

XAVIER BLASE

LES NANOMATÉRIAUX DU FUTUR

En 1990, l'uniforme ne lui disant rien, Xavier Blase décide de faire son service militaire en coopération dans un laboratoire de Rio de Janeiro. Mais une coupe budgétaire brutale l'envoie dans une célèbre université californienne, Berkeley, où il fera son doctorat. C'est là qu'il découvre le fil conducteur de ses recherches : simuler toutes sortes de systèmes décrits par la physique quantique, des nanotubes de carbone au noyau de la Terre en passant par les brins d'ADN.

LE FIL CONDUCTEUR DE SES RECHERCHES : SIMULER TOUTES SORTES DE SYSTÈMES DÉCRITS PAR LA PHYSIQUE QUANTIQUE...

Dans la plupart des systèmes physiques, il y a un nombre astronomique d'atomes : cela rend tout calcul exact – à partir des équations qui les décrivent – impossible à réaliser en pratique pour les ordinateurs actuels. « C'est pourquoi, historiquement, précise ce physicien de 42 ans, on a commencé par les décrire de manière empirique. Les modèles théoriques nécessitaient d'être réglés à partir des résultats expérimentaux, obtenus sur certains systèmes. » Difficile dans ce cas de faire des prédictions pour d'autres systèmes que ces derniers.

« À l'inverse, la voie qui est suivie dans mon domaine de recherches est de partir des équations de base de la mécanique quantique, mais en les simplifiant de façon à rendre les calculs possibles : ce sont les modèles *ab initio*. » Par exemple, calculer toutes les interactions qui existent entre les électrons d'un corps est inextricable. Il est possible de simplifier le problème en considérant qu'un électron subit principalement l'effet collectif moyen de ses congénères.

L'une des voies explorées pendant sa thèse en 1990-1994 est de raffiner cette simplification en y incluant les interactions qui existent entre les électrons pris deux à deux, trois à trois, etc. Mais c'est loin d'être la seule. Son directeur de thèse, en effet, court les conférences pour y glaner de nouvelles idées. « Il venait me voir et disait : Tiens, mets-toi là-dessus. Ses sujets étaient souvent très bons, même s'il fallait parfois un peu résister pour ne pas trop se disperser. »

C'est ainsi qu'il est l'un des premiers théoriciens en 1992-1993 à étudier les propriétés des nanotubes de carbone¹, synthétisés un an plus tôt. Ces matériaux se révèlent rapidement de très bons conducteurs du courant électrique, parce que, contrairement à la plupart des molécules, ils se déforment peu lors de son passage. Des propriétés qui vont susciter énormément d'intérêt à l'heure où la miniaturisation de l'électronique se rapproche peu à peu de l'échelle moléculaire.

En 1996, après une année de post-doc en Suisse, il rentre à Lyon, ville de ses études supérieures, comme chargé de recherches au CNRS. Riche de plusieurs pistes de recherches, il développe un groupe de simulation *ab initio* au Laboratoire de physique de la matière condensée et nanostructures.

« La décennie qui a suivi a vu une réelle explosion de la discipline. D'une part la puissance des ordinateurs a considérablement augmenté : alors qu'on se limitait à des petites molécules, on peut aujourd'hui étudier des milliers d'atomes, et leur interaction avec la lumière, ou avec le solvant dans lequel ils sont plongés. D'autre part les expérimentateurs ont développé et perfectionné de nouveaux instruments, comme la microscopie à effet tunnel. Cela a permis de vérifier nos simulations de manière beaucoup plus élaborée. »

Son travail se fait en liaison étroite avec les chimistes et les physiciens expérimentateurs. « Il faut savoir assez vite si un nouveau matériau qui semble prometteur au vu des premières simulations a des chances d'être synthétisé sans trop de problèmes. »

IL EST L'UN DES PREMIERS THÉORICIENS À ÉTUDIER LES PROPRIÉTÉS DES NANOTUBES DE CARBONE.

À son tableau de chasse de simulateur, plusieurs prédictions réussies. Celle que le nitrure de bore pouvait former des nanotubes, ouvrant la voie à des sources de lumière ultraviolette, diode ou laser. Ou encore, celle plus récente que le diamant pouvait être supraconducteur², à condition de le doter de suffisamment d'impuretés chimiques. Le silicium suit deux ans plus tard, en 2006.

Soucieux d'éviter qu'un fossé ne se creuse entre « science, conscience et société », il aimerait élargir le champ d'application de ses travaux au domaine de l'énergie. « Il y a plusieurs directions possibles pour participer à la recherche de nouveaux matériaux : pour obtenir des cellules photovoltaïques avec un meilleur rendement, ou des piles à hydrogène qui stockent et relarguent en grande quantité. » Des recherches qu'il mènera désormais à l'Institut Néel de Grenoble, ville où il vient de s'établir pour des raisons familiales.

¹ Les nanotubes de carbone sont faits d'un plan d'atomes de carbone enroulé sur lui-même. Ils sont larges de quelques milliardièmes de mètre.

² Un matériau supraconducteur n'oppose aucune résistance au passage du courant.



© CNRS Photothèque - Jean-François Dars.



© CNRS Photothèque - Jean-François Dars.

MATHÉMATIQUES, PHYSIQUE, PLANÈTE ET UNIVERS (MPPU)
INSTITUT NÉEL
CNRS
GRENOBLE
<http://neel.cnrs.fr/>
<http://lpmcn.univ-lyon1.fr/~xblase/pageneel.html>