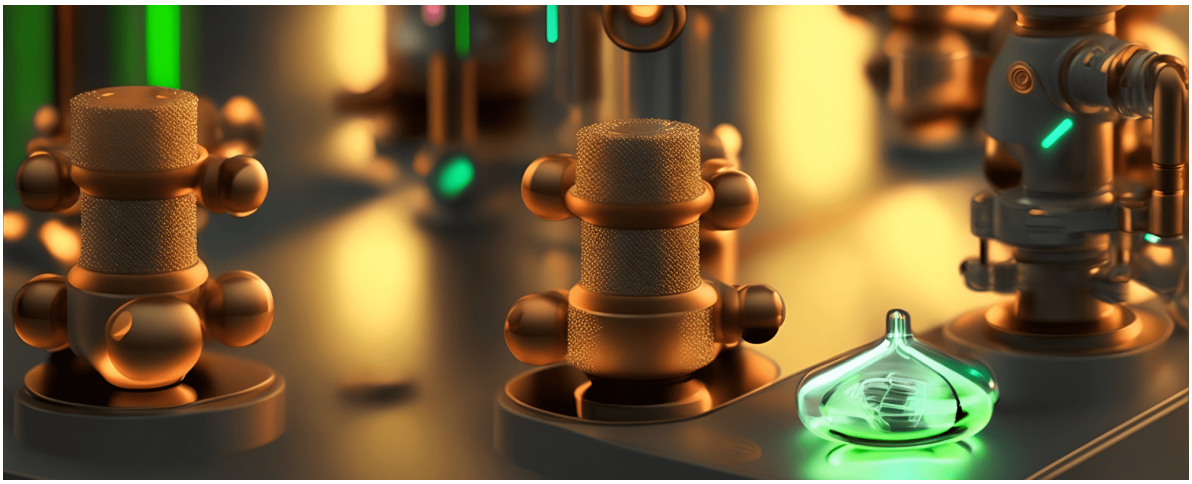
INVESTIGACIÓN Y APLICACIONES PRÁCTICAS

# Resolución de problemas cuánticos difíciles con átomos ultrafríos

Leticia Tarruell



Representació artística d'àtoms ultrafreds. Conceptualització: Luisa Quiroga

## ¿Qué es la simulación cuántica?

La computación cuántica ha experimentado un desarrollo espectacular los últimos años. El nuevo paradigma de computación aprovecha las propiedades de la mecánica cuántica para llevar a cabo cálculos muy complicados de hacer, si no imposibles, mediante ordenadores siguiendo las reglas de la física clásica. Sin embargo, todavía tendremos que superar problemas formidables antes de disponer de ordenadores cuánticos que funcionen de manera parecida a los ordenadores clásicos a que estamos acostumbrados; es decir, ordenadores que sean universales (que puedan abordar cualquier problema), digitales y capaces de autocorregirse los errores surgidos en los cálculos para garantizar la calidad del resultado final. Es extremadamente difícil hacer predicciones en un ámbito tan dinámico, pero el consenso actual es que harán falta años, quizás décadas, antes de que máquinas cuánticas tan sofisticadas sean una realidad.

No obstante, para predecir el resultado de problemas difíciles no siempre son necesarios ordenadores cuánticos completamente desarrollados. Antes de los ordenadores clásicos utilizábamos varias herramientas para que nos ayudaran a hacer cálculos complejos. Un ejemplo excelente es el ábaco, cuyo origen todavía se desconoce. Otro ejemplo es la esfera armilar, que se inventó independientemente en la antigua China y en la antigua Grecia, y

que se utilizó para predecir el movimiento de las estrellas y los planetas. Podemos utilizar dispositivos parecidos para que nos ayuden a resolver problemas de mecánica cuántica difíciles. Como estos problemas son de naturaleza cuántica, los dispositivos correspondientes naturalmente también lo serán. Fue el físico Richard Feynman quien propuso por primera vez esta idea en el año 1981 y quien acuñó el término *simuladores cuánticos*. [1] Los simuladores cuánticos no son nada más que ordenadores cuánticos que tienen una finalidad especial. De hecho, a causa de las limitaciones del hardware cuántico de que disponemos actualmente, actualmente la mayoría de dispositivos de computación cuántica se ejecutan en modo de simulación cuántica cuando se intenta obtener una ventaja cuántica con respecto a los ordenadores clásicos.

> Los simuladores cuánticos nos permiten resolver problemas cuánticos complejos porque, en muchos casos, son problemas muy sencillos de formular, pero difíciles de resolver. Incluso los superordenadores clásicos más potentes pueden tardar mucho tiempo —quizás incluso más que la edad del universo— a encontrar la solución

Los simuladores cuánticos nos permiten resolver problemas cuánticos complejos porque, en muchos casos, son problemas muy sencillos de formular, pero difíciles de resolver. En términos físicos, el hamiltoniano —el operador de mecánica cuántica asociado a la energía del sistema— es muy sencillo de escribir, pero la medida del espacio de Hilbert —el número de configuraciones de mecánica cuántica que hay que tener en cuenta para describir el sistema— es extremadamente grande. Es precisamente por eso que incluso los superordenadores clásicos más potentes pueden tardar mucho tiempo —quizás incluso más que la edad del universo!— a encontrar la solución. Ahora bien, como el problema es sencillo de formular, se puede utilizar un sistema cuántico físico para diseñar un modelo completamente igual que el problema, dejarlo evolucionar hasta que alcance el estado de interés y después medir las propiedades para obtener la solución del problema cuántico. Justamente eso es lo que se entiende por resolver el problema mediante la simulación cuántica.

Cuando se hace una simulación cuántica, es muy importante poder diseñar el modelo que nos interesa con mucha precisión; dicho en términos físicos, realizar exactamente el hamiltoniano objetivo sin ningún término espurio que pueda modificar el resultado. También es necesario ejercer un control óptimo de la inicialización del sistema. Otro aspecto clave es tener un buen método para sondear el sistema una vez hecha la simulación, con el fin de leer la respuesta del «cálculo». Lo ideal sería disponer del estado de cada uno de los componentes cuánticos del sistema. Finalmente, es fundamental poder escanear los diferentes parámetros del hamiltoniano que se ha realizado, con el fin de

determinar cómo la solución depende de su valor. Es exactamente así como se hacen las simulaciones numéricas en la computación clásica; la diferencia es que en la simulación cuántica el cálculo lo hace el sistema cuántico.

Los requisitos mencionados —óptimo diseño de modelos, inicialización, sondeo y capacidad de escanear de manera independiente los diferentes parámetros del sistema— determinan qué hardware cuántico es el más adecuado para la simulación cuántica. Hoy por hoy, las plataformas experimentales más desarrolladas son los átomos neutros, los iones atrapados, los circuitos superconductores y los circuitos fotónicos. Por otra parte, los simuladores cuánticos pueden funcionar en modo digital o analógico. En principio, los simuladores digitales son más flexibles, es decir, más sencillos de programar a la hora de abordar una gama más amplia de problemas. Pero vista la ausencia de protocolos de corrección de errores, los resultados se ven mucho más afectados por las limitaciones del hardware. A diferencia de los digitales, los simuladores analógicos se tienen que reconfigurar cuando se abordan diferentes tipos de problemas. En cambio, son mucho más robustos ante las imperfecciones del hardware y actualmente permiten simular medidas de sistema mucho mayores. En la práctica, la elección de una plataforma experimental concreta y de un enfoque analógico o digital depende mucho del problema exacto que se quiera simular cuánticamente. A continuación, nos centraremos en los átomos neutros ultrafríos, que es el sistema con el cual se demostró por primera vez la simulación cuántica y que a estas alturas permite alcanzar las medidas mayores del sistema.

## Enfriar, atrapar y obtener imágenes de átomos neutros

Los gases ultradiluidos de átomos neutros constituyen una excelente plataforma para la simulación cuántica. Proporcionan de manera natural muchas partículas idénticas —los átomos— que se tienen que enfriar a temperaturas ultrafrías para entrar en el régimen cuántico. Las primeras fases del enfriamiento se pueden conseguir sin dificultades utilizando láseres, según una invención de S. Chu, C. Cohen-Tannoudji y W. Phillips, el trabajo de los cuales fue reconocido con el Premio Nobel de Física el año 1997. [2][3][4] En la práctica, simplemente se ilumina un conjunto de átomos con rayos láser, la longitud de onda de los cuales (es decir, el color del láser) es cuasi-resonante con una transición atómica. Cuando un átomo absorbe un fotón (una partícula de luz) de un láser, su electrón pasa del estado de energía más baja (fundamental) a un estado excitado. En este proceso, el átomo recibe un impulso que reduce su velocidad a lo largo de la dirección del láser. Como el estado excitado del átomo tiene una vida limitada, el electrón vuelve espontáneamente al estado basal y vuelve a emitir un fotón. En este caso, sin embargo, la dirección de la emisión es aleatoria, y también lo es el impulso asociado. Si el proceso se repite muchas veces, se anula el efecto de los impulsos causados por los acontecimientos de emisión espontáneos, pero el efecto de los impulsos de láser se mantiene y reduce en general la velocidad de los átomos en esta dirección. Cuando se irradian láseres sobre los átomos a lo largo de tres ejes perpendiculares, los átomos se frenan en general. Como la temperatura de un conjunto de átomos está relacionada con su velocidad, su temperatura se reduce mucho. Con este método, se pueden alcanzar temperaturas de la orden de 1 μK —o incluso inferiores, dependiendo de las propiedades de la transición atómica utilizada—; es decir,

sólo una millonésima parte de grado por encima del cero absoluto de la temperatura.

Una vez se han alcanzado estas temperaturas ultrabajas, se pueden utilizar láseres adicionales para atrapar los átomos y someterlos a “paisajes” esculpidos con precisión. Eso se consigue utilizando la llamada fuerza de dipolo óptica.

> El objetivo a largo plazo es utilizar los simuladores cuánticos como herramienta práctica para guiar el diseño de nuevos materiales, dicho en otras palabras, hacer que los simuladores cuánticos tengan un papel parecido a los túneles aerodinámicos que se utilizan para diseñar y probar automóviles y aviones

La fuerza de dipolo óptica se basa en el hecho de que un láser de longitud de onda más pequeña que cualquier transición atómica polarizará un átomo, e inducirá un pequeño dipolo eléctrico. Este dipolo volverá a interactuar con el campo eléctrico del láser, de manera que, para minimizar su energía, el átomo se querrá mover hacia los máximos de intensidad del rayo láser. Así, los átomos serán atraídos hasta el punto hacia donde se enfoca el rayo láser, donde quedarán efectivamente atrapados. El resultado es que un rayo láser enfocado puede actuar como una pinza óptica con respecto al átomo, no sólo atrapándolo, sino también permitiéndole que se mueva mediante el desplazamiento del punto de máxima intensidad de láser. Además, se puede generar esencialmente cualquier paisaje para los átomos utilizando, en vez de un solo fajo de láser, uno modulador de luz espacial —el dispositivo que hay dentro de los proyectores que se utilizan para proyectar presentaciones o películas— que permite crear prácticamente cualquier distribución de luz espacial. Sólo hace falta que los átomos estén lo bastante fríos para quedar atrapados.

Eso nos lleva a otro punto clave. Aunque los átomos enfriados con láser estén muy fríos, no quiere decir que ya se encuentren necesariamente en régimen cuántico. Eso sólo ocurrirá una vez los átomos empiecen a comportarse simultáneamente como partículas y onda, lo cual requiere que el paquete de ondas que está intrínsecamente asociado en cada átomo tenga una extensión mayor que la distancia entre átomos vecinos, de manera que puedan surgir efectos de interferencia cuántica entre diferentes átomos. Esta situación sólo se produce a temperaturas todavía más bajas, a escala nK (una mil millonésima de grado por encima del cero absoluto) o incluso inferiores. Estas son las temperaturas más bajas del universo, tal como certificó en el 2008 un Récord Guinness mundial.

E. Cornell, C. Wieman y W. Ketterle fueron galardonados con el Premio Nobel de Física el año 2001 por haber conseguido este régimen cuántico por primera vez. [5][6] Estas temperaturas se pueden alcanzar mediante una técnica de refrigeración adicional que es conceptualmente análoga a cómo se enfría una taza de café caliente soplando sobre su

superficie. A causa de esta semejanza, recibe el nombre de enfriamiento por evaporación. Para que esta técnica funcione, los átomos tienen que interaccionar entre sí: lo hacen chocantdo los unos contra los otros, que también es el recurso básico que utilizamos para diseñar modelos de interacción con átomos ultrafríos (aunque también son posibles otros tipos de interacciones más complejas).

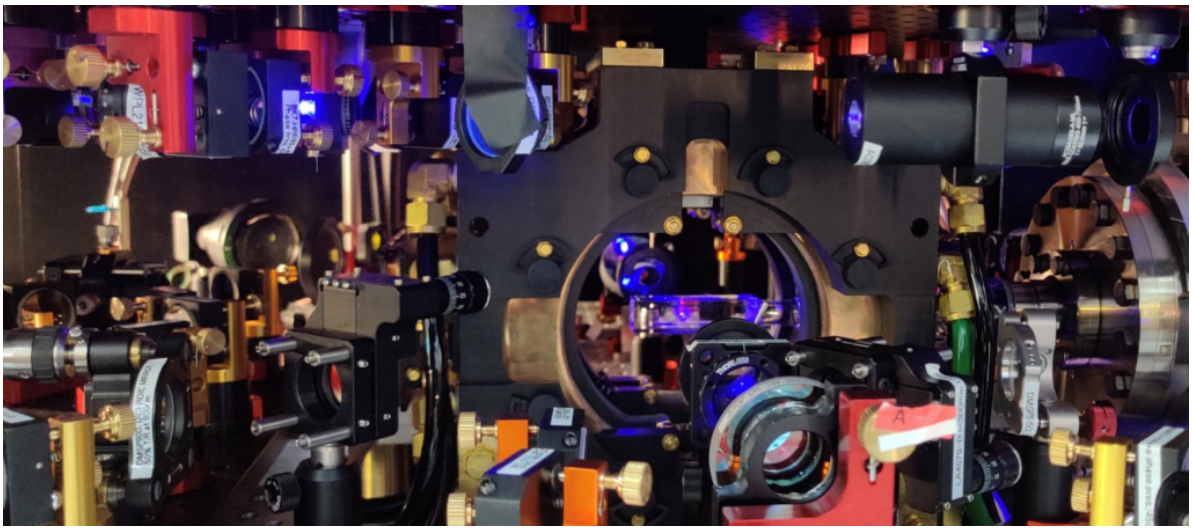


Figura 1.1. Uno de los simuladores cuánticos con átomos neutros ultrafríos del ICFO, donde los átomos de estroncio se enfrían con láser hasta temperaturas μK.

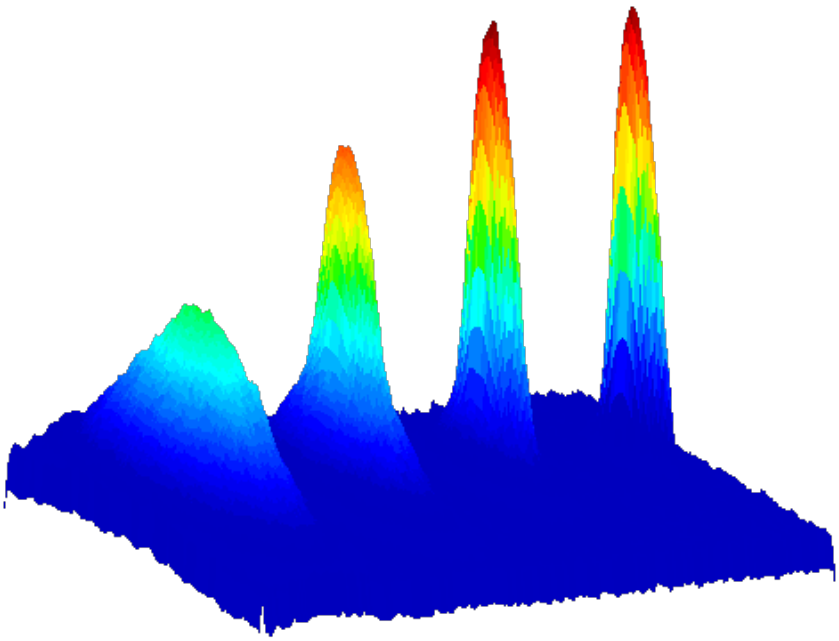


Figura 1.2. Primer condensado de Bose-Einstein (un conjunto de átomos bosónicos en régimen cuántico) realizado en Catalunya en 2015 por nuestro grupo del ICFO. La imagen muestra cómo se modifica la distribución de velocidades de un gas de átomos de potasio cuando se pasa del régimen clásico al cuántico.

Una vez alcanzado el régimen cuántico, los átomos se comportarán de manera muy diferente según si tienen un número par o impar de componentes; dicho en términos físicos, si su momento angular intrínseco (su spin) toma valores enteros o semienteros. En el primer caso, los átomos se llaman bosones, y todos tienden a ocupar el mismo estado. En el segundo caso, hablamos de fermiones, y dos átomos idénticos nunca pueden estar en el mismo estado al mismo tiempo. Tener estas dos clases de átomos nos permite imitar el comportamiento de los diferentes tipos de partículas que existen en la naturaleza: las partículas de materia —como electrones, protones, cuarks, etc. — son fermiones, mientras que las interacciones entre sí surgen del intercambio de partículas bosónicas —por ejemplo, fotones para fuerzas electromagnéticas.

Finalmente, para leer el resultado de una simulación cuántica, es fundamental poder detectar el estado del sistema con mucha precisión. El ideal sería hacerlo en el nivel de átomo individual, lo cual se puede conseguir irradiando luz resonante sobre una transición atómica. Después de absorber los fotones correspondientes, los átomos volverán a emitir luz de fluorescencia. Recogiendo los fotones de fluorescencia con un objetivo de microscopio y formando la imagen en una cámara CCD, se puede obtener la distribución espacial del sistema con una resolución que llega hasta cada átomo individual. [7]

Así pues, los átomos neutros ultrafríos reúnen todos los elementos necesarios para hacer simulaciones cuánticas exitosas. Nos proporcionan muchas partículas idénticas la naturaleza de las cuales (bosones o fermiones) se puede seleccionar fácilmente, y se pueden llevar al régimen cuántico. Se pueden hacer interactuar entre sí y se pueden someter a varios paisajes energéticos, cosa que permite realizar una amplia variedad de modelos. Los parámetros de estos modelos se pueden escanear de manera flexible, cosa que permite “solucionarlos”. Y esta solución se puede leer detectando el estado de cada átomo de una manera muy precisa. En conclusión, los átomos neutros ultrafríos ofrecen una forma extremamente maleable de materia cuántica para llevar a cabo simulaciones cuánticas.

## De la ingeniería de materiales artificiales a la exploración de estados exóticos de la materia

Concluimos este artículo analizando algunos ejemplos de problemas cuánticos difíciles que se pueden abordar con estos sistemas. El primer ejemplo tiene que ver con las propiedades de conductancia eléctrica de los sólidos, un problema que se presta a ser abordado por medio de simulación cuántica. Se trata de una situación que implica muchas partículas cuánticas: los electrones. Cuando sus interacciones son muy fuertes, pueden resultar sumamente difíciles de abordar con métodos clásicos. Al mismo tiempo, es un problema que

también tiene aplicaciones prácticas importantes. Un ejemplo clave es la superconductividad a alta temperatura, es decir, el hecho de que ciertos materiales conducen la electricidad sin sufrir ninguna pérdida a temperaturas mucho más altas de las que se observan habitualmente. Este fenómeno se descubrió en los años ochenta del siglo pasado, sin embargo, a pesar de su importancia tecnológica —por ejemplo, para fabricar imanes de alto campo para aplicaciones tan cruciales como los reactores de fusión— todavía se entiende sólo parcialmente. La simulación cuántica supone una oportunidad para aclarar los mecanismos que hay detrás de la superconductividad a alta temperatura.

Con el fin de investigar estos fenómenos, hace falta que un simulador cuántico diseñe un material artificial. Cuando se consideran las propiedades de un material como conductor electrónico, los dos ingredientes clave son los electrones y la estructura cristalina bajo la cual evolucionan. En un simulador cuántico de átomos ultrafríos, se pueden utilizar átomos fermiónicos para que imiten el papel de los electrones. La estructura cristalina se consigue mediante rayos láser interferentes, que crearán un potencial periódico —muy parecido a las hueveras— para los átomos. De hecho, la interferencia de dos rayos láser que se propagan en sentido contrario da lugar a una onda estacionaria con una sucesión de franjas brillantes y oscuras, y, escogiendo adecuadamente la longitud de onda de los láseres, se pueden atrapar los átomos en las franjas brillantes. Además, interfiriendo no sólo dos sino varios rayos láser, y ajustando adecuadamente los ángulos, las longitudes de onda y las intensidades, es posible realizar materiales artificiales bidimensionales y tridimensionales básicamente con cualquier estructura cristalina. [8]

Estos sistemas son sin duda los “sólidos” más puros y limpios existentes en la naturaleza, y se puede utilizar la adaptabilidad para investigar una amplia gama de materiales —aislantes, conductores, superconductores e imanes— así como para entender cuáles son los ingredientes clave que dan lugar a un comportamiento de interés. El objetivo a largo plazo es utilizar los simuladores cuánticos como herramienta práctica para guiar el diseño de nuevos materiales, probando ideas y conceptos nuevos antes de sintetizar los compuestos correspondientes en un laboratorio. Dicho en otras palabras, hacer que los simuladores cuánticos tengan un papel parecido a los túneles aerodinámicos que se utilizan para diseñar y probar automóviles y aviones. En Catalunya, desde el ICFO (el Instituto de Ciencias Fotónicas, situado en Castelldefels, en el área metropolitana de Barcelona) hemos desarrollado un simulador cuántico ideal para este tipo de cálculos cuánticos, que nos permitirá diseñar materiales artificiales controlando cada átomo, y leyendo la solución de los problemas a escala de átomo individual y de lugar individual.

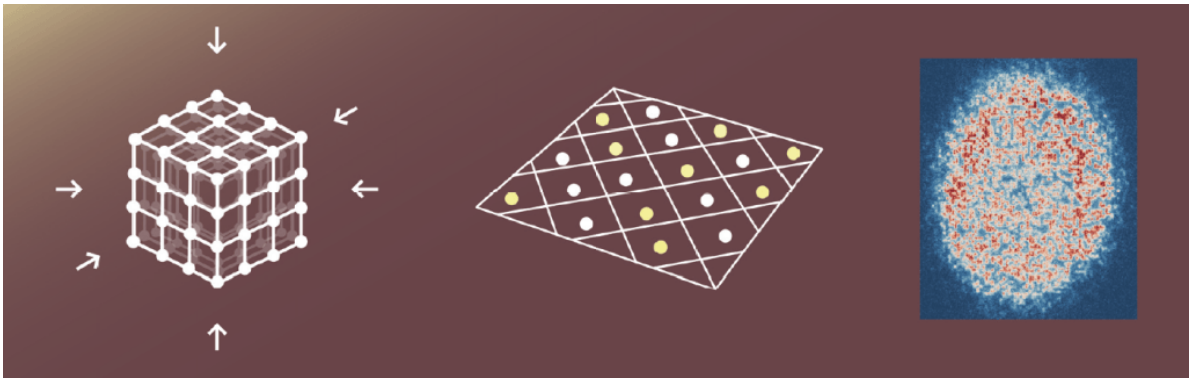


Figura 2. Ingeniería de materiales artificiales con átomos ultrafríos en cristales de luz. Izquierda: disposición de rayos láser interferentes que conducen a un cristal tridimensional, conocido como red óptica. Centro: esquemas de una red óptica, donde los átomos quedan atrapados en una serie de pozos potenciales y experimentan un paisaje de huevera. Derecha: una de las primeras imágenes de átomos de estroncio en una red óptica hecha en el simulador cuántico del ICFO, en el año 2023. Las imágenes de fluorescencia permiten ver cada átomo individual, que en la imagen aparecen como un punto brillante.

Otro tipo de problemas para los cuales los simuladores cuánticos ofrecen una ventaja importante es la exploración de fases exóticas de la materia. Los átomos ultrafríos nos permiten obtener formas de materia cuántica que han existido en la mente de los físicos durante décadas como construcciones abstractas, pero que hasta ahora no se han podido observar en los sistemas naturales, ya sea porque corresponden a regímenes de parámetros extremos no accesibles a la naturaleza —como campos magnéticos extremamente fuertes, materiales sometidos a un estrés enorme o temperaturas irrealmente altas— o porque se espera que se produzcan en sistemas dónde hacer mediciones es extremamente difícil (si no imposible); por ejemplo, el núcleo de una estrella de neutrones o el interior de un núcleo. Aunque el interés por estos problemas es, en general, fundamentalmente científico, más que no aplicado, poder hacer experimentos en los laboratorios en este ámbito no sólo es muy emocionante para los científicos, sino que también nos aporta avances en nuestra comprensión de la naturaleza que, sin duda, se extenderán a otras áreas del conocimiento.

En el ICFO disponemos de un simulador cuántico especializado en este tipo de problemas exóticos. Por ejemplo, durante los últimos años, hemos realizado líquidos cien millones de veces más diluidos que el agua y un millón de veces más delgados que el aire, y que existen a causa de efectos cuánticos minúsculos —las llamadas fluctuaciones cuánticas— que normalmente son muy difíciles de observar. [9] También hemos diseñado materia cuántica quiral, en la cual las interacciones entre los átomos son diferentes según si se mueven hacia la derecha o hacia la izquierda. Eso nos ha permitido observar fenómenos que se habían predicho en el ámbito teórico hace casi veinte años, pero que no se habían visto nunca en un laboratorio. [10] Recientemente, hemos obtenido una fase muy intrigante de la materia, un supersólido, que fluye sin fricción a la vez que cristaliza espontáneamente. Estos son sólo algunos ejemplos de las formas sumamente extrañas de la materia que existen cuando nos acercamos mucho al cero absoluto.

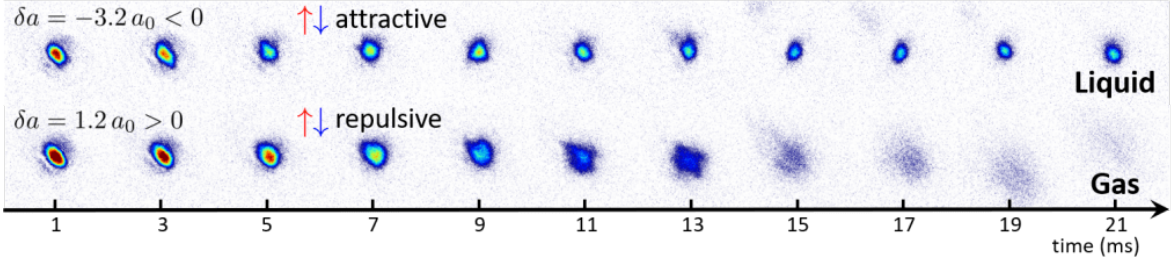



Figura 3. Observación de fases cuánticas exóticas de la materia con simuladores cuánticos; aquí, gotas de líquido cuántico en una mezcla de dos gases de átomos bosónicos de potasio con interacciones en competencia. Al abrir una caja de láser en tiempo t = 0 ms, un gas se

expande mientras un líquido mantiene su forma porque ha formado una gota

## Conclusión

En este artículo, hemos hecho una breve introducción a la simulación cuántica: el arte de resolver problemas cuánticos difíciles que los ordenadores tradicionales (clásicos) no pueden abordar y de obtener nuevas formas de materia cuántica más allá de lo que es accesible a la naturaleza. Nos hemos referido al hecho de que los simuladores cuánticos se pueden entender como ordenadores cuánticos (en muchos casos analógicos) de finalidad especial. Acto seguido, hemos presentado los átomos neutros ultrafríos como un hardware cuántico muy avanzado del cual ya podemos disponer para hacer estas simulaciones cuánticas. Finalmente, hemos comentado algunos de los problemas que se exploran actualmente con simuladores cuánticos, poniendo como ejemplo algunas de las capacidades que hemos desarrollado en Catalunya durante los últimos años. La simulación cuántica es un campo que evoluciona muy rápidamente: en el futuro próximo esperamos ver un aumento constante tanto de la calidad como de la potencia del hardware de simulación cuántica, así como de la gama de problemas que se pueden resolver mediante esta técnica.

### REFERENCIAS Y NOTAS


1 — Feynman, R. P. (1982). «Simulating physics with computers». *International Journal of Theoretical Physics*, 21: 467–488.
2 — Chu S. (1998). «Nobel Lecture: The manipulation of neutral particles». *Review of Modern Physics*, 70: 685.
3 — Phillips, W. D. (1998). «Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms». *Review of Modern Physics*, 70: 721.
5 — Cohen-Tannoudji, C. N. (1998). «Nobel Lecture: Manipulating atoms with photon». *Review of Modern Physics* 70: 707.
5 — Cornell, E. A; Wieman, C. E. (2002). «Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments». *Review of Modern Physics*, 74: 875.
6 — Ketterle, W. (2002). «Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser». *Review of Modern Physics*, 74: 1131.
7 — Gross, C.; Bakr, W. S. (2021). «Quantum gas microscopy for single atom and spin detection». *Nature Physics*, 17: 1316–1323.
8 — Greiner, M.; Fölling, S. (2008). «Optical lattices». *Nature*, 453: 736–738.
9 — Cabrera, C. R.; Tanzi, L.; Sanz, J.; Naylor, B.; Thomas, P.; Cheiney, P.; Tarruell, L. (2018). «Quantum liquid droplets in a mixture of Bose-Einstein condensates». Science, 359: 301-304.
10 — Frölian, A.; Chisholm, C. S.; Neri, E.; Cabrera, C. R.; Ramos, R.; Celi, A.; Tarruell, L. (2022). «Realizing a 1D topological gauge theory in an optically dressed BEC». *Nature*, 608: 293–297.



**Leticia Tarruell**

Leticia Tarruell es investigadora en el Instituto de Ciencias Fotónicas (ICFO). Estudió Física en Madrid y París, y obtuvo el doctorado en 2008, con una tesis sobre la superfluidez fermiónica en la École Normale Supérieure de París. Durante el postdoctorado, estudió los gases de Fermi en redes ópticas en la ETH Zürich. Después de trabajar como investigadora CNRS en el Instituto de Óptica de Burdeos, se incorporó al Instituto de Ciencias Fotónicas (ICFO) como directora de grupo en 2013, y en 2022 pasó a ser profesora ICREA. El grupo de investigación Ultracold Quantum Gases que ha creado en el ICFO lleva a cabo experimentos de simulación cuántica con mezclas de condensaciones de Bose-Einstein de potasio, gases de estroncio ultrafríos en redes ópticas y agrupaciones de átomos de Rydberg. Tarruell fue galardonada en 2015 con el Premio Investigador Joven otorgado por la Real Sociedad Española de Física. En 2016 recibió una beca Ramón y Cajal, y en 2020 una beca de consolidación del Consejo Europeo de Investigación.