

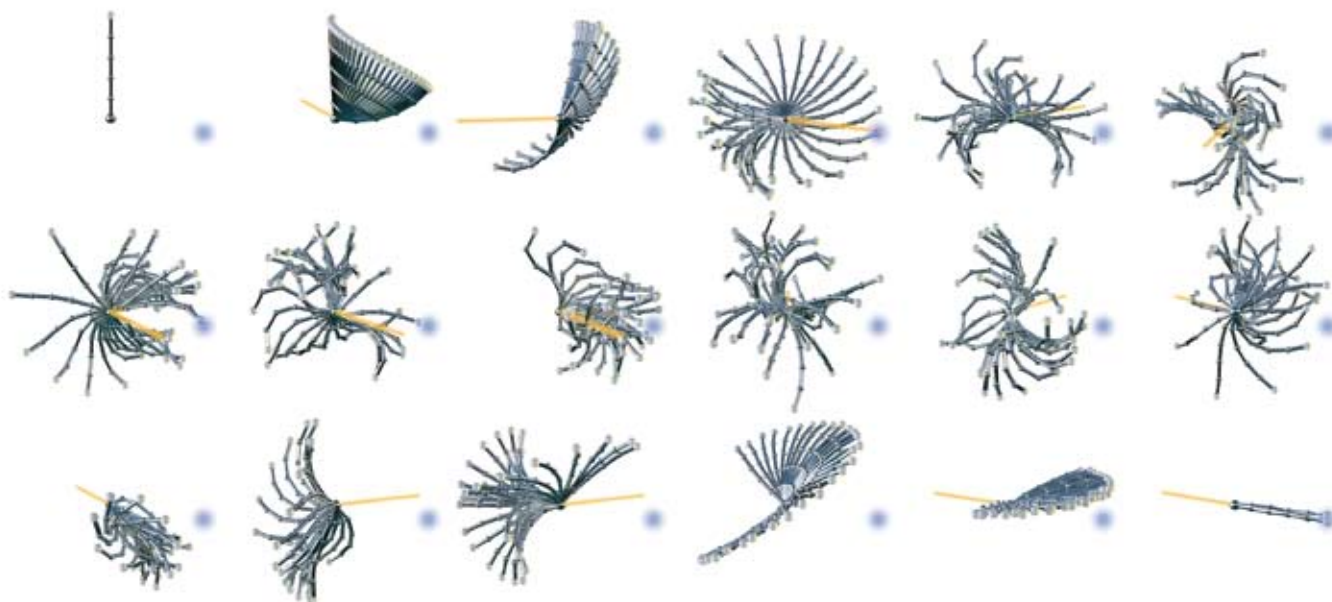
Unter dem Einfluss von magnetischen Impulsen verhalten sich bestimmte Quanten – Kernspins genannt – wie kleine Stäbchen, die sich gleichmäßig ausrichten lassen. Steffen Glaser und sein Team nutzen solche Impulse für einen Quantencomputer

Link

www.org.chemie.tu-muenchen.de/glaser

Quanten als Computer

Professor Steffen Glaser und sein Team können Atome so manipulieren, dass sie nach ihrer Pfeife tanzen. Zusammen mit Harvard-Professoren und Siemens-Forschern beweisen sie die Schlagkraft ihrer Methode: Sie bauen den ersten neuronalen Quantencomputer



Wie bringe ich mit elektromagnetischen Steuerimpulsen Quantenbits vom Zustand links oben in den rechts unten? Die mathematische Kontrolltheorie kann helfen: Mit ihr lassen sich komplizierte Zwischenschritte ermitteln, die das Problem lösen. Die Quantenbits sind hier die kleinen Armsegmente, die elektromagnetischen Felder werden durch die orangefarbene Linie angezeigt

Wer in der Wissenschaft Erfolg haben will, muss bereit sein, über sein eigenes Fachgebiet hinauszublicken, andere Disziplinen zu entdecken und Querverbindungen zu suchen. Steffen Glaser tut das mit großer Begeisterung. An der TUM hat er eine Professur für organische Chemie inne, obwohl er eigentlich Physik studiert hat. „Aber von Anfang an war ich neugierig auf die Schnittbereiche zwischen den Fächern“, sagt er. So galt sein Interesse zunächst vor allem der Biologie. Die Arbeit mit organischen Substanzen führte ihn dann zur Chemie, wo er sich intensiv mit den Methoden der Strukturanalyse von Biomolekülen mittels Kernspinresonanz (NMR, nach der englischen Bezeichnung „nuclear magnetic resonance“) beschäftigte.

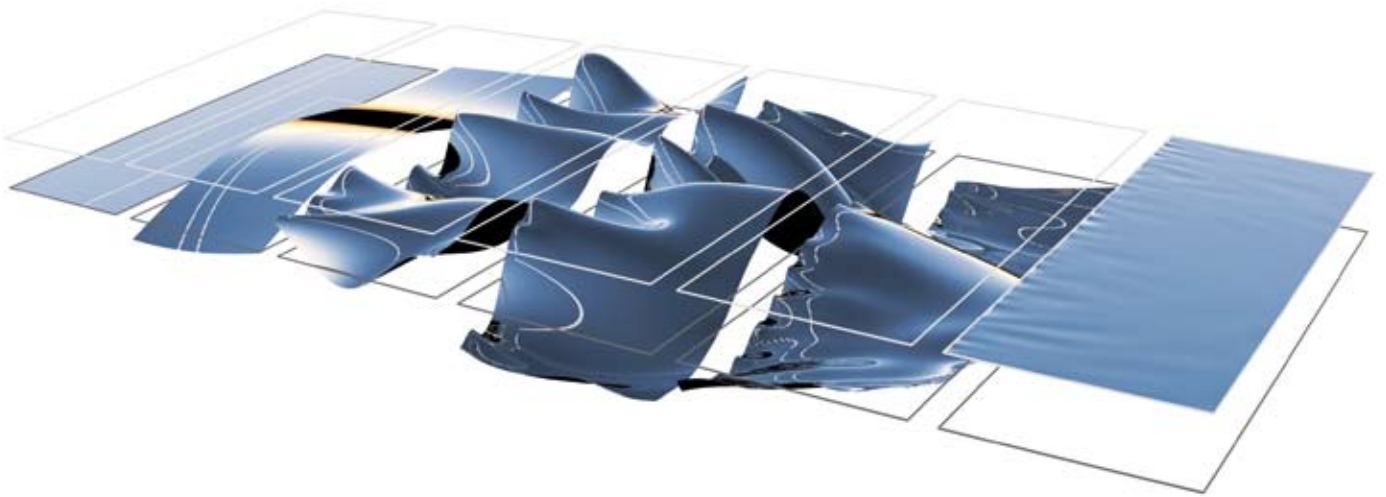
Das Prinzip dieses Verfahrens funktioniert ähnlich wie in der Kernspintomographie, die in der Medizin Bilder aus dem Inneren des Körpers liefert: Man bringt die Probe in ein starkes Magnetfeld, in dem sich ihre Atomkerne aufgrund ihrer Eigendrehung – ihres „Spins“ – und ihres magnetischen Moments entlang der Feldlinien ausrichten. Durch geeignete Hochfrequenzimpulse stößt man dann die Atomkerne an, sie beginnen wie Kreisel um die Magnetfeldlinien zu rotieren und senden dabei ihrerseits Strahlung aus, die man registrieren und auswerten kann.

Der Trick bei der Sache ist nun, dass jeder Atomkern im Molekül bei diesem „Tanz“ Signale einer ganz charakteristischen Frequenz abstrahlt, die von der unmittelbaren chemischen Umgebung beeinflusst wird. So kann man die einzelnen Atomkerne voneinander unterscheiden und Rückschlüsse auf die Struktur des Moleküls ziehen.

Können Quanten Informationen transportieren?

Steffen Glaser interessiert sich vor allem für die Methodik dieses Verfahrens; er erforscht, wie man dessen Effizienz steigern oder sogar ausreizen kann. Hier kamen ihm seine physikalischen Kenntnisse zugute, denn „um die Informationen aus den Molekülen herauskitzeln zu können, muss man die Quantenmechanik wirklich verstehen und anwenden.“ Aber wenn man das kann, dann gelingt es auch, Atomkerne so zu manipulieren, dass man mit ihnen rechnen kann. Denn in der Quanten-Informationsverarbeitung geht es ebenfalls um die Ausrichtung von Atomkernen in einem Magnetfeld. So lag es für Glaser nahe, sich auch mit dem Thema Quantencomputer zu befassen.

Auf diesem ruhen große Hoffnungen der Computertechniker. Mit seiner Hilfe hofft man, Rechenaufgaben lösen zu können, für die heutige Computer nicht gut geeignet



Hier der gleiche Vorgang in einer anderen graphischen Darstellung: Durch eine Abfolge von Steuerimpulsen wird der Zustand links oben in den rechts unten überführt. Die Welligkeit der dazwischen liegenden Flächen zeigt an, wie gut der Zielzustand schon erreicht ist. Erst im letzten Schritt glättet sich die Fläche plötzlich und zeigt so an, dass der erwünschte Zustand erreicht ist

sind, etwa die Zerlegung großer Zahlen in ihre Primfaktoren oder die schnelle Mustererkennung. Dabei macht man sich eine besondere Eigenschaft von Quantensystemen zunutze, die für „normale“ Objekte in unserem Alltag nicht gilt: Sie befinden sich in der Regel nicht in einem eindeutigen Zustand, sondern in einer Überlagerung aller möglichen Zustände gleichzeitig.

Information ist bekanntlich aus Bits zusammengesetzt, mit denen herkömmliche Computer rechnen. Dort kann ein Bit den Wert 0 oder 1 haben, und es wird repräsentiert durch den Ladungszustand eines Schaltelements. Ähnliche Strukturen findet man in der Quantenmechanik. Dort gibt es ebenfalls Zustände, die 0 oder 1 entsprechen, etwa die Ausrichtung eines kreiselnden Teilchens, also seinen Spin. So liegt es nahe, diese Ähnlichkeit auszunutzen, um einen Computer zu bauen. Beispielsweise kann man Spin nach oben 1, Spin nach unten 0 nennen. Für die Bits der Quantenwelt hat sich auch schon ein Name eingebürgert: „Qubit“. Wegen der Überlagerung der Zustände kann nun ein Qubit gleichzeitig 0 und 1 sein.

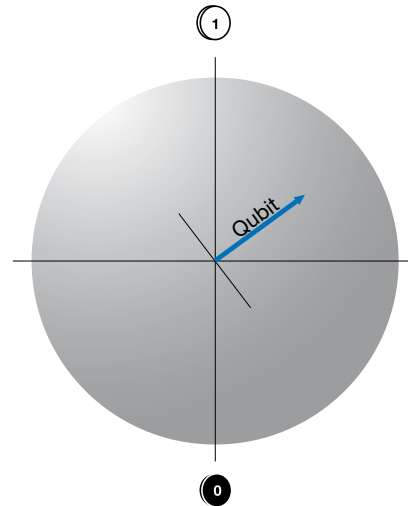
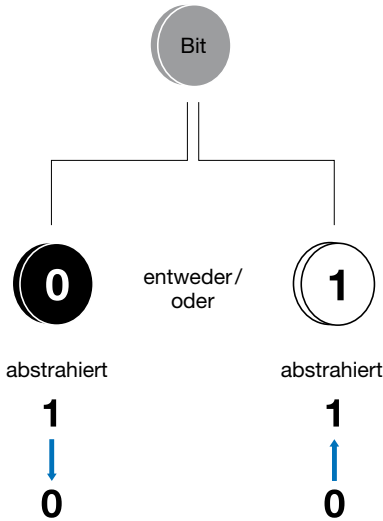
Betrachtet man also zwei Qubits, so können sie die vier Zustände 00, 01, 10 und 11 annehmen, und zwar alle gleichzeitig. Die Zahl der möglichen Kombinationen steigt schnell an; 32 Qubits ergeben schon vier Milliar-

den Möglichkeiten. Im Quantencomputer will man sich diese Vielfalt zunutze machen: Jede Rechenoperation, die man durchführt, würde ja dann in allen Zuständen gleichzeitig ablaufen. Mit zwei Qubits berechnet man automatisch vier Werte gleichzeitig, mit 32 Qubits vier Milliarden Werte. So hätte man einen höchst potenten Parallelrechner – vorausgesetzt, man kann passende Moleküle finden und die Spins ihrer Atome entsprechend kontrollieren, etwa durch NMR.

TUM und Harvard arbeiten Hand in Hand

Glasers Forschungsarbeiten zu diesen Themen an der Universität Frankfurt zeigten gute Erfolge, aber erst ein Zufall brachte ihn mit einem speziellen Zweig der Mathematik in Berührung und machte ihn und sein Team zu einer der weltweit besten Gruppen auf dem Gebiet der NMR-Quantencomputer. Und das kam so: Seine Veröffentlichung über die Grenzen der Effizienz der NMR-Untersuchungen erschien in der Wissenschaftszeitschrift Science, und die wurde auch aufmerksam gelesen von Forschern am Department für Ingenieurwesen und angewandte Wissenschaften an der Harvard-Universität. Dort interessierten sich vor allem Mathematiker aus dem Bereich Kontrolltheorie für das Problem. Dieser Wissenschaftszweig untersucht, wie man ein System aus ▶

Qubits als Bausteine eines neuronalen Quantencomputers

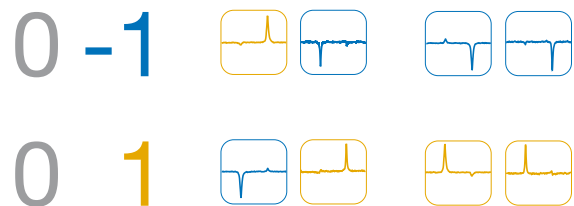
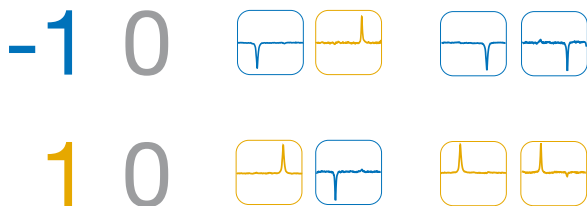


Klassisches Bit:

Der Zustand eines klassischen Bits kann ausschließlich einen der beiden Werte „0“ oder „1“ annehmen. Diese Zustände lassen sich geometrisch durch einen Pfeil (blau) mit den beiden möglichen Orientierungen nach „oben“ bzw. „unten“ darstellen. Für die Beschreibung der beiden möglichen Anregungszustände eines Neurons (ruhend oder feuernd) werden traditionell die Bezeichnungen „-1“ und „1“ verwendet

Quantenbit (Qubit):

Der Zustand eines einzelnen Qubits kann durch einen sogenannten Bloch-Vektor (blauer Pfeil) veranschaulicht werden, der im Gegensatz zur Pfeildarstellung der klassischen Bits nicht auf die beiden Ausrichtungen nach „oben“ bzw. „unten“ eingeschränkt ist, sondern durch geeignete Steuerungen beliebig im dreidimensionalen Raum ausgerichtet werden kann



Der neuronale Quantencomputer erkennt auch bei unvollständiger Eingabe das am besten passende abgespeicherte Muster von Neuronenzuständen.

Blau entspricht dem Neuronenzustand „-1“ (Neuron im Grundzustand), orange dem Neuronenzustand „1“ (Neuron feuert). Die Eingabe „0“ (grau) bedeutet hier, dass der Zustand dieses Neurons unbekannt ist

Die linke Spalte zeigt jeweils ein eingegebenes, unvollständiges Muster für die Zustände zweier Neuronen. Die erkannten Muster lassen sich anhand der Signaturen der gemessenen NMR-Spektren experimentell bestimmen.

Die mittlere Spalte zeigt die Messresultate, falls in dem neuronalen Netz als mögliche Muster die Werte (-1,1) und (1,-1) abgespeichert sind.

Die rechte Spalte zeigt die Ergebnisse für die abgespeicherten Muster (-1,-1) und (1,1)

Vier Möglichkeiten, wie ein Quantencomputer der Zukunft konstruiert sein könnte:

- 1 Angeregte Ionen, die man in so genannten Ionenfallen festhalten und manipulieren kann, wären eine Möglichkeit, einen Computer zu bauen. Sie lassen sich durch geeignete Laserimpulse anregen. Der Zustand 1 wäre dann ein angeregtes Ion, 0 wäre das Ion im Grundzustand.
- 2 Beim Verfahren der Kernspinresonanz NMR in Flüssigkeiten übernehmen die ausgerichteten Spins in einem Atomkern die Rolle der Qubits: Spin up bedeutet beispielsweise 1, Spin down wäre die 0.
- 3 Quantenpunkte, winzige Halbleiterstrukturen in einem Festkörper, könnten als Fallen für Elektronen dienen. Die Teilchen lassen sich dort mit elektromagnetischen Feldern manipulieren, als Qubit dienen der Spin oder die Ladung der Teilchen.
- 4 Supraleitende Schaltkreise, die kleine Josephson-Tunnelkontakte enthalten, sind eine weitere Option für Quantencomputer in Halbleitern. Die Qubits können hier durch Spannungsänderungen oder wie bei NMR durch die Einstrahlung von Mikrowellen-Pulssequenzen manipuliert werden.

einem bekannten Ist-Zustand gezielt und effizient möglichst nahe an einen gewünschten vorgegebenen Soll-Zustand heranführen kann, etwa bei Robotern oder in der Logistik. Und um genau das Gleiche ging es ja auch in Glasers Arbeit.

Deshalb meldete sich eines Tages der aus Indien stammende Doktorand Navin Khaneja aus Harvard bei Steffen Glaser, der inzwischen einem Ruf an die TUM gefolgt war. „Ich lud ihn nach München ein, und wir trafen uns“, erinnert sich der Forscher. Er schilderte Khaneja das Problem, das er und sein Team in monatelangen Computersimulationen und mit den verschiedensten Algorithmen zu lösen versucht hatten: Wie kann man die Information von einem Kernspin möglichst effizient auf einen anderen übertragen? Sie hatten die Lösung von allen Seiten eingekreist, kannten das Umfeld, die Effizienz und die Grenzen des Verfahrens, nur das Verfahren selbst kannten sie noch nicht. Trotz aller Bemühungen blieb die drängende Frage: Wie kann man eine solche Informationsübertragung experimentell verwirklichen? Wie sieht die reale Steuerung aus?

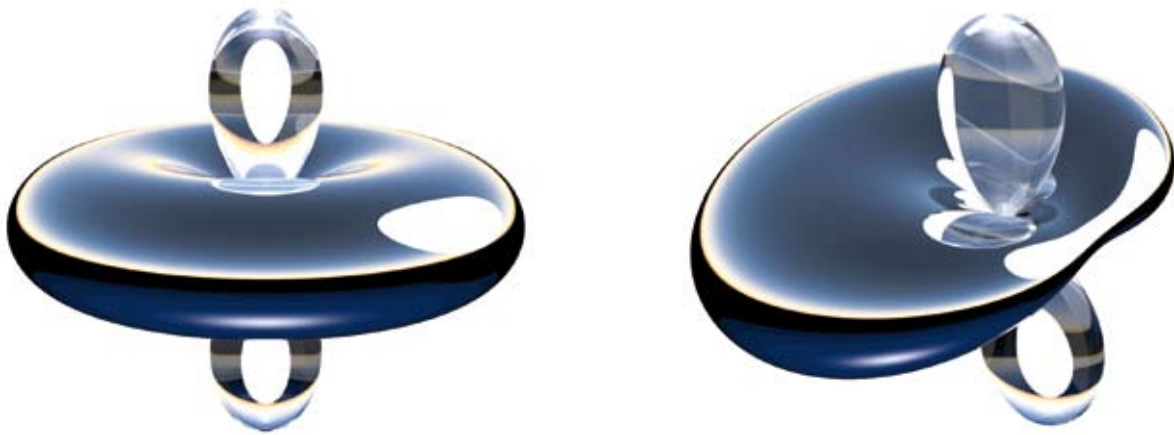
„Eigentlich hatte ich keine hohen Erwartungen an das Gespräch“, erinnert sich der 50-jährige Physiker heute an das erste Treffen mit dem 14 Jahre jüngeren Kollegen. „Aber es hat sofort gefunkt. Ich schilderte ihm unsere Probleme, er war Feuer und Flamme, und bis zum nächsten Tag schrieb er ein kleines Programm, das innerhalb von Sekunden die Lösung fand, nach der wir so dringend gesucht hatten.“ Sie wurde umgesetzt als eine komplizierte Folge von Steuerungsimpulsen, die mit Hilfe kleiner Magnetfeldspulen in die Apparatur eingestrahlt werden und die Spins so manipulieren, dass sie am Ende genau die Positionen einnehmen, die die Forscher wünschen. Steffen Glaser demonstriert den Vorgang am Computer mittels einer Bilderfolge für mehrere Spins, die deutlich macht, dass die Steuerung so kompliziert ist, dass sie sich jeder intuitiven Erklärung entzieht. Sie wirkt wie die scheinbar unerklärlichen Spielzüge von Speedcubern, die mit einigen Dutzend Drehungen in einer geheimnisvollen Abfolge einen beliebig verstellten Rubik's Cube in seinen Urzustand zu-

rückversetzen können. In der NMR-Technologie laufen die Steuerimpulse aber im Mikrosekundenmaßstab ab. Das ist nötig, denn bereits nach wenigen Zehntelsekunden klappen die Spins der Atomkerne von selbst wieder in ihre Ausgangsposition zurück.

Mit diesem neuen methodischen Ansatz begann 1999 eine enge und fruchtbare Zusammenarbeit zwischen dem Münchner Team und dem Forscher aus Harvard, der inzwischen dort Professor ist. Die durchschlagenden Erfolge, die sich aufgrund dieser Kooperation einstellten, machten auch Wissenschaftler der Siemens Corporate Technology (CT) aus dem Münchner Umfeld hellhörig. Die Spezialisten der Abteilung „Lernende Systeme“ beschäftigen sich dort schon seit Längerem mit Verfahren, die man zum Teil der Natur abgeschaut hat. Dazu zählen auch neuronale Netze, die ähnlich wie das menschliche Gehirn arbeiten. „Es handelt sich um Netzwerke, bei denen alle Knotenpunkte miteinander verbunden sind. Die Information steckt in der Stärke der jeweiligen Verbindung“, erklärt Dr. Rudolf Sollacher, der die Abteilung leitet. „Solche neuronalen Netze kann man beispielsweise dazu verwenden, Muster zu erkennen.“



Steffen Glaser (rechts), diskutiert hier mit dem Doktoranden Rodion Neigovzen die Eigenschaften der Moleküle, mit denen sie den neuronalen Quantencomputer in einem Labor des Bayerischen Kernresonanz-Zentrums an der TUM realisieren. Im Hintergrund der supraleitende Magnet eines NMR-Spektrometers, mit dem die Forscher die Quanten-Zustände der Kernspins präparieren, steuern und auslesen können.



Die Quantenbits in einer Flüssigkeit sind nicht voneinander unabhängig, sondern beeinflussen sich gegenseitig. Daraus ergeben sich so verwickelte Verhältnisse, dass die Forscher diese nur noch mit komplizierten Bildern visualisieren können

Das ist nicht ganz neu, aber die Siemens-Forscher gingen noch einen Schritt weiter. „Wenn man die Leistung immer weiter steigert und gleichzeitig die Chips immer kleiner macht, stoßen konventionelle Computer in einigen Jahren an physikalische Grenzen“, gibt der 48-jährige Physiker zu bedenken. Bisher sagte das Mooresche Gesetz die Entwicklung gut voraus. Es stellt fest, dass die Anzahl von Schaltkreisen, die auf einen Mikrochip passt, sich alle 18 Monate verdoppelt.

Quanten - der Stoff für Computer der Zukunft

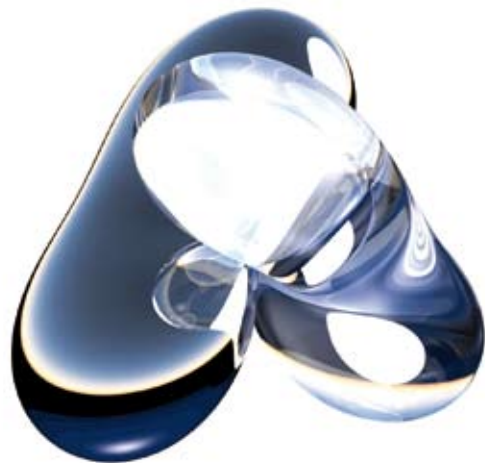
Gilt das auch in Zukunft, so landet man in wenigen Jahren bei Schaltelementen, die nur noch wenige Nanometer groß sind. Bei diesen winzigen Abmessungen spielen dann bereits Quanteneffekte eine Rolle. Sie könnten den normalen Betrieb eines Computers empfindlich stören, denn in der Quantenwelt herrschen andere Gesetze als im Alltag. „Man kann nun diese Effekte als Störungen auffassen und versuchen, sie zu beseitigen, oder man kann sie ganz bewusst nutzen“, so Sollacher. In diesem Fall braucht man einen Quantencomputer. Für Probleme wie die Mustererkennung könnte sich ein solcher Computer aufgrund seiner Fähigkeiten zum Parallelrechnen besonders gut eignen. Deshalb beschloss man bei Siemens, neuronale Netze und Quantencomputer zusammenzuspannen und das Ganze zunächst einmal in einer numerischen Simulation auszuprobieren.

Ein Forscher, der diese komplizierte Aufgabe übernehmen konnte, war schnell gefunden: Der 28-jährige Quanteninformatiker Rodion Neigovzen war mit dem

Unternehmen durch ein Förderprogramm bereits eng verbunden. Nun nahm er sich des Problems an und schrieb darüber seine Doktorarbeit: „Ich habe sowohl die Architektur als auch die Dynamik eines neuronalen Netzes ins Quantenregime übertragen.“ Auf diese Weise entwickelte er ein Verfahren, das mit Hilfe eines kleinen neuronalen Netzes auf Quantenbasis ein Muster aus zwei Bits zuverlässig erkennen konnte, auch wenn es nur unvollständige Informationen darüber erhielt. „Diese Simulation funktioniert mit beliebig vielen Netzpunkten“, so Neigovzen, „solange der Rechner mitmacht.“

In der virtuellen Welt funktionierte das neuronale Quantennetz hervorragend. Aber jede numerische Simulation muss sich an der Wirklichkeit messen lassen. Stimmen ihre Ergebnisse nicht mit dem realen Experiment überein, ist irgend etwas falsch an ihr. Deshalb suchte Neigovzen nach einer Möglichkeit, seine Simulation im Experiment nachzuprüfen.

Außerdem laufen die Rechenzeiten für eine Simulation mit mehr als einer Handvoll Bits schnell aus dem Ruder; sie könnten einen Großcomputer tage- und wochenlang blockieren. So lag Rudolf Sollacher und seinem Team ebenfalls viel daran, einen Ansatz zu finden, wie man den Algorithmus in einen realen Quantencomputer übersetzen könnte, der dann vielleicht auch mit mehr als zwei oder drei Qubits rechnen kann. Sie wurden fündig bei Steffen Glaser und seinen Leuten: Im Dezember 2007 gelang im Keller des Chemie-Departments der TUM die weltweit erste experimentelle Umsetzung eines neuronalen Netzes auf einem einfachen Quanten-



Die dargestellte Bildfolge zeigt den Übergang von einem Zustand in einen anderen, wobei wieder Steuerimpulse eingestrahlt werden. Solche Übergänge spielen sowohl im Quantencomputer als auch in spektroskopischen Kernspin-Verfahren eine grundlegende Rolle

computer. Dort hatten die beiden Forscher Neigovzen und Dr. Jorge Neves in Wasser gelöstes Natriumformiat in das Probenröhrchen gefüllt und unterzogen es der NMR-Prozedur. Das Magnetfeld richtete die Spins in der gewünschten Weise aus, und die eingestrahelten Steuerungsimpulse, die Neves vorher berechnet hatte, brachten sie zum Tanzen. Die dabei gemessenen Signale entsprachen genau den von der Simulation vorhergesagten Werten. Damit konnten die Wissenschaftler zeigen, dass Neigovzens Verfahren für einen Quantencomputer auch in der Praxis korrekte Ergebnisse liefert.

Dass all dies erst ein Anfang ist, auf den weitere Schritte folgen sollen, darüber sind sich alle Beteiligten einig. Rodion Neigovzen will die Experimente auf vier und mehr Qubits ausdehnen, und die Siemens-Forscher hoffen, dass einerseits die Theorie ausgebaut werden kann und andererseits die dazugehörigen Experimente eines Tages zu einem funktionsfähigen Quantencomputer führen.

Wie macht man einen Quantencomputer fit?

Steffen Glaser wiederum hat noch ein weiteres Problem im Auge: Er will untersuchen, wie man einen Quantencomputer robuster machen kann. „Ein Problem ist, dass jeder Quantencomputer seine Eigenschaften verliert, wenn er mit seiner Umgebung in Wechselwirkung tritt. Man muss ihn also gegen Einflüsse abschirmen.“

Siemens ist sowieso an den Entwicklungen im Bereich der Quantencomputer stark interessiert: „Wir werden da auf jeden Fall dranbleiben“, ist Rudolf Sollacher sicher,

„sobald es irgendwo eine Hardware gibt mit genügend Qubits, werden wir uns die Sache ansehen.“ Fernziel wäre es, Probleme wie etwa die Mustererkennung einem Quantenrechner zu überlassen, der wie ein Koprozessor an einen konventionellen Computer angeschlossen ist. Damit ließen sich Probleme wie die Identifikation von Gensequenzen oder die Auswertung von Bildern in der Automatisierung oder Medizin schneller und leichter lösen. Dass aber ein ganzer Rechner auf Quantenbasis arbeiten wird, das hält Sollacher nicht für sinnvoll: „Meine Einschätzung ist, dass es eher Hybridrechner geben wird, die konventionelle Technik und quantenmechanische Methoden kombinieren, je nachdem, wo die Stärken der beiden Verfahren liegen.“

Wenn man die großen NMR-Experimentieranlagen im Keller des Chemie-Departments der TUM betrachtet, in denen metergroße supraleitende Magnetspulen die Atomkerne in den winzigen Reagenzröhrchen ausrichten, wird sofort klar, dass die Zukunft des Quantencomputers nicht so aussehen kann. Zu groß, zu aufwändig und zu teuer sind die Anlagen, als dass sie sich für einen Alltagsrechner eignen würden. Steffen Glaser geht auch nicht davon aus, dass ein künftiger Quantencomputer flüssig sein wird: „Ich denke, es wird letztlich doch wieder auf einen Chip hinauslaufen“, meint er, „aber das ändert nichts daran, dass wir die Grundlagen erforschen müssen. Denn die Kontrolle der Quanten müssen wir auf jeden Fall beherrschen, egal, ob sie sich auf einem Chip, in einer Ionenfalle oder in einem Reagenzglas befinden.“ *Brigitte Röthlein*