



HAL
open science

Des ordinateurs quantiques pour simuler la nature

Bruno Senjean, Marie Morelle, Simon Baert, Sebastien Damour

► **To cite this version:**

Bruno Senjean, Marie Morelle, Simon Baert, Sebastien Damour. Des ordinateurs quantiques pour simuler la nature. *Ebullition(s): le cahier illustré de la recherche - Ébullitions - Ébullition*, 2024, 1, <https://revue-ebullitions.fr/articles/des-ordinateurs-quantiques-pour-simuler-la-nature.10.59655/na52122995491> . hal-04947386

HAL Id: hal-04947386

<https://hal.science/hal-04947386v1>

Submitted on 14 Feb 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0 International License

DES ORDINATEURS QUANTIQUES POUR SIMULER LA NATURE

À l'**institut Charles Gerhardt de Montpellier**, au département de Chimie Physique Théorique et Méthodologie, Bruno Senjean et son équipe développent des **algorithmes sur ordinateurs quantiques** pour simuler les propriétés des molécules.

Texte: Bruno Senjean, ICGM (Institut Charles Gerhardt de Montpellier), Université de Montpellier, CNRS, ENSCM
Illustrations: Marie Morelle

mots-clés: ordinateur quantique, modélisation, physique théorique, propriétés physico-chimiques
keywords: quantum computer, modeling, theoretical physics, physical-chemical properties





-mm-

« UNE COMPRÉHENSION DÉTAILLÉE DE LA PHOTOSYNTHÈSE NOUS PERMETTRAIT DE DÉVELOPPER DES PANNEAUX PHOTOVOLTAÏQUES BIEN PLUS PERFORMANTS. »

COMPRENDRE LES PHÉNOMÈNES PHYSICO-CHIMIQUES PAR LE BIAIS DE SIMULATIONS

Durant les dernières dizaines d'années, nous avons vu notre technologie avancer à grands pas, avec le développement des cellules photovoltaïques, de machines d'imagerie médicale, de smartphones toujours plus performants, et bien d'autres innovations technologiques. Malgré tout, nous n'avons qu'une compréhension primaire de certains phénomènes et de la manière dont ils se produisent dans la nature. Cette dernière arrive toujours à nous surprendre... Par exemple, une compréhension détaillée de la photosynthèse (processus bioénergétique qui permet à des organismes de synthétiser de la matière organique en utilisant l'énergie lumineuse, l'eau et le dioxyde de carbone) nous servirait à développer des panneaux photovoltaïques bien plus performants. Savoir comment la bactérie *Clostridium pasteurianum* arrive à fixer le diazote de l'air à température et pression ambiantes serait une voie vers le remplacement du procédé industriel pour la production de fertilisants qui demande des dépenses énergétiques considérables (le procédé Haber-Bosch^a). Il est fréquent que les expériences ne suffisent pas à déterminer toutes les étapes très complexes des mécanismes réactionnels mis en jeu. Pouvoir simuler théoriquement ces réactions par le biais de calculs sur ordinateurs révèle les processus cruciaux impliqués dans ces mécanismes: c'est ce que s'efforcent de faire les chimistes théoriciens depuis de nombreuses années. Des modèles théoriques très simples peuvent suffire à comprendre le résultat d'expériences^b, comme des modèles d'électrons sans interactions, mais il arrive que certains problèmes soient trop complexes

^a – Le procédé Haber est un procédé chimique servant à la synthèse de l'ammoniac (NH₃) par hydrogénation du diazote (N₂) gazeux atmosphérique par le dihydrogène (H₂) gazeux en présence d'un catalyseur.

^b – Comme des modèles d'électrons sans interactions. Par exemple, une méthode très simple comme la méthode de Hückel permet d'expliquer la réaction de Diels-Alder.

pour être résolus par les méthodes actuelles, comme pour la *Clostridium pasteurianum* [7].

MODÉLISER LES MOLÉCULES... PAS SI FACILE QUE ÇA!

Pour comprendre les processus chimiques, il est nécessaire d'entrer dans le monde de l'infiniment petit. En effet, les propriétés physico-chimiques qui nous intéressent sont en réalité gouvernées par les interactions entre les électrons, ces particules chargées qui sont si petites qu'elles sont complètement invisibles à l'œil nu et qui tournent autour des noyaux des atomes, ces derniers formant la matière telle que nous la connaissons. L'épaisseur d'un simple cheveu peut contenir un million d'atomes! Mais plonger dans le monde de l'infiniment petit est loin d'être aisé. Il s'agit d'un monde régi par d'autres lois de la physique, des lois quantiques, plus déstabilisantes les unes que les autres. Une particule quantique aurait des pouvoirs dignes de ceux d'un superhéros! Elle pourrait traverser les murs (par effet tunnel), et être à plusieurs endroits à la fois (par superposition quantique), agissant comme une onde tant qu'on ne l'observe pas et redevenant particule quand on l'observe. C'est ce qu'on appelle la dualité onde-particule. Elle pourrait également influencer instantanément l'état d'une autre particule, même si celle-ci est infiniment éloignée (par intrication quantique). On dit alors que ces particules sont intriquées [4][5]. Nous et le monde macroscopique qui nous entoure n'échappons pas à ces lois de la mécanique quantique, cependant ces propriétés sont si instables qu'il faut être complètement isolés du monde extérieur pour les ressentir. Nous sommes si loin de cet isolement extrême que les effets quantiques sont tout simplement quasi instantanément réduits à néant à notre échelle. Ce monde est à la fois fascinant et bouleversant, si bien qu'un physicien renommé, Richard Feynman, a dit un jour « Si vous pensez comprendre la mécanique quantique, c'est que vous ne comprenez pas la mécanique quantique. »



Tout ceci ne facilite pas la tâche des chimistes théoriciens, qui s'acharnent encore aujourd'hui à résoudre l'équation fondamentale de la physique quantique, proposée en 1925 par Erwin Schrödinger (prix Nobel de physique en 1933) pour décrire l'évolution d'un système quantique. Résoudre cette équation pour n'importe quelle molécule nous donnerait toutes les réponses nécessaires à la compréhension des phénomènes qui nous intéressent. Fantastique, non? Cependant, ce n'est pas si simple, car cette équation décrit un problème de plusieurs particules en interaction impossible à résoudre à la main. L'utilisation des ordinateurs est alors indispensable, mais le problème est tellement complexe (sa complexité augmentant de manière exponentielle par rapport au nombre de particules) qu'il nécessite un temps de calcul et des quantités de mémoire gigantesques. Obtenir des résultats intéressants peut alors prendre plusieurs années!

LES ORDINATEURS QUANTIQUES À LA RESCOURSE

« La nature n'est pas classique [...], et si vous voulez faire une simulation de la nature, vous feriez mieux de la faire quantique, et bon sang c'est un problème merveilleux car ce n'est pas si facile. » Cette citation de Richard Feynman en 1982 laisse entendre une chose : les ordinateurs classiques, tels que nous les connaissons, ne peuvent pas efficacement modéliser la nature, car ils n'obéissent pas aux mêmes lois. Pour décrire efficacement les phénomènes physico-chimiques qui s'y produisent, il faut une machine régie par la même physique: la mécanique quantique. C'est la naissance des ordinateurs quantiques [1], et s'ils n'étaient au départ qu'un pur produit de l'imagination, ils existent à présent bel et bien! Ces derniers ne ressemblent en rien aux ordinateurs classiques: certains sont construits à base de circuits électro-

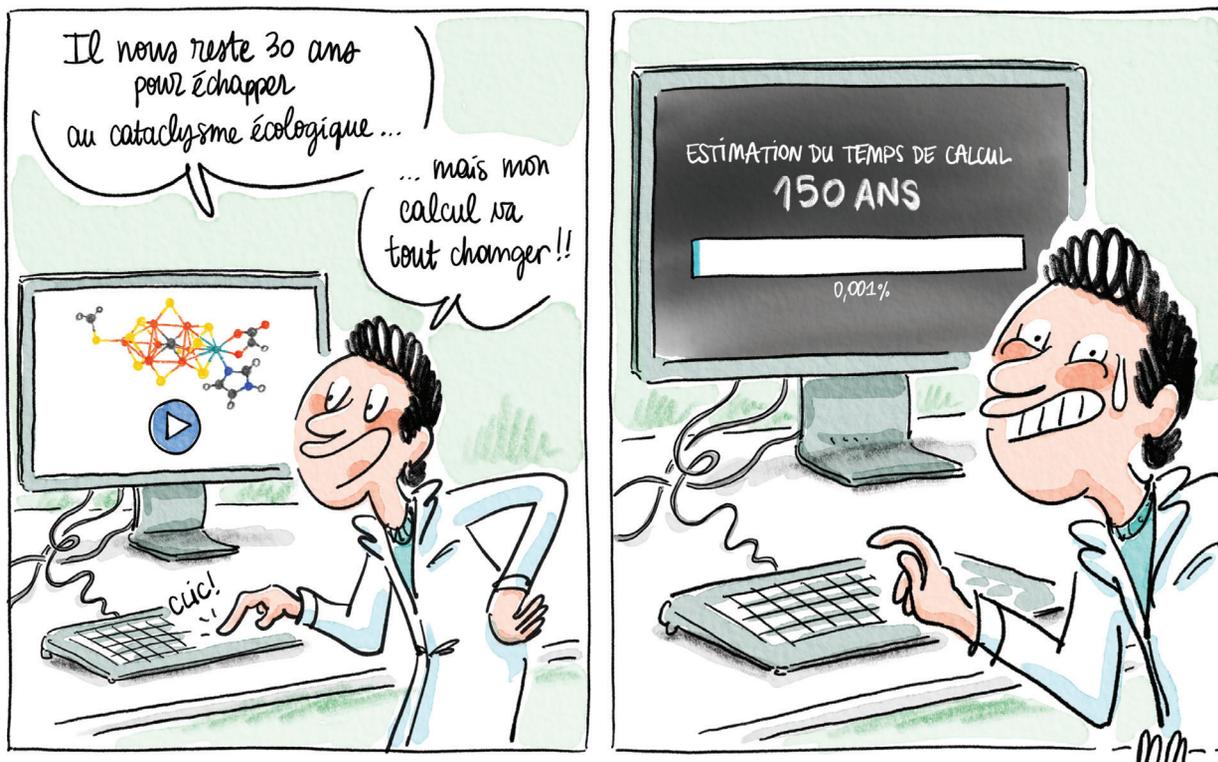
« DE TRÈS NOMBREUSES ENTREPRISES, START-UP, CHERCHEUSES ET CHERCHEURS TRAVAILLENT D'ARRACHE-PIED POUR DÉVELOPPER UN ORDINATEUR QUANTIQUE STABLE SUR UN TEMPS SUFFISAMMENT LONG AFIN QU'IL SOIT POSSIBLE DE MANIPULER L'INFORMATION QUANTIQUE À NOTRE GUISE, MAIS IL RESTE ENCORE UN TRÈS LONG CHEMIN À PARCOURIR. »

niques supraconducteurs^c fonctionnant à une température proche du zéro absolu^d, d'autres sont composés d'ions piégés par des champs électromagnétiques, et d'autres utilisent des photons (les particules composants la lumière), pour créer les superpositions d'états quantiques. Un ordinateur quantique prend tellement de place qu'il pourrait remplir tout l'espace de votre salle à manger ! C'est un peu comme si nous étions retournés dans les années quarante avec l'invention des premiers ordinateurs qui faisaient la taille d'un appartement. Et la taille n'est pas le seul problème : il est en effet important de se souvenir qu'un état quantique en superposition est très éphémère, très instable. Maintenir un tel état sur un ordinateur quantique est un véritable défi, nécessitant des technologies de pointe et des conditions expérimentales extrêmes comme atteindre une température proche du zéro absolu. De très nombreuses entreprises, start-up, chercheuses et chercheurs travaillent d'arrache-pied pour développer un ordinateur quantique stable sur un temps suffisamment long afin qu'il soit possible de manipuler l'information quantique à notre guise, mais il reste encore un très long chemin à parcourir.

Bruno Senjean et son équipe travaillent sur un défi plus théorique, qui consiste à faire le lien entre l'équation de Schrödinger et l'état quantique généré et manipulé par l'ordinateur quantique. Ils développent des algorithmes capables d'encoder et de résoudre cette équation sur les différentes machines quantiques, afin de simuler les propriétés chimiques des molécules présentes dans la nature [2][6]. Le jour où les ordinateurs quantiques surpasseront les capacités de calcul des ordinateurs classiques n'est pas encore venu, mais ils promettent de changer radicalement notre domaine de recherche pour la simulation de la matière, que ce soit en physique, chimie, ou biologie. Par leur puissance de calcul inégalée, les ordinateurs quantiques pourront effectuer des calculs de haute précision sur des systèmes de taille jusqu'alors inatteignable par les ordinateurs classiques, comme pour l'étude des complexes enzyme-substrat dans l'élaboration de nouveaux médicaments, ou le centre actif de la *Clostridium pasteurianum* pour l'agronomie, mais aussi dans bien d'autres domaines, comme la cryptographie et la cybersécurité pour renforcer la sécurité et améliorer les procédures de chiffrement des communications.

^c – La supraconductivité est un phénomène physique caractérisé par l'absence de résistance électrique et l'expulsion du champ magnétique (l'effet Meissner) à l'intérieur de certains matériaux, dits supraconducteurs, qui peuvent transporter de l'électricité sans perte d'énergie. Elle se manifeste à des températures proches du zéro absolu et s'explique grâce aux caractéristiques quantiques de la matière.

^d – Il s'agit de la température la plus basse qui puisse exister : -273.15°C.

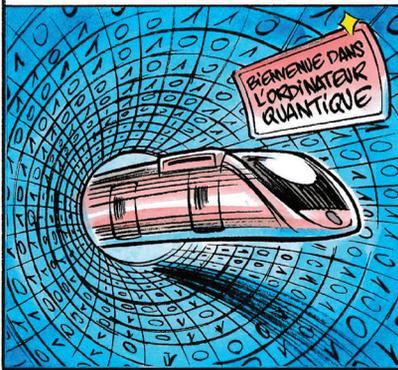


BIBLIOGRAPHIE - ARTICLE ET BANDE DESSINÉE

- [1] Feynman R. P. (1982), « Simulating physics with computers », *Int. J. Theor. Phys.*, 21, p. 467-488.
- [2] Yalouz S., Senjean B., Günther J., Buda F., O'Brien T. E., Visscher L. (2021), « A state-averaged orbital-optimized hybrid quantum-classical algorithm for a democratic description of ground and excited states », *Quantum Sci. Technol.*, 6, 024004.
- [3] O'Brien T. E., Senjean B., Sagastizabal R., Bonet-Monroig X., Dutkiewicz A., Buda F., DiCarlo L., Visscher L. (2019), « Calculating energy derivatives for quantum chemistry on a quantum computer », *npj Quantum Information*, 5 (1), 113.
- [4] Bobroff J. (2020), *La Quantique autrement : garanti sans équation !*, Paris, Flammarion.
- [5] Schafer L. (2020), *QUANTIX : La physique quantique et la relativité en BD*, Paris, Dunod Graphic.
- [6] Senjean B., Yalouz S., Saubanière M. (2023), « Toward density functional theory on quantum computers? », *SciPost Phys.*, 14, 055.
- [7] Reiher M., Wiebe N., Svore K. M., Wecker D., Troyer M. (2017), « Elucidating reaction mechanisms on quantum computers », *PNAS*, 114 (29), p. 7555-7560.

L'ordinateur quantique: la clé des problèmes complexes!

À L'HEURE ACTUELLE, NOUS N'AVONS QU'UNE COMPRÉHENSION PARTIELLE DE CERTAINS PHÉNOMÈNES CHIMIQUES ET DE LEUR FONCTIONNEMENT DANS LA NATURE.

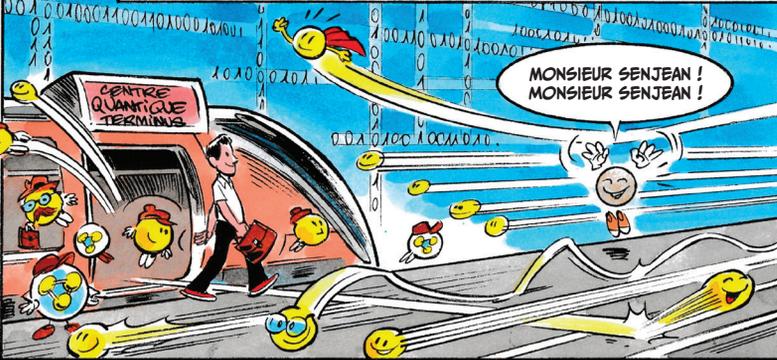


OR, LES PROPRIÉTÉS DES ESPÈCES CHIMIQUES SONT GOUVERNÉES PAR LES INTERACTIONS ENTRE DES PARTICULES CHARGÉES ET INVISIBLES À L'ŒIL NU FORMANT LA MATIÈRE TELLE QUE NOUS LA CONNAISSONS.



CE MONDE INFINIMENT PETIT EST RÉGI PAR LES LOIS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE, ET NE PEUT ÊTRE FIDÈLEMENT SIMULÉ QU'AVEC UNE MACHINE RÉGIE PAR CES MÊMES LOIS : UN ORDINATEUR QUANTIQUE (1).

BRUNO SENJEAN, CHIMISTE THÉORICIEN À L'INSTITUT CHARLES GERHARDT DE MONTPELLIER, DÉVELOPPE DES ALGORITHMES SUR ORDINATEURS QUANTIQUES POUR SIMULER CES PROPRIÉTÉS (2) (3).



MERCI DE ME RECEVOIR!



LES LOIS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE SONT PLUS DÉSTABILISANTES LES UNES QUE LES AUTRES. LES PARTICULES QUANTIQUES AGISSENT À LA FOIS COMME UNE ONDE ET COMME UNE PARTICULE. L'ÉTAT D'UNE PARTICULE PEUT AUSSI INFLUENCER INSTANTANÉMENT L'ÉTAT D'UNE AUTRE PARTICULE MÊME INFINIMENT ÉLOIGNÉE (4) (5).



ELLE PEUT AUSSI ÊTRE À PLUSIEURS ENDROITS À LA FOIS.



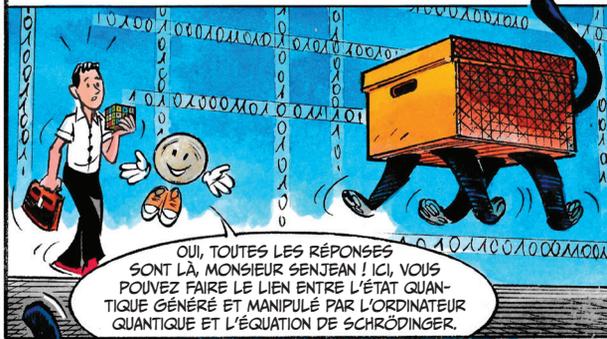
OU DANS PLUSIEURS ÉTATS EN MÊME TEMPS. PRENEZ CE CUBE POUR LEQUEL IL EXISTE 43 MILLIARDS DE MILLIARDS DE COMBINAISONS DIFFÉRENTES. LES EXPLORER UNE À UNE AVEC UN CUBE CLASSIQUE NOUS PRENDRAIT UN TEMPS FOU!



C'EST UN MONDE COMPLEXE RÉGI PAR L'ÉQUATION FONDAMENTALE DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE, DITE DE SCHRÖDINGER, QUI S'APPLIQUE À N'IMPORTE QUELLE MOLÉCULE. ELLE EST LA CLÉ DES RÉPONSES À TOUTES LES QUESTIONS QUE NOUS NOUS POSONS.

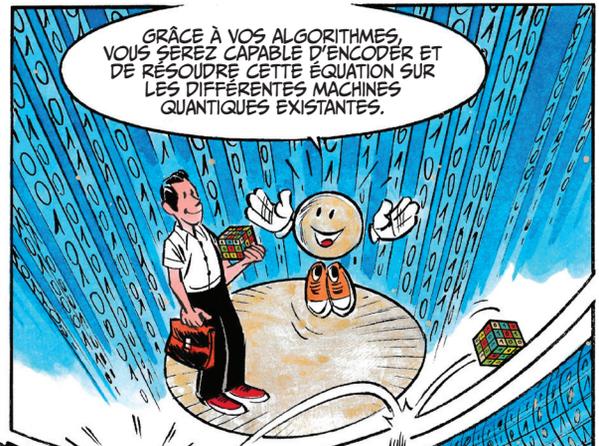


L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER DÉCRIT UN PROBLÈME DONT LA COMPLEXITÉ AUGMENTE EXPONENTIELLEMENT PAR RAPPORT AU NOMBRE DE PARTICULES PRISES EN COMPTE. LE RECOURS À L'ORDINATEUR QUANTIQUE EST AINSI PRIMORDIAL TANT ELLE DEMANDE DES QUANTITÉS GIANTESQUES DE CALCULS QUE NE PEUVENT OFFRIR LES ORDINATEURS CLASSIQUES.



OUI, TOUTES LES RÉPONSES SONT LÀ, MONSIEUR SENJEAN ! ICI, VOUS POUVEZ FAIRE LE LIEN ENTRE L'ÉTAT QUANTIQUE GÉNÉRÉ ET MANIPULÉ PAR L'ORDINATEUR QUANTIQUE ET L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER.

GRÂCE À VOS ALGORITHMES, VOUS SÉREZ CAPABLE D'ENCODER ET DE RÉSOUDRE CETTE ÉQUATION SUR LES DIFFÉRENTES MACHINES QUANTIQUES EXISTANTES.



CETTE DRÔLE DE BOÎTE, ON NE L'A PAS DÉJÀ VUE ?!!



SI, C'EST UN BUG DU SYSTÈME. ÇA ARRIVE À CHAQUE FOIS QU'ON PARLE DE SCHRÖDINGER...

QU'EST-CE QUE C'ÉTAIT ?

LA DÉCOHÉRENCE QUANTIQUE. VOYEZ-VOUS, LES ÉTATS QUANTIQUES SONT INSTABLES ET S'EFFONDRENT SOUS L'EFFET DES INTERACTIONS AVEC LEUR ENVIRONNEMENT, LORSQUE NOUS NE SOMMES PAS TOTALEMENT ISOLÉS DU MONDE EXTÉRIEUR.



VOILÀ, NOUS SOMMES ARRIVÉS !



VOICI LES RÉSULTATS DE NOS SIMULATIONS. NOUS ESTIMONS QU'A TERME, NOS ALGORITHMES POURRONT PERMETTRE D'EFFECTUER DES CALCULS DE HAUTE PRÉCISION ET PERMETTRE DES AVANCÉES MONUMENTALES DANS DE NOMBREUX DOMAINES (6).



PAR EXEMPLE, COMPRENDRE COMMENT LA BACTÉRIE CLOSTRIDIUM PASTEURIANUM FIXE LE DIAZOTE DE L'AIR POUR PRODUIRE DE L'AMMONIAC ET, PAR MIMÉTISME, FAIRE ÉVOLUER LE PROCÉDÉ INDUSTRIEL DE PRODUCTION DE FERTILISANTS QUI EXIGE D'ABONDANTES DÉPENSES ÉNERGÉTIQUES (7).

OU ENCORE, DÉCRYPTER LE PHÉNOMÈNE DE LA PHOTOSYNTÈSE.

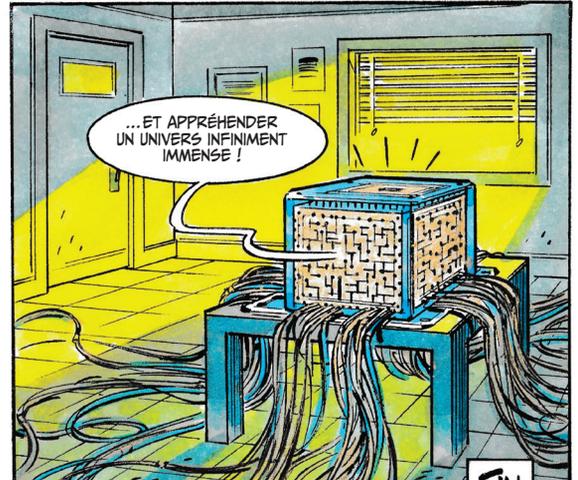


COMPRENDRE COMMENT LES PLANTES ARRIVENT À CONVERTIR L'ÉNERGIE SOLAIRE EN ÉNERGIE CHIMIQUE PERMETTRAIT DE BOOSTER LES PERFORMANCES DES PANNEAUX PHOTOVOLTAÏQUES.

CEPENDANT, POUR COMPRENDRE CES PROCESSUS, IL ME FALLAIT ENTRER DANS LE MONDE DE L'INFINIMENT PETIT...



...ET APPRÉHENDER UN UNIVERS INFINIMENT IMMENSE !



FIN