

Seconde révolution quantique et chimie : Un ordinateur quantique pour quoi faire ?

Par César FENIOU

Qubit Pharmaceuticals

Et Jean-Philip PIQUEMAL

Laboratoire de Chimie théorique, Sorbonne Université (UMR 7616 CNRS), et Qubit Pharmaceuticals

La chimie est souvent considérée comme l'une des applications les plus prometteuses du calcul quantique. Cette association repose sur une affinité profonde entre les lois qui gouvernent les systèmes moléculaires et les principes de l'information quantique. Pourtant, derrière cette intuition séduisante se cache une réalité scientifique et industrielle bien plus complexe. Dans cet article, nous explorons les fondements de cette promesse, ainsi que les défis algorithmiques et industriels qui conditionnent encore sa concrétisation.

Introduction

Il est courant d'ouvrir un article sur le calcul quantique appliqué à la chimie et de tomber sur cette citation emblématique du physicien Richard Feynman : "*Nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical.*" L'une des interprétations étant : si l'on parvenait à contrôler et manipuler des états quantiques, comme l'ordinateur quantique promet de le faire, pourquoi ne pas s'en servir pour simuler directement d'autres systèmes quantiques, comme les molécules ? Or, les molécules constituent les briques élémentaires de la chimie, elle-même essentielle à toute industrie qui transforme la matière. Mieux comprendre et prédire leur comportement, c'est donc disposer d'un levier puissant pour concevoir de nouveaux médicaments, matériaux ou batteries. C'est cette perspective qui a rapidement fait de la chimie l'une des applications les plus prometteuses de l'ordinateur quantique, et qui, plus largement, nourrit l'espoir que la seconde révolution quantique puisse transformer en profondeur l'industrie chimique tout entière.

Pourtant, il suffit de poser une question simple à un spécialiste pour mesurer la distance qui sépare l'enthousiasme ambiant de la réalité du terrain. Imaginons qu'un ordinateur quantique tolérant aux fautes (Campbell *et al.*, 2017), doté de milliers de qubits logiques et largement supérieur aux machines actuelles, apparaisse demain. Peut-on alors garantir des avancées majeures pour l'industrie chimique ?

La réponse surprend souvent : on ne peut aujourd'hui pas le garantir.

Cette incertitude reflète moins les limites du calcul quantique que l'ampleur des questions encore ouvertes. Elle est aussi le signe que nous explorons un territoire scientifique largement inédit, dont le potentiel reste difficile à mesurer. Toutefois, cette promesse a parfois conduit à une lecture simplifiée de l'intuition de Feynman : puisqu'il existe une affinité conceptuelle entre les molécules et l'informatique quantique, il suffirait de construire un processeur quantique assez grand et fiable pour obtenir un avantage en simulation moléculaire, puis le voir se diffuser naturellement à l'industrie chimique.

Dans cet article, nous proposons de faire le point sur les obstacles logiciels et algorithmiques qu'il reste à franchir avant que la promesse quantique ne se traduise en impact industriel, sans pour autant perdre de vue les raisons d'être optimiste.

Simulation quantique d'état fondamental de molécules

La chimie quantique est née dans le sillage de la première révolution quantique, lorsque le formalisme de la mécanique quantique a permis de décrire les électrons dans les molécules. Son ambition consiste à comprendre et prédire les réactions chimiques à partir du calcul. En pratique, il s'agit de construire une surface

d'énergie potentielle du système moléculaire étudié : une carte qui associe à chaque arrangement des noyaux l'énergie de son état électronique le plus bas, appelé état fondamental. Cette carte permet ensuite de prédire, à partir des différences d'énergie entre réactifs, intermédiaires, états de transition et produits, quelles réactions chimiques sont possibles et à quelle vitesse elles sont susceptibles de se produire. Le calcul de l'état fondamental électronique concentre alors l'essentiel de la difficulté. Les électrons interagissent entre eux ; leurs mouvements ne peuvent pas être décrits comme s'ils étaient indépendants les uns des autres. C'est ce que l'on appelle la corrélation électronique. Or, numériquement, cette corrélation a un coût : ajouter un électron revient à multiplier le nombre de configurations électroniques à considérer, et donc l'effort de calcul nécessaire. C'est le mur exponentiel de la chimie quantique : "*Nature isn't classical, dammit*".

La chimie quantique s'est largement construite autour de cette difficulté : en développant un arsenal de méthodes qui capturent l'essentiel de la corrélation électronique sans traiter exactement tous les degrés de liberté quantique. À ces avancées algorithmiques se sont ajoutés les progrès des architectures de calcul classiques, des CPU aux GPU, qui ont augmenté la taille et la complexité des systèmes accessibles aux simulations de structure électronique, jusqu'à permettre aujourd'hui de nombreuses applications industrielles. Mais une question demeure : jusqu'où peut-on repousser, avec des approximations et des machines toujours plus puissantes, une difficulté qui vient de la structure même du problème quantique ?

C'est ici que l'ordinateur quantique amène une perspective nouvelle puisque les qubits peuvent encoder les configurations électroniques d'une molécule de manière exponentiellement plus compacte qu'avec des bits classiques : "*If you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical*".

Toutefois, représenter un problème plus efficacement ne signifie pas automatiquement le résoudre plus vite. Entre l'encodage et le résultat, il y a l'algorithme. Tout l'enjeu de la chimie quantique sur ordinateur quantique est précisément là : transformer la compatibilité naturelle entre qubits et configurations électroniques en véritable avantage de calcul.

La recherche logicielle dans ce domaine avance aujourd'hui sur trois fronts :

- La scalabilité algorithmique. Le premier enjeu est la manière dont le coût d'un calcul quantique augmente avec la taille de la molécule. Cette dépendance, appelée complexité algorithmique, a connu des progrès spectaculaires sur la décennie 2010-2020 : si mesure la taille du système étudié, certaines estimations sont passées d'une croissance en 2^n à une croissance proche de n^2 , simplement grâce à des améliorations algorithmiques théoriques (Whitfield *et al.*, 2011 ; Lee *et al.*, 2021).
- Les estimations de ressources. Le deuxième enjeu consiste à traduire ces coûts algorithmiques en ressources physiques concrètes : combien de qubits et combien d'opérations faudrait-il pour résoudre un problème chimique utile ? Là encore, les progrès

ont été considérables. Pour des systèmes typiques comme le centre actif FeMoCo de la nitrogénase, impliqué dans la fixation biologique de l'azote, les estimations de taille de circuit quantique ont diminué de plusieurs ordres de grandeur en une décennie, passant d'environ 1000 à 10 opérations grâce aux avancées algorithmiques (Low *et al.*, 2025).

- Les tests sur machines réelles. Avec les processeurs quantiques actuels, dits NISQ (*noisy intermediate-scale quantum*) (Preskill, 2018), on peut déjà implémenter et tester des algorithmes. Les progrès dépendent ici davantage du *hardware*, i.e. du nombre de qubits et de la fiabilité des opérations. Cependant, les méthodes algorithmiques progressent aussi, permettant d'exploiter toujours mieux les machines disponibles pour résoudre des problèmes d'intérêt en chimie (Traore *et al.*, 2024).

Depuis les premières estimations, les avancées algorithmiques ont fait chuter les ressources requises pour la simulation moléculaire sur ordinateur quantique. L'avantage pratique en chimie reste à établir (Lee *et al.*, 2023), mais la trajectoire parle d'elle-même. Reste une question essentielle : s'il était atteint, comment passer d'un calcul moléculaire plus efficace à un impact réel sur un procédé chimique ?

Du ground state au procédé : Un changement d'échelle vertigineux

Les démonstrations théoriques portent généralement sur la résolution d'un problème électronique bien défini en chimie quantique. En calculant précisément l'état fondamental (*ground state*) d'une configuration moléculaire figée, l'ordinateur quantique répond à une question purement physique.

Cependant, les problèmes de modélisation moléculaire industriels sont d'une autre nature. Dans le monde réel, une réaction chimique ne se résume pas à une structure statique. Elle implique une dynamique complexe des positions atomiques du système moléculaire, des fluctuations thermiques, des effets de solvant et des barrières d'énergie libre qu'il faut explorer dans le temps.

Pour combler ce fossé, plusieurs approches s'affrontent :

- d'un côté, certains envisagent une dynamique quantique complète (*full dynamics*), capable de simuler l'évolution temporelle exacte du système, mais au prix d'un coût algorithmique aujourd'hui prohibitif ;
- de l'autre, une voie plus pragmatique émerge : coupler la précision des données quantiques (*quantum data*) avec la puissance des modèles fondationnels (*foundation models*) et de la dynamique moléculaire (MD) classique (Plé *et al.*, 2025). Dans ce schéma, la machine quantique ne résoudrait pas tout le problème, mais servirait d'oracle (Ansari *et al.*, 2026) pour entraîner des potentiels réseaux de neurones hautement précis, capables ensuite de simuler des millions de pas de temps classiques.

Cette transition du microscopique au macroscopique repose, néanmoins, sur un grand nombre d'autres

hypothèses qu'il convient de questionner. Une décision industrielle mobilise en effet :

- des modèles simplifiés : pour concevoir un polymère ou un catalyseur, les ingénieurs utilisent des approximations phénoménologiques où la mécanique quantique pure n'intervient parfois que de façon indirecte ;
- des conditions expérimentales: la température, la pression, le pH ou la pureté des réactifs introduisent un bruit que le calcul idéal ne prend pas toujours en compte ;
- des phénomènes multi-échelles: le comportement d'un fluide dans un réacteur chimique dépend de la thermodynamique et de la mécanique des fluides (micro-, méso- et macro-échelle), et pas seulement de la structure électronique des molécules qui le constituent ;
- des contraintes économiques : le coût de calcul d'une simulation, qu'elle soit classique ou quantique, doit être amorti par le gain de performance ou le gain de temps (*time-to-market*) du produit final.

Il apparaît donc évident qu'un calcul plus précis n'est utile que s'il réduit une incertitude réellement limitante. Si le goulot d'étranglement d'un procédé industriel réside dans la diffusion de la matière au sein d'un catalyseur poreux plutôt que dans l'énergie de son état de transition, la précision quantique ultime devient superflue.

L'existence d'un avantage algorithmique ne garantit donc pas automatiquement un avantage industriel. L'ordinateur quantique ne remplacera pas les logiciels de simulation industrielle existants par magie. Son rôle sera plutôt celui d'un accélérateur intégré à des chaînes de calcul classiques (*workflows* hybrides), intervenant de manière chirurgicale là où la corrélation électronique classique échoue (comme pour les métaux de transition ou les états excités complexes), tandis que les supercalculateurs classiques continueraient de gérer le reste de la complexité systémique.

Conclusion

La proximité conceptuelle entre la chimie quantique et l'information quantique est profonde et solidement fondée. Bien que le débat public soit largement focalisé sur le matériel et la course aux qubits logiques, de telles avancées ne suffiront toutefois pas, à elles seules, à engendrer des applications industrielles majeures en chimie. Les défis se situent également au niveau algorithmique et dans l'intégration de ces technologies au sein de chaînes de calcul et de conception déjà très complexes. Dès lors, la question centrale n'est pas seulement de disposer d'ordinateurs quantiques plus puissants, mais de comprendre comment ces futurs outils pourront s'intégrer efficacement dans des *pipelines* industriels où la simulation moléculaire ne constitue qu'un maillon parmi d'autres. C'est à cette condition que la seconde révolution quantique pourra se traduire par un impact industriel tangible dans le domaine de la chimie.

Références

- CAMPBELL E. T., TERHAL B. M. & VUILLOT C. (2017), "Roads towards fault-tolerant universal quantum computation", *Nature*, 549(7671), pp. 172-179.
- WHITFIELD J. D., BIAMONTE J. & ASPURU-GUZI A. (2011), "Simulation of electronic structure Hamiltonians using quantum computers", *Molecular Physics*, 109(5), pp. 735-750.
- LEE J. *et al.* (2021), "Even more efficient quantum computations of chemistry through tensor hypercontraction", *PRX Quantum*, 2(3), 030305.
- LOW G. H. *et al.* (2025), "Fast quantum simulation of electronic structure by spectral amplification", *Physical Review X*, 15(4), 041016.
- PRESKILL J. (2018), "Quantum computing in the NISQ era and beyond", *Quantum*, 2, 79.
- TRAORE D. *et al.* (2024), "Shortcut to chemically accurate quantum computing via density-based basis-set correction", *Communications Chemistry*, 7(1), 269.
- LEE S. *et al.* (2023), "Evaluating the evidence for exponential quantum advantage in ground-state quantum chemistry", *Nature Communications*, 14, 1952.
- PLÉ T. *et al.* (2025), "A foundation model for accurate atomistic simulations in drug design", Preprint, ChemRxiv, DOI:10.26434/chemrxiv-2025-f1hgn-v4
- ANSARI N. *et al.* (2026), "The convergence frontier: Integrating machine learning and high-performance quantum computing for next-generation drug discovery", arXiv preprint arXiv:2603.17790