

Stefano Rascazzo

Classe 5<sup>a</sup> sezione B

Liceo scientifico "Le Filandiere"

## COMPUTER QUANTISTICI PER LA CREAZIONE DI NUOVI FARMACI

*A partire da Richard Feynman, l'idea di utilizzare i sistemi quantistici per trasmettere informazioni è stata affrontata da diversi fisici ed informatici: i qubit sono il risultato di tutta questa ricerca. Oggi, i computer quantistici possiedono tantissime applicazioni, tra cui il drug design, cioè la creazione di nuovi farmaci ad un ritmo ben più sostenuto della ricerca attuale.*

Da quando Heisenberg nel giugno del 1925 ha deciso di ritirarsi nella remota e solitaria isola di Helgoland, la fisica ha subito una radicale mutazione che ha portato alla scoperta di una disciplina tanto rivoluzionaria quanto contorta: la fisica quantistica. Quest'ultima, nel corso della sua evoluzione, ha trovato nell'informatica una delle sue più improbabili alleate. Il risultato di questa stretta amicizia è probabilmente lo strumento più potente di cui l'umanità dispone: il computer quantistico. Con la sua spaventosa capacità di calcolo, infatti, il quantum computer è in grado di svolgere operazioni che normalmente non potremmo neanche immaginarci. Ciò si traduce in una capacità di simulazione senza precedenti nella storia dell'umanità, che può essere applicata ai più disparati settori della vita quotidiana. Tra questi settori, spicca l'ambito medico che, specialmente in tempi di Covid-19, si ritroverebbe fortemente agevolato nella ricerca di nuovi farmaci e vaccini dalla tecnologia all'avanguardia dei computer quantistici.

Abbiamo parlato della spaventosa potenza di calcolo di un quantum computer, ma qual è la differenza che rende il computer quantistico strepitosamente superiore a quello classico? Ebbene, la differenza c'è ed è sostanziale. L'unità fondamentale di informazione che può essere gestita da un computer classico prende il nome di bit (binary digit), esso può manifestarsi con un singolo valore binario: 0 o 1 in modo alternato, dove ogni cifra rappresenta un'alternativa equamente possibile. I computer quantistici utilizzano un nuovo tipo di bit, il qubit (quantum binary digit); come suggerisce il nome, il qubit trae dalle leggi della meccanica quantistica la sua incredibile capacità di immagazzinare informazioni, di gran lunga superiore a quella di un bit classico. In particolare, i due principali concetti di cui si avvale il qubit sono la sovrapposizione (o interferenza) quantistica e il fenomeno dell'*entanglement*. Descriviamo quindi, nel modo più chiaro e sintetico possibile, i due fenomeni che più hanno incantato i fisici nel corso dell'ultimo secolo.

La sovrapposizione quantistica consiste nella compresenza di due stati fisici, di due proprietà di un oggetto nello stesso momento. In altre parole, prendiamo un oggetto qualunque O e lanciamolo in un burrone (facciamo finta che si tratti di un fenomeno quantistico), questo presenta due differenti stati fisici: lo stato fisico A implica che l'oggetto è ancora integro alla fine della caduta, mentre lo stato B rappresenta l'oggetto O in frantumi. L'interferenza quantistica ci dice che, finché non scendiamo giù nel burrone per verificare lo stato dell'oggetto O (cioè stato A o stato B), esso presenta entrambe le proprietà: è sia integro che frantumato. Questo è il famosissimo paradosso del gatto di Schrödinger che, all'interno della scatola, è sia vivo che morto allo stesso tempo. La domanda ora è: come fa il qubit a sfruttare tale fenomeno? Abbiamo già anticipato che il bit può assumere un unico valore binario tra 0 e 1, ebbene il qubit ha la possibilità di manifestarsi attraverso un terzo valore: 0 e 1 contemporaneamente. Sfrutta cioè la sovrapposizione quantistica per assumere entrambi i valori allo stesso tempo. Ciò permette a gruppi di qubit di generare spazi di computazione multidimensionali, in grado di affrontare problemi enormemente più complessi che un computer classico non riuscirebbe a risolvere in un intervallo di tempo accettabile.

L'*entanglement* invece è un fenomeno ben diverso e ancora più complicato della sovrapposizione quantistica. *Entanglement* in italiano può essere reso con "coinvolgimento", "intreccio"; in fisica quantistica è il fenomeno per cui due oggetti, come due particelle, restano in qualche modo in contatto dopo aver interagito almeno una volta nel corso della loro esistenza. Lo stato di una influenza lo stato dell'altra: sono

*entangled*, correlate. Ma come fanno due particelle a restare correlate? Non c'è uno scambio di informazioni tra le due, perché le informazioni non possono superare una velocità limite e non possono quindi essere istantanee; inoltre le correlazioni tra le due particelle non sono neanche predeterminate al momento dell'interazione, perché se fosse così allora seguirebbero, a queste determinazioni, conseguenze ben precise che invece noi non rileviamo nel momento dell'osservazione. In altre parole le due particelle non si parlano al telefono per decidere cosa fare, né si accordano al momento dell'incontro su come comportarsi in futuro. E allora come fanno? Il nodo viene sciolto dall'introduzione di un terzo elemento che spesso consideriamo scontato: l'osservatore, perché il fenomeno dell'*entanglement* è "una danza a tre" (Carlo Rovelli "*Helgoland*", Adelphi 2020) su cui però non ci soffermiamo ulteriormente. Basti sapere che il mondo non è deterministico, bensì si esprime in termini probabilistici. Questa è la grande intuizione di Heisenberg e degli altri fisici di quel tempo.

Quando parliamo di *entanglement* per i computer quantistici, sono i qubit ad essere *entangled*, e quindi il cambiamento di un qubit genera un cambiamento anche nell'altro. Gli informatici, facendo leva su questa proprietà dei qubit, riescono a generare degli algoritmi quantistici in grado di risolvere problemi complessi.

Riassumendo ciò che è stato detto fino ad ora, il computer quantistico, grazie alle specifiche proprietà dei qubit che utilizzano la fisica quantistica a proprio vantaggio, può accedere ad una potenza computazionale ampiamente maggiore di quella di un computer classico. Ovviamente, le applicazioni che tale potente strumento può avere sono moltissime: si passa dal settore di ricerca negli acceleratori di particelle agli ambiti più quotidiani come le previsioni meteo. Uno tra questi ha però importante rilevanza in tempi di pandemia come quella iniziata nel 2020: stiamo parlando dell'ambito medico.

L'eccezionale capacità computazionale dei computer quantistici potrebbe in teoria simulare molecole complesse in modo più efficiente di un supercomputer. Infatti nel 2017, alcuni ricercatori di IBM sono riusciti a simulare con un computer quantistico diverse molecole: l'idrogeno, l'idruro di litio e l'idruro di berillio. Queste non sono molecole complesse, ma la potenza dei computer quantistici è in rapida crescita e le potenzialità di questa tecnologia sono ancora tutte da scoprire. Si stima infatti che in futuro si potranno simulare veri e propri composti farmaceutici (formati in genere da 50-80 atomi) e le relative proteine (costituite da migliaia di atomi) con cui i farmaci dovrebbero interagire. Inoltre, come afferma Alessandro Curioni, direttore del Laboratorio di ricerca di IBM a Zurigo, l'innovazione portata dai computer quantistici dovrebbe essere unita a due altre tecnologie all'avanguardia: l'intelligenza artificiale e i supercomputer. Potremmo definirla un'alleanza triadica tra bit, neuroni e qubit. Questa alleanza porta alla cosiddetta "scoperta accelerata", oggi già in utilizzo, che delinea ben due orizzonti in campo medico: il *drug design*, la creazione di nuovi farmaci, e il *drug repositioning*, cioè l'utilizzo di farmaci già esistenti per il trattamento del Covid-19. La capacità computazionale dei computer quantistici unita ai giusti dati estratti dall'IA potrà infatti svolgere la ricerca per il vaccino contro il Covid-19 in un intervallo di tempo di soli due mesi. Sempre Curioni afferma che l'alleanza tra bit, qubit e neuroni è un'alleanza preziosa, poiché ognuno di questi ha i suoi particolari vantaggi e saranno quindi, insieme, alla base del progresso della ricerca futura.

Per pura onestà scientifica, è bene però sottolineare anche le problematiche che incorrono nell'utilizzo di un computer quantistico. Questo occupa sì uno spazio notevolmente inferiore al tradizionale supercomputer, ma deve essere tenuto a temperature prossime allo zero assoluto, perché i qubit sono fortemente sensibili alle fluttuazioni di temperatura e alle interferenze elettromagnetiche provenienti da sistemi esterni. Il progresso, ovviamente, avanza sempre e ci sono molte soluzioni in via di sviluppo, ma ora come ora il settore dei computer quantistici è ancora aperto a nuove ricerche, che di sicuro la nuova generazione di fisici e informatici è determinata ad intraprendere.

I computer quantistici sono quindi una tecnologia tutta nuova, che sfrutta la meccanica quantistica, anch'essa in continua evoluzione, per raggiungere obiettivi straordinari. Le speranze sono molte e i risultati sono promettenti, una cosa però è certa: il mondo della fisica quantistica, unita a qualcosa di così concreto come l'informatica, ha ancora tanto da dare alla nostra società.

## **BIBLIOGRAFIA E SITOGRAFIA**

<https://www.focus.it/live/news/i-computer-quantistici-sono-il-futuro>

<https://www.ibm.com/topics/quantum-computing>

<https://newsroom.ibm.com/2017-09-13-IBM-Pioneers-New-Approach-to-Simulate-Chemistry-with-Quantum-Computing>

Carlo Rovelli, *"Helgoland"*, Adelphi, Milano, 2020.

Carlo Rovelli, *"L'ordine del tempo"*, Adelphi, Milano, 2017.

Paul Adrien Maurice Dirac, *"Principles of Quantum Mechanics"*, Oxford University Press, Oxford, 1930.