

IBM přichází s novátorským přístupem využití kvantového počítače k chemickým simulacím

Yorktown Heights, N.Y. - 02 X 2017: Vědci z IBM vyvinuli nový způsob simulace molekul na kvantovém počítači, který by jednoho dne mohl přinést revoluci v chemii a nauce o materiálech. V rámci náročné simulace molekulární struktury hydridu berylnatého (BeH_2) – největší molekuly, která kdy byla simulována na kvantovém počítači – úspěšně použili sedmiqubitový kvantový procesor. Výsledky ukazují, že v krátkodobém horizontu by kvantové systémy mohly přinést hlubší porozumění složitých chemických reakcí a jejich následné praktické využití.

Vědecký tým dokázal implementovat nový algoritmus, který lze efektivně aplikovat na množství kvantových operací nezbytných pro tuto simulaci. S využitím šesti qubitů sedmiqubitového procesoru byli schopni změřit nejnižší stav energie u hydridu berylnatého. Tato hodnota je přitom klíčová pro pochopení chemických reakcí.

Ačkoliv je tento model BeH_2 možné simulovat i na klasickém počítači, má metoda vyvinutá společností IBM daleko vyšší potenciál využití i při zkoumání větších molekul, na než klasické výpočetní metody nestačí. Výsledky současného výzkumu byly publikovány v prestižním časopise Nature mezi hlavními články.

Vývojáři a uživatelé IBM Q experience mají nyní přístup k Jupyter Notebooku, který je určený pro kvantovou chemii. Díky němu si mohou vyzkoušet schopnosti kvantových počítačů v oblasti simulování molekul. Open source Jupyter Notebook pro kvantovou chemii (volně dostupný přes QISKit github repo) umožňuje uživatelům otestovat metodu simulace základního stavu u malých molekul, jako jsou například vodík nebo hydrid lithný.

Projekt IBM Q experience spustila společnost IBM před více než rokem, když do cloudu umístila volně přístupný výkonný pětiqubitový kvantový počítač. Nedávno přidala beta přístup k vylepšené verzi se 16qubitovým procesorem.

„Očekáváme, že schopnosti systémů IBM Q v následujících několika letech předčí to, co umí dnešní běžné počítače. Věříme, že se stanou nástrojem odborníků v oblastech jako je chemie, biologie, zdravotnictví nebo materiálová věda,“ řekl Dario Gil, viceprezident pro umělou inteligenci a IBM Q v IBM Research.

„Tým IBM provedl úžasnou sérii rekordních pokusů, když se jim podařilo na kvantovém počítači simulovat největší molekulu. Díky tomu jsme na cestě k oborovému převratu. Ten nastane tehdy, když budou kvantové počítače schopny provádět numericky přesné chemické simulace – tedy pravděpodobně až budeme mít k dispozici opravu chyb a velký počet logických qubitů. Výsledkem takto přesných předpovědí bude schopnost molekulového modelování, které nevyžaduje kalibraci pomocí pokusu. To by mohlo přinést objev nových malomolekulárních léčiv nebo organických materiálů,“ prohlásil profesor chemie a chemické biologie na Harvardově univerzitě Alán Aspuru-Guzik. “

Informace o kontaktu

Vladislav Doktor

IBM Central External Communications Manager vladislavdoktor@sk.ibm.com

