ALTERNATOR
Misliti znanost.

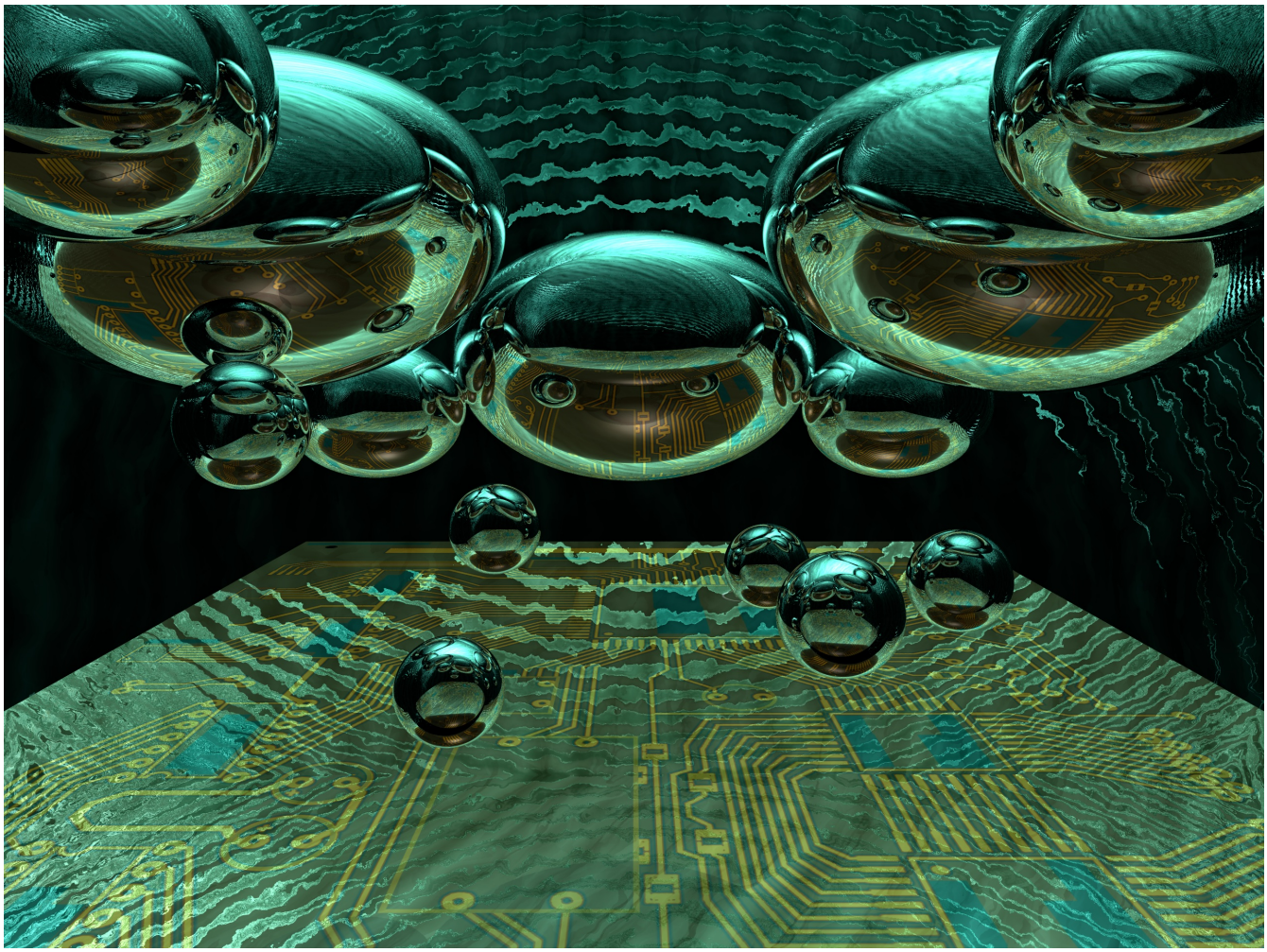
Praktična kvantna moč: narava kot svoj lastni računalnik

29. 5. 2025

Številka: 10/2025

Avtor:

- Jaka Vodeb



Umetniška predstavitev kvantne simulacije neravnovesne dinamike mehurčkov v lažnem vakuumu. Avtor: Zlatko Papić, Univerza Leeds

Naravni kvantni procesi so temelj razumevanja fizikalnega sveta, saj opisujejo vedenje snovi in energije na atomski in subatomski ravni. Klasična fizika za pojasnjevanje pojavov, kot so delovanje beljakovin, kvantna prevodnost materialov, fotosinteza in celo kemijske vezi, pogosto ne zadošča. Procesi, kot so kvantno tuneliranje (https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_tunnelling) , superpozicija (https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_superposition) in kvantna prepletenost (https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_entanglement) , delcem omogočajo, da vplivajo drug na drugega na načine, ki so intuitivno težko dojemljivi, za naravne pojave pa so ključni. Kvantna mehanika nam torej ne omogoča le razumevanja sveta, temveč nam odpira tudi vrata k novim tehnologijam.

Eno izmed najbolj obetavnih področij uporabe je kvantno računalništvo, ki kvantne zakonitosti izkorišča za reševanje problemov, ki so za klasične računalnike pretežki. Velike tehnološke korporacije, kot so Google, IBM in Microsoft, intenzivno vlagajo v razvoj kvantnih naprav. Leta 2019 je Google objavil preboj (https://doi.org/10.1038/s41586-019-1666-5) , imenovan kvantna prednost – njihov kvantni računalnik je izvedel račun, ki bi ga najhitrejši klasični računalniki reševali več tisoč let. Vendar pa je bil ta dosežek kasneje postavljen pod vprašaj, saj so tekmeci, kot je na primer IBM, pokazali, da

je mogoče isti izračun tudi na klasičnih računalnikih izvesti veliko hitreje, kot je sprva trdil Google. Kljub temu je bil ta eksperiment pomemben mejnik pri razvoju kvantnih tehnologij in je spodbudil nadaljnje raziskave na tem področju.

Bolj koristen način uporabe kvantnega računalništva pa je kvantna simulacija (https://doi.org/10.1038/nphys2259) , ki omogoča preučevanje kompleksnih fizikalnih sistemov s pomočjo kvantnih naprav. Znanstvenikom je s kvantnimi simulatorji že uspelo poglobiti razumevanje nekaterih temeljnih fizikalnih pojavov, kot je modeliranje umetnih kristalov v dveh dimenzijah. Čeprav še ni dokazano, da klasični računalniki ne bi mogli doseči enakih rezultatov, pa je zelo verjetno, da bi bil tak podvig izjemno zahteven in skoraj neizvedljiv.

Kubiti zamenjajo bite

Kvantno računalništvo predstavlja revolucionarno spremembo v načinu obdelave informacij. Medtem ko klasični računalniki temeljijo na bitih, ki lahko zavzamejo vrednost 0 ali 1, kvantni računalniki uporabljajo kubite, ki lahko obstajajo v stanju, ki je kombinacija (superpozicija) obeh vrednosti in tako posledično vsebuje več informacij. Poleg tega kvantni računalniki izkoriščajo še en pomemben pojav kvantne mehanike – prepletenost, ki omogoča soodvisnost več kubitov na načine, ki jih klasični sistemi ne morejo doseči. Te lastnosti teoretično omogočajo, da lahko kvantni računalniki rešujejo določene probleme bistveno hitreje kot klasični, saj lahko bolj učinkovito preiščejo prostor vseh možnih rešitev. Vendar pa kvantni računalniki kljub svojemu potencialu še niso popolni. Njihova največja prednost je hkrati tudi njihova največja omejitev – delujejo po kvantnih zakonih, kar pomeni, da so občutljivi na šum in napake. Današnji kvantni računalniki še niso dovolj stabilni, da bi brez napak izvajali dolgotrajne izračune; preden bodo lahko široko uporabni, bo treba še močno izboljšati stabilnost in zmanjšati napake. Poleg tega kvantno računalništvo ni univerzalno boljše od klasičnega niti ni primerno za vse vrste nalog. Kvantni računalniki lahko učinkovito rešujejo le probleme, za katere obstajajo posebej zasnovani kvantni algoritmi. Programiranje kvantnih računalnikov zahteva specializirano znanje kvantne mehanike in kvantnih algoritmov, kar je za povprečnega uporabnika preveč kompleksno. To pomeni, da kvantni računalnik nikoli ne bo nadomestil vsakodnevnega osebnega računalnika ali pametnega telefona, saj je njegova prednost omejena predvsem na specifične načine in področja uporabe.

Največji potencial (https://doi.org/10.3986/alternator.2024.19) kvantnega računalništva se pokaže pri problemih, kjer klasične metode odpovedo, na primer pri faktorizaciji velikih števil (kot jo omogoča Shorov algoritem (https://en.wikipedia.org/wiki/Shor%27s_algorithm) , kar pomembno vpliva na šifriranje (https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_cryptography) podatkov), optimizacijskih problemih (https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_optimization_algorithms) , kjer kvantni algoritmi (https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_algorithm) bistveno pohitrijo iskanje optimalnih rešitev, ter pri simulaciji kvantnih sistemov, kjer klasični računalniki zaradi eksponentno rastočih zahtev pogosto niso učinkoviti.

Prav kvantna simulacija je ena najpomembnejših uporab kvantnih računalnikov, saj omogoča raziskovanje pojavov v kemiji (kemijske vezi in kompleksne reakcije), znanosti o materialih in fiziki osnovnih delcev, kjer klasični računalniki ne morejo učinkovito modelirati procesov, kot so kvantni fazni prehodi, močno korelirani materiali ali molekularna dinamika. Kljub trenutnim omejitvam kvantni simulatorji že danes odpirajo nova raziskovalna obzorja in predstavljajo pomemben korak naprej pri razumevanju narave.

Eden od trenutno najbolj obetavnih načinov uporabe je v neravnovesnih kvantnih pojavih, procesih, pri katerih kvantni sistemi niso v termodinamičnem ravnovesju in se skozi čas razvijajo v smeri novih kvantnih stanj. Ti pojavi vključujejo kvantne fazne prehode (https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_phase_transition) , mnogodelčne kvantne brazgotine (https://doi.org/10.1038/s41567-021-01230-2) , razpad lažnega vakuuma (https://en.wikipedia.org/wiki/False_vacuum) , mnogodelčno lokalizacijo (https://en.wikipedia.org/wiki/Many-body_localization) in dinamično preurejanje domen (https://doi.org/10.1038/s41586-024-08353-5) v kvantnih materialih, ki jih klasične metode težko opišejo. Njihovo razumevanje je ključno za razvoj kvantnih tehnologij in materialov prihodnosti.

V tem prispevku bomo raziskali, zakaj so kvantni simulatorji tako pomembni, kako delujejo in kakšno vlogo imajo pri preučevanju neravnovesnih kvantnih pojavov, ki ostajajo ena največjih ugank sodobne fizike.

Kaj je kvantna simulacija?

Predstavljajmo si, da znanstveniki odkrijejo novo proteinsko molekulo, ki bi lahko vodila do zdravljenja bolezni, za katero še ni zdravila. Raziskovalci želijo ugotoviti, kako se ta molekula vede v telesu, kako se veže na druge snovi in kako učinkovita bi lahko bila kot zdravilo. Da bi to razumeli, imajo tri možnosti: eksperiment v laboratoriju, simulacijo na klasičnem računalniku ali simulacijo na kvantnem računalniku.

Pri prvi možnost, torej laboratorijskem eksperimentu, poskušajo znanstveniki s pomočjo kemikalij in celičnih modelov ugotoviti, kako se nova molekula vede v telesu. Takšen pristop je temelj znanstvenega dela in daje najbolj neposredne rezultate, vendar je počasen, drag in pogosto omejen, saj zahteva dolgotrajne postopke sinteze molekul, testiranja in analize. Če molekula ne deluje po pričakovanjih, je treba začeti znova, kar lahko traja več let. Prav tako smo omejeni pri poustvarjanju realističnih sistemov, saj dajejo eksperimenti *in vitro* bistveno drugačne rezultate kot *in vivo*.

Druga možnost je, da za simulacijo molekulskega vedenja uporabimo klasične računalnike. Ti so močno orodje, ki lahko modelira osnovne kemijske interakcije, vendar pa ima pomembno omejitev. Kvantni svet je izjemno zapleten, in čeprav je

mogoče danes na superračunalnikih simulirati tudi do tisoč med seboj neodvisnih atomov, je simulacija nekaj deset koreliranih atomov praktično nemogoča. Že eno samo molekulo vode je na klasičnem računalniku težko v celoti zajeti, kar pomeni, da smo od simulacije tekoče vode, ki je sestavljena iz milijard takšnih molekul, ki konstantno trkajo ena ob drugo, še zelo oddaljeni. Zato se v ta namen uporabljajo različno natančni približki, ki na superračunalnikih omogočajo približne simulacije več sto ali tisoč, v klasičnih (nekvantnih) približkih pa tudi več milijonov atomov.

Tu vstopi kvantna simulacija. Kvantni računalniki delujejo po istih zakonih kot naravni kvantni sistemi, kar pomeni, da lahko naravne kvantne procese modelirajo veliko bolj učinkovito. Namesto da bi poskušali vsak elektron in njegovo gibanje izračunati s klasičnimi algoritmi, kvantni računalniki naravno sledijo kvantnim zakonitostim in tako natančneje in hitreje simulirajo celoten sistem.

Klasični računalniki se namreč pri simulaciji kvantnih sistemov soočajo z eksponentno rastjo računskih zahtev. Na primer: za popoln kvantni opis sistema s 300 elektroni, kjer upoštevamo samo njihove spine (magnetne momente), bi morali za vsako možno konfiguracijo zapisati amplitudo verjetnosti. Ker ima vsak spin dve možnosti (»gor« ali »dol«), je skupno število konfiguracij 2^{300}, kar znaša približno 2×10^{90} različnih kvantnih stanj. Za vsako stanje potrebujemo 16 bajtov (8 bajtov za realni in 8 za imaginarni del), kar skupaj pomeni približno 3×10^{91} bajtov spomina. To pomeni, da bi potrebovali milijardokrat več bajtov, kot je atomov v celotnem vesolju (ocenjeno na približno 10^{82} atomov). Takšna količina podatkov je za klasične računalnike popolnoma nepredstavljiva in neizvedljiva. Kvantni računalniki pa lahko s pomočjo rotacij spinov naravno ustvarijo popoln kvantni opis sistema znotraj enega samega kvantnega stanja, kar jim omogoča bistveno učinkovitejšo simulacijo.

Naravni kvantni procesi so ključni za razumevanje delovanja našega sveta, saj vključujejo širok spekter pojavov – od osnovnih gradnikov vesolja, kot jih opisuje kvantna teorija polja, do kolektivnega vedenja snovi, kot so fazni prehodi, superprevodnost in kvantni magnetizem. Kvantni računalniki omogočajo simulacijo zapletenih kemijskih reakcij, molekularne dinamike in procesov prenosa energije v bioloških sistemih, kot je fotosinteza, kjer se kvantni učinki kažejo v izjemni učinkovitosti pri prenosu energije.

To pomeni, da lahko kvantni računalniki raziščejo vedenje proteinskih molekul, fizikalnih sistemov, materialov in celo temeljnih kvantnih pojavov na način, ki je s klasičnimi metodami praktično nemogoč. Prav ta sposobnost sledenja naravnim kvantnim zakonitostim je tista, ki kvantnim računalnikom omogoča, da v določenih primerih bistveno presegajo zmogljivosti klasičnega računalništva.

Kvantne platforme za simulacijo

Trenutno obstaja več eksperimentalnih platform za kvantno simulacijo, na primer superprevodni kubiti (https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_sc_qubits) , ujeti ioni (https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_trapped_ions) , Rydbergovi atomi (https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_neutral_atoms) , ultrahladni atomi (https://medium.com/colibritd-quantum/quantum-computation-using-ultracold-atoms-in-optical-lattices-b66f30a1392f) in kvantni žarilniki (https://docs.dwavequantum.com/en/latest/quantum_research/quantum_annealing_intro.html) . Vsaka od teh platform ima svoje prednosti in specifične načine uporabe, v nadaljevanju pa se bomo osredotočili na ultrahladne atome in kvantne žarilnike, saj sta to trenutno eni izmed najbolj obetavnih metod za raziskovanje kvantnih pojavov.

Pri ultrahladnih atomih si predstavljajmo, da v sobo z veliko hitrostjo vržemo žogico. Ta se divje odbija od sten, da jo komaj uspemo spremljati z očmi. Če bi na stene sobe postavili ventilatorje, opremljene s kamerami, ki bi vsakič, ko bi zaznali gibanje žogice v svojo smer, pihnili vanjo ravno prav močno, bi se žogica postopoma upočasnila. Po določenem času bi se umirila v središču sobe, kjer bi jo lahko podrobno opazovali. Na podoben način deluje lasersko hlajenje atomov – s pomočjo usklajenih laserskih žarkov jih postopoma upočasnimo in zadržimo na mestu, kar omogoča njihovo natančno preučevanje.

Ko so atomi dovolj ohlajeni, jih znanstveniki ujamejo v optične mreže, ki delujejo kot predalnik za jajca, v katerem ima vsako jajce svoje mesto. Če bi jajca poskušali zložiti brez predhodnega ohlajanja, bi se premetavala in lomila, s hlajenjem pa postanejo stabilna in jih lahko lepo razporedimo v natančne vzorce. Tako lahko v optične mreže razporedimo tudi atome, ki jih uporabimo za simulacijo kvantnih pojavov, kot so kvantni magnetizem, superprevodnost in fazni prehodi.

Atome v mreži lahko z natančnim vzbujanjem z lasersko svetlobo postavimo v točno določena kvantna stanja. Ko nas zanima, v katerem stanju so, posvetimo nanje še en laserski sunek, ki povzroči fluorescenco – atomi oddajo svetlobo, ki jo nato zajamemo s posebno kamero. Na tak način lahko neposredno opazujemo kvantne lastnosti atomov in pridobivamo nova znanja o temeljnih zakonitostih narave. V Sloveniji že imamo laboratorij (https://doi.org/10.3986/alternator.2020.09) , ki se ukvarja s tovrstnimi sistemi.

Pri kvantnih žarilnikih si predstavljajmo slepega planinca, ki se znajde v neznani gorski pokrajini. Njegova naloga je, da najde najnižjo dolino, saj se tam nahaja njegov dom – ta dolina predstavlja rešitev optimizacijskega problema. Če bi se tega lotil s klasičnimi metodami, bi lahko le tipal okoli sebe in ocenil, ali se teren spušča ali dviga. Počasi bi se spuščal v upanju, da najde najnižjo točko, vendar bi obstajala velika verjetnost, da bi se ustavil v dolini, ki ne bi bila najnižja.

Kvantni žarilniki pa problem rešujejo popolnoma drugače. Namesto planinca si zamislimo, da vse gore najprej izravnamo v ravno planoto, na kateri leži ogromno jezero. Višina gladine vode v tej analogiji predstavlja verjetnost, da bomo želene koordinate izmerili pod njo. Ker je voda enakomerno porazdeljena po celotnem jezeru, je na začetku verjetnost, da bomo

določeno koordinato GPS izmerili v njem, enaka po celotni površini jezera. Nato začnemo pokrajino postopoma preoblikovati nazaj v njeno prvotno obliko. V jezeru sedaj naenkrat vzniknejo gore in poniknejo doline, voda pa se stalno prilagaja njihovemu nastajanju. Kot si lahko predstavljamo, bo največ vode steklo v najnižjo dolino okoli planinčevega doma, kar predstavlja rešitev optimizacijskega problema. Posledično bomo želene koordinate GPS z največjo verjetnostjo pomerili ravno v najnižji dolini, pri čemer pa obstaja tudi možnost, da bo voda ostala ujeta v kaki drugi dolini.

Pomembna prednost kvantnega žarilnika je, da počasnejše spreminjanje pokrajine omogoča vodi (oziroma kvantnemu sistemu) več časa, da se prerazporedi in skoncentrira v najnižji dolini. To pomeni, da lahko kvantni žarilniki pri optimizacijskih problemih pogosto najdejo boljše rešitve kot klasični računalniki, ki se lahko ujamejo v lokalne minimume.

Kvantni žarilniki so bili primarno razviti za reševanje optimizacijskih problemov, vendar jih je mogoče uporabiti tudi za kvantne simulacije. Njihova sposobnost modeliranja poljubnih gorskih pokrajin (interakcij med kvantnimi delci) je uporabna pri modeliranju kvantnih pojavov, kot so vedenje elektronov v materialih, simulacije kvantnih faznih prehodov in razumevanje kompleksnih interakcij v kvantnih sistemih.

Kvantni simulatorji kot orodje za raziskovanje kompleksnih kvantnih pojavov

Kvantni simulatorji omogočajo vpogled v najzahtevnejše fizikalne pojave, ki jih klasični računalniki zaradi eksponentne rasti računskih zahtev ne morejo učinkovito obravnavati. Ključni primeri raziskav na področju kvantne fizike – kot so preučevanje neravnovesnih kvantnih sistemov, vedenje močno koreliranih materialov in raziskovanje kvantnih faznih prehodov – so v ospredju tudi v dveh nedavnih študijah, objavljenih v revijah *Nature Physics* (https://doi.org/10.1038/s41567-024-02765-w) in *Nature Communications* (https://doi.org/10.1038/s41467-024-49179-z) .

V prvi študiji smo z uporabo kvantnega žarilnika D-Wave, ki vključuje 5564 kvantnih bitov, preučevali razpad lažnega vakuuma. Razpad lažnega vakuuma pomeni prehod iz metastabilnega kvantnega stanja v stabilno stanje (pravi vakuum), kar je ključno za razumevanje kvantnih faznih prehodov in kozmičnih procesov. Eksperimentalno smo izvedli kvantno simulacijo, kjer smo začetno stanje nastavili v lažnem vakuumu, nato pa smo opazovali njegovo razpadanje v pravi vakuum z nastajanjem kvantiziranih mehurčkov. Ti mehurčki se tvorijo v ozadju lažnega vakuuma, pri čemer je njihova velikost določena z ravnovesjem med energijskim dobitkom (sorazmernim z volumnom mehurčka) in energijsko izgubo (sorazmerno s površino mehurčka). Raziskava je razkrila da so interakcije med mehurčki ključne za njihovo rast, kar smo podkrepili z močnimi teoretičnimi argumenti. Rezultati raziskave so poglobili razumevanje kvantne dinamike pri razpadu lažnega vakuuma.

V drugi študiji smo s pomočjo kvantnega žarilnika preučevali neravnovesno kvantno dinamiko domenskih struktur v dvodimenzionalnem elektronskem kristalu. Raziskovali smo preurejanje kvantnih domen v sistemu, kjer kvantne fluktuacije povzročajo prehode med različnimi domenskimi konfiguracijami. Kvantni žarilnik nam je omogočil simulacijo dinamike nastajanja, preurejanja in stabilnosti kvantnih domen. Ugotovili smo, da kvantni žarilnik omogoča preučevanje preureditve domen v pogojih, v katerih klasični računalniki ne zadoščajo. Eksperimentalni rezultati so se dobro ujemali s teoretičnimi modeli, kar potrjuje uporabnost kvantnih žarilnikov za raziskovanje dinamičnih faznih prehodov v kvantnih sistemih.

Ti študiji dokazujeta, da kvantni simulatorji niso le teoretična obljuba, temveč v kvantni fiziki že danes prinašajo pomembne rezultate. S svojo sposobnostjo neposrednega modeliranja kvantnih pojavov omogočajo raziskovanje neravnovesnih stanj in dinamičnih faznih prehodov, česar klasični računalniki zaradi računske zahtevnosti preprosto ne zmorejo. Prav zato so kvantni simulatorji že danes nepogrešljivo orodje za razvoj novih tehnologij in razumevanje temeljnih fizikalnih procesov.