



Der Blick ins Ungewisse

Quantensimulation

Indem sie die Rechenkraft der Natur anzapfen, sollen Quantensimulatoren ungelöste Geheimnisse der Physik und Chemie lüften. Doch dafür muss man ihnen erst einmal beibringen, nach menschlichen Regeln zu spielen

VON FELIX KNOKE

Computermodelle und Simulationen bestimmen unser Bild von der Welt. Doch nicht erst bei der Erforschung neuer Materialien, exotischer Materiezustände und den Spielregeln des Universums geraten die besten Supercomputer an ihre Grenzen: Schon die Berechnung einfacher Moleküle und ihrer Eigenschaften sprengt die verfügbaren Rechen- und Speicherkapazitäten. Der Grund ist die Quantennatur der Materie: Die kann nur eine Quantenmechanik auf atomarem Niveau korrekt beschreiben. Dort verhalten sich Partikel als Quantensystem, dessen Teile mit ihren Zuständen und Wechselwirkungen gleichzeitig zu berücksichtigen sind. Das führt mit zunehmender Systemgröße zu exponentiell mehr Rechen- und Speicherbedarf im Rahmen einer klassischen Simulation. Mit vereinfachten An-

nahmen und groben Modellen haben Physik, Chemie und Biologie in den letzten Jahren zwar große Fortschritte gemacht. Doch zur Erforschung exotischer Materiezustände, für Hochtemperatur-Supraleiter, die Berechnung komplexer biochemischer Moleküle oder für Durchbrüche in der Grundlagenforschung reicht das nicht. Dabei sollen Quantensimulatoren weiterhelfen – nach der Devise: Quantenprobleme mit Quantenmethoden lösen.

Die Idee dazu hatte der US-Physiker Richard Feynman bereits 1981 in einem Vortrag am MIT ausgebreitet. Er skizzierte einen neuen Typ Computer, der sich der Natur als Rechenressource bediente: „Die Natur ist nicht klassisch, verdammt nochmal“, rief Feynman seinem Publikum zu. „Und wer die Natur simulieren will, sollte das besser quantenmechanisch tun. Und,

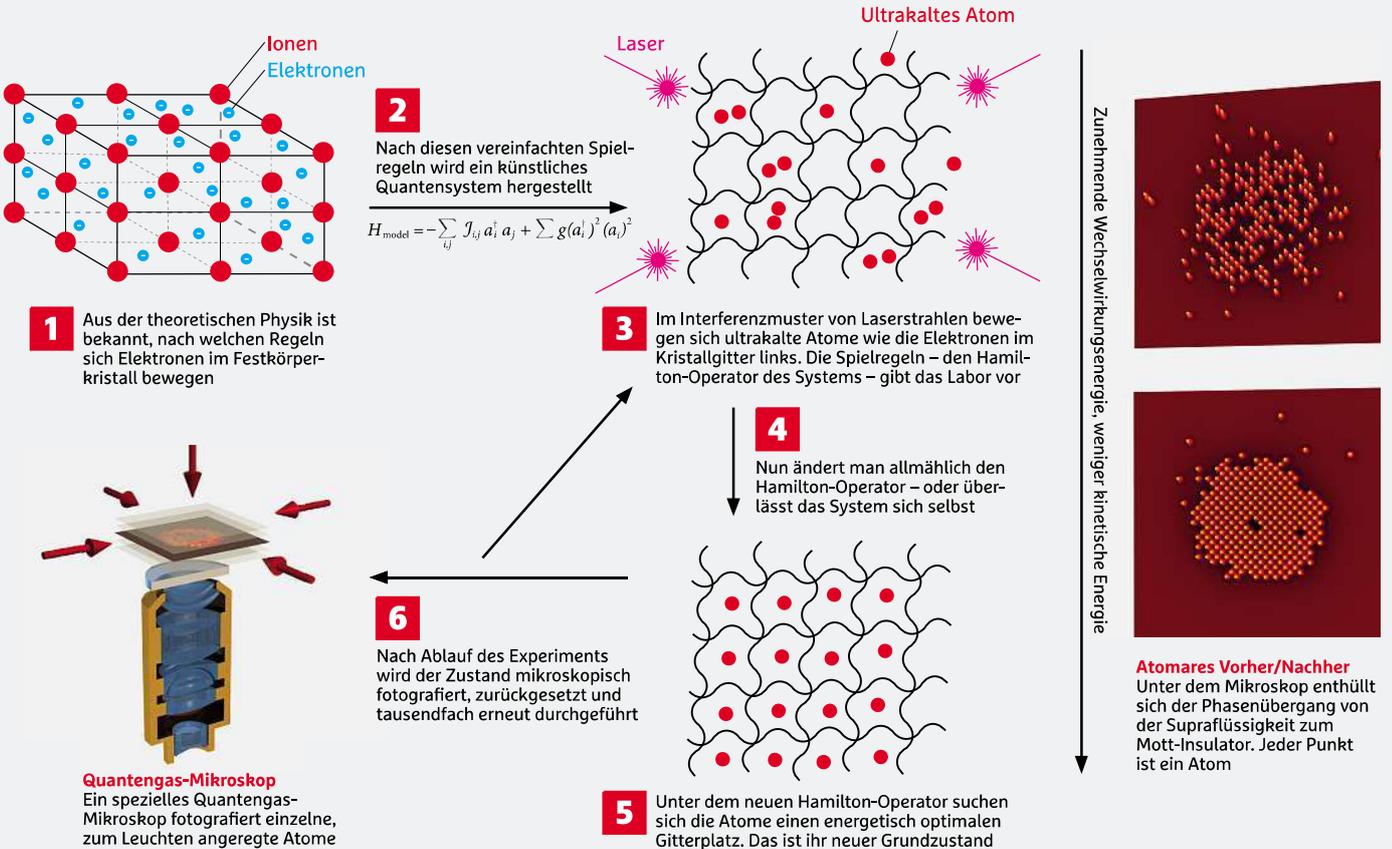
meine Güte, ist das ein wunderbares Problem, denn es scheint nicht ganz einfach zu sein.“ Feynman behielt Recht. Erst seit wenigen Jahren kann die Forschung Quantenzustände so zuverlässig erzeugen und kontrollieren, dass man mit ihnen rechnen, messen, kommunizieren und andere Quantensysteme verstehen kann.

Ein wunderbares Problem

„Es gibt grundsätzlich zwei Ansätze, um Quantensysteme quantenmechanisch zu simulieren“, sagt Monika Aidelsburger, Professorin für Künstliche Quantenmaterie an der Universität München. „Beim *digitalen Quantensimulator* benutzt man einen universellen Quantencomputer, um das quantenmechanische Problem Schritt für Schritt durch die Anwendung von Quantengattern zu lösen.“ Solange es ge-

Gefangen im Laserkristall

Ein vielversprechender Ansatz für einen analogen Quantensimulator sind optische Gitter, in denen sich ultrakalte Atome genau wie Elektronen im Kristallgitter eines Festkörpers bewegen. Ein Quantengas-Mikroskop zeichnet diese Bewegung auf



nügend fehlerkorrigierte Qubits gibt, könnten mit diesem Ansatz beliebige Quantensysteme simuliert werden. Jedoch bestimmen Anzahl und Qualität der Qubits und Gatteroperationen die Komplexität der simulierten Modelle. Da es an beidem mangelt, sind die digitalen Ansätze den klassischen derzeit kaum überlegen.

Einen Quantenvorteil bieten heute dagegen schon *analoge Quantensimulatoren*. Sie ahmen ein Quantensystem durch ein anderes, besser beherrschbares nach: „Wir simulieren beispielsweise Festkörpermodelle, indem wir deren quantenmechanische Eigenschaften auf ein künstliches Quantensystem übertragen und dann dessen Entwicklung beobachten“, sagt Monika Aidelsburger. Mit diesem Ansatz können heute bereits Tausende Quantenteilchen simuliert werden. Allerdings ist der Ansatz nicht universell: „Er funktioniert nur dann, wenn sich das Problem auch gut auf das Modell übertragen lässt.“

Beide Ansätze stehen noch am Anfang ihrer Entwicklung, so Aidelsburger. Deswegen läuft auch noch die Suche nach der geeigneten technischen Umsetzung, der sogenannten *Plattform*. „Analoge Quantensimulationen werden auch mit Ionen oder supraleitenden Qubits durchgeführt und digitale Ansätze mit elektrisch neutralen Atomen in optischen Gittern.“

Komplexität aus einfachen Regeln

Auch wenn sich ihr Lösungsprinzip unterscheidet, gehen beide Simulationsansätze von derselben Idee aus: Die Komplexität eines Quantensystems entspringt dem Zusammenspiel vieler, für sich genommen exakt beschreibbarer Interaktionen und Veränderungen einzelner Teilchen. Die Regeln dieses Zusammenspiels können als sogenannter *Hamilton-Operator* formalisiert und verallgemeinert werden. „Er ist der Regelsatz, nach denen sich einzelne Teilchen in einem Quantensystem bewe-



„Im analogen Quantensimulator simulieren wir Hunderte bis 1.000 Teilchen.“

Monika Aidelsburger
Professorin für Künstliche Quantenmaterie, LMU München

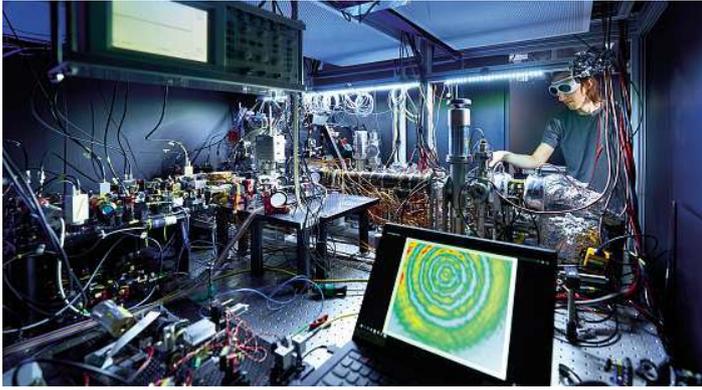


FOTO: MCGST/JAN GREUNE

Ungeheurer Aufwand
Dieser analoge Quantensimulator füllt mit seinen komplexen Laser-Aufbauten auf optischen Tischen ein ganzes Labor

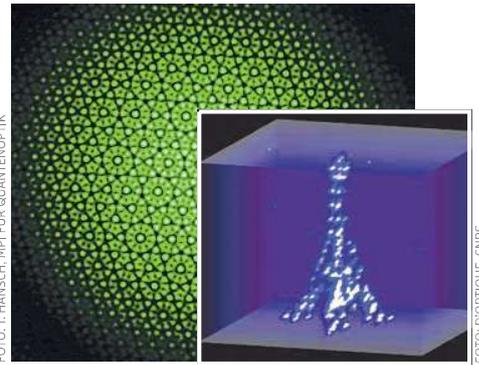


FOTO: T. HÄNSCH, MPI FÜR QUANTENOPTIK

FOTO: D'OPTIQUE CNRS, LABORATOIRE CHARLES FABRY

Konstruktive Interferenzen
Mit Laserlicht lassen sich komplexe Potenziallandschaften konstruieren

gen“, erklärt Immanuel Bloch, Direktor am Max-Planck-Institut für Quantenoptik und Professor an der Universität München.

Weil eine korrekte Wiedergabe der Realität aber auch einen ausgewachsenen Quantensimulator überfordern würde, beschränkt man den Hamilton-Operator auf die relevanten Teilchen und Freiheitsgrade. Für die Simulation eines Festkörpers behilft man sich dabei zum Beispiel des *Hubbard-Modells*, welches das quantenmechanische Innenleben eines Festkörpers auf die Bewegung von Elektronen in einem starren Gitter vereinfacht. Dieser *Hubbard-Hamiltonian* ist zwar eine kurze Gleichung, aber noch immer ein knackiges Problem: „Sie passt in eine halbe Zeile, aber ein klassischer Computer reicht nicht aus, um daraus das kollektive Verhalten vieler Teilchen zu berechnen.“

Käfig aus Licht

Digitale Simulationen am Quantencomputer lösen das Problem, indem sie das untersuchte System durch Qubits darstellen und es gemäß den Regeln des Hamilton-Operators nach und nach verändern. „Indem man den Hamilton-Operator in elementare Gatter-Operationen herunterbricht, kann man die zeitliche Entwicklung eines Systems nachbilden.“ Auch äußere Einflüsse wie Magnetfelder oder Kälte können so einfach als gezielte Manipulation des Qubit-Quantensystems über logische Operationen hinzugefügt werden. Der Quantenvorteil entsteht dadurch, dass alle Veränderungen gleichzeitig für das gesamte Quantensystem und alle seine überlagerten Zustände wirken. Das Dickicht aus Abhängigkeiten und Wechselwirkungen zwischen den Teilchen löst sich in der *Quantenparallelität* auf.

Beim analogen Quantensimulator dagegen stellt man ein *künstliches Quantensystem* her, das denselben Regeln folgt wie



FOTO: JAN GREUNE/MPI FÜR QUANTENOPTIK

„Wir können Materiezustände simulieren, die es in der Realität nicht gibt.“

Immanuel Bloch

Direktor am Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Professor an der LMU München

das untersuchte System – allerdings in vieltausendfacher Vergrößerung und sehr verlangsamt. Einmal präpariert, kann entweder die Entwicklung dieses Systems beobachtet werden oder wie es etwa auf Fehlstellen reagiert. Oder man verändert über die Simulationsbedingungen den Hamilton-Operator, dem das künstliche System gehorcht, und beobachtet, wie es darauf reagiert. Aus der Beobachtung wird dann auf die Realität verallgemeinert.

Einen besonders anschaulichen Ansatz dieser Art der Simulation hat der Quantenforscher Bloch mitentwickelt: „Wir ahnen mit *ultrakalten Atomen*, die in einem *optischen Gitter* aus Laserlicht gefangen sind, die Bewegung von Elektronen im Kristallgitter eines Festkörpers nach.“ Durch Änderung am Lichtgitter kann zum Beispiel der Hamilton-Operator verändert werden. „Oder wir schalten von außen künstliche Magnetfelder hinzu, die hundertmal stärker sind als alles, was wir in der Realität herstellen könnten.“ Die Messung erfolgt

über vieltausendfache Mikroskopaufnahmen, die – statistisch gemittelt – ein Bild der sich in dem Gittermuster bewegenden Atome ergeben, von dem man auf die Bewegungen von Elektronen im Kristallgitter schließen kann. Der Aufwand dafür ist enorm: Analoge Quantensimulatoren füllen Laborräume. Die hochempfindlichen Quantensysteme aus einzelnen, miteinander wechselwirkenden Atomen müssen bis knapp über den absoluten Nullpunkt gekühlt werden. Allein zu deren Beobachtung mussten Wissenschaftler ein neuartiges Quantengas-Mikroskop entwickeln.

Verwischene Grenzen

Die Simulation der quantenmechanischen Vorgänge in Festkörpern und die Vorhersage der Eigenschaften neuartiger Materiezustände liegt mit Quantensimulatoren in greifbarer Nähe. Das könnte auch die Suche nach einem Hochtemperatur-Supraleiter beschleunigen und wichtige Fragen der Grundlagenforschung beantworten. Bis die Wissenschaftler mit diesen Methoden komplexe Quantendynamiken und chemische Reaktionen simulieren können, werden Jahre vergehen – dafür müssen die Methoden noch flexibler und programmierbarer werden. Sollte das gelingen, könnten sie bei der gezielten Entwicklung neuer Materialien oder komplexer Moleküle helfen – das könnte auch die Forschung an Arzneimitteln erleichtern.

Alternativ eignen sich kleinere Quantensimulatoren als Beschleuniger für klassische Simulatoren. Sie könnten auch als Quantencomputer light zur Lösung von Optimierungsaufgaben zum Einsatz kommen. So sind etwa bestimmte Graphenprobleme rein klassisch kaum lösbar. Damit hätten Quantensimulatoren nicht nur einen sofortigen praktischen Nutzen, sondern auch ein Geschäftsmodell.

redaktion@chip.de