

Vývoj materiálů: od kovadliny ke kvantovým počítačům

S Martinem Friákem o otázkách materiálového výzkumu

Materials development: from anvil to quantum computers. With Martin Friák on issues of materials research

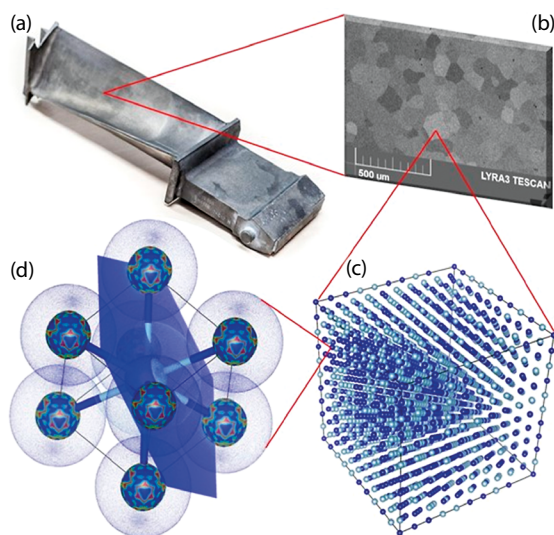
Jana Žďárská

Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 00 Praha 8; zdarskaj@fzu.cz

Zavádění výpočtů na kvantových počítačích do výzkumu umožní zásadním způsobem zlepšit vznik a vývoj nových materiálů. Kvantové počítače již brzy předpoví vlastnosti materiálů atom po atomu, což do budoucna přinese důležité objevy nejen v materiálovém výzkumu. Využití kvantových počítačů postupně usnadní život celému lidstvu, ale zřejmě přinese i určité hrozby.

Nové technologie otvírají zcela nové možnosti vývoje materiálů. Vědci z Ústavu fyziky materiálů¹ se snaží objasňovat vztah mezi chováním a vlastnostmi materiálů a jejich strukturními a mikrostruktur-

¹ T. Kruml, J. Žďárská: Ústav fyziky materiálů AV ČR. Čs. čas. fyz. 75, 426–435 (2025).



Obr. 1 Schematický obrázek „cesty do nitra hmoty“: (a) lopatky turbíny (za foto děkuji docentu Klusákovi), (b) mikrostruktura jednotlivých zrn, zachycená elektronovou mikroskopií, které se na ÚFM v Brně velmi intenzivně věnují, (c) atomární úroveň, kde probíhá teorie vedený vývoj materiálů pomocí kvantověmechanických výpočtů elektronové struktury, zde promítnuté na sféry symbolizující atomy (d) v krystalu pevné látky. Foto: Jan Klusák, ÚFM AV ČR

ními charakteristikami a také zkoumají pokročilé kovové materiály a kompozity na bázi kovů ve vztahu k jejich mikrostruktuře a způsobu přípravy.

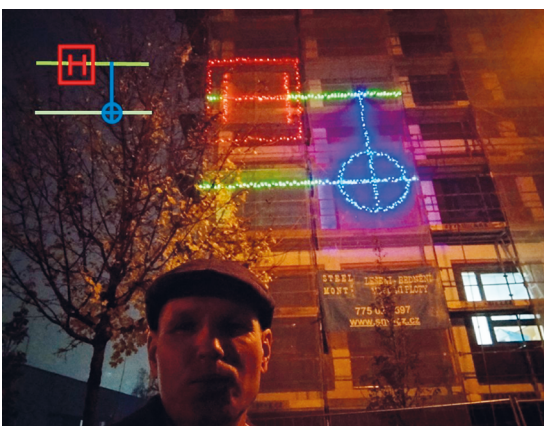
Název článku zmiňující kovadlinu naznačuje, jakým způsobem byly dříve vyvíjeny a testovány materiály například z hlediska pevnosti či odolnosti a o jak náročnou a dlouhotrvající činnost se jednalo. V současné době probíhá výzkum nových materiálů odlišným způsobem: „Jedná se především o optimalizace užitných vlastností materiálů a predikce jejich provozní životnosti teoretickými a výpočetními metodami podloženými experimenty. Navazujeme na tradici dávných kovářů, prvních materiálových vědců, kteří se celá dlouhá staletí věnovali vylepšování materiálů – většinou ocelí. Je téměř neuvěřitelné, co všechno dokázali. My tyto spolehlivé materiály můžeme nyní nejen používat, ale například některé ocelové komponenty automobilů dokonce chrání i náš život a zdraví v případě nehody. Pociťuji obrovský respekt k tomu, co se těmto dávným kovářům podařilo s minimem znalostí, které měli o složení hmoty, když třeba nevěděli o její atomární struktuře a podobně,“ připomíná Martin Friák.

V současné době lze do tohoto výzkumu efektivně zapojit superpočítače a kvantové technologie (kvantové počítače), které dokážou předpovídat vlastnosti materiálů doslova atom po atomu. Tyto výpočty jsou velmi náročné, a proto by je kancelářské počítače nezvládly a je třeba použít superpočítače. V případě kvantových počítačů se navíc jedná o zcela novou technologii zpracování informací, která na rozdíl od současných, klasických počítačů, jako je notebook nebo chytrý telefon, využívá kvantové jednotky infor-

mace. „Jak čtenáři a čtenářky vědí, v klasických počítačích je základní zpracovávanou jednotkou informace bit, který nabývá hodnoty 0, nebo 1, a to ve významu vylučovacím. V kvantových počítačích je základní jednotkou kvantový bit, zkráceně qubit (čteno „kjubit“). Qubity mohou být díky kvantovému jevu zvanému superpozice ve stavu 0 i 1 zároveň. Provedení nějaké matematické operace na qubitu v superpozici nám dá výsledek pro obě hodnoty, 0 i 1 zároveň, což klasický bit neumožňuje. To výpočty v kvantových počítačích urychluje,“ vysvětluje Martin Friák. „Na druhou stranu je třeba zmínit, že kvalitní výsledky výpočtů získáme pouze v tom případě, pokud popisujeme hmotu na atomární úrovni správně. Naši nejlepší teorie pro popis atomů je kvantová fyzika. Naštěstí máme v České republice výbornou superpočítačovou infrastrukturu, např. distribuovanou síť METACENTRUM, superpočítač CERIT v Brně, nebo IT4Innovation v Ostravě. V posledně jmenovaném budou moci uživatelé a uživatelky z celé naší republiky od června 2026 zdarma na kvantovém počítači pracovat.“

Potenciál kvantových počítačů je a bude jistě obrovský. V současné době možná ani nedohledneme, co všechno nám jejich využívání umožní. Abychom si kvantový počítač mohli lépe představit a vysvětlit jiným než běžným jazykem, který by mohl být zkrslující, vyžadovalo by to především matematiku, která je tím pravým jazykem kvantové fyziky. A protože se jedná o skutečně velmi zajímavé a důležité téma, budeme mu věnovat obsáhlejší rozhovor v některém z následujících čísel, kde se na tuto problematiku více zaměříme.

V současné době stojíme na počátku důležité vědecké kapitoly lidstva a i když se technologie kvantových počítačů teprve rozvíjí a není ještě dotažena k dokonalosti, během příštích několika let se předpokládá, že kvantové počítače zvládnou spočítat některé praktické úlohy, které by klasické počítače nezvládly ani za tisíce let. Více se o tomto tématu můžete dozvědět, pokud si na YouTube vyslechnete přednášku Martina Friáka s názvem *Kvantové počítače: naděje*



Obr. 2 Schéma obvodu kvantového počítače, instalované na exteriér ÚFM AV ČR v Brně v souvislosti s podzimní akcí *Qiskit Fall Fest 2025*, která proběhla 13. 11. 2025. Dekorace z vánočních světelných řetězů znázorňuje jednoduchý kvantový obvod (viz vlevo nahoře) se dvěma kvantovými bity (zeleno-žluté vodorovné čáry), kvantovým Hadamardovým hradlem H (v červené), které uvede horní qubit do superpozice stavů 0 a 1, a kvantovým CNOT hradlem (v modré), které qubity kvantově propojí.



Obr. 3 Pohled na kvantový počítač VLQ, umístěný v superpočítačovém centru IT4Innovations v Ostravě na Vysoké škole báňské.

*i hrozba*², která je pojata popularizační a nenáročnou formou a tuto novou výpočetní technologii popisuje v českém jazyce. O kolik rychlejší a výkonnější je kvantový počítač než počítač standardní, se můžete doslechnout v celém rozhovoru na Českém rozhlasu v kategorii *Věda plus*³ (čas cca 13:55:30).

Myšlenka kvantových počítačů pochází zhruba z 80. let minulého století, kdy ji poprvé zmínil držitel Nobelovy ceny Richard Feynman. První uživatelé k nim měli přístup až o téměř 40 let později, teprve na konci minulého desetiletí. Tehdy bylo kvantových počítačů pouze několik na světě. „Firma IBM k nim však umožňovala přístup – sice omezený, ale zdarma, přes internet na dálku do USA,“ zmiňuje Martin Friák. „Firma IBM tak naučila uživatele s jejich kvantovými počítači pracovat. Tehdy jsme s nimi začali v naší skupině i my, konkrétně to byla moje studentka, nyní doktorka Ivana Miháliková, později pak pan Mgr. Michal Krejčí, oba z Masarykovy univerzity. Ale teprve minulý rok se stal pro Českou republiku přelomový, když v červnu 2025 vzniklo konsorcium osmi akademických institucí, nazvané *Kvantové inovační centrum*, které se skládá ze sedmi univerzit⁴ a Akademie věd a je koordinované z ČVUT.“

Předpokládá se, že by kvantové počítače mohly přinést do výpočetní techniky revoluci srovnatelnou s nástupem sociálních sítí, internetu, nebo dokonce výpočetní techniky v 70. letech. „Podívejte se okolo, jak naši civilizaci klasická výpočetní technika změnila. Nám vědcům však nestačí. Existují úlohy, a je to i můj případ ve fyzice pevných látek, které se ve vědě celé desítky let odkládaly stranou, protože se prostě nedaly na klasických počítačích spočítat,“ podotýká Martin Friák. „A nyní je budeme moci na kvantových počítačích řešit. Jiným, ale vhodným přirovnáním důležitosti kvantových počítačů, je jejich srovnání s umělou inteligencí. Víím, že ta je momentálně na výsluní slávy, ale to, čím je AI dnes, budou kvantové počítače na konci tohoto desetiletí. Kvantové počítače jsou tzv. *průlomovou technologií*. Kdo ji ovládne, získá dlouhodobou strategickou technologickou výhodu. Pro přirovnání: pokud se do AI investují momentálně stovky miliard dolarů každý rok,

2 Viz: <https://www.youtube.com/watch?v=AUIy9bLxsiQ>.

3 Viz: <https://program.rozhlas.cz/zaznamy#plus/38/2025-12-09>.

4 ČVUT, UK, MU, VUT, ZČU, UPOL a UNOB.



Obr. 4 Snímek účastníků prvního workshopu Kvantového inovačního centra, který M. Friák zorganizoval v prostorách Ústavu přístrojové techniky AV ČR v Brně 2. července 2025. Workshop s názvem *Kvantové počítání v Akademii věd 2025* spojil špičky české vědy a technologických inovací. Setkání zahrnovalo přednášky o základních principech kvantových počítačů, aplikacích kvantového počítání v moderní výpočetní materiálové vědě, kvantové fyzice a kvantové chemii, kvantových algoritmech, kvantové kryptografii, zdrojích šumu v současných kvantových počítačích, ale i o perspektivním propojování umělé inteligence a kvantových počítačů. Prezentovány již byly i první výsledky získané na kvantovém počítači firmy IBM, který je osazen kvantovým procesorem Eagle se 127 qubity.

do technologie kvantových počítačů jsou to ty stejné sumy, jen rozložené do několika málo příštích let. Ty částky jsou tedy téměř srovnatelné. A na vývoz technologií kvantových počítačů do zahraničí se už začínají uplatňovat stejná omezení jako na čipy a grafické karty pro umělou inteligenci.“

Jak již proběhlo v médiích, první kvantový počítač v Česku je umístěn na Vysoké škole báňské – Technické univerzitě (VŠB-TUO) v Ostravě. Počítač za zhruba 125 milionů korun dostal jméno VLQ (zkratka obsahuje V jako VŠB, L jako konsorcium LUMI-Q, viz níže, a Q jako kvantový). Dodavatelem je finská společnost IQM Quantum Computers. Polovinu nákladů financuje společný evropský podnik pro vysoce výkonné počítání EuroHPC JU, druhou polovinu LUMI-Q. Technologie, na níž je postavený, umožňuje provádění velmi složitých kvantových algoritmů. Vzhledem k ceně kvantových počítačů a náročnosti jejich technologie jsou momentálně kvantové počítače fyzicky umístěny ve specializovaných centrech a uživatelé se na ně připojují přes internet. Pro jejich programování se často používá programovací jazyk Python, konkrétně balíček *Qiskit*, vyvinutý firmou IBM. „Uživatelé a uživatelky si naprogramují architekturu kvantového obvodu, tedy obdobu logických hradel propojujících klasické bity v dnešní elektrotechnice. Architektura kvantového obvodu odráží řešenou úlohu, takže uživatelé a uživatelky se vlastně stávají kvantovými architekty a architektkami, což je obohacující. Ohledně toho, co jim kvantové počítání může přinést v praktické rovině, bych rád zmínil, že studenti a studentky získávají zkušenost s touto novou technologií, mohou zkusit řešit svoje úlohy a vzdělávat se pro budoucí trh práce, na kterém budou lidé se zkušenostmi s kvantovým počítáním velmi ceněni,“ doplňuje Martin Friák.

Mnozí z nás si nejspíš pamatují na změnu a především zjednodušení komunikace, kterou přineslo otevření trhů a postupné zavedení výpočetní techniky

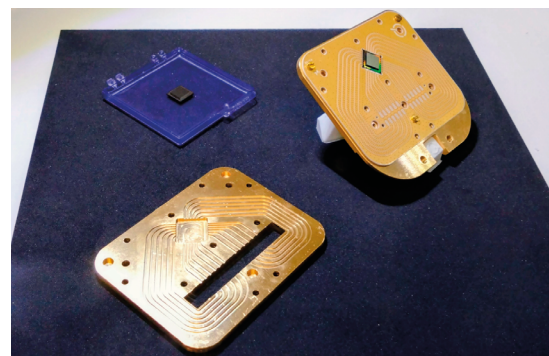
<https://ccf.fzu.cz>

po roce 1989. Při přípravě rozhovoru s významným českým astronomem Lubošem Perkem⁵ pro Československý časopis pro fyziku jsme se dotýkali i této skutečnosti, kdy Luboš Perek zmiňoval: „*Jiní v té době hořekovali, že pro ně přišla změna režimu poněkud pozdě, ale já jsem prostě nechtěl ztrácet čas. Vrhnu se do práce a začal jsem se seznamovat s možnostmi, které výpočetní technika nabízela. A bylo to třeba, vždyť se mi konečně naskytl možnost komunikovat a sdílet svoji práci v OSN a sdílet své vědecké myšlenky s vědci celého světa.*“ Předpokládá se, že využití kvantových počítačů výrazným způsobem usnadní život lidem na celém světě. „*Ano, zní to trochu nadneseně, ale kvantové počítače nám pomohou vyvinout nové materiály a technologie potřebné pro přechod k udržitelné a ekologičtější společnosti, což se týká celé planety. Vedle příkladů, které jsem zmínil výše, se o kvantových počítačích také předpokládá, že pomohou s úlohami v logistice, např. u ‚problému obchodního cestujícího‘. Je to úloha o tom, že máme na mnoho adres doručit nějaké zboží a zeptáte se, která cesta bude nejkratší, nejrychlejší nebo s nejnižší spotřebou pohonných hmot, což jsou v logistice zásadní otázky,*“ podotýká Martin Friák. „*Zkoušet všechny kombinace různých cest mezi adresami jde klasickým počítačům pomalu, protože počet možných cest exponenciálně roste s rostoucím počtem adres. Kvantové počítače by si s takovými úlohami s mnoha kombinacemi měly poradit mnohem snáz.*“

Na druhou stranu je také třeba zmínit, že vyšší výpočetní výkon kvantových počítačů může být i hrozbou. V tomto případě by mohla rychlost kvantových počítačů umožnit například prolomení šifrované komunikace, ať v souvislosti s bezpečnostními složkami a obranou, či třeba i uživatelskými úlohami u hesel k mobilnímu bankovníctví a podobně.

Využití kvantových počítačů v následujících letech doufáme přinese lidstvu více toho dobrého než naplněných hrozeb. A využití kvantových počítačů umožní v příštích 10 až 15 letech vyvíjet i nové materiály: „*Je však třeba upozornit, že cesta od vývoje materiálu k jeho výrobě a uvedení do praxe, tedy od základního výzkumu k aplikovanému, je docela dlouhá. I Akademie věd, která se tradičně soustředí na základní výzkum, si je tohoto vědoma, a tak v posledních několika letech spustila několik programů na podporu propojení základního výzkumu s aplikacemi a inovacemi pro praxi,*“ dodává Martin Friák.

⁵ L. Perek, J. Žďárská: Rozhovor s Lubošem Perkem. *Čs. čas. fys.* 67, 250–256 (2017).



Obr. 5 Srdcem kvantového počítače je supravodivý čip, chlazený na několik tisícín stupně nad absolutní nulu.

Mgr. Martin Friák, Ph.D., se narodil v Brně v roce 1974, je absolventem Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity (konkrétně odborné fyziky se specializací na pevné látky), a to jak v případě magisterského studia (Mgr., 1998), tak doktorského studia (Ph.D., 2002). V letech 1998–2002 působil také jako pomocná vědecká síla v Ústavu fyziky materiálů AV ČR v Brně pod vedením profesora Mojmíra Šoba. Po studiích působil v letech 2002–2005 jako postdoktorand v teoretickém oddělení profesora Matthiase Schefflera v Ústavu Fritze Habera Společnosti Maxe Plancka v Berlíně. Od května 2005 do září 2013 pak vedl svou vlastní skupinu v rámci oddělení nazvaného *Počítači podpořený vývoj materiálů* profesora Jörga Neugebauera v Ústavu Maxe Plancka pro výzkum ocelí v Düsseldorfu (nyní je tento ústav přejmenován na Ústav Maxe Plancka pro udržitelné materiály). V říjnu 2013 se vrátil do Ústavu fyziky materiálů (ÚFM) AV ČR v Brně za podpory Akademie věd ve formě Stipendia Jana Evangelisty Purkyně

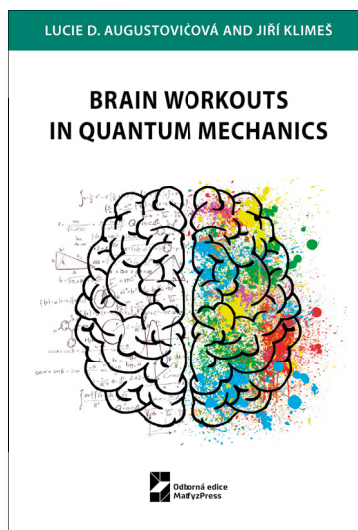


(2013–2018). Od ledna 2015 působí v ÚFM AV ČR jako vedoucí skupiny Elektrických a magnetických vlastností. Učí na Masarykově univerzitě a Vysokém učení technickém v Brně. Od roku 2021 je předsedou Rady uživatelů superpočítačového centra IT4Innovations v Ostravě, od listopadu 2022 je členem Správní rady (*Board of Trustees*) britské nadační organizace *Psi-k Network*, která si klade

za cíl mezinárodní podporu výpočtů elektronové struktury materiálů, od roku 2025 je koordinátorem kvantového počítání v Akademii věd v rámci Kvantového inovačního centra a momentálně je i členem Rady instituce ÚFM AV ČR.

Ve své práci se věnuje teorii vedeného vývoje materiálů, často magnetických, kdy se výzkum většinou opírá o kvantověmechanické výpočty. V roce 2023 ocenila Akademie věd jeho práci Akademickou premií (*Praemium Academiae*), díky níž se v letech 2024–2029 věnuje zavádění nástrojů umělé inteligence a výpočtů na kvantových počítačích do svého výzkumu. Na vývoji kvantových algoritmů spolupracuje s vědci a vědkyněmi z MIT, CALTECH a Národní laboratoře v Los Alamos v USA a Univerzity v Cambridge ve Velké Británii. Kvantové počítače také velmi aktivně popularizuje (Veletrh vědy 2024 a 2025, AFO 2025 a další). Ve volném čase rád běhá v lesích v okolí vesnice na okraji Moravského krasu, kde žije s manželkou Martinou a dvěma dětmi (Tobiasem Alexem a Emmou Sophií).

Knihy Nakladatelství MFF UK MatfyzPress



Prodej knih z odborné a popularizační edice nakladatelství MatfyzPress MFF UK a dárkových předmětů fakulty zajišťuje prodejna v budově MFF UK Sokolovská 83, Praha 8-Karlín a také e-shop www.matfyzpress.cz