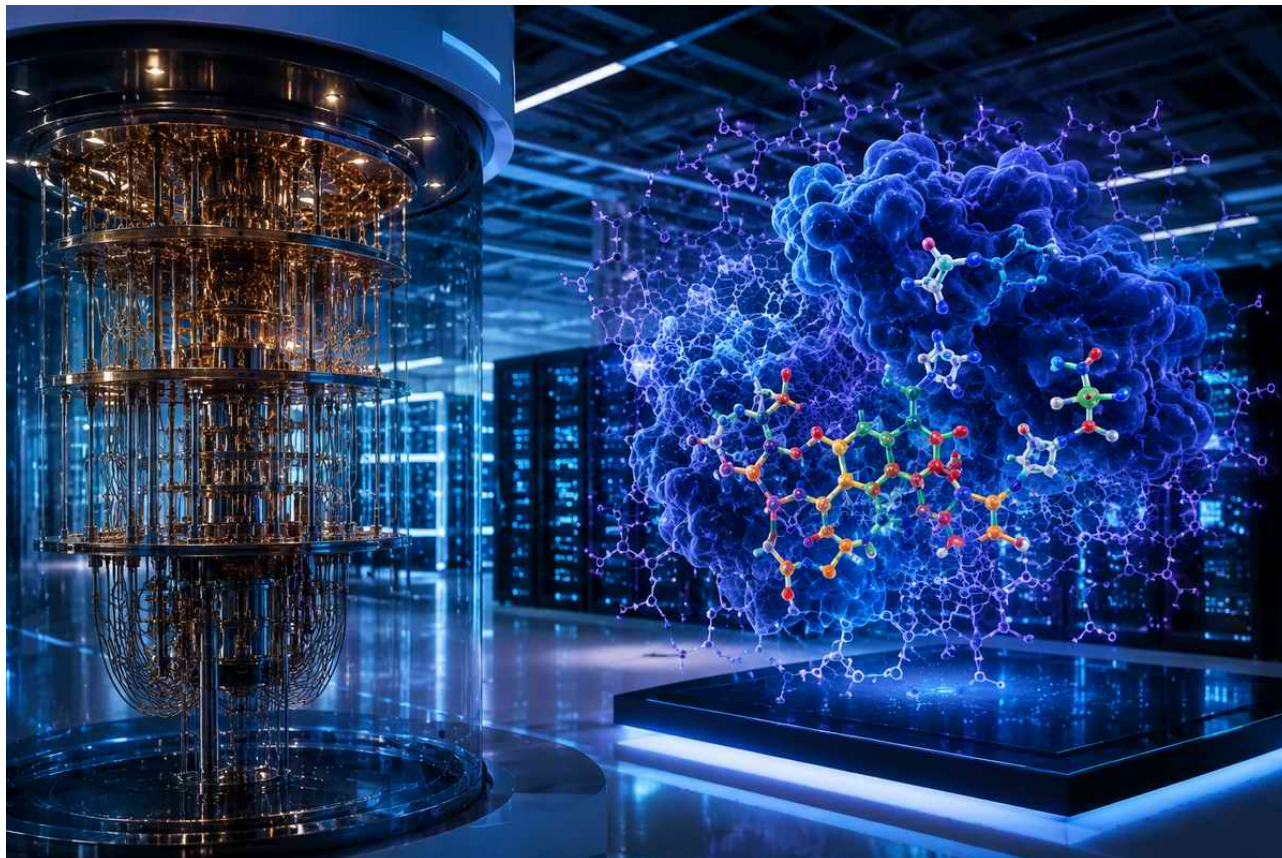


Квантовые суперкомпьютеры впервые смоделировали белок из 12 тысяч атомов — это может изменить разработку лекарств



Дата публикации: 20.05.2026

Квантовые вычисления сделали один из крупнейших шагов в истории вычислительной химии. Международная группа исследователей из IBM, RIKEN и Кливлендской клиники впервые выполнила моделирование белковых комплексов размером более 12 тысяч атомов с использованием квантово-ориентированной суперкомпьютерной платформы. Новый результат стал важным рубежом для всей области квантовой химии и приблизил момент, когда квантовые компьютеры смогут применяться для полноценной разработки лекарств, новых материалов и сложных биологических исследований.

В качестве тестовых объектов исследователи выбрали два биологически важных белка: T4-лизоцим и трипсин. Первый участвует в разрушении бактериальных клеточных стенок, второй играет ключевую роль в пищеварении. Учёные смоделировали взаимодействие этих белков с лигандами — молекулами, с которыми они связываются в живых системах, — а также учли окружающий водный раствор. Общий масштаб вычислений достиг 11 608 и 12 635 атомов

соответственно, что стало крупнейшей квантовой симуляцией биомолекул на сегодняшний день.

Особенно впечатляет скорость прогресса. Ещё несколько месяцев назад исследователи смогли смоделировать лишь мини-белок Trp-cage размером 303 атома. Новый результат означает почти сорокакратное увеличение масштаба моделируемой системы всего за короткий промежуток времени. Одновременно была достигнута более чем двухсоткратная прибавка точности по сравнению с предыдущими квантово-ориентированными подходами на одном из ключевых этапов вычислений.

Главная причина такого интереса к квантовым вычислениям заключается в самой природе химии. Все химические процессы подчиняются законам квантовой механики. Электроны внутри молекул постоянно взаимодействуют, создавая чрезвычайно сложные системы взаимосвязей. Классические компьютеры способны приближённо рассчитывать такие процессы, однако с увеличением размера молекулы вычислительная сложность растёт практически экспоненциально.

Для больших белков традиционные методы быстро становятся слишком медленными или требуют колоссальных вычислительных ресурсов. Именно поэтому квантовые компьютеры рассматриваются как потенциально идеальный инструмент для моделирования молекулярных процессов. Они способны работать с квантовыми состояниями напрямую, а не через приближённые математические модели.

Новая работа основана на гибридной архитектуре QCSC — квантово-ориентированной суперкомпьютерной платформе, объединяющей классические суперкомпьютеры и квантовые процессоры. Такой подход позволяет распределять вычисления между разными типами устройств. Простые участки молекулы обрабатываются классическими алгоритмами, а наиболее сложные области, где возникает сильная квантовая запутанность между электронами, передаются квантовым процессорам.

В исследовании использовались два 156-кубитных квантовых процессора IBM Quantum Heron r2, а также суперкомпьютеры Fugaku и Miyabi-G. Учёные выполнили более 9200 квантовых схем, потратили свыше 100 часов вычислительного времени и обработали около 1,3 миллиарда измерений. По уровню вычислительной нагрузки эта работа стала одним из самых ресурсоёмких экспериментов в истории квантовой химии.

Одним из главных технологических достижений стал новый метод TrimSQD. Его задача — отделять действительно важные электронные конфигурации

молекулы от огромного количества второстепенных вариантов. В сложных молекулах число возможных состояний электронов настолько велико, что полный перебор становится практически невозможным даже для современных суперкомпьютеров.

Исследователи сравнивают эту задачу со сборкой гигантского пазла, где нужные детали перемешаны с тысячами лишних элементов. TrimSQD разбивает проблему на множество меньших подпространств, позволяя квантовому компьютеру сосредоточиться только на наиболее значимых конфигурациях. Это резко повышает эффективность вычислений и делает моделирование больших белков практически реализуемым.

Дополнительный прорыв связан с использованием локализованных взаимодействий внутри молекулы. Учёные показали, что электроны сильнее всего взаимодействуют лишь на относительно небольших расстояниях — порядка нескольких ангстремов. Это позволило существенно сократить объём вычислений, ограничив анализ только локально важными квантовыми эффектами.

Несмотря на то что гибридный квантово-классический подход пока ещё не превосходит лучшие традиционные методы вычислительной химии, динамика развития впечатляет. Исследователи считают, что уже в ближайшие годы квантовые вычисления смогут превзойти классические суперкомпьютеры в ряде задач молекулярного моделирования.

Практическое значение таких технологий огромно. Более точное моделирование белков и химических реакций способно ускорить разработку новых лекарств, материалов, катализаторов и биотехнологий. Учёные смогут прогнозировать поведение молекул ещё до лабораторного синтеза, сокращая стоимость исследований и время создания новых препаратов.

Особенно важными такие вычисления могут стать для фармацевтики. Сегодня создание одного лекарства занимает годы и требует миллиардных затрат. Квантовые модели потенциально позволят заранее отсеивать неэффективные молекулы и быстрее находить перспективные соединения для лечения рака, нейродегенеративных заболеваний, вирусных инфекций и генетических нарушений.

Исследование также демонстрирует новую модель суперкомпьютерных вычислений будущего, где квантовые процессоры, графические ускорители и классические центральные процессоры работают совместно как единая система. Именно такие гибридные архитектуры рассматриваются сегодня как наиболее реалистичный путь развития высокопроизводительных вычислений.

Следующим этапом станет переход к отказоустойчивым квантовым компьютерам нового поколения. Уже сейчас исследователи связывают большие надежды с будущими системами IBM Quantum Starling, запуск которых ожидается в конце десятилетия. Если темпы прогресса сохранятся, квантовые вычисления могут стать одним из главных технологических прорывов XXI века.

Ссылка: «Преодоление барьера в 12 000 атомов с помощью гетерогенных квантово-классических суперкомпьютеров: квантовая химия белково-лигандных комплексов» [DOI: 10.48550/arxiv.2605.01138](https://doi.org/10.48550/arxiv.2605.01138).