

Discours Van Speybroeck 8 octobre 2024

Sire,

C'est un immense honneur de recevoir aujourd'hui le Prix Francqui des mains de Votre Majesté. Cela souligne que vous attachez une grande importance à la recherche scientifique et que vous souhaitez transmettre le message que la science et l'éducation constituent les fondements d'une société de la connaissance forte et éclairée.

Sire, Excellences, Mes Dames, Messieurs

Les fondateurs de la Fondation Francqui étaient pleinement conscients, en tant que visionnaires, de l'importance de la recherche scientifique et de l'enseignement pour le développement d'une Belgique tournée vers l'avenir. La Fondation Francqui joue toujours un rôle primordial pour encourager la recherche scientifique de haut niveau, l'internationalisation et la collaboration.

Je suis particulièrement reconnaissante que le jury ait sélectionné ma candidature et mon domaine de recherche en modélisation moléculaire pour cette prestigieuse distinction. Je tiens à remercier vivement la Fondation Francqui, son Conseil d'Administration et tous les membres du jury. Je suis également reconnaissante envers mes deux promoteurs, Prof. Johan Martens et Prof. Bert Weckhuysen. Jamais, je n'aurais imaginé me retrouver un jour devant vous tous dans ce Palais des Académies, et cela ne m'était certainement pas venu à l'esprit lorsque, à l'âge de vingt ans, j'ai commencé mes premiers pas de chercheur à l'Université de Gand dans le nouveau domaine de recherche de la modélisation moléculaire.

Je suis ravie que le jury ait pleinement reconnu le domaine de recherche de la modélisation moléculaire comme un maillon important pour le développement des technologies futures pour une industrie durable. L'attribution de ce prix est une incitation à poursuivre des recherches scientifiques de pointe avec encore plus de détermination, à inspirer les jeunes chercheurs et à contribuer à la résolution de questions sociétales importantes.

1. Concernant la collaboration interdisciplinaire

Le domaine de la modélisation moléculaire et son application à des processus catalytiques importants se situe à l'interface de la physique, de la chimie, de la science des matériaux et des sciences de l'ingénieur. La collaboration interdisciplinaire m'a toujours particulièrement fasciné. Regarder ensemble un problème sous différents angles, chercher l'inconnu et être inspiré par des chercheurs d'autres disciplines est particulièrement intrigant pour moi. Une telle perspective interdisciplinaire est cruciale pour résoudre les grandes questions sociétales.

2. Concernant la Modélisation Moléculaire et son application aux systèmes industriels

J'ai commencé ma recherche dans le domaine de la modélisation moléculaire à la fin des années 1990 à l'Université de Gand. En 1998, le prix Nobel de chimie a été décerné à Walter Kohn et John Pople pour le développement de la théorie de la fonctionnelle de la densité et des méthodes computationnelles en chimie quantique. Grâce au développement de moyens de calculs de plus en plus puissants, cela a inauguré une nouvelle ère à partir de laquelle des molécules et des matériaux réalistes pouvaient être modélisés et visualisés avec une grande précision.

Dans d'autres universités, des groupes de chimie quantique importants étaient déjà actifs, mais à l'Université de Gand, le domaine de la modélisation moléculaire était encore inexploré. Lorsque j'ai découvert la théorie abstraite de la mécanique quantique pendant mes études d'Ingénieur Civil en physique, j'étais profondément intriguée. Peu de temps après, j'ai suivi le

cours “Théorie quantique de la liaison chimique” et j’ai compris comment cette théorie abstraite était nécessaire pour décrire le comportement des molécules. Ce lien entre le fondamental et l’appliqué constitue le fil conducteur de toute ma carrière scientifique.

Le monde des molécules se déroule à l’échelle nanométrique, bien plus petite que ce que nous pouvons voir à l’œil nu. À une telle petite échelle, d’autres lois et phénomènes agissent, bien différents de ceux que nous observons quotidiennement. Les particules se comportent de manière probabiliste, sans position ni vitesse bien définies. Au début des années 1900, de nombreuses discussions ont rassemblé des physiciens emblématiques, notamment ici à Bruxelles lors des conférences Solvay. Les photos emblématiques de la célèbre conférence Solvay de 1927 et de la première conférence de chimie Solvay de 1922 sont affichés dans mon bureau. Elles continuent à m’inspirer ainsi que mes étudiants. Elles nous permettent de rêver des immenses possibilités de la science et montrent que les découvertes en recherche fondamentale peuvent avoir, même des années plus tard, un impact majeur sur notre vie quotidienne.

Après avoir obtenu mon diplôme d’Ingénieur Civil en Physique Appliquée, j’ai décidé d’effectuer un séjour de recherche chez DSM Research. C’est à cette occasion que j’ai rencontré Dr. Rob Meier et Dr. Franco Buda qui avaient pour la première fois simulé une réaction catalytique à l’aide de techniques de dynamique moléculaire basées sur la mécanique quantique. Cela m’a profondément marqué. Peu de temps après, j’ai commencé ma recherche doctorale à l’Université de Gand à l’Institut des Sciences Nucléaires, sous la direction du Prof. Michel Waroquier. J’ai activement collaboré avec des groupes de chimie expérimentale et j’ai essayé de comprendre leurs questions scientifiques. Cela m’a inspiré à développer de nouvelles méthodes pour modéliser des systèmes moléculaires réalistes avec des applications pratiques. C’était un défi de m’immerger dans le langage des chimistes avec mes compétences en physique. Mais c’est précisément ce pont vers l’inconnu qui m’a énormément fasciné.

Mon travail de recherche initial se situait dans le domaine de la chimie des polymères et des processus pétrochimiques classiques. Pendant ma période postdoctorale, je me suis intéressée aux matériaux nanoporeux et à la catalyse hétérogène. En collaboration avec des chercheurs très talentueux et des laboratoires expérimentaux à travers le monde, nous nous sommes plongés dans la chimie qui gouverne la conversion du méthanol en oléfines. Ce processus m’a fasciné comme alternative à la production d’éléments constitutifs chimiques à partir de nouvelles sources alimentaires, telles que la biomasse ou les déchets, au lieu de ressources fossiles. Mes nombreuses interactions avec des partenaires expérimentaux m’ont rapidement appris que la modélisation de processus catalytiques réalistes est très complexe. L’objectif de modéliser ces processus complexes de manière aussi précise que possible m’a constamment motivé à repousser les limites des techniques de simulation.

3. Concernant l’importance de ma recherche pour une société durable

Aujourd’hui, mon groupe travaille dans des domaines importants pour la transition vers une société durable. La production de certains composés chimiques repose encore largement sur des matières premières fossiles. Pour réaliser la transition vers une économie neutre en carbone, nous devons passer à des processus radicalement différents qui partent d’autres sources de carbone. Par exemple, le CO₂ que nous capturons peut être reconverti en produits chimiques utiles, ou le plastique et la biomasse peuvent être utilisés de manière circulaire. Pour rendre cela possible, nous avons besoin de catalyseurs performants capables de traiter les nouvelles matières premières et de fonctionner dans des conditions différentes de celles des processus

pétrochimiques classiques. La conception moléculaire joue un rôle crucial à cet égard. Non seulement dans le domaine de la catalyse, mais aussi pour la conception de matériaux pour le stockage de l'hydrogène ou pour détecter les substances nocives dans l'air, une conception minutieuse à l'échelle nanométrique est nécessaire. Au lieu de deviner à quoi devrait ressembler un catalyseur idéal, nous voulons le prédire.

Cela n'est certainement pas simple. La fonction d'un catalyseur industriel est extrêmement complexe et elle est fortement influencée par les conditions dans lesquelles le matériau fonctionne. De plus, aucun matériau n'est parfait, et de petites ou grandes imperfections influencent parfois leur comportement de manière positive. Par analogie avec les êtres humains, nous réagissons également différemment en fonction des circonstances, et aucun de nous n'est parfait.

La modélisation de tels matériaux réalistes est particulièrement ambitieuse. Pour pouvoir faire le lien avec l'expérience, nous devrions pouvoir suivre plus d'un million d'atomes de manière mécanique quantique au fil du temps. Même avec les ordinateurs exascale les plus performants, nous ne pouvons calculer quantiquement que des systèmes contenant environ 1000 atomes. Une nouvelle étape fondamentale est nécessaire pour initier un changement de paradigme.

Cela m'amène à nos activités de recherche les plus récentes où nous faisons le pont vers l'intelligence artificielle et les techniques d'apprentissage automatique (Machine Learning). Nous avons l'ambition de simuler des systèmes avec des millions d'atomes à l'aide de modèles basés sur l'apprentissage automatique, entraînés sur des systèmes plus petits simulés quantiquement. De cette manière, nous souhaitons reproduire une expérience catalytique réaliste. J'aimerais observer par simulation numérique comment un flux de matière tel que le CO₂, la biomasse ou le méthanol est converti et comment le catalyseur évolue dans le temps. Je suis convaincue qu'un nouveau changement de paradigme est possible en élargissant le domaine de la modélisation moléculaire à l'intelligence artificielle, à condition qu'elle soit appliquée avec les connaissances théoriques, physiques et chimiques nécessaires du système.

4. Regarder en avant et en arrière – Quelques réflexions

Le Prix Francqui m'a fait réfléchir sur le passé et l'avenir.

Une telle reconnaissance ne s'obtient pas seul. Je me rends compte que je suis très privilégiée d'avoir eu de nombreuses opportunités et d'avoir reçu beaucoup de soutien.

Tout d'abord, il y a mes parents, qui ont inculqué à mes sœurs et à moi un ensemble de valeurs basées sur l'intégrité, l'honnêteté et l'éthique de travail, et qui nous ont toujours encouragés à donner le meilleur de nous-mêmes dans tout ce que nous entreprenons. Obtenir un diplôme universitaire était pour eux le bien le plus précieux. Malheureusement, ma mère n'est plus parmi nous aujourd'hui, mais son incroyable persévérance, son dynamisme et sa force restent une source d'inspiration constante.

Je peux me considérer chanceuse d'avoir grandi dans le paysage éducatif et de recherche belge, où des opportunités sont offertes à chacun d'entre nous. Avoir la possibilité de faire de la recherche au sein d'une institution académique – dans mon cas, l'Université de Gand – est un privilège particulier, on y a la liberté de s'épanouir soi-même. Avoir des opportunités pour découvrir différents aspects en essayant et en apprenant de ses erreurs est la plus belle chose que nous puissions offrir aux jeunes. Cela forme des penseurs critiques qui auront eux-mêmes un impact sur la société de demain.

Moi aussi, j'ai eu de telles opportunités. Je tiens à remercier en particulier Prof. Michel Waroquier, avec qui j'ai cofondé le Centre de Modélisation Moléculaire. Il m'a guidé durant ma période de doctorat et de postdoctorale en me donnant toute la liberté pour développer ma recherche et établir des collaborations avec des collègues d'autres laboratoires. Ensemble, nous devions chercher des fonds pour développer une nouvelle ligne de recherche à l'Université de Gand. Cela n'était certainement pas évident, mais l'enthousiasme des jeunes chercheurs pour contribuer à cette histoire et la conviction que nous construisions quelque chose d'unique nous ont poussés en avant.

Aujourd'hui, le Centre de Modélisation Moléculaire est devenu un centre de recherche multidisciplinaire avec environ 40 chercheurs. Notre slogan est "Plus forts grâce à la collaboration". Collaborer au-delà des frontières des facultés, des départements, des disciplines et avec des collègues du monde entier est notre indicateur de direction pour atteindre l'excellence scientifique. Nous croyons fermement au pouvoir de chaque individu avec ses talents uniques. J'ai eu le privilège de travailler avec des personnes incroyablement talentueuses.

Je suis particulièrement reconnaissante envers les institutions qui ont soutenu ma recherche.

Le conseil de recherche de l'Université de Gand, avec le financement du fonds de recherche spécial, a joué un rôle clé dans ma carrière. Comme de nombreux jeunes chercheurs, j'ai été confrontée à l'incertitude d'obtenir un poste permanent dans le corps académique pendant ma période postdoctorale. Grâce au conseil de recherche, j'ai pu postuler pour un professorat de recherche, indépendamment d'un poste spécifique avec un domaine de recherche prédéfini, où l'on était jugé uniquement sur ses mérites scientifiques et son excellence.

Je porte également le Fonds pour la Recherche Scientifique (FWO) dans mon cœur. Pour les universitaires qui font de la recherche fondamentale, c'est l'une des institutions les plus importantes au niveau flamand pour permettre une recherche scientifique de haut niveau. À l'époque, j'ai obtenu un mandat postdoctoral du FWO, ce qui m'a donné des ailes pour me développer davantage.

Donc, je plaide fortement pour un FWO solide et j'appelle tous les décideurs politiques à continuer d'investir dans la recherche fondamentale indépendante avec suffisamment de moyens pour créer un terreau fertile pour l'innovation et la créativité à long terme.

Je suis profondément reconnaissante envers le Conseil Européen de la Recherche (ERC) qui soutient les chercheurs à travers l'Europe pour poursuivre une recherche de pointe menée par des chercheurs. La sélection est basée sur l'excellence scientifique afin de poursuivre une recherche exploratoire de pointe qui repousse les frontières des connaissances actuelles. Obtenir une subvention ERC est très difficile, mais cela m'a permis de mener des recherches révolutionnaires.

5. Quelques réflexions personnelles

Faire de la recherche au plus haut niveau, c'est souvent comme monter une côte à vélo, il faut apprendre à faire face aux revers, comme des projets que vous n'obtenez pas ou des articles difficiles à publier. Aujourd'hui, je veux aussi exprimer explicitement ce message, en particulier pour les jeunes chercheurs qui sont au début de leur carrière. Tout le monde, même les chercheurs les plus réussis, est confronté à des revers et à des échecs. Savoir que des collègues

chercheurs de haut niveau ont vécu des expériences similaires m'a donné la force et le courage de ne jamais abandonner.

Pour conclure, je voudrais souligner que ma recherche a toujours été et reste mon hobby: écrire un article est une détente pour moi. Cela nécessite un environnement qui le comprend, vous encourage et vous stimule. Mon époux Piet m'a toujours encouragée et apporté de la rationalité. Les enfants mettent tout en perspective, ils m'ont toujours montré les véritables dimensions de la vie. La combinaison du travail et de la famille n'est certainement pas toujours évidente, mais il est important de faire savoir aux jeunes collègues chercheurs que c'est possible.

Je considère le Prix Francqui comme une immense source de motivation pour continuer de faire de la recherche de niveau mondial avec mes collaborateurs dans les années à venir. J'espère pouvoir continuer à passionner et inspirer les jeunes, car je crois fermement qu'ils représentent l'avenir. À eux, je voudrais donner le message suivant: ne vous laissez pas trop guider par les préoccupations du jour ou les plans de carrière à long terme. N'ayez pas peur, suivez vos passions et croyez que beaucoup de choses sont possibles.

Je vous remercie tous pour votre attention sincère et votre présence.

Je vous remercie de tout mon cœur.