

# Emergence et chimie

*Jean-Pierre Llored*

*Ecole Polytechnique, France*

23<sup>ème</sup> Festival d'Astronomie de Fleurance .

V<sup>ème</sup> Marathon des sciences : **Complexité et Emergence.**

3 août 2013



# Objectif et méthode

Identifier les conditions que devrait respecter *un* concept d'émergence, qu'il s'agit de créer, s'il doit être pensé *avec* la chimie.

Ce faisant, il s'agit de partir d'une étude attentive aux pratiques chimiques en identifiant *ce qui importe dans ce contexte.*



# Souvenirs, souvenirs...

**Diderot** : « Toute science, tout art a sa métaphysique » (Article *Encyclopédie*, V, p. 642)

**Bachelard** : Notion d'épistémologie distribuée  
(*La Philosophie du non*, 1940)

**Wittgenstein** : Etude des formes de vie et des jeux de langage (*Recherches philosophiques*, 1953)

Penser la *spécificité* de chaque savoir en *explorant* le travail quotidien des praticiens ainsi que les usages linguistiques et formels.



1. L'émergence comme problème :  
Considérations historiques
2. Etude de quelques pratiques chimiques
3. Mise en relation d'un concept d'émergence avec la chimie



## L'émergence comme problème: retour à l'histoire



# Le problème des mélanges de corps chimiques

**Aristote** (*De la génération et de la corruption*) : étude des mélanges de corps.

« Mixte pour les yeux » : les ingrédients se conservent dans le mélange, toutes les parties juxtaposées pour former le tout étant identiques entre elles. Le tout est la somme des parties, un simple agrégat.

« Mixte véritable ou *mixis* » : la nature homogène de l'entité « générée » et ses propriétés sont différentes des ingrédients qui ont disparu (corrompus) lors de sa formation. Si les ingrédients sont mis en présence en quantité à peu près égales, il est possible de reformer les ingrédients par le biais d'*opérations* spécifiques.



# Le cadre : le rejet de l'atomisme

Cette distinction proposée par Aristote prend place dans une réflexion à propos des théories atomistes de son époque qu'il souhaitait « réfuter », dirions-nous de nos jours.

Toute la difficulté consiste à comprendre comment il est possible de « régénérer » deux ingrédients qui ont préalablement disparu en formant un composé inédit dont les propriétés ne sont pas celles qu'ils peuvent eux-mêmes manifester.

Aristote propose la distinction entre la puissance et l'acte : les ingrédients ont cessé d'exister *en acte* dans le mixte mais se conservent *en puissance*.

BENSAUDE-VINCENT, Bernadette. « Le mixte : un défi au tout comme somme des parties », *in Le tout et les parties dans les systèmes naturels*, MARTIN Thierry (Dir.), Vuibert, Collection Philosophie des sciences, Paris, 2007, pp. 157-165.





# Le mixte et les chimistes (fin du XVII<sup>ème</sup> siècle et XVIII<sup>ème</sup> siècle)

« Un caractère essentiel de la *mixtion* chimique, du-moins la plus parfaite, c'est que les propriétés particulières de chaque principe qui concourt à la formation du *mixte* périssent, ou du-moins qu'elles soient totalement masquées, & que le *mixte* soit une substance vraiment nouvelle, spécifiée par des qualités propres & diverses de celles de ses principes. C'est ainsi que le nitre formé par l'union d'un certain acide, & d'un certain alcali, n'a plus ni les propriétés essentielles de cet acide, ni celles de cet alkali, **mais des propriétés nouvelles et spéciales.** » VENEL, Gabriel-François. « Mixte », in *Encyclopédie*, tome III, 1753, pp. 586 b-587 a.

**Mécanique : Science de l'agrégat.**

**Chimie : Science du mixte.**





# Eclipse du mixte au XIX<sup>ème</sup> siècle en chimie :

Polémique : Les combinaisons chimiques se font-elles selon des proportions définies comme le suggère Proust ou évoluent-elles de façon continue comme le défend Berthollet ?

Cette polémique a largement contribué au choix du mot « mélange » pour désigner les composés sans proportions fixes d'ingrédients et à celui de « combinaisons » pour qualifier les composés formés en proportions définies.

Réforme de la nomenclature proposée en 1787 par Guyton de Morveau, Lavoisier, Berthollet et Fourcroy : un composé est formé par la juxtaposition des mots désignant les composants, comme pour « chlorure » de « sodium » : NaCl.

Exception : Pierre Duhem (*Le mixte et la combinaison chimique*) : retour à la notion de potentialité en thermodynamique. Rejet des atomistes.



# Résumé:

Le mixte est une entité à part entière, différente de ses ingrédients, homogène, et manifestant des comportements nouveaux.

Comprendre la combinaison chimique et les transformations des corps.

Rejet des formes d'atomisme (question de la réduction).

Problèmes relatifs à des opérations chimiques, à des définitions et des nomenclatures.

Penser la nouveauté et la spécificité d'un corps.



# Emergentisme britannique et la chimie

Réflexion sur l'origine de la vie : rejet du mécanisme et de l'idée d'une force vitale. Alternative : émergentisme.

Idée d'une hiérarchie des niveaux d'organisation de l'inerte au vivant. Les niveaux sont de plus en plus complexes au fil du temps.

Idée d'une causalité comme transfert d'énergie ou de mouvement d'un corps à un autre.

La chimie est utilisée comme illustration, sachant que l'émergence est pensée sur des réflexions construites à partir de la physique et de la physiologie de l'époque.



Modèle additif de composition des forces.

Causalité de *type mécanique* pour laquelle l'effet global d'un collectif de forces est équivalent à la somme des effets de chaque force prise isolément. Dans ce cas, les forces individuelles sont sans effet les unes sur les autres et demeurent identiques dans le collectif qui les regroupe. Véritable « agrégat de forces ».

Causalité de *type chimique* qui ne vérifie pas cette clause d'additivité.



# John Stuart Mill (1806-1873) :

## Composition des causes (A System of Logic, 1843)

« La combinaison chimique de deux substances produit, comme on sait, une troisième substance, dont les **propriétés sont complètement différentes** de celles de chacune des deux substances séparément, ou de toutes deux prises ensemble. »

Les lois « hétéropathiques » qui régissent les ingrédients **ne suffisent pas à prédire et expliquer le comportement de l'entité formée.**  
Les lois des parties *dans* le tout ne sont pas connues.



# John Stuart Mill (1806-1873) : Composition des causes (*A System of Logic*, 1843)

« Les effets du nouveau phénomène (les propriétés de l'eau par exemple), l'expérimentation les découvre aussi facilement que les effets de toute autre cause. Mais la **détermination de sa cause**, c'est-à-dire de la combinaison particulière des agents dont il résulte, est souvent assez difficile. (...) Aucune expérience sur l'hydrogène et l'oxygène séparés, ni rien de ce qu'on sait de leurs lois, ne nous eût conduit à **inférer déductivement** qu'ils produiraient de l'eau. Il nous faut une **expérimentation spécifique sur les deux agents combinés.** »





# George Henry Lewes (1817-1878)

## *Problems of life and Mind (1874)*

Lewes nomme effets « émergents » ce que Mill désigne par effets « hétéropathiques ».

« Tout résultant est soit une somme, soit une différence des forces co-opérantes. Il en va tout autrement en ce qui concerne les **émergents**. Dans ce cas, à l'addition d'un mouvement mesurable à un autre mouvement mesurable ou de choses à tout autre chose du même type, vient se substituer une *coopération entre choses de types différents*. Ce qui émerge des composants ne leur est en rien semblable mais leur reste *incommensurable*, et ne peut être *réduit* ni à leur somme ni à leur différence. »

LEWES, George Henry. *Problems of Life and Mind, First series: The foundations of a creed*, vol 2, Boston, Osgood R. and Company, 1875, p. 369, ma traduction.





# Définition opératoire des corps et philosophie des relations (Lewes)

« Toute qualité implique le sentir, toute propriété implique des réactions. Les choses sont des groupes de relations, des synthèses de propriétés ; elles n'existent pas *per se*, mis à part dans notre abstraction idéale. Elles sont leurs propriétés, rien d'autres que leurs propriétés. »

« Dans une pincée de sel de table n'apparaît pas le métal sodium mou ou le chlore gazeux à l'odeur âcre. Afin de prouver son affirmation que ces éléments sont bel et bien là, sous-jacents aux apparences, le chimiste doit complètement **changer le groupe de relations**, et pour ce groupe en substitue un autre, *alors*, en effet, le gaz et le métal réapparaissent. »



**Mill** : Définition à partir des lois et des causes.

**Lewes** : Coopération et de groupes de relations.

**Corps** défini comme « groupe de relations ». Dissolution de la métaphysique classique qui sépare l'essence des accidents, les propriétés premières intrinsèques et les propriétés secondes relatives à nos sens et instruments. Prémises d'une philosophie relationnelle.



# Samuel ALEXANDER (1859-1938) :

## *Space, Time, and Deity (1920)*

« De nouveaux ordres de phénomènes finis viennent à l'existence avec le temps; le monde se développe réellement ou historiquement à partir de sa condition d'Espace-Temps première ou élémentaire. Mais, comme une **nouvelle complexité de mouvement** apparaît à l'existence avec le temps, une **nouvelle qualité en émerge**, ce qui signifie qu'un **nouveau complexe** possède, en tant que fait empirique observé, une qualité nouvelle ou émergente. »

**Complexité, nouveauté, évolution émergente.**



# Samuel ALEXANDER (1859-1938) :

## *Space, Time, and Deity (1920)*

« L'émergence d'une nouvelle qualité à partir d'un niveau d'existence quel qu'il soit signifie qu'à ce niveau advient à l'existence une certaine **constellation** ou **collocation** de mouvements appartenant à ce niveau et possédant la **qualité propre à ce niveau**, et que cette collocation possède une nouvelle qualité qui appartient en propre à un **complexe de niveau supérieur**. La qualité et la constellation auxquelles il appartient sont à la fois **nouvelles** et **exprimables** en des termes qui ne font aucunement référence au moindre processus appartenant au niveau duquel elles émergent. »

**Idée d'autonomie, le niveau supérieur *survient* sur le niveau inférieur mais reste autonome. Par exemple, le niveau chimique dépend du niveau des particules mais en reste autonome (physicalisme).**



# Conwy Lloyd Morgan (1852-1936)

## *Emergent Evolution (1923)*

Idée de paliers évolutifs et celle d'accroissement progressif de la complexité des ordres de la nature (comme Alexander).

+

Idée d'imprédictibilité

« Quand le carbone qui possède certaines propriétés se combine avec le soufre qui en possède d'autres, ils forment, non un simple mélange, mais un **nouveau** composé dont certaines propriétés sont sensiblement différentes de celles de chaque composant. Mais diverses autres **propriétés** sont des émergents de constitution qui (nous pouvons l'affirmer) **ne pouvaient être prévues** avant l'instanciation de chaque combinaison en jeu. »





# Conwy Lloyd Morgan (1852-1936)

## *Emergent Evolution (1923)*

« Ce qui survient à chaque niveau émergent du progrès induit par l'évolution est une nouvelle sorte de **relationnalité**. En vertu de ces nouvelles sortes de relationnalité, non seulement des entités naturelles ont des **qualités nouvelles** qui leur sont **propres**, mais elles ont aussi des **propriétés nouvelles** **relativement aux autres entités**. Les entités du niveau supérieur ne sont pas seulement différentes par elles-mêmes ; mais elles **agissent et réagissent différemment en présence des autres**.

A chaque niveau donné d'évolution émergente les questions qui se posent sont donc : **Quelle est la nouvelle sorte de relationnalité qui advient ?** Quels nouveaux termes, quelles relations ? Quelle différence intrinsèque recèle l'entité qui atteint ce niveau, et quelle différence existe-t-il dans sa **relationnalité extrinsèque** aux autres entités. »



# Conwy Lloyd Morgan (1852-1936)

## *Emergent Evolution (1923)*

**Idée de « relationnalités » (intrinsèque et extrinsèque).**

**L'émergence est pensée dans un scénario à trois : le tout, les parties et le milieu associé.**

**Nous ne sommes plus dans un discours binaire qui concerne le tout et les parties.**

**Idée de capacité à agir. Cette idée complète les notions de groupe de relations et d'opérations développées par Lewes.**





# Charlie Dunbar BROAD (1887-1971)

## *The Mind and its Place in Nature (1925)*

Une qualité émergente est une qualité qui appartient **strictement** au **complexe considéré** dans sa globalité et non à ses parties.

« Si la théorie de l'émergence des composés chimiques est vraie, un archange mathématicien, doté du pouvoir supplémentaire de percevoir la structure microscopique des atomes aussi bien que nous percevons des bottes de foin, ne pourrait pas davantage **prédire** le comportement de l'argent et du chlore ou les propriétés du chlorure d'argent sans avoir observé au préalable des échantillons de ces substances que ne nous pourrions nous-mêmes le faire à présent. Il ne pourrait pas plus **déduire** le reste des propriétés d'un élément ou d'un composé, à partir de plusieurs de ses propriétés que ne nous pourrions le faire nous-mêmes. »



# Petit bilan

Discours qui concernent pour l'essentiel le tout et les parties (sauf pour Lewes et Morgan qui ouvrent la discussion au milieu extérieur).

Un niveau fondamental doté de particules, de corps, de lois, de qualités ou de propriétés qui sont connues et un niveau, situé plus haut dans la hiérarchie des organisations existantes, dont nous connaissons uniquement des structures, des configurations (collocations, constellations, etc.)

L'essentiel revient à déterminer si, oui ou non, le niveau supérieur est autonome par rapport à son niveau-fondement, en termes de non-prédictibilité, non-déductibilité ou de capacités à agir.

Répondre par l'affirmative revient à donner un caractère fort, ontologique à l'émergence.

Nier cette possibilité revient à admettre une forme d'émergence qui serait, au plus, épistémique, conceptuelle ou computationnelle (pour parler avec les émergentistes contemporaine comme Mark Bedau)



# Petite comparaison avec une formulation récente en termes de complexité

« Le système est à la fois plus, moins, autre que la somme des parties. (...)

L'idée d'émergence est inséparable de la morphogénèse systémique, c'est-à-dire de la création d'une **forme nouvelle** qui constitue un tout : **l'unité complexe organisée**. Il s'agit bien de morphogénèse, puisque le système constitue une réalité **topologiquement, structurellement, qualitativement nouvelle** dans l'espace et le temps.

**Les émergences sont les propriétés, globales et particulières, issues de cette formation, inséparables de la transformation des éléments.** Les **acquisitions et les pertes qualitatives** nous indiquent que les éléments qui participent à un système sont transformés, et **d'abord en parties d'un tout**. Nous débouchons sur un principe systémique clé : **la liaison entre formation et transformation**. Tout ce qui forme transforme. Ce principe deviendra actif et dialectique à l'échelle de l'organisation vivante, où transformation et formation constituent **un circuit récursif ininterrompu.** »

Edgar Morin, *La Méthode*, Volume 1, *La Nature de la Nature*, 1977, p. 115.



# Petite comparaison avec une définition formelle récente de l'émergence

« Considérons que le système  $S$  possède la microstructure  $[C_1, \dots, C_n ; R]$ , alors  $F$  est une propriété émergente de  $S$  si et seulement si : (a) il existe une loi selon laquelle tous les systèmes possédant cette microstructure ont la propriété  $F$ , mais (b)  $F$  n'est pas micro-réductible à  $[C_1, \dots, C_n ; R]$ . »

BECKERMANN, Ansgar. « Supervenience, Emergence, and Reduction », *in Emergence or Reduction ? Essays on the Prospects of Nonreductive Physicalism*, Beckermann Ansgar, Flohr Hans, Kim Jaegwon (Eds.), Walter de Gruyter, Berlin, New York, 1992, pp. 94-118 [p.115].



# Seconde partie

## Etude de quelques pratiques chimiques



# Les éléments principaux des alchimistes

**Contexte de pratiques** : Le métal est un corps mixte dont il est possible de séparer les éléments principaux constitutifs et de les agencer d'une nouvelle manière. Calcination, distillation, dissolution apparaissent comme des **opérations** permettant d'atteindre de tels buts. **Les substances** sont des instruments pour agir.

**Combinaisons d'éléments et échange graduel des qualités** : Différents principes qui se mélangent, s'échangent et se conservent durant les transformations de la matière. Les qualités (chaud et froid, sec et humide) non opposées ( $\neq$  Aristote) mais qui présentent des différences quantitatives soumises à la mesure et aux opérations.





# Table des rapports de Etienne-François Geoffroy (1718)

↔	⊖	⊙	⊕	▽	⊖	⊕	SM	♁	♂	♁	♀	☾	♂	♁	▽
⊖	♁	♂	♁	⊕	⊕	⊕	⊖	⊖	⊙	☾	♂	♁	♁	♂	▽ <sup>S</sup>
⊕	♁	♀	⊖	⊕	⊕	⊕	⊕	♂	☾	♀	PC	♀	☾♂	☾♂	⊖
▽	♀	♁	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	♀	♁						
SM	☾	♂	▽		♁		♁	♁	♀						
	♂	☾	♂		♁			☾	♁						
			♀					♁	♁						
			☾					♂							
	⊙							⊙							

↔ Esprits acides.  
 ⊖ Acide du sel marin.  
 ⊙ Acide nitreux.  
 ⊕ Acide vitriolique.  
 ⊖ Sel alcali fixe.  
 ⊙ Sel alcali volatil.

▽ Terre absorbante.  
 SM Substances metalliques.  
 ♂ Mercure.  
 ♁ Regule d'Antimoine.  
 ⊙ Or.  
 ☾ Argent.

⊙ Cuivre.  
 ♂ Fer.  
 ♁ Plomb.  
 ♁ Etain.  
 ♁ Zinc  
 PC Pierre Calaminaire.

♁ Soufre mineral. [Principe.  
 ♁ Principe huileux ou Soufre  
 ♁ Esprit de vinaigre.  
 ▽ Eau.  
 ⊖ Sel. [dents  
 ▽ Esprit de vin et Esprits ar

Isabelle Stengers. « L'affinité ambiguë : le rêve newtonien de la chimie du XVIII<sup>ème</sup> siècle », in *Éléments d'histoire des sciences*, Serres Michel Ed, Bordas, Paris, (1989), pp. 297-320.





# Principe de la table de Geoffroy

A

a

b

c



Propriétés chimiques relationnelles.

Déplacement de la fonction explicative des principes, responsables des qualités, vers l'état d'union entre deux corps et la notion de processus qui implique union et désunion.

Comparaison de l'intensité des liens entre corps et prévision de réactions chimiques.

Influence jusqu'au début du 19<sup>ème</sup> siècle sur la production de nouveaux critères d'identification des corps (extraction et recréation au laboratoire, analyse et synthèse). « Faiseurs de table » : Gellert, Bergman, Wenzel, etc.



# Relation périodique entre les propriétés chimiques et les poids atomiques des éléments, Mendeleev (1869)

## Contexte :

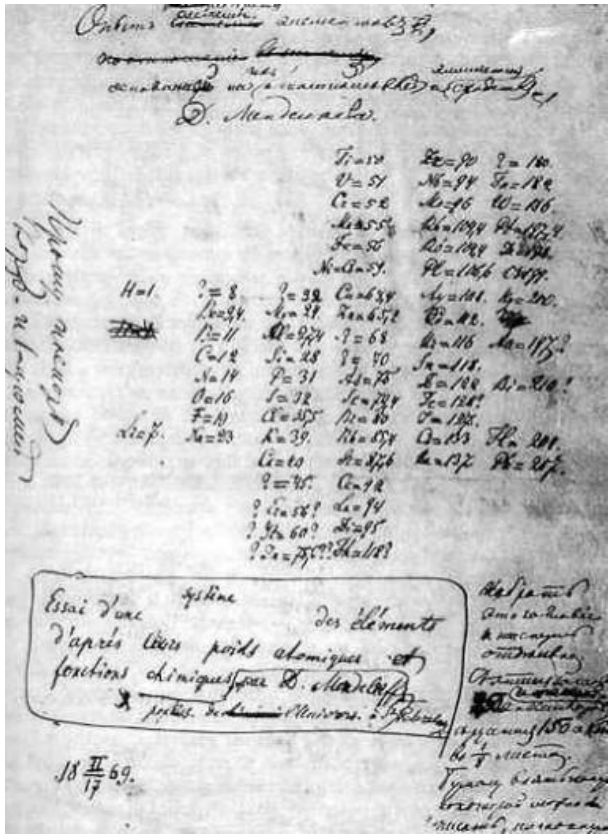
**Congrès de Karlsruhe (1860) :** Ordonner l'ensemble des connaissances.

**Hypothèse de Prout :** Primat du poids atomique comme critère de classement. Focalisation sur des corrélations arithmétiques diverses au détriment des analogies des propriétés chimiques à une échelle globale (Dumas, Béguyer de Chancourtois, etc.)

**Idée d'un loi générale de périodicité :** Loi des octaves (Newlands, 1865), système périodique de Odling (1865).



# Elément : unité abstraite d'un réseau de relations



## Tableau Périodique des Éléments

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18															
IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIB	VIB	VIB	IB	IB		IIIA	IVA	VA	VIA	VIA	VIIA															
1 H Hydrogène 1,00794	2 He Hélium 4,002602											3 B Bore 10,811	4 C Carbone 12,011	5 N Azote 14,00644	6 O Oxygène 15,999	7 F Fluore 18,9984032	8 Ne Néon 20,1797															
3 Li Lithium 6,941	4 Be Béryllium 9,012182											9 Al Aluminium 26,9815386	10 Si Silicium 28,0855	11 P Phosphore 30,973762	12 S Soufre 32,06	13 Cl Chlore 35,45	14 Ar Argon 39,948															
5 Na Sodium 22,98976928	6 Mg Magnésium 24,304											15 Ga Gallium 69,723	16 Ge Germanium 72,64	17 As Arsenic 74,9216	18 Se Sélénium 78,96	19 Br Brome 79,904	20 Kr Krypton 83,798															
7 K Potassium 39,0983	8 Ca Calcium 40,078	9 Sc Scandium 44,955912	10 Ti Titane 47,88	11 V Vanadium 50,9415	12 Cr Chrome 51,9961	13 Mn Manganèse 54,938045	14 Fe Fer 55,845	15 Co Cobalt 58,933195	16 Ni Nickel 58,6934	17 Cu Cuivre 63,546	18 Zn Zinc 65,38	19 Ga Gallium 69,723	20 Ge Germanium 72,64	21 As Arsenic 74,9216	22 Se Sélénium 78,96	23 Br Brome 79,904	24 Kr Krypton 83,798															
9 Rb Rubidium 85,4678	10 Sr Strontium 87,62	11 Y Yttrium 88,90584	12 Zr Zirconium 91,224	13 Nb Niobium 92,90638	14 Mo Molybdène 95,94	15 Tc Technétium 98	16 Ru Ruthénium 101,07	17 Rh Rhodium 102,9055	18 Pd Paladium 106,3676	19 Ag Argent 107,8682	20 Cd Cadmium 112,411	21 In Indium 114,818	22 Sn Étain 118,710	23 Sb Antimoine 121,760	24 Te Tellure 127,6	25 I Iode 126,90545	26 Xe Xénon 131,29															
11 Cs Césium 132,90545196	12 Ba Baryum 137,327	13 La Lanthane 138,90547	14 Ce Cérium 140,116	15 Pr Praseodyme 140,90766	16 Nd Néodyme 144,24	17 Pm Prométhium 144,9126	18 Sm Samarium 150,36	19 Eu Europium 151,964	20 Gd Gadolinium 157,25	21 Tb Terbium 158,90786	22 Dy Dysprosium 162,50031	23 Ho Holmium 164,930329	24 Er Erbium 167,259	25 Tm Thulium 168,93402	26 Yb Ytterbium 173,04	27 Lu Lutécium 174,967	28 Hf Hafnium 178,49	29 Ta Tantale 180,94788	30 W Wolfram 183,84	31 Re Rhenium 186,207	32 Os Osmium 190,23	33 Ir Iridium 192,222	34 Pt Platine 195,078	35 Au Or 196,966569	36 Hg Mercure 200,59	37 Tl Thallium 204,3833	38 Pb Plomb 207,2	39 Bi Bismuth 208,9804	40 Po Polonium 209	41 At Astatine 210	42 Rn Radon 222	
13 Fr Francium 223	14 Ra Radium 226	15 Ac Actinium 227	16 Th Thorium 232,0377	17 Pa Protactinium 231,036888	18 U Uranium 238,02891	19 Np Neptunium 237,048173	20 Pu Plutonium 239,0521634	21 Am Americium 243	22 Cm Curium 247	23 Bk Berkélium 247	24 Cf Californium 251	25 Es Einsteinium 252	26 Fm Fermium 257	27 Md Mendelevium 258	28 No Nébulium 259	29 Lr Lawrencium 260	30 Uu Ununium 289	31 Uuq Ununquium 289	32 Uup Ununpentium 289	33 Uuh Ununhexium 289	34 Uus Ununseptium 289	35 Uuo Ununoctium 289	36 Uuq Ununquium 289	37 Uup Ununpentium 289	38 Uuh Ununhexium 289	39 Uus Ununseptium 289	40 Uuo Ununoctium 289	41 Uuq Ununquium 289	42 Uup Ununpentium 289	43 Uuh Ununhexium 289	44 Uus Ununseptium 289	45 Uuo Ununoctium 289

Atomic masses in parentheses are those of the most stable or common isotope.

Note: The subgroup numbers 1-18 were adopted in 1984 by the International Union of Pure and Applied Chemistry. The names of elements 112-118 are the Latin equivalents of those numbers.



## Apports de Mendeleev :

Réorganisation des connaissances autour des éléments caractérisés par leur poids atomique et non plus autour des corps simples.

Anticipation expérimentale et étude des contrastes et dissemblances. Raisonnement de proche en proche et pratique d'approximations. Mendeleev maille peu à peu un réseau de relations.

Changement de statut de l'élément chimique interprété comme une unité de relations ou maille d'un réseau d'échanges matériels qui offre un grand pouvoir explicatif. L'élément circule, s'échange, se conserve durant les transformations ( $\neq$  corps simple).



# Petit bilan intermédiaire

Relations établies dans le cadre d'une chimie comparée liée à un ensemble de pratiques dans un domaine de recherche donné.

Analogie comme principal guide des chimistes qui présuppose un réseau d'interdépendances.

Double postulat (« Si je veux que la porte tourne, il faut que les gonds restent fixes » L. Wittgenstein. *De la certitude*, traduit par Moyal-Sharrock Danièle, Editions Gallimard, Paris, 2006, § 343, p. 98)

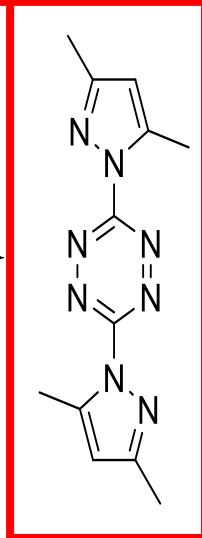
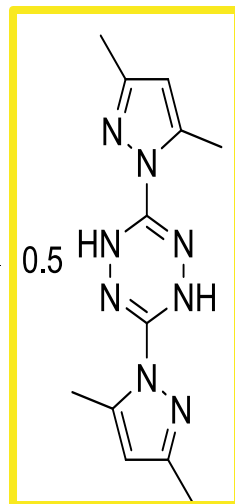
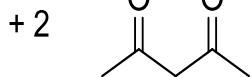
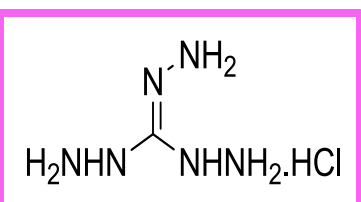
- (1) Existence d'être individuels pluriels définis par leur capacité à entrer en relation avec d'autres entités.
- (2) Postulat d'une cohérence d'ensemble des explications chimiques.

La réaction libère ou bloque des dispositions à agir.

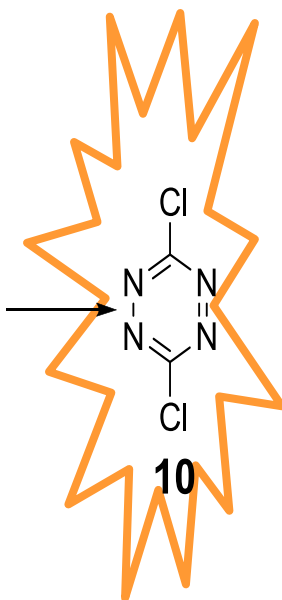
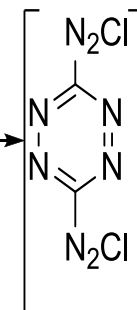
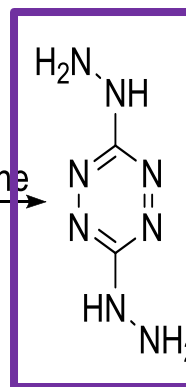




# Synthèse usuelle de la dichloro-*s*-tétrazine: transformations et relations

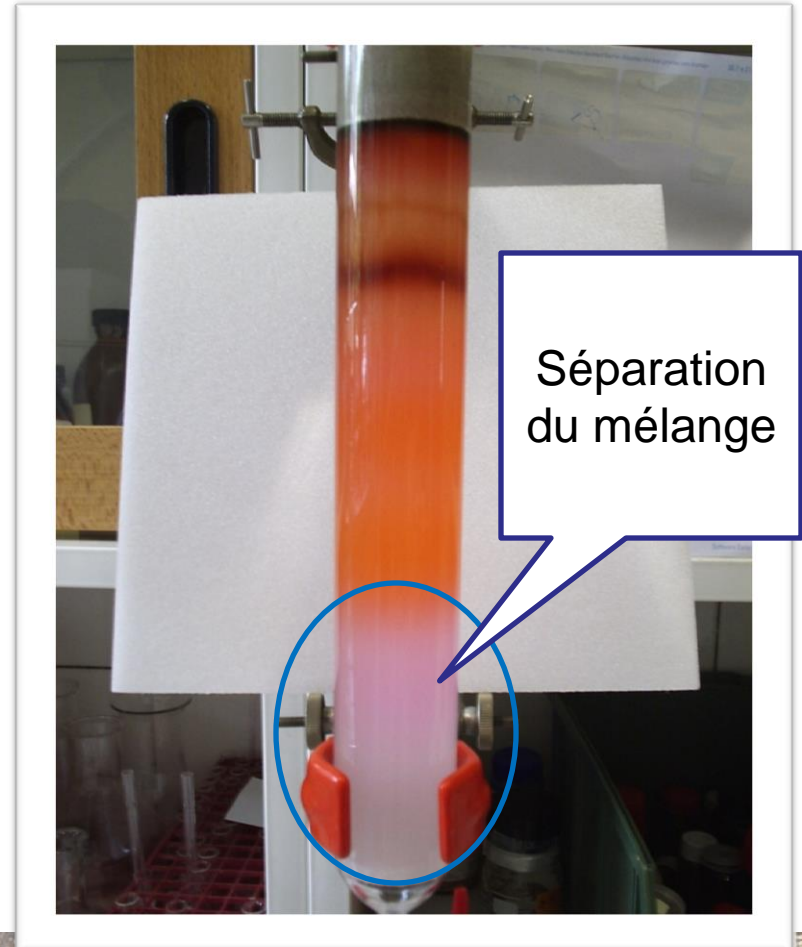
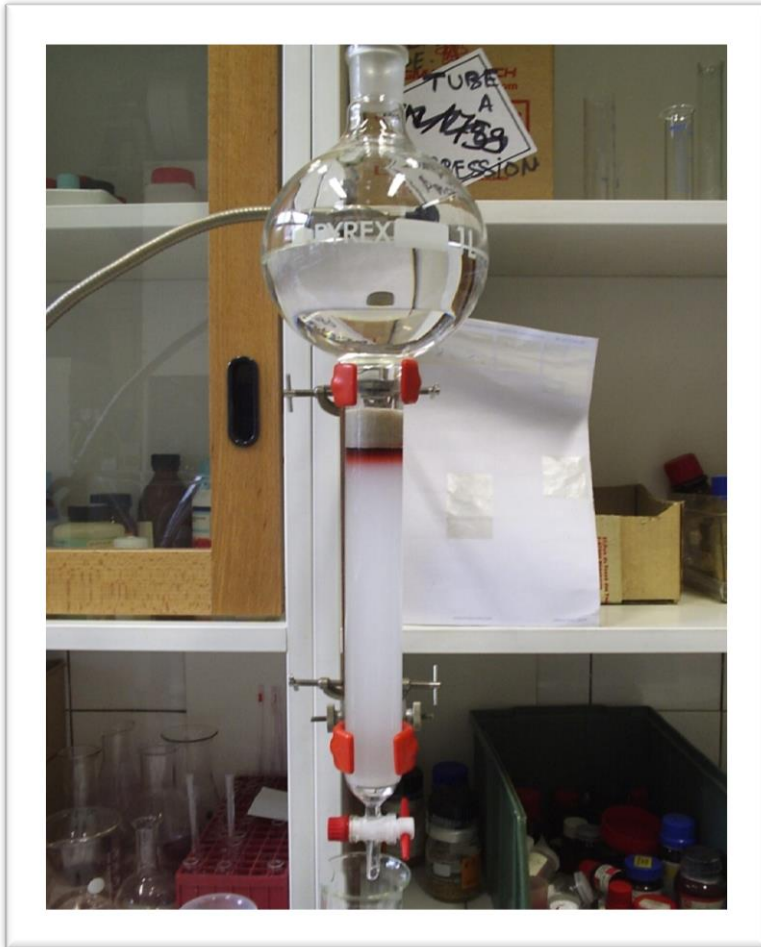


Stable



Rendement global: 39%

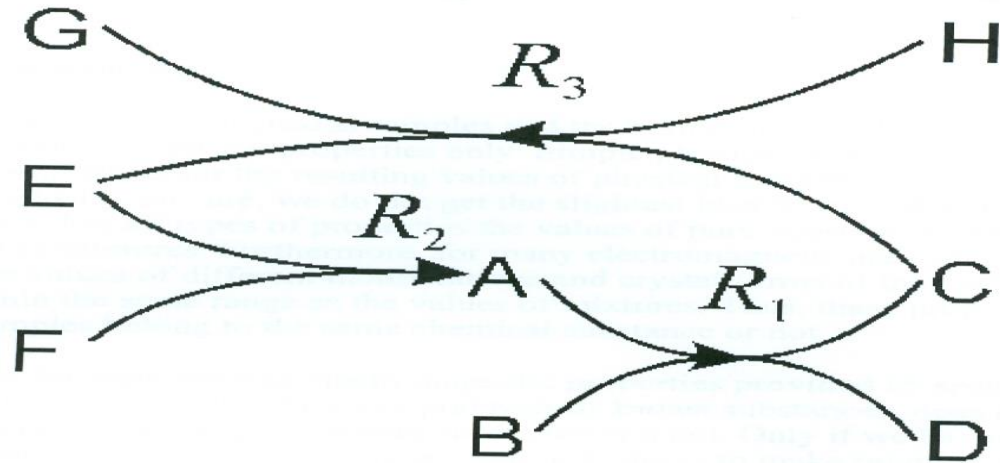
# Purification par chromatographie colonne de silice : Les corps sont séparés en fonction de leurs interactions avec la colonne





# Relata et relations se codéfinissent

J. Schummer, *The Chemical Core of Chemistry I : A conceptual approach*, Hyle, Vol 4, n°2, (1998), p. 133.

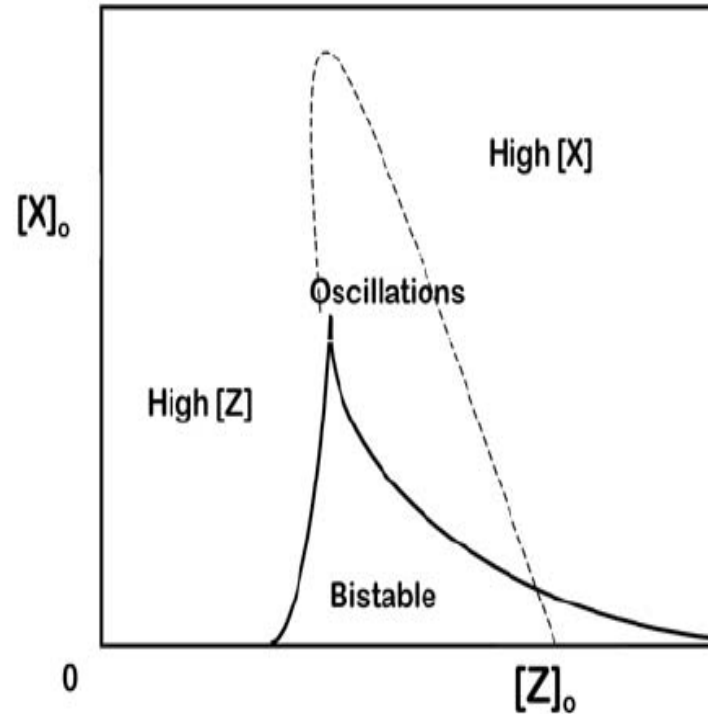
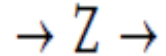
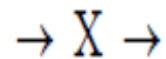
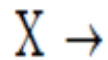
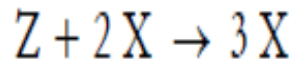


A, B, C, D, etc., sont des nœuds d'un réseau chimique, c'est-à-dire des corps « purs » obtenus par des opérations chimiques.

La pureté chimique n'est pas une propriété intrinsèque de la matière mais le résultat de transformations à partir d'un mélange initial. Elle est aussi une condition de possibilité qui rend les chimistes capables de synthétiser de nouveaux produits et d'étendre leurs taxonomies.

L'émergence doit être pensée dans un cadre dans lequel relations et *relata* se définissent mutuellement.

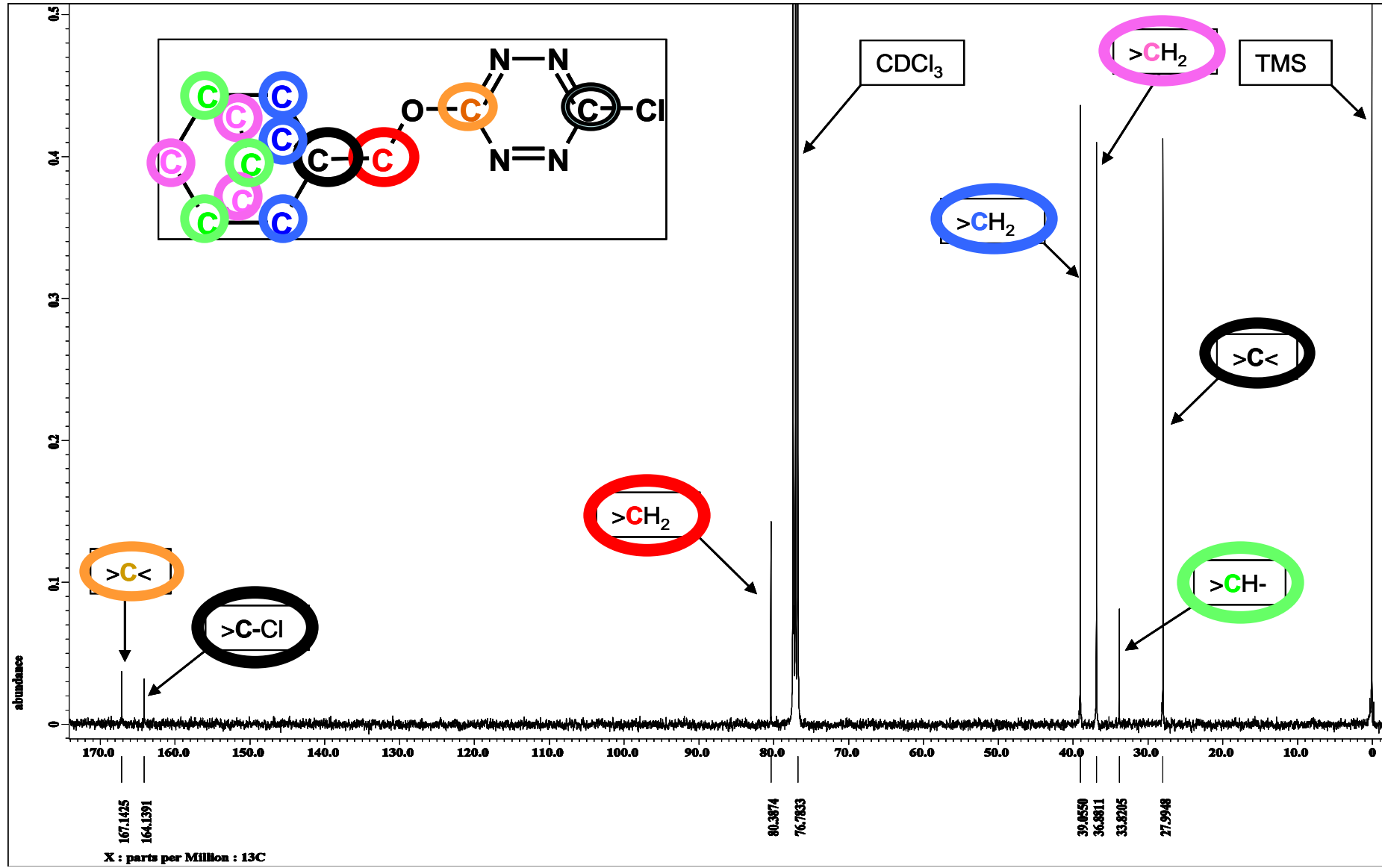
# Réseau et complexité



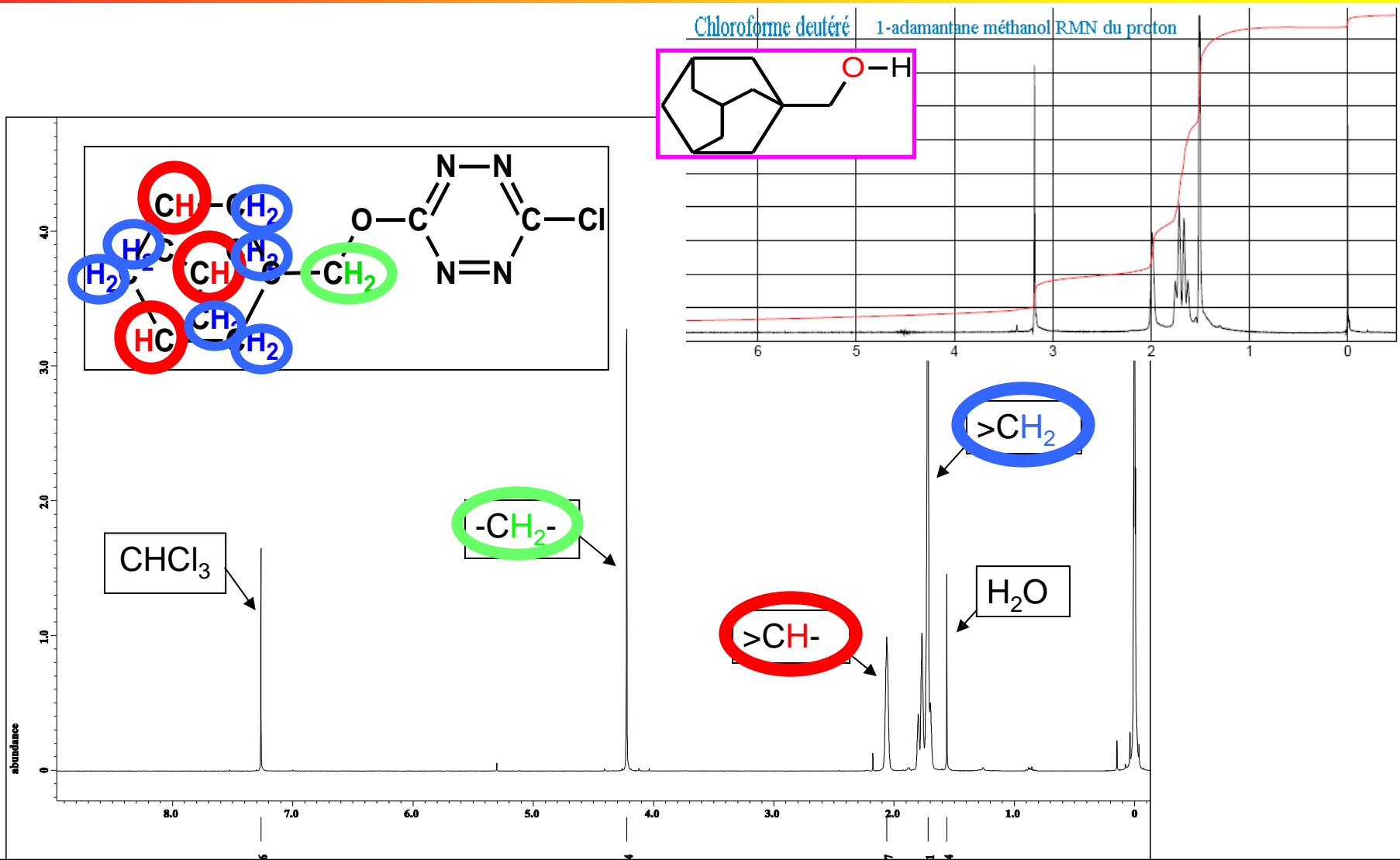
Schreiber, I. & Ross, J. « Mechanism of Oscillatory Reactions deduced from Bifurcations Diagrams », *Journal of Physical Chemistry*, 107, 2003, pp. 9846-9859.



# RMN $^{13}\text{C}$ : Les signaux des ensembles de noyaux de carbone chimiquement équivalents dépendent de la connectivité dans la molécule et d'un champ magnétique.



# RMN $^1\text{H}$ : Une nouvelle méthode implique une nouvelle analyse le tout et ses parties. L'inclusion dans une structure change les caractérisations des parties



La nature des parties change selon le mode d'intervention. Il faut donc considérer le tout, ses parties et le milieu associé en même temps.

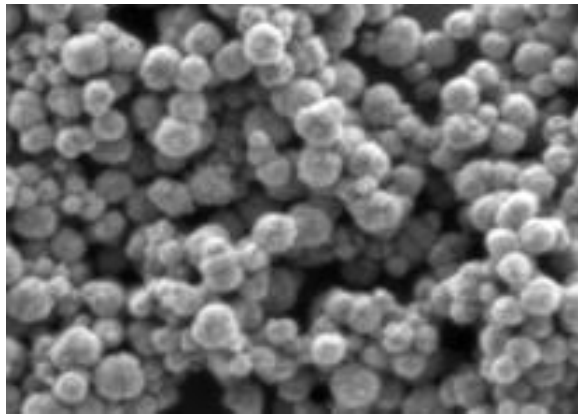
# Les effets du milieu sur le tout et ses parties

ZnO

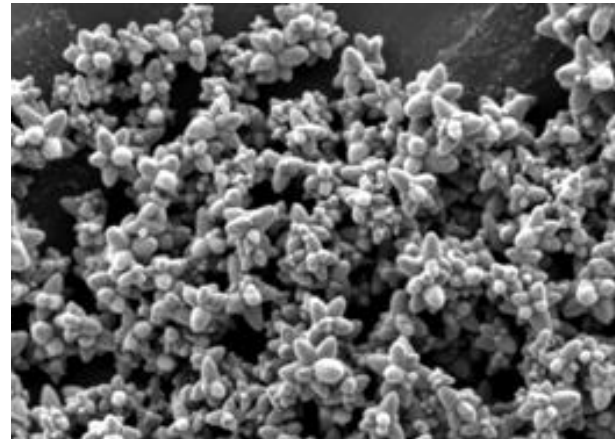
Les chimistes doivent aujourd'hui penser ensemble les ingrédients, le tout, les parties, le milieu associé et le procédé pour élucider une transformation. On est loin, très loin, du seul cadre du tout et des parties « intrinsèques ».

Polymer-assisted precipitation of ZnO nanoparticles with narrow particle size distribution.  
A. AIMABLE, M. T. BUSCAGLIA, V. BUSCAGLIA, P. BOWEN, Journal of the European Ceramic Society 30 (2010) 591-598.

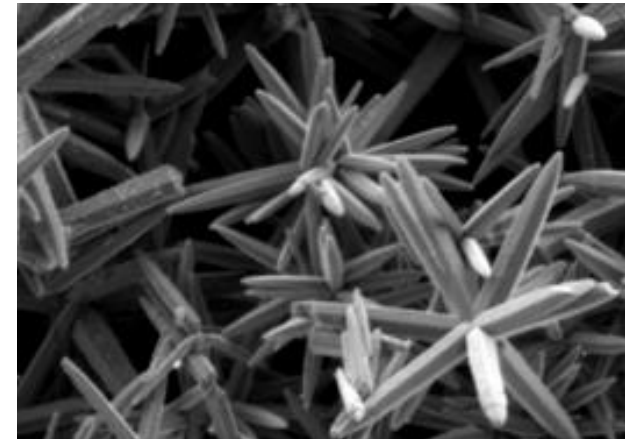
## Effets du pH



pH 5.6



pH 11.2



pH 12.5

2 μm



# La structure interne dépend de la taille du cristal qui elle-même dépend du procédé et du milieu associé.

Oscillation entre différentes structures des particules d'or (450 atomes et taille égale à 2 nm).

(e), (f), (j) : Octaèdre tronqué avec des structures cubiques à faces centrées.

(a), (d), (i) : Polyèdre avec une structure à face centrée et une macle.

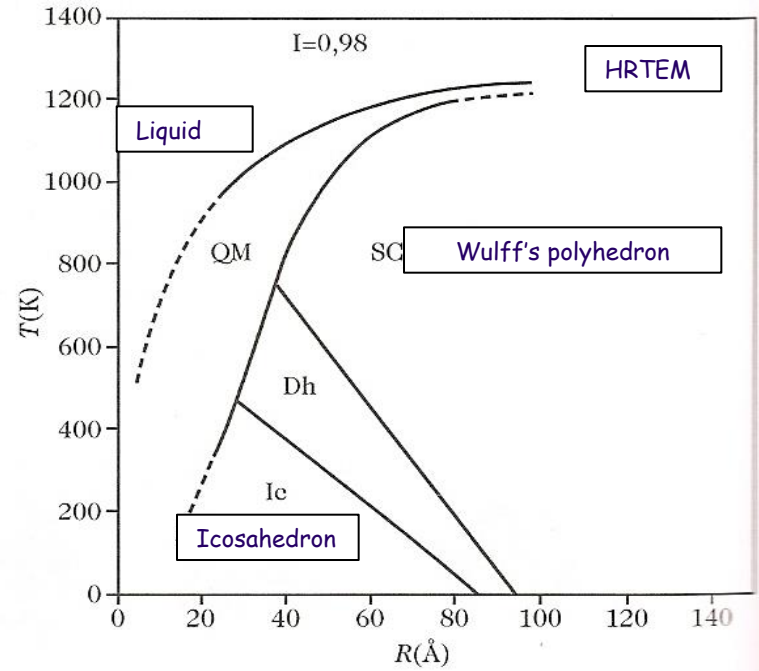
(b), (h) : Icosaèdre avec différentes macles.

Les énergies nécessaires pour passer d'une forme à une autre sont très faibles.

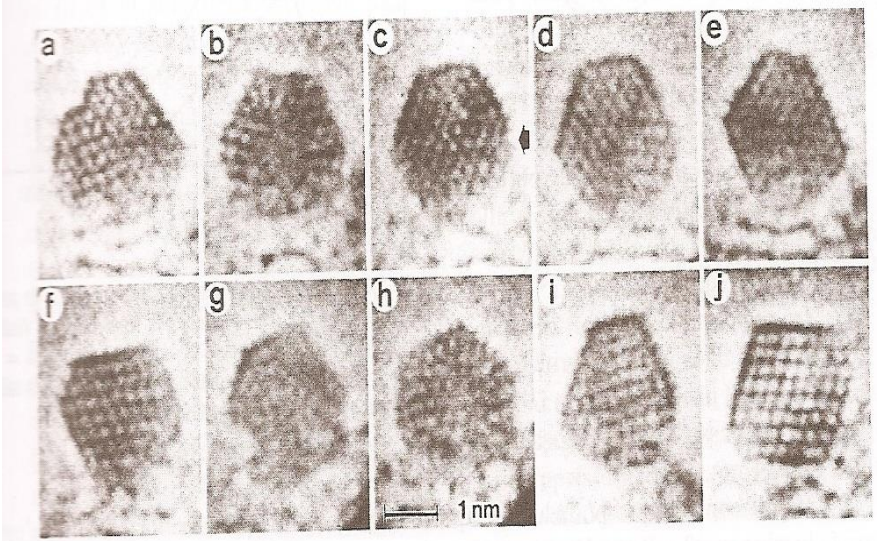


Dodecahedron: Dh

Quasimelting: QM



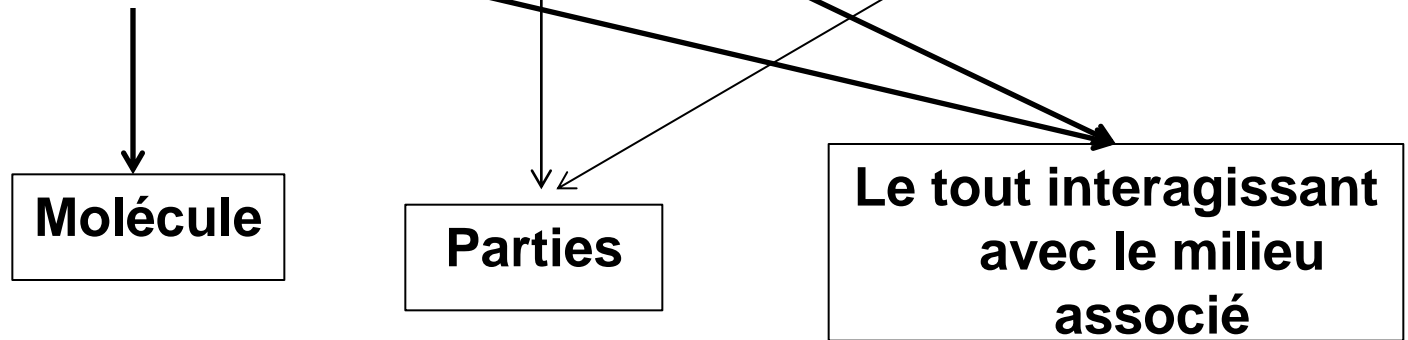
Ajayan P.M., Marks L.D., *Phys. Rev. Lett.*, 60, (1988), 585.





# Relations entre niveaux d'organisation : Approche des orbitales moléculaires

$$\Psi(HI) = a_1 \phi(H) + b_1 \phi(I)$$



$a_1$  et  $b_1$  sont déterminés par des méthodes variationnelles (minimisation d'énergie).

Techniquement la détermination de  $a_1$  et  $b_1$  nécessite de faire appel à la molécule toute entière.

Au-delà du simple aspect technique, la justification de cette minimisation fait appel à l'environnement (molécules, photons de longueurs d'onde spécifiques).

Aucune réduction d'un niveau par un autre mais une dépendance mutuelle des niveaux. Le tout, ses parties, et le milieu associé sont nécessaires au raisonnement.

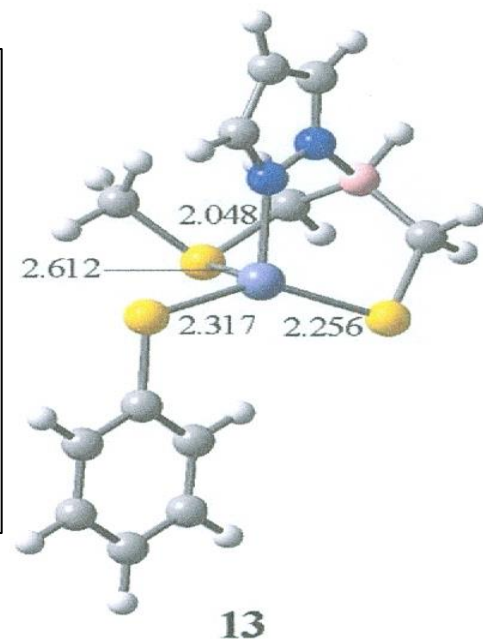
# Théorie de la densité fonctionnelle (DFT en anglais)

Basée sur une fonctionnelle de densité électronique (une fonction dans la variable est une fonction de l'énergie des électrons).

Espace moléculaire: grilles de cubes de tailles modulables (approche topologique).

Le calcul utilise une fonctionnelle pour :

- chaque atome;**
- chaque effet spécifique à l'intérieur d'une molécule;**
- l'environnement** (molécules, champs électromagnétiques, photons);
- une information sur l'entité** (structure).



Optimized structure of the previous complex n°13 at the B3LYP/BS1 level. Bond length in Å. Yellow: sulfur, blue: nitrogen, gray: carbon, white: hydrogen, pink: boron, light blue: zinc (D. Picot, G. Ohanessian & G. Frison (2008). The Alkylation Mechanism of Zinc-Bound Thiolates Depends upon the Zinc Ligands. *Inorganic Chemistry*, **47**, 8167-8178.

# Faisons un nouveau point

La nature des ingrédients et les quantités sont les mêmes, mais selon l'environnement, le procédé et sa durée, le tout formé, sa taille, ses parties et leur agencement, peuvent différer. Penser l'émergence d'un nouveau corps doit intégrer le fait que le tout, ses parties et le milieu associé sont définis ensemble.

Le mode d'intervention prend activement part à la définition et à la constitution du corps formé. Il n'y a pas un seul niveau fondamental dans ce scénario mais seulement des niveaux qui dépendent mutuellement les uns des autres et qui sont constitués par le mode d'accès, "constitués" au sens où Kant utilise ce terme.



# De quoi avons-nous besoin pour penser l'émergence dans ce contexte ?

D'un concept qui prenne en charge trois exigences:

La définition, provisoire et ouverte, d'un corps défini par les modes d'intervention et par les opérations qu'il peut réaliser.

La dépendance mutuelle des relations et des *relata* dans le cadre chimique.

Un raisonnement « à trois niveaux » dans lequel le tout, ses parties et l'environnement, prennent sens ensemble, et donc l'absence d'un niveau fondamental.



# Troisième partie

Mise en relation d'un concept  
d'émergence avec la chimie





# L'émergence en termes « d'affordances » (1)

« Pour bien souligner que la substance est définie par un *groupe de déterminations externes agencées* de telle manière qu'elles ne peuvent toutes ensemble se préciser assez pour atteindre un *intérieur absolu*, peut-être pourrait-on retenir le nom d'*ex-stance*. » BACHELARD, Gaston. *La philosophie du non*, 1940, p. 78.

Le mode d'intervention n'est plus éliminable. Le concept « d'affordance » prend en charge cette situation.

Il a été proposé par Rom Harré sur la base des travaux de Gibson en théorie de la perception et de Bohr en physique quantique. (HARRÉ, Rom. *Varieties of Realism. A Rationale for the Natural Sciences*, 1985).



## Définitions :

Les dispositions sont exprimées sous forme d'une proposition conditionnelle : « si je mets un sucre dans l'eau alors il se dissoudra ».

Une « affordance » est une disposition pour laquelle la partie conditionnelle fait intervenir directement le corps humain ou une interaction avec un instrument mis au point par les humains.

Le complexe {solution sodée-électrolyseur} « affine » le sodium sous forme métallique à l'une des électrodes.

Nous ne pouvons connaître que des « affordances ».



# L'émergence en termes « d'affordances » (3)

Si deux instruments, INST1 et INST2, sont incompatibles, c'est-à-dire ne peuvent être pas utilisés en même temps sur le même corps, les « affordances » qui proviennent du complexe {INST1-corps} et du complexe {INST2-corps} sont des phénomènes complémentaires, au sens de Bohr.

Le complexe {réacteur-corps chimiques} « affine » des produits alors que le complexe {appareil de RMN-corps chimiques} « affine » des signaux liés à des parties équivalentes de ces corps et produits.

Une « propriété-affordance » est *émergente* par rapport à une autre « propriété-affordance ». Reste ensuite à articuler ces savoirs liés à des modes d'intervention différents, sachant toutefois que les « affordances » renvoient aux pouvoirs causaux du monde (réalisme : « policy realism »).



# Approche non ontologique de l'émergence (1)

## Michel Bitbol

Les modes d'intervention sont multiples.

Ils participent activement à la définition et à la constitution de ces niveaux.

**Ce faisant, tous les niveaux définis par des modes d'accès s'identifient à des configurations relationnelles.**

Or les modes d'accès sont soumis à la condition de fournir des informations compatibles entre elles (d'un point de vue scientifique).

Les niveaux d'organisation sont donc soumis, à leur tour, à une contrainte de compatibilité mutuelle. Ainsi sont-ils à la fois définis par un mode d'intervention mais aussi les uns par rapport aux autres (**double relativité**).

**Les relations internes à chaque niveau et les relations entre niveaux sont donc subordonnées aux relations d'accès qui les définissent ou aux relations d'intervention qui les mobilisent.**



# Approche non ontologique de l'émergence (2)

« Si tout le processus global est sans *fondement d'un bout à l'autre*, alors il peut y avoir une émergence sans propriétés émergentes. Non pas une émergence asymétrique des propriétés de haut niveau par rapport aux propriétés plus fondamentales, mais *une co-émergence symétrique* de caractéristiques microscopiques du niveau inférieur et du comportement du niveau supérieur. **Non pas une émergence de propriétés absolues d'un niveau d'échelle supérieure par rapport à des propriétés absolues d'un niveau d'échelle inférieure, mais des émergences de phénomènes qui sont *co-relatives*.** » (Bitbol, Michel. *De l'intérieur du monde*, 2010, l'italique est celle de l'auteur).





# Emergence et approche interventionniste de la causalité (1)

Galilée a défini une cause comme ce qui une fois posé conduit à un effet alors que sa suppression implique également celle du même effet.

Quand un antécédent de plus haut niveau a été **produit** par un instrument capable d'altérer des structures macroscopiques, certains phénomènes élémentaires sont **ultérieurement** observés, avec une certaine probabilité  $p$ , par un autre dispositif respectant les exigences d'une exploration microscopique.

Quand cet antécédent n'est pas ou plus instancié car l'instrumentation est désactivée, le groupe de phénomène n'est plus mis en évidence par l'autre instrument.

Telle est la définition de la **causalité descendante** dans ce cadre interventionniste.



## Emergence et approche interventionniste de la causalité (2)

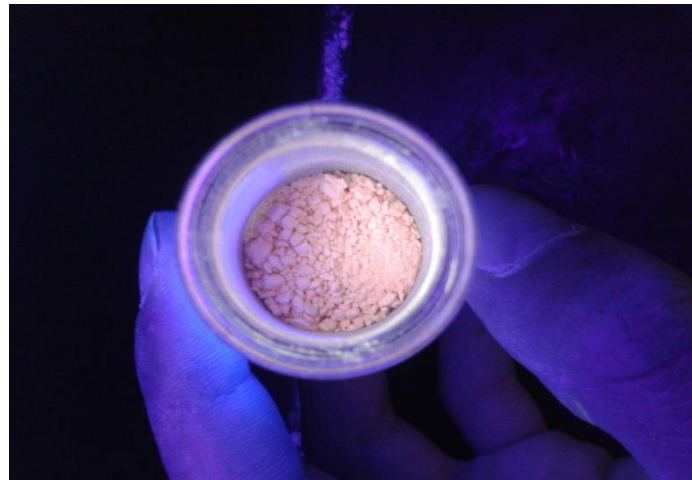
Lorsque vous changez un solvant ou lorsque vous modifiez la structure de la dichloro-s-tétrazine par le biais d'une réaction chimique, bref lorsque vous agissez à une « grande » échelle d'action, il est possible de mesurer ultérieurement des modifications dans l'émission de fluorescence en utilisant un fluorimètre de résolution adaptée à ce type d'échelle intramoléculaire.

L'intervention à un niveau contraint seulement la gamme des évolutions possibles de l'autre niveau !

Renouvellement des arguments en faveur d'une émergence adaptée à la chimie et à la physique quantique.

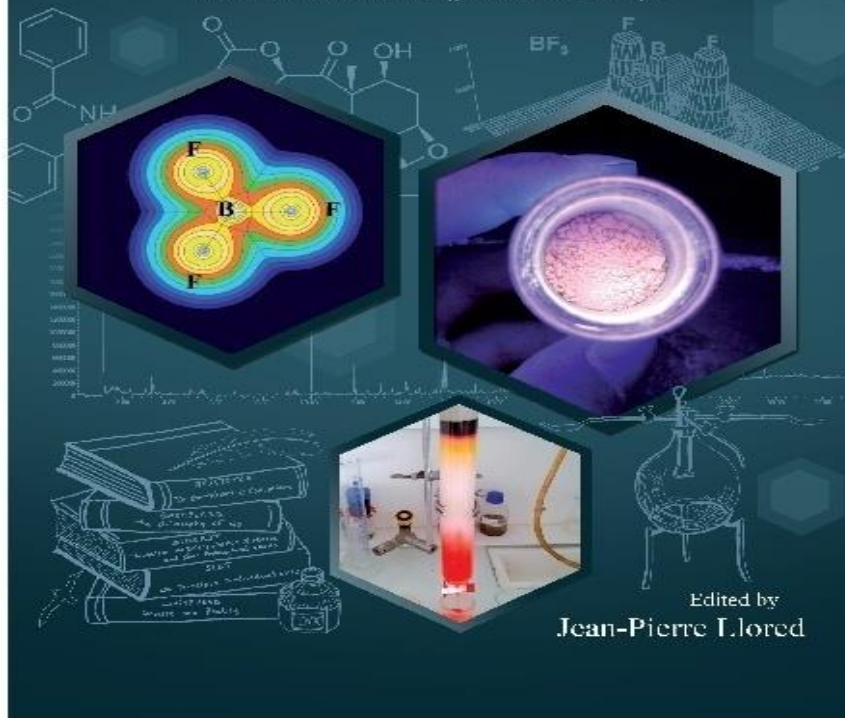


**Merci de votre attention**



# The Philosophy of Chemistry

Practices, Methodologies, and Concepts



*The Philosophy of Chemistry: Practices, Methodologies, and Concepts*, Cambridge Scholars Publishing, New Castle, juin 2013.

En préparation, *La chimie, cette inconnue?*, Hermann, à paraître en 2014.

