



הדמיה באמצעות מחשב קוונטי. איור: יבמ

בשלב חלוצי חשוב של טכנולוגיה חדשנית, מדענים השתמשו במחשב קוונטי לשם חישוב האנרגיה המדויקת של מימן מולקולארי. גישה חלוצית זו להדמיות מולקולאריות תוכל להיות בעלת השלכות עמוקות לא רק עבור כימיה קוונטית, אלא גם עבור מגוון תחומים מדעיים, החל מהצפנה (קריפטוגרפיה) ועד מדעי-החומרים. "אחת מהבעיות הרציניות ביותר העומדות בפני כימאים תיאורטיים הינה כיצד לקבל הדמיות מדויקות של מערכות כימיות", אומר המדען Guzik-Aspuru Alán, פרופסור לכימיה וביולוגיה כימית באוניברסיטת הרווארד. "זו הפעם הראשונה שמחשב קוונטי משמש לקבלת חישובים מדויקים אלו."

בכתב-העת המדעי Chemistry Nature, הינו פרי שיתוף פעולה בין צוות של כימאים תיאורטיים מאוניברסיטת הרווארד וקבוצת פיסיקאים ניסיוניים מאוניברסיטת קווינסלנד אשר באוסטרליה. הצוות בהרווארד הוביל את התכנון הניסיוני וביצע חישובים מרכזיים, בעוד ששותפיהם מאוסטרליה בנו את המחשב הפיסיקלי וערכו בפועל את הניסויים. "אנו היינו אנשי התוכנה", אומר החוקר הראשי מהרווארד, "ושותפינו היו אנשי החומרה."

שמחשבי-על מתקדמים מסוגלים לבצע חישובים מקורבים של מערכות מולקולאריות פשוטות יחסית, הגדלת נפח המערכת הנבחנת גורמת להגדלה מעריכית (אקספוננציאלית) בזמן החישוב. חישוב קוונטי הינו יעיל בזכות יכולתו לפתור סוגים מסוימים של בעיות שהינן בלתי-פתירות ע"י מחשבים רגילים. במקום להשתמש בסיביות (ספרות בינאריות, bits binary) המתויגות כ"אפס" ו"אחת" לשם הצפנת מידע, כפי שמתרחש במחשבים רגילים, חישוב קוונטי מאחסן מידע בצורה של קיוביט המסוגל לייצג "אפס" ו"אחת" בו-זמנית (סיבית קוונטית, qubit), משמש כיחידת מידה למידע קוונטי, וגם לתיאור אלמנט אחסון המידע הקטן ביותר במחשב קוונטי. זהו האנלוג הקוונטי של הביט בתורת המידע הקלאסית. במחשב קוונטי, קיוביט הוא מערכת קוונטית בעלת 2 ממדים). כאשר מחשב קוונטי פועל, הוא לוקח בחשבון את כל הפתרונות האפשריים של הבעיה הנבחנת באמצעות סידור בו-זמני של הקיוביטים שלו בכל הצירופים הקיימים של "אפסים" ו"אחדות". מאחר ורצף יחיד של קיוביט מסוגל לייצג מספרים שונים רבים, מחשב קוונטי יבצע הרבה פחות חישובים ממחשב רגיל בפתרון בעיות מסוימות. לאחר שהמחשב מסיים את עבודתו, מדידת הקיוביטים שלו מספקת את הפתרון. רגיל מוגבלת, אם אתה מדמה מערכת המכילה יותר מארבעה או חמישה אטומים בלבד – לדוגמא, תגובה כימית, או אפילו פרודה מורכבת רק במעט – הבעיה הופכת למורכבת יותר ויותר במהירות, "אומר אחד מהחוקרים. "חישובים מקורבים של מערכות כאלו הם המיטב שכימאים מסוגלים להשיג היום."

קבוצת המחקר התמודדה עם סוגיה זו באמצעות רעיון מושגי אלגנטי – "אם הדמיה של מערכת קוונטית באמצעות מחשב רגיל הינה מורכבת מדי", אומר החוקר הראשי, "מדוע לא לדמות מערכות קוונטיות באמצעות מערכת קוונטית אחרת?"

גישה זו תוכל, בתיאוריה, להוביל לחישובים מדויקים ביותר בעודה משתמשת רק במקצת מהמשאבים של מחשבים רגילים.

בעוד שמספר מערכות פיסיקליות אחרות יכולות לשמש כליבת המחשב, המדענים השותפים באוסטרליה

השתמשו במידע המוצפן בשני פוטונים בכדי לבצע את ההדמיות שלהם עבור פרודת מימן. כל רמת אנרגיה שחושבה הייתה התוצאה של עשרים מדידות קוונטיות שכאלו, תוך קבלת מדד מדויק ביותר של כל אחד מהמצבים הגיאומטריים האפשריים של מימן מולקולארי.

"גישת חישוב זו מייצגת דרך חדשה לחלוטין לקבלת פתרונות מדויקים לשלל בעיות אשר נפתרות היום ברמה מקורבת בלבד", אומר החוקר הראשי. בסופו של דבר, אותו המחשב הקוונטי המסוגל להעביר צפנים באינטרנט יוכל לשמש גם לחישוב המבנה הנמוך ביותר באנרגיה של פרודות מורכבות כמו כולסטרול.

הידיעה מהאוניברסיטה

{loadposition content-related}