INVESTIGACIÓN Y APLICACIONES PRÁCTICAS

Simulación cuántica: configurando el horizonte de la tecnología del futuro

Maciej Lewenstein, Joana Fraxanet, Tymoteusz Salamon



Cables quàntics i el planeta Terra. Conceptualització: Luisa Quiroga

Aunque los medios de comunicación a menudo plantean la computación cuántica en el marco de una revolución, la computación cuántica es, fundamentalmente, una extensión del esfuerzo humano persistente por acelerar la transferencia de información y aumentar la densidad. Este viaje empezó con datos pictográficos que civilizaciones antiguas grababan en las paredes de las cuevas, y después evolucionó hacia el uso del papel, que hacía posible transportar la información escrita por medio de palomas o de caballos. Por otra parte, la información pasó de los pictogramas a los alfabetos, cosa que permitió una codificación más densa de la información. La invención de la tipografía aumentó la velocidad de creación y reproducción de información más allá de la escritura a mano. Pero el cambio más sustancial llegó con el telégrafo, que utilizaba la electricidad como portadora de información.

Curiosamente, eso marcó un límite aproximado para la evolución de la velocidad de la distribución de la información. Con la información desplazándose por los cables eléctricos, aproximadamente al 70%-80% de la velocidad de la luz, el aumento conseguido con la fibra óptica no fue gran cosa en comparación con el cambio que representó pasar de los caballos a la electricidad. El aspecto revolucionario del telégrafo también se basa en el uso de electrones para codificar la información. Simplificándolo, la ausencia de un electrón se representa con un 0, mientras que su presencia simboliza el 1; se trata de un sistema

binario que codifica toda la información necesaria, ahora conocida como bit, que todavía se utiliza en todos nuestros dispositivos electrónicos.

¿Así pues, qué es la computación cuántica y por qué resulta tan atractiva? En esencia, es un paso progresivo más allá del método binario contemporáneo de codificación y procesamiento de la información. La computación cuántica profundiza más, controlando el estado del portador y codificando información en su estructura (el *spin* de un electrón o la polarización de un fotón, por ejemplo), etiquetada como qbit. Eso facilita que el procesamiento y la transferencia de la información sean más densos y, por lo tanto, más eficientes, el objetivo último de todas las exploraciones científicas en computación cuántica.

> La computación cuántica es, fundamentalmente, una extensión del esfuerzo humano persistente por acelerar la transferencia de información y aumentar la densidad. En esencia, es un paso progresivo más allá del método binario contemporáneo de codificación y procesamiento de la información

No obstante, esta perspectiva innovadora para transmitir y procesar información tiene implicaciones sustanciales. Requiere enfoques completamente nuevos para el procesamiento de la información y utilizar sistemas cuánticos (qbits) como portadores de esta información. Las reglas de la física cuántica, como el entrelazamiento y la superposición de los estados 0 y 1, se tienen que aprovechar para un procesamiento más rápido de la información, lo cual da lugar a una ventaja cuántica. Esta ventaja ocurre cuando un ordenador cuántico supera uno clásico en una tarea computacional. Pero para conseguirlo hace falta diseñar puertas lógicas completamente nuevas y fabricarlas físicamente, garantizar la conectividad total entre los qbits y establecer estrategias innovadoras para minimizar los posibles errores. La información codificada en sistemas cuánticos es extremamente delicada y determinados factores ambientales, como la temperatura, pueden alterarla. Además, la falta de algoritmos cuánticos demostrados más rápidos que los ordenadores clásicos es un obstáculo notable, con un progreso limitado desde la introducción de los algoritmos de Shor (1994) y de Grover (1996).

Por lo tanto, quizás alguien se preguntará si la computación cuántica no es simplemente una exageración. Nosotros, sin embargo, consideramos que es más que una moda pasajera: es un viaje científico importante y trascendente. Puede ser que el escepticismo del público sea consecuencia de promesas exageradas hechas por empresas cuánticas y que no se han podido materializar. Además, parece que es excesiva la orientación a conseguir la supremacía cuántica. Nosotros sugerimos ver la computación cuántica como una empresa científica nueva y compartida. Ya nos ha permitido manipular átomos, fotones, electrones y mucho más maneras que nunca nos habríamos podido imaginar. La computación cuántica

ha estimulado enormes avances científicos y tecnológicos en muchas áreas; por ejemplo, la fabricación de fotónica integrada, los circuitos superconductores, la criogenia, el control de la luz, el desarrollo de algoritmos y la generación de entrelazamiento. Estas consecuciones por sí solas justifican el apoyo y el desarrollo continuos de la computación cuántica, incluso si la supremacía cuántica práctica no se materializa nunca.

Una ventaja innegable de desarrollar un ordenador cuántico universal sería la capacidad de crear un simulador cuántico digital, capaz de simular cualquier material o reacción química, un objetivo imposible de alcanzar con los ordenadores clásicos. Sorprendentemente, para eso no se necesitan nuevos algoritmos: la comunidad de físicos ya ha desarrollado el formalismo necesario para estas simulaciones y está a punto para implementarlas en un simulador cuántico digital cuando esté disponible. Creemos que esta es una de las aplicaciones más prometedoras e impactantes de la computación cuántica.

Sin embargo, hasta que no se resuelvan los problemas del ordenador cuántico universal con corrección de errores, la obtención de aplicaciones realistas y prácticas de la computación cuántica que sean importantes para la ciencia y la tecnología continuará en el dominio de los ordenadores cuánticos de finalidad especial, es decir, los simuladores cuánticos.

La idea detrás de la simulación cuántica se puede esbozar brevemente de la manera siguiente. Sabemos que existen muchos fenómenos cuánticos interesantes como la superconductividad, que pueden tener aplicaciones tecnológicas importantes. Estos fenómenos a menudo son difíciles de describir por medio de ordenadores clásicos. En cambio, podemos utilizar otro sistema cuántico más sencillo y que se puede controlar mejor para simular, comprender y controlar estos fenómenos, tal como propusieron inicialmente Y. I. Manin y R. P. Feynman. Este sistema funcionaría, pues, como un ordenador cuántico de finalidad especial, y eso es lo que denominamos simulador cuántico.

Actualmente ya hay varias plataformas bien desarrolladas en que se hace simulación cuántica y se ha conseguido la supremacía cuántica «práctica». En este punto, también tenemos que remarcar que la simulación cuántica puede ser analógica o digital. En el último caso, cualquier plataforma que ofrezca herramientas para la computación cuántica universal también se puede utilizar con finalidades especiales, es decir, para la simulación cuántica. En los siguientes párrafos presentamos algunos ejemplos de la larga lista de plataformas fácilmente disponibles.

Plataformas de simulación cuántica

Por una parte, grandes empresas como Google y D-Wave utilizan qbits superconductores, que permiten, en principio, una computación cuántica ruidosa, pero universal, y que muy a menudo se utilizan para la simulación cuántica digital. Otras opciones para la simulación cuántica digital son el circuito QED —sistemas de qbits superconductores situados en microcavidades—, puntos cuánticos, qbits de spin en semiconductores, sistemas fotónicos —que, combinados con el recuento de fotones, pueden imitar un ordenador cuántico universal— o iones atrapados, que permiten la computación cuántica universal, pero que

también se pueden utilizar como simuladores cuánticos analógicos para describir, por ejemplo, sistemas de spin semientero, en lugar de modelos de Hubbard.

> Una ventaja innegable de desarrollar un ordenador cuántico universal sería la capacidad de crear un simulador cuántico digital, capaz de simular cualquier material o reacción química, un objetivo imposible de alcanzar con los ordenadores clásicos

Por otra parte, los átomos ultrafríos son buenos candidatos para la simulación cuántica analógica y se pueden capturar con trampas o, más a menudo, con redes ópticas. Son muy flexibles y permiten simular modelos complejos de Hubbard, así como sistemas de spin. Otras plataformas para la simulación cuántica analógica son los átomos de Rydberg, unos átomos que se pueden excitar hasta estados de Rydberg altos y quedar atrapados en pinzas ópticas, muy útiles para imitar sistemas de spin con interacciones de largo alcance; o los sistemas twistrònics, doble capa de grafeno con rotación u otros sistemas de materiales 2D. Por un pequeño ángulo de giro «mágico», se forman patrones de muaré periódicos a escala de longitud mucho mayor que la escalera típica de la materia condensada, de manera tal que se pueden considerar como simuladores cuánticos de materia condensada.

Todas estas plataformas de simulación cuántica ya se utilizan para las tareas y objetivos que se mencionan al final de este apartado. La aplicación más desarrollada es el estudio de los problemas fundamentales de la física, en la que se cree que muchos de los resultados obtenidos alcanzan la ventaja cuántica. En segundo lugar, se pueden utilizar para aplicaciones de la química cuántica, si bien este campo es bastante nuevo y todavía está lejos de la precisión y la exactitud de la química cuántica teórica contemporánea. Finalmente, la simulación cuántica también se puede aplicar a problemas de optimización clásicos o cuánticos para la tecnología. Esta aplicación también se encuentra en una fase inicial y todavía no puede competir con los métodos clásicos de los superordenadores.

En las próximas décadas, tal como se refleja claramente en los futuros programas de Quantum Flagship, esperamos que las plataformas utilizadas se mantengan igual, aunque los retos y los enfoques serán muy diferentes. Los simuladores cuánticos del futuro tendrán que ser dispositivos robustos, escalables, programables, accesibles externamente y estandarizados, además de verificables, comprobables y certificables. Por otra parte, las prioridades con respecto a tareas y objetivos se invertirán. Se espera que los problemas de optimización aplicables a la tecnología ocupen el primer lugar del podio y que la química cuántica se mantenga en el segundo lugar, mientras que los problemas fundamentales de la física no perderán importancia, pero sí su estatus de ser los únicos problemas en esta área donde se pueden alcanzar ventajas cuánticas prácticas. En resumen, en el futuro la simulación cuántica se ocupará de la lista de prioridades siguiente:

- Generación, manipulación y aplicaciones de estados masivamente entrelazados, útiles, para la comunicación cuántica, la metrología cuántica, la teledetección y la detección.

- Problemas de optimización clásicos y cuánticos en el ámbito de la tecnología.

- Química cuántica, incluidos nuevos métodos de simulación de química cuántica que van más allá de los dispositivos NISQ y los simuladores analógicos.

- Problemas fundamentales de física, con un enfoque específico en simulaciones de sistemas para materia condensada, física de altas energías (FAE) y teoría cuántica de campos (TQC).

Catalunya en el ámbito de la simulación cuántica

En los párrafos siguientes, presentamos algunas simulaciones cuánticas de problemas fundamentales de la física sobre los cuales hoy se hace investigación a Catalunya y analizamos algunas de las grandes consecuciones de la simulación cuántica de los últimos años.

Modelo de Fermi-Hubbard: un sistema clásico paradigmático y notoriamente difícil de simular es, por descontado, el modelo de Fermi-Hubbard, que muchos creen que constituye el tuétano del fenómeno de la superconductividad a alta temperatura. El grupo de Markus Greiner de Harvard es el líder de los simuladores cuánticos de Fermi-Hubbard. Un buen ejemplo de lo que pueden hacer los simuladores cuánticos en este contexto es, como escriben los autores, el siguiente: «Entender los estados cuánticos de muchos cuerpos fuertemente correlacionados es uno de los retos más difíciles de la física moderna. Por ejemplo, todavía hay preguntas fundamentales abiertas sobre el diagrama de fase del modelo de Hubbard, que describe electrones fuertemente correlacionados en sólidos […]. Realizamos el hamiltoniano de Hubbard y buscamos patrones específicos dentro de las imágenes individuales de muchas realizaciones de fermiones ultrafríos fuertemente correlacionados en una red óptica».

Gotas cuánticas: otro tipo de sistemas que suelen ser difíciles de simular son los que presentan inestabilidad intrínseca compensada por fuertes interacciones, fluctuaciones cuánticas u otras mecánicas, que llevan a la creación de solitones autolimitados, gotas líquidas (ver la figura 2) y texturas parecidas. Líquidos y gases son dos fases diferentes de la materia que forman parte de nuestra vida cotidiana. Así como los gases son diluidos, compresibles y adoptan la medida del recipiente que los contiene, los líquidos son densos, tienen un volumen fijo y forman gotas en pequeñas cantidades. Las gotas son conjuntos de partículas que permanecen ligadas por sí mismas y tienen una superficie libre que las separa del medio. Si se aumenta la temperatura, se puede inducir una transición de fase de líquido a gas. Es lo que pasa exactamente cuando hacemos hervir agua en una olla. ¿Pero los gases siempre son diluidos y los líquidos siempre son densos? Normalmente sí, pero las cosas pueden ser muy diferentes a temperaturas muy bajas. Recientemente, el grupo de

Leticia Tarruell de l'ICFO ha creado un líquido cien millones de veces más diluido que el agua y un millón de veces más delgado que el aire.



Figura 1. Visión artística de una gota de líquido cuántico formada mezclando dos gases de átomos de potasio ultrafrío. Adaptación gráfica. Imagen original: ©ICFO/PovarchikStudiosBarcelona

Sistemas fundamentales de materia condensada, FAE y TQC: En los últimos años, se ha prestado una gran atención a la simulación cuántica de modelos FAE (física de alta energía) y a las teorías de gauge en retículo y sistemas relacionados. En este caso, el reto es controlar interacciones de muchos cuerpos: interacciones «magnéticas» sobre las plaquetas del retículo e interacciones «eléctricas» regidas por la ley de Gauss, es decir, la invariabilidad de contraste local.

El modelo de Schwinger: la versatilidad de los iones atrapados los hace especialmente adecuados tanto para la simulación digital como analógica de la teoría de gauge en retículo. Estos sistemas pueden servir como ordenadores cuánticos universales y, en principio, realizar interacciones y restricciones de pocos cuerpos. El grupo de Rainer Blatt consiguió «la primera demostración experimental de una simulación cuántica digital de una teoría de gauge en retículo, realizando electrodinámica cuántica (1 + 1)-dimensional (modelo de Schwinger) en un ordenador cuántico de iones atrapados de pocos qbits». Les interesaba la evolución en tiempo real del mecanismo de Schwinger, que describe la inestabilidad del vacío desnudo (*bare vacuum*) a causa de fluctuaciones cuánticas, y que se manifiesta en la creación espontánea de pares electrón-positrón.

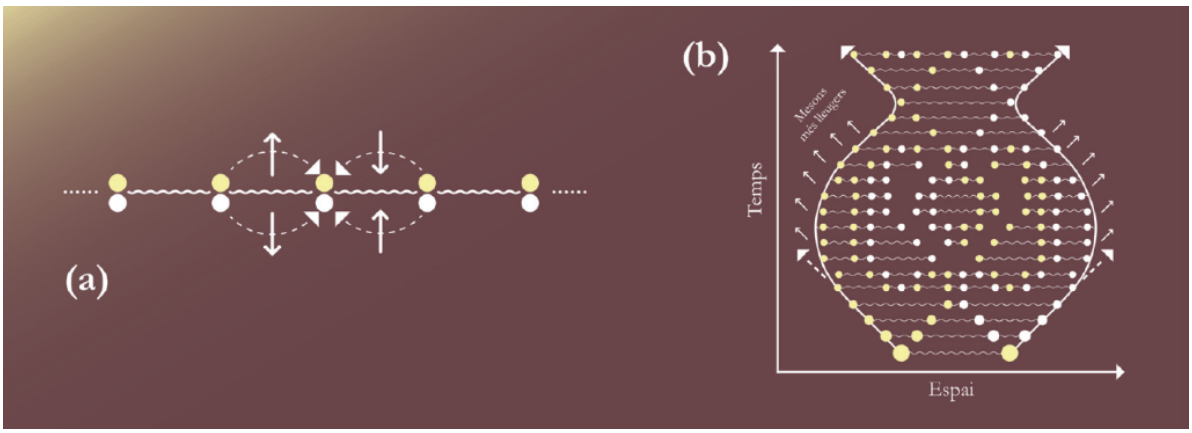


Figura 2. Un par partícula-antipartícula (un mesón) empieza a extenderse y termalizarse, pero enseguida empieza a notar efectos de confinamiento y oscila ad infinitum sin termalización aparente. Crédito de imagen: Titas Chanda

Modelo de Schwinger bosònic: las teorías relativistas cuánticas de gauge son teorías fundamentales de la materia que describen la naturaleza. Son ejemplos paradigmáticos la electrodinámica cuántica —que describe las interacciones electromagnéticas de partículas cargadas y fotones—, la cromodinàmica —que describe las interacciones fuertes de cuarks y gluones- y el modelo estándar, que unifica las dos últimas con las interacciones débiles. A pesar del enorme progreso con respecto a nuestra comprensión de las teorías cuánticas de gauge, las cuestiones relativas al comportamiento de los sistemas descritos por estas teorías en presencia de correlaciones fuertes continúan ampliamente abiertas: desde la naturaleza misma del confinamiento del cuark hasta el comportamiento del cuark-gluón-plasma a altas densidades y temperaturas. Por otra parte, la dinámica cuántica de no equilibrio de las teorías cuánticas de gauge cae fuera del alcance de los ordenadores actuales. Es por eso que se trabaja intensamente para diseñar e investigar simuladores cuánticos de estos tipos de sistemas.

En el modelo de Schwinger, el modelo paradigmático de la teoría cuántica de gauge en una dimensión espacial y en el tiempo, los electrones «cargados» (fermiones) interactúan con los fotones (bosones) en una dimensión. Como las simulaciones cuánticas con fermiones son extremamente difíciles, el grupo de óptica cuántica del ICFO, en colaboración con el grupo de Cracovia de Jakub Zakrzewski, propuso una versión bosònica del modelo de Schwinger. Utilizando métodos de última generación de física teórica, se investigó cómo se comporta la materia bosònica cuando se encuentra en no equilibrio mediante la creación de un par partícula-antipartícula sobre el vacío del sistema. Los tres resultados principales son importantes para entender las teorías cuánticas de gauge en general (ver la figura 3). Este trabajo abre un camino hacia simulaciones cuánticas de teorías cuánticas de gauge en regímenes nuevos e inexplorados.

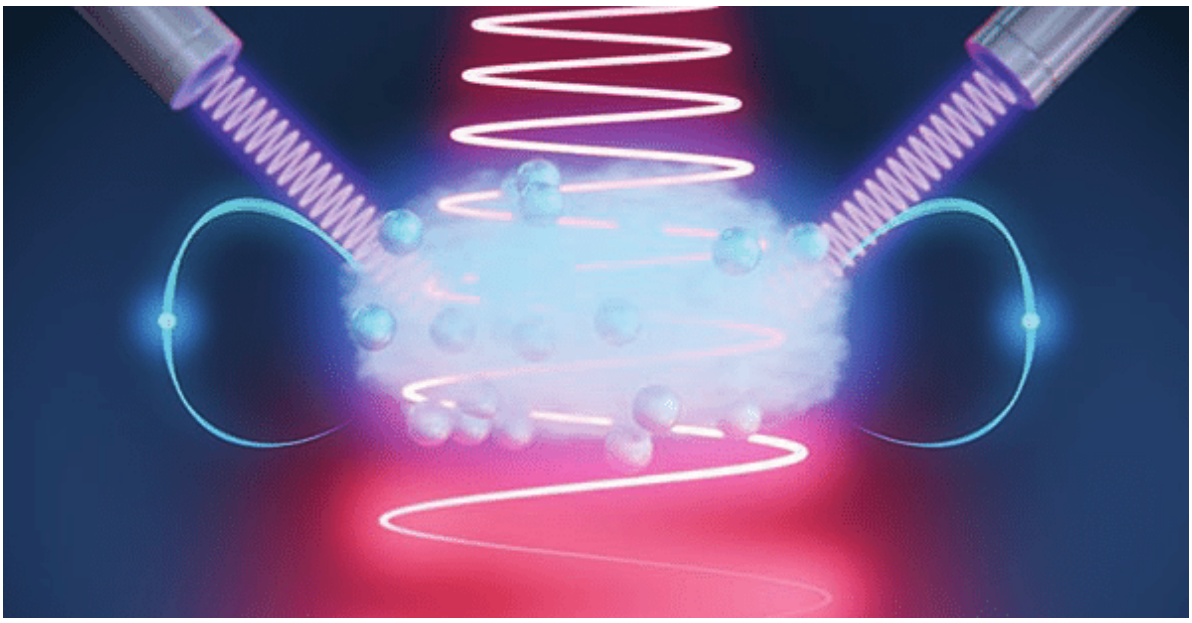


Figura 3. Estados ópticos del gato de Schrödinger en interacción intensa láser-materia. ©ICFO / Scixel – E. Sahagun

Nuevos simuladores cuánticos (NOQIA): recientemente, el ICFO ha propuesto una plataforma completamente nueva para la simulación cuántica de attociencia y procesos ultrarrápidos. Durante las últimas cuatro décadas, se han hecho avances sorprendentes en el campo de las tecnologías de láser y en la comprensión de las interacciones luz-materia en el régimen no lineal. Gracias a eso, los científicos han podido llevar a cabo experimentos sumamente complejos relacionados, por ejemplo, con pulsos de luz ultrarrápidos en el rango visible e infrarrojo, y alcanzar objetivos cruciales como el uso de los mismos electrones de una molécula para obtener imágenes de su estructura y ver cómo se reordena, vibra o se rompe durante una reacción química.

El desarrollo de láseres de alta potencia permitió a los científicos estudiar la física de las interacciones ultraintensas láser-materia. La versión estándar del modelo de estudio, sin embargo, sólo se ocupa de los pulsos de láser de conducción ultracortos y ultrafuertes desde un punto de vista clásico. La famosa teoría conocida como «modelo del hombre simple» o «modelo de las tres fases» —que celebró su 25.º aniversario en el 2019— describía elegantemente la interacción de un electrón con su núcleo padre en un entorno de campo láser fuerte, según los procesos clásicos y cuánticos. No obstante, como estos pulsos de láser son altamente coherentes y contienen una enorme cantidad de fotones, la descripción de la interacción en el campo láser fuerte hasta ahora ha sido incompleta, porque el sistema atómico se trata de una manera cuántica mientras que el campo electromagnético se trata de una manera clásica.

> El campo de los simuladores cuánticos es una de las áreas más bonitas de la física contemporánea, que mezcla todas las ramas y los géneros de la física

Actualmente, en la descripción de los procesos más relevantes de la física de las interacciones ultraintensas láser-materia —por ejemplo, generación de altos armónicos, ionización por encima del umbral, difracción de electrones inducida por láser, ionización multielectrónica secuencial y no secuencial, etc.— los efectos de fluctuación cuántica del campo eléctrico láser, para no hablar de los campos magnéticos, son insignificantes.

Sin embargo, la naturaleza cuántica de la totalidad de los campos electromagnéticos siempre está presente en estos procesos, cosa que plantea la pregunta siguiente: ¿esta naturaleza cuántica se manifiesta? ¿Y en qué situaciones aparece? En un estudio reciente llevado a cabo con el grupo FORTH de Paraskevas Tzallas se ha informado sobre la demostración teórica y experimental que las interacciones láser-átomo intensas pueden dar lugar a la generación masiva de estados de luz altamente no clásicos, uno de los Sants Greals de la simulación cuántica contemporánea (ver la figura 4). Estos resultados se han obtenido utilizando el proceso de generación de altos armónicos en átomos, en los que un gran número de fotones de un pulso de láser de conducción de frecuencia infrarroja se convierten en fotones de frecuencias más altas en el rango espectral ultravioleta extremo. La teoría electrodinámica cuántica formulada en este estudio predice que, si el estado inicial del láser conductor es coherente, se mantiene coherente, pero cambia en amplitud después de las interacciones con el medio atómico. De manera parecida, los estados cuánticos de los modos armónicos se vuelven coherentes con amplitudes coherentes pequeñas. Sin embargo, el estado cuántico del pulso de láser que impulsa la generación de altos armónicos puede ser acondicionado para tener en cuenta esta interacción, y eso lo transforma en el llamado estado óptico del gato de Schrödinger. Este estado corresponde a una superposición cuántica de dos estados de luz coherentes diferentes: el estado inicial del láser y el estado coherente reducido en amplitud que resulta de la interacción con los átomos.

Disfrutar de la física y más allá

Acabamos este artículo destacando que el campo de los simuladores cuánticos es, en todos los sentidos, una de las áreas más bonitas de la física contemporánea, que mezcla todas las ramas y los géneros de la física y no sólo de la física. La conclusión que siempre repetimos es que hay que disfrutar de la física y más allá. Desde el ICFO nos gusta ir más allá de la física para intentar interpretar los procesos de la mecánica cuántica, y más específicamente la aleatoriedad cuántica en ámbitos como la música de vanguardia contemporánea. Este proyecto se llama sonificació de la física cuántica. También intentamos incorporar procesos aleatorios cuánticos utilizando los generadores de números aleatorios cuánticos auténticos, que nos proporciona QUSIDE, empresa derivada del IFCO. Una de las consecuciones más destacadas de nuestra tarea fue el concierto de casi una hora de duración, «Interpreting Quantum Randomness», presentado en el famoso festival SÓNAR 2021, y el LP de vinilo y el álbum digital disponibles en Bandcamp.

CRÉDITOS

Este artículo es una versión corta y simplificada del capítulo «The Coming Decades of Quantum Simulation» de los mismos autores, Joana Fraxanet, Tymoteusz Salamon y Maciej Lewenstein, en «Sketches of Physics», *Lecture Notes in Physics*, vol. 1.000, eds.: Roberta Citro, Maciej Lewenstein, Angel Rubio, Wolfgang P. Schleich, James D. Wells i Gary P. Zank.



Maciej Lewenstein

Maciej Lewenstein es profesor ICREA en el Instituto de Ciencias Fotónicas (ICFO), donde dirige el grupo de investigación sobre teoría de óptica cuántica desde el año 2005. Físico teórico, sus contribuciones más destacadas son en el ámbito de la física cuántica y la ciencia del attosegundo (la trilionésima parte de un segundo). Autor de más de 500 publicaciones, también ha investigado en el ámbito de las redes ópticas, la física de átomos fríos condensados y la teoría del entrelazamiento cuántico, especialmente en todo lo relacionado con el desarrollo de simuladores cuánticos.



Joana Fraxanet

Joana Fraxanet Morales es investigadora doctoral en el Instituto de Ciencias Fotónicas (ICFO), dentro del grupo de investigación sobre teoría de óptica cuántica. Tiene un máster en Física por la Universidad de Leiden. Sus investigaciones se centran en el campo de los gases atómicos ultrafríos.



Tymoteusz Salamon

Tymoteusz Salamon es investigador doctoral en el Instituto de Ciencias Fotónicas (ICFO) dentro del grupo de investigación sobre teoría de óptica cuántica. Tiene un máster en Física por la Universidad de Ulm. Actualmente, investiga el desarrollo de un simulador cuántico basado en átomos fríos de grafeno bicapa, fuente potencial de superconductividad no convencional.