans succès. Mais il faut dire que la chimie théorique était tellement nouvelle qu'il y avait peu de postes qui s'ouvraient dans ce domaine. J'étais sûr que si j'avais la patience, j'aurais un poste de professeur à l'Université de Genève. Je n'étais pas malheureux en attendant: j'avais suffisamment d'argent pour travailler, j'avais déjà le groupe, j'avais déjà des étudiants...

... pouviez-vous être en charge de doctorants?
Oui, mais je ne pouvais pas les accompagner seul.

Comment avez-vous vécu les Etats-Unis pendant vos séjours de recherche entre 1974 et 1975 à Gainesville en Floride et dans le laboratoire de recherche IBM en Californie?

Ce séjour m'a permis de me développer de façon incroyable. Quand j'ai vu comment les Américains travaillaient dans le laboratoire de recherches IBM de San Jose en Californie, cela m'a vraiment ouvert les yeux...

Et comment travaillaient-ils?

D'abord j'étais à l'Université de Floride, où il y avait encore John C. Slater, grand physicien et chimiste théoricien, qui avait développé une méthode très rusée pour calculer ces molécules. Elle était simple, il y avait des approximations, et elle ne fonctionnait pas mal... Je me suis dit, tiens, il n'y a pas toujours besoin d'avoir des méthodes précises, de toujours aller dans les détails!

Ensuite, en Californie, j'avais accès aux gros ordinateurs mis à disposition par IBM, qui pouvaient calculer d'énormes molécules. On y avait développé des méthodes tirées de la physique, qui permettaient de calculer toutes sortes de propriétés de ces molécules. Quand je voyais tout cela, je me disais, mais qu'est-ce qu'on fait à Genève... Ceci m'a appris à voir qu'on pouvait aller encore beaucoup plus loin que ce que je faisais. Après ma rentrée en Suisse, je me suis dit que c'est ça qu'il faut faire...

Y avait-il autre chose qui vous impressionnait, à part l'équipement?

Le travail jour et nuit...

Ça ne se faisait pas à Genève?

Non; on travaillait, mais on n'arrivait pas à l'Uni le dimanche à trois heures du matin... Ensuite, j'étais fasciné par les collaborations que les Américains avaient mises en place.

«Je me suis dit, tiens, il n'y a pas toujours besoin d'avoir des méthodes précises, de toujours aller dans les détails!»

Un esprit plus généreux...

Oui. Puis beaucoup de congrès, parfois très spécialisés. Les Etats-Unis sont assez grands pour organiser des conférences très spécialisées.

Quoi d'autre?

Le président Nixon avait entretenu des excellentes relations avec l'Union Soviétique, grâce auxquelles ces deux pays échangeaient des chercheurs. Un chercheur russe est venu travailler avec moi. Mes collègues américains étaient très curieux; ils l'ont invité pour toutes leurs parties... J'ai beaucoup appris sur la mentalité américaine. Ils étaient très ouverts et très *friendly* avec ce Russe... Pour moi c'était vraiment une découverte, alors qu'ici, de temps en temps on avait un Français qui travaillait chez nous... (rit)

Ça a changé...

Évidemment!

Si je ne me trompe pas, vous n'avez jamais travaillé aux Etats-Unis plus tard.

Avant de quitter IBM, j'ai été convoqué dans le bureau du directeur de l'unité qui m'avait demandé si je voulais rester. Je dois dire que pendant deux nuits, je n'ai pas dormi; j'ai réfléchi... J'ai pris contact avec Genève pour savoir ce qui se passerait pour



moi à mon retour éventuel. On m'a dit, ne te fais pas de soucis, ton poste est ici, il l'est toujours. Alors, je voulais avoir une certaine sécurité de la part des Américains, que je n'ai pas pu avoir. Ils m'ont dit, on t'offre un poste analogue à celui que tu as à Genève pour une année. J'ai répondu, et après? Ils ne pouvaient rien me promettre. Même si j'adorais l'Amérique, je ne voulais pas prendre ce risque.

En 1987 je suis retourné pour travailler pendant un mois chez IBM, pour voir où ils en étaient. Ils ont fait des progrès, bien entendu, mais on a fait à peu près les mêmes ici à Genève. Du côté professionnel, ça ne valait pas tellement la peine. Par contre, la Californie m'aurait plu...

Vous avez entretenu des rapports scientifiques particulièrement proches avec la France. Vous avez été plusieurs fois professeur invité ou associé à Paris et avez tenu une fonction au sein de la Société Française de Chimie. Comment caractérisez-vous votre rapport avec la France?

J'ai eu des contacts extrêmement étroits avec la France. Aux Etats-Unis, lors d'un congrès, j'avais rencontré le regretté Jacques-Émile Dubois, qui était un chimiste organicien faisant à Paris des recherches très poussées dans des domaines voisins des miens. Il m'a invité à Paris, où j'ai donné des conférences qui ont eu beaucoup de succès parce que moi j'avais une certaine avance dans le domaine du graphique. Ils ont été étonnés et disaient qu'il me fallait revenir et donner des cours à leurs étudiants. J'ai travaillé et publié avec Dubois. Être à Paris et avoir tous ces contacts avec des professeurs à Paris, c'était utile à ma carrière.

«J'étais dur même avec des très bons amis.»

Après une crise du rectorat à l'Université de Genève en 2006 – un an après votre retraite – vous êtes devenu recteur par intérim pendant un an. Comment exactement avez-vous défini votre mission?

Il y avait eu des malversations, l'ambiance était mauvaise; la situation était difficile. Le meilleur souvenir que j'ai, c'est l'équipe que nous formions, vice-recteurs et moi. On a vraiment travaillé dur, main dans la main. Après quelques mois, on avait redressé le tout: mis de l'ordre dans les comptes, identifié les personnes concernées... Ça s'est très bien passé. En plus, c'était une leçon pour moi; j'ai beaucoup appris.



Est-ce que vous vous êtes défini une mission particulière? Quels étaient vos buts?

Le but, c'était une rigueur absolue. Absolue! On a installé un contrôle extrêmement sérieux. Toutes les semaines, on regardait en détail, au centime près, où l'on en était dans le secteur comptable. Les collaborateurs ont compris tout de suite que je prenais les choses au sérieux. J'ai convoqué une conférence pour les collaborateurs de l'université, dans laquelle j'ai été extrêmement dur – beaucoup plus dur que je ne l'étais normalement. J'étais dur même avec des très bons amis. J'étais dur tout le long, et ça a payé!

Vous n'étiez plus dans les affaires de l'université; vous étiez libre...

Il y avait des personnes qui changeaient de trottoir quand on se rencontrait; il fallait s'y attendre! Je me suis fait pas mal d'en-

nemis; c'était obligé... J'ai découvert des abus financiers qui étaient assez incroyables. Mais finalement, cela représentait quantitativement d'assez petites sommes.

*«J'avais dit que si on supprimait
CHIMIA, on supprimait
la Société Suisse de Chimie.»*

Vous étiez membre du comité de notre Société de 1992 à 2002. Quelles étaient les activités les plus marquantes pendant cette période?

En 1992, c'était la fusion de la Société Suisse de Chimie et de l'Association Suisse des Chimistes, pour former la Nouvelle Société Suisse de Chimie. Ça n'a pas été facile.

Tout d'un coup la Société avait deux journaux, «Helvetica Chimica Acta» et CHIMIA...

J'ai fortement soutenu CHIMIA. On discutait de supprimer CHIMIA... J'avais dit que si on supprimait CHIMIA, on supprimait la Société.

Bien que ce fût le journal moins prestigieux?

Oui, mais pour le contact entre les Suisses, pour la collaboration entre les groupes, pour les informations, CHIMIA était plus important. CHIMIA couvrait mieux les domaines de la chimie dans sa totalité. Les informations sur ce qui se fait en Suisse, c'est essentiel pour nos groupes de recherche!

Propos recueillis par Dr. Lukas Weber, secrétaire général de la SSC.