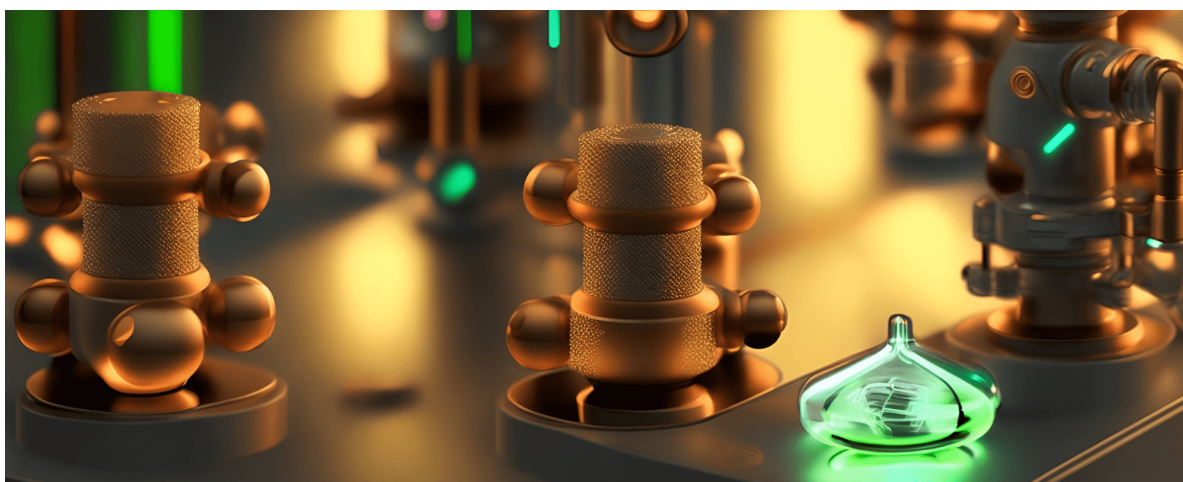


RECERCA I APLICACIONS PRÀCTIQUES

# Resolució de problemes quàntics difícils amb àtoms ultrafreds

Leticia Tarruell



Representació artística d'àtoms ultrafreds. Conceptualització: Luisa Quiroga

## Què és la simulació quàntica?

La computació quàntica ha experimentat un desenvolupament espectacular els darrers anys. El nou paradigma de computació aprofita les propietats de la mecànica quàntica per dur a terme càlculs molt complicats de fer, si no impossibles, mitjançant ordinadors seguint les regles de la física clàssica. Tanmateix, encara haurem de superar problemes formidables abans de disposar d'ordinadors quàntics que funcionin de manera semblant als ordinadors clàssics a què estem acostumats; és a dir, ordinadors que siguin universals (que puguin abordar qualsevol problema), digitals i capaços d'autocorregir-se els errors sorgits en els càlculs per garantir la qualitat del resultat final. És extremadament difícil fer prediccions en un àmbit tan dinàmic, però el consens actual és que caldran anys, potser dècades, abans que màquines quàntiques tan sofisticades siguin una realitat.

No obstant això, per predir el resultat de problemes difícils no sempre són necessaris ordinadors quàntics completament desenvolupats. Abans dels ordinadors clàssics utilitzàvem diverses eines perquè ens ajudessin a fer càlculs complexos. Un exemple excel·lent és l'àbac, l'origen del qual encara es desconeix. Un altre exemple és l'esfera armil·lar, que es va inventar independentment a l'antiga Xina i a l'antiga Grècia, i que es va utilitzar per predir el moviment de les estrelles i els planetes. Podem fer servir dispositius

semblants perquè ens ajudin a resoldre problemes de mecànica quàntica difícils. Com que aquests problemes són de naturalesa quàntica, els dispositius corresponents naturalment també ho seran. Va ser el físic Richard Feynman qui va proposar per primera vegada aquesta idea l'any 1981 i qui va encunyar el terme *simuladors quàntics* per referir-s'hi [1]. Els simuladors quàntics no són res més que ordinadors quàntics que tenen una finalitat especial. De fet, a causa de les limitacions del maquinari quàntic de què disposem actualment, actualment la majoria de dispositius de computació quàntica s'executen en mode de simulació quàntica quan s'intenta obtenir un avantatge quàntic respecte als ordinadors clàssics.

Els simuladors quàntics ens permeten resoldre problemes quàntics complexos que són senzills de formular però difícils de resoldre. Fins i tot els superordinadors clàssics més potents poden trigar molt de temps —potser més que l'edat de l'univers— a trobar-hi solució

Els simuladors quàntics ens permeten resoldre problemes quàntics complexos perquè, en molts casos, són problemes molt senzills de formular, però difícils de resoldre. En termes físics, el hamiltonià —l'operador de mecànica quàntica associat a l'energia del sistema— és molt senzill d'escriure, però la mesura de l'espai de Hilbert —el nombre de configuracions de mecànica quàntica que cal tenir en compte per descriure el sistema— és extremadament gran. És precisament per això que fins i tot els superordinadors clàssics més potents poden trigar molt de temps —potser més que l'edat de l'univers i tot!— a trobar la solució. Ara bé, com que el problema és senzill de formular, es pot utilitzar un sistema quàntic físic per dissenyar un model completament igual que el problema, deixar-lo evolucionar fins que assoleixi l'estat d'interès i després mesurar-ne les propietats per obtenir la solució del problema quàntic. Justament això és el que s'entén per resoldre el problema mitjançant la simulació quàntica.

Quan es fa una simulació quàntica, és molt important poder dissenyar el model que ens interessa amb molta precisió; dit en termes físics, realitzar exactament el hamiltonià objectiu sense cap terme espuri que pugui modificar el resultat. També és necessari exercir un control òptim de la inicialització del sistema. Un altre aspecte clau és tenir un bon mètode per sondejar el sistema un cop feta la simulació, per tal de llegir la resposta del «càlcul». L'ideal seria disposar de l'estat de cadascun dels components quàntics del sistema. Finalment, és fonamental poder escanejar els diferents paràmetres del hamiltonià que s'ha realitzat, a fi de determinar com la solució depèn del seu valor. És exactament així com es fan les simulacions numèriques en la computació clàssica; la diferència és que en la simulació quàntica el càlcul el fa el sistema quàntic.

Els requisits esmentats —òptim disseny de models, inicialització, sondeig i capacitat d’escanejar de manera independent els diferents paràmetres del sistema— determinen quin maquinari quàntic és el més adequat per a la simulació quàntica. Ara com ara, les plataformes experimentals més desenvolupades són els àtoms neutres, els ions atrapats, els circuits superconductors i els circuits fotònics. D’altra banda, els simuladors quàntics poden funcionar en mode digital o analògic. En principi, els simuladors digitals són més flexibles, és a dir, més senzills de programar a l’hora d’abordar una gamma més àmplia de problemes. Però atesa l’absència de protocols de correcció d’errors, els resultats es veuen molt més afectats per les limitacions del maquinari. A diferència dels digitals, els simuladors analògics s’han de reconfigurar quan s’aborden diferents tipus de problemes. En canvi, són molt més robustos davant de les imperfeccions del maquinari i actualment permeten simular mesures de sistema molt més grans. A la pràctica, la tria d’una plataforma experimental concreta i d’un enfocament analògic o digital depèn molt del problema exacte que es vulgui simular quànticament. A continuació, ens centrarem en els àtoms neutres ultrafreds, que és el sistema amb el qual es va demostrar per primera vegada la simulació quàntica i que a hores d’ara permet assolir les mesures més grans del sistema.

## Refredar, atrapar i obtenir imatges d’àtoms neutres

Els gasos ultradiluits d’àtoms neutres constitueixen una excel·lent plataforma per a la simulació quàntica. Proporcionen de manera natural moltes partícules idèntiques —els àtoms— que s’han de refredar a temperatures ultrafredes per entrar en el règim quàntic. Les primeres fases del refredament es poden aconseguir sense dificultats utilitzant làsers, segons una invenció de S. Chu, C. Cohen-Tannoudji i W. Phillips, el treball dels quals va ser reconegut amb el Premi Nobel de Física l’any 1997 [2][3][4]. A la pràctica, simplement s’il·lumina un conjunt d’àtoms amb raigs làser, la longitud d’ona dels quals (és a dir, el color del làser) és quasiressonant amb una transició atòmica. Quan un àtom absorbeix un fotó (una partícula de llum) d’un làser, el seu electró passa de l’estat d’energia més baixa (fonamental) a un estat excitat. En aquest procés, l’àtom rep un impuls que redueix la seva velocitat al llarg de la direcció del làser. Com que l’estat excitat de l’àtom té una vida limitada, l’electró torna espontàniament a l’estat basal i torna a emetre un fotó. En aquest cas, però, la direcció de l’emissió és aleatòria, i també ho és l’impuls associat. Si el procés es repeteix moltes vegades, s’anul·la l’efecte dels impulsos causats pels esdeveniments d’emissió espontanis, però l’efecte dels impulsos de làser es manté i redueix en general la velocitat dels àtoms en aquesta direcció. Quan s’irradien làsers sobre els àtoms al llarg de tres eixos perpendiculars, els àtoms es frenen en general. Com que la temperatura d’un conjunt d’àtoms està relacionada amb la seva velocitat, la seva temperatura es redueix molt. Amb aquest mètode, es poden assolir temperatures de l’ordre d’1  $\mu\text{K}$  —o fins i tot inferiors, depenent de les propietats de la transició atòmica utilitzada—; és a dir, només una milionèsima part de grau per sobre del zero absolut de la temperatura.

Un cop s’han assolit aquestes temperatures ultrabaixes, es poden utilitzar làsers addicionals per atrapar els àtoms i sotmetre’ls a “paisatges” esculpits amb precisió. Això s’aconsegueix utilitzant l’anomenada força de dipol òptica.

L'objectiu a llarg termini és fer servir els simuladors quàntics com a eina pràctica per guiar el disseny de nous materials, és a dir, fer que els simuladors quàntics tinguin un paper semblant als túnels aerodinàmics que s'utilitzen per dissenyar i provar automòbils i avions

La força de dipol òptica es basa en el fet que un làser de longitud d'ona més petita que qualsevol transició atòmica polaritzarà un àtom, i hi induirà un petit dipol elèctric. Aquest dipol tornarà a interactuar amb el camp elèctric del làser, de manera que, per minimitzar la seva energia, l'àtom es voldrà moure cap als màxims d'intensitat del raig làser. Així, els àtoms seran atrets fins al punt cap on s'enfoca el raig làser, on quedaran efectivament atrapats. El resultat és que un raig làser enfocat pot actuar com una pinça òptica respecte a l'àtom, no solament atrapant-lo, sinó també permetent-li que es mogui mitjançant el desplaçament del punt de màxima intensitat de làser. A més, es pot generar essencialment qualsevol paisatge per als àtoms fent servir, en comptes d'un sol feix de làser, un modulador de llum espacial —el dispositiu que hi ha dins dels projectors que s'utilitzen per projectar presentacions o pel·lícules— que permet crear pràcticament qualsevol distribució de llum espacial. Només cal que els àtoms estiguin prou freds per quedar atrapats.

Això ens porta a un altre punt clau. Encara que els àtoms refredats amb làser estiguin molt freds, no vol dir que ja es trobin necessàriament en règim quàntic. Això només s'esdevindrà un cop els àtoms comencin a comportar-se simultàniament com a partícules i ones, la qual cosa requereix que el paquet d'ones que està intrínsecament associat a cada àtom tingui una extensió més gran que la distància entre àtoms veïns, de manera que puguin sorgir efectes d'interferència quàntica entre diferents àtoms. Aquesta situació només es produeix a temperatures encara més baixes, a escala nK (una mil milionèsima de grau per sobre del zero absolut) o fins i tot inferiors. Aquestes són les temperatures més baixes de l'univers, tal com va certificar el 2008 un Rècord Guinness mundial.

E. Cornell, C. Wieman i W. Ketterle van ser guardonats amb el Premi Nobel de Física l'any 2001 per haver aconseguit aquest règim quàntic per primera vegada [5][6]. Aquestes temperatures es poden assolir mitjançant una tècnica de refrigeració addicional que és conceptualment anàloga a com es refreda una tassa de cafè calent bufant sobre la seva superfície. A causa d'aquesta semblança, rep el nom de refredament per evaporació. Perquè aquesta tècnica funcioni, els àtoms han d'interaccionar entre si: ho fan xocant els uns contra els altres, que també és el recurs bàsic que fem servir per dissenyar models d'interacció amb àtoms ultrafreds (encara que també són possibles altres tipus d'interaccions més complexes).

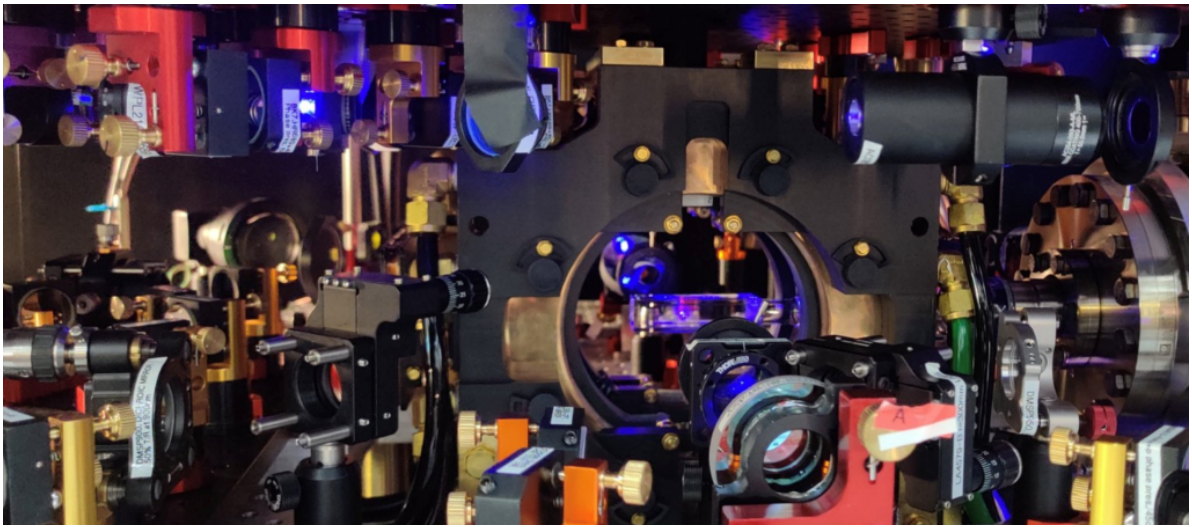


Figura 1.1. Un dels simuladors quàntics amb àtoms neutres ultrafreds de l'ICFO, on els àtoms d'estronci es refreden amb làser fins a temperatures  $\mu\text{K}$ .

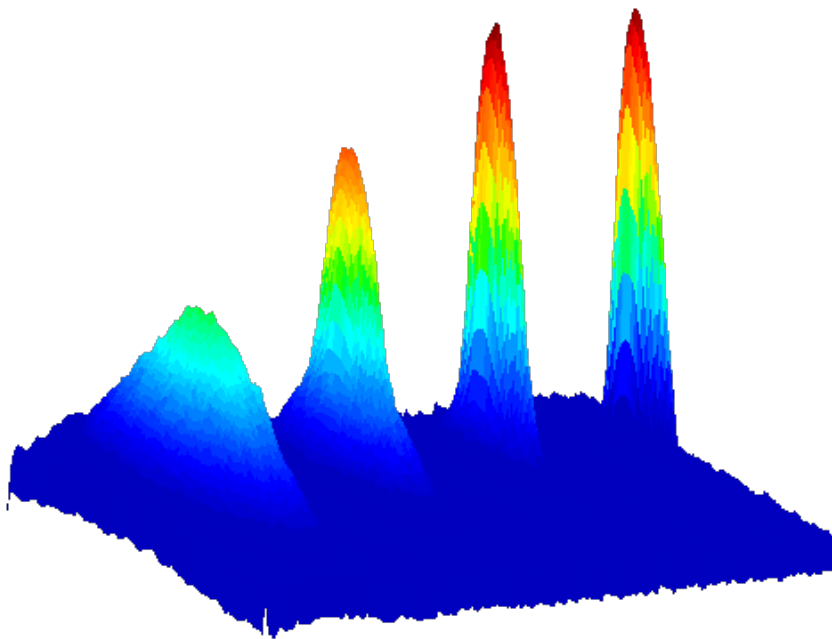


Figura 1.2. Primer condensat de Bose-Einstein (un conjunt d'àtoms bosònics en règim quàntic) realitzat a Catalunya l'any 2015 pel nostre grup de l'ICFO. La imatge mostra com es modifica la distribució de velocitats d'un gas d'àtoms de potassi quan es passa del règim clàssic al quàntic.

Un cop assolit el règim quàntic, els àtoms es comportaran de manera molt diferent segons si tenen un nombre parell o imparell de components; dit en termes físics, si el seu moment angular intrínsec (el seu spin) pren valors enters o semienters. En el primer cas, els àtoms s'anomenen bosons, i tots tendeixen a ocupar el mateix estat. En el segon cas, parlem de fermions, i dos àtoms idèntics mai poden estar en el mateix estat alhora. Tenir aquestes dues classes d'àtoms ens permet imitar el comportament dels diferents tipus de partícules que existeixen a la natura: les partícules de matèria —com ara electrons, protons, quarks, etc.— són fermions, mentre que les interaccions entre si sorgeixen de l'intercanvi de partícules bosòniques —per exemple, fotons per a forces electromagnètiques—.

Finalment, per llegir el resultat d'una simulació quàntica, és fonamental poder detectar l'estat del sistema amb molta precisió. L'ideal seria fer-ho en el nivell d'àtom individual, la qual cosa es pot aconseguir irradiant llum ressonant sobre una transició atòmica. Després d'absorbir els fotons corresponents, els àtoms tornaran a emetre llum de fluorescència. Recollint els fotons de fluorescència amb un objectiu de microscopi i formant la imatge en una càmera CCD, es pot obtenir la distribució espacial del sistema amb una resolució que arriba fins a cada àtom individual [7].

Així doncs, els àtoms neutres ultrafreds reuneixen tots els elements necessaris per fer simulacions quàntiques reeixides. Ens proporcionen moltes partícules idèntiques la naturalesa de les quals (bosons o fermions) es pot seleccionar fàcilment, i es poden portar al règim quàntic. Es poden fer interactuar entre si i es poden sotmetre a diversos paisatges energètics, cosa que permet realitzar una àmplia varietat de models. Els paràmetres d'aquests models es poden escanejar de manera flexible, cosa que permet “solucionar-los”. I aquesta solució es pot llegir detectant l'estat de cada àtom d'una manera molt precisa. En conclusió, els àtoms neutres ultrafreds ofereixen una forma extremament mal·leable de matèria quàntica per dur a terme simulacions quàntiques.

## De l'enginyeria de materials artificials a l'exploració d'estats exòtics de la matèria

Concloem aquest article analitzant alguns exemples de problemes quàntics difícils que es poden abordar amb aquests sistemes. El primer exemple té a veure amb les propietats de conductància elèctrica dels sòlids, un problema que es presta a ser abordat per mitjà de simulació quàntica. Es tracta d'una situació que implica moltes partícules quàntiques: els electrons. Quan les seves interaccions són molt fortes, poden resultar summament difícils d'abordar amb mètodes clàssics. Al mateix temps, és un problema que també té aplicacions pràctiques importants. Un exemple clau és la superconductivitat a alta temperatura, és a dir, el fet que certs materials condueixen l'electricitat sense patir cap pèrdua a temperatures molt més altes de les que s'observen habitualment. Aquest fenomen es va descobrir als anys vuitanta del segle passat, però, malgrat la seva importància tecnològica —per exemple, per fabricar imants d'alt camp per a aplicacions tan crucials com els reactors de fusió— encara s'entén només parcialment. La simulació quàntica suposa una oportunitat per aclarir els mecanismes que hi ha darrere de la superconductivitat a alta temperatura.

Per tal d'investigar aquests fenòmens, cal que un simulador quàntic dissenyi un material artificial. Quan es consideren les propietats d'una material com a conductor electrònic, els dos ingredients clau són els electrons i l'estructura cristal·lina sota la qual evolucionen. En un simulador quàntic d'àtoms ultrafreds, es poden fer servir àtoms fermiònics perquè imitin el paper dels electrons. L'estructura cristal·lina s'aconsegueix mitjançant raigs làser interferents, que crearan un potencial periòdic —molt semblant a les oueres— per als àtoms. De fet, la interferència de dos raigs làser que es propaguen en sentit contrari dona lloc a una ona estacionària amb una successió de franges brillants i fosques, i, escollint adequadament la longitud d'ona dels làsers, es poden atrapar els àtoms a les franges brillants. A més, interferint no només dos sinó diversos raigs làser, i ajustant-ne adequadament els angles, les longituds d'ona i les intensitats, és possible realitzar materials artificials bidimensionals i tridimensionals bàsicament amb qualsevol estructura cristal·lina [8].

Aquests sistemes són sens dubte els “sòlids” més purs i nets existents a la natura, i se'n pot utilitzar l'adaptabilitat per investigar una àmplia gamma de materials —aïllants, conductors, superconductors i imants— així com per entendre quins són els ingredients clau que donen lloc a un comportament d'interès. L'objectiu a llarg termini és fer servir els simuladors quàntics com a eina pràctica per guiar el disseny de nous materials, provant idees i conceptes nous abans de sintetitzar els compostos corresponents en un laboratori. Dit en altres paraules, fer que els simuladors quàntics tinguin un paper semblant als túnels aerodinàmics que s'utilitzen per dissenyar i provar automòbils i avions. A Catalunya, des de l'ICFO (l'Institut de Ciències Fotòniques, situat a Castelldefels, a l'àrea metropolitana de Barcelona) hem desenvolupat un simulador quàntic ideal per a aquest tipus de càlculs quàntics, que ens permetrà dissenyar materials artificials controlant cada àtom, i llegint la solució dels problemes a escala d'àtom individual i de lloc individual.

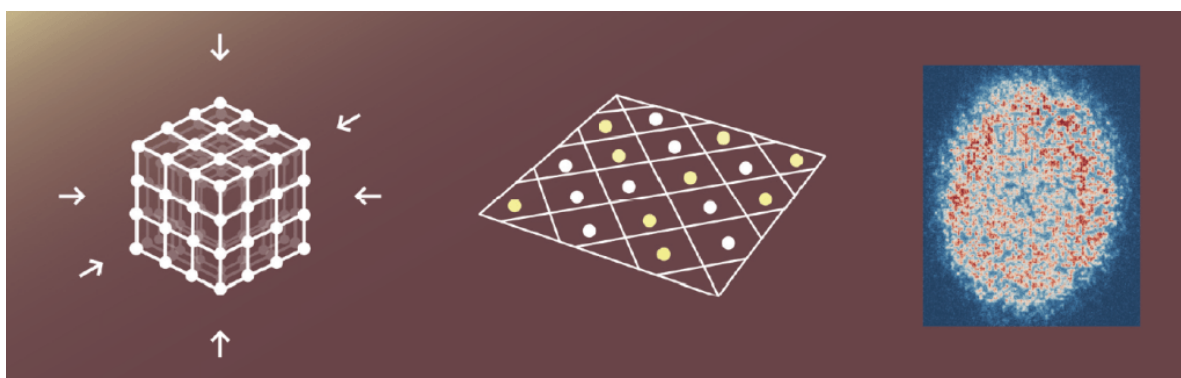


Figura 2. Enginyeria de materials artificials amb àtoms ultrafreds en cristalls de llum. Esquerra: disposició de raigs làser interferents que condueixen a un cristall tridimensional, conegut com a xarxa òptica. Centre: esquemes d'una xarxa òptica, on els àtoms queden atrapats en una sèrie de pous potencials i experimenten un paisatge d'“ouera”. Dreta: una de les primeres imatges d'àtoms d'estronci en una xarxa òptica feta en el simulador quàntic de l'ICFO, l'any 2023. Les imatges de fluorescència permeten veure cada àtom individual, que a la imatge apareixen com un punt brillant.

Un altre tipus de problemes per als quals els simuladors quàntics ofereixen un avantatge important és l'exploració de fases exòtiques de la matèria. Els àtoms ultrafreds ens permeten obtenir formes de matèria quàntica que han existit a la ment dels físics durant dècades com a construccions abstractes, però que fins ara no s'han pogut observar en els sistemes naturals, ja sigui perquè corresponen a règims de paràmetres extrems no accessibles a la natura —com ara camps magnètics extremament forts, materials sotmesos a un estrès enorme o temperatures irrealment altes— o perquè s'espera que es produeixin en sistemes on fer mesuraments és extremament difícil (si no impossible); per exemple, el nucli d'una estrella de neutrons o l'interior d'un nucli. Malgrat que l'interès per aquests problemes és, en general, fonamentalment científic, més que no pas aplicat, poder fer experiments als laboratoris en aquest àmbit no només és molt emocionant per als científics, sinó que també ens aporta avenços en la nostra comprensió de la natura que, sens dubte, s'estendran a altres àrees del coneixement.

A l'ICFO disposem d'un simulador quàntic especialitzat en aquest tipus de problemes exòtics. Per exemple, durant els darrers anys, hem realitzat líquids cent milions de vegades més diluïts que l'aigua i un milió de vegades més prims que l'aire, i que existeixen a causa d'efectes quàntics minúsculs —les anomenades fluctuacions quàntiques— que normalment són molt difícils d'observar [9]. També hem dissenyat matèria quàntica quiral, en la qual les interaccions entre els àtoms són diferents segons si es mouen cap a la dreta o cap a l'esquerra. Això ens ha permès observar fenòmens que s'havien predit en l'àmbit teòric fa gairebé vint anys, però que no s'havien vist mai en un laboratori [10]. Recentment, hem obtingut una fase molt intrigant de la matèria, un supersòlid, que flueix sense fricció alhora que cristal·litza espontàniament. Aquests són només alguns exemples de les formes summament estranyes de la matèria que existeixen quan ens acostem molt al zero absolut.

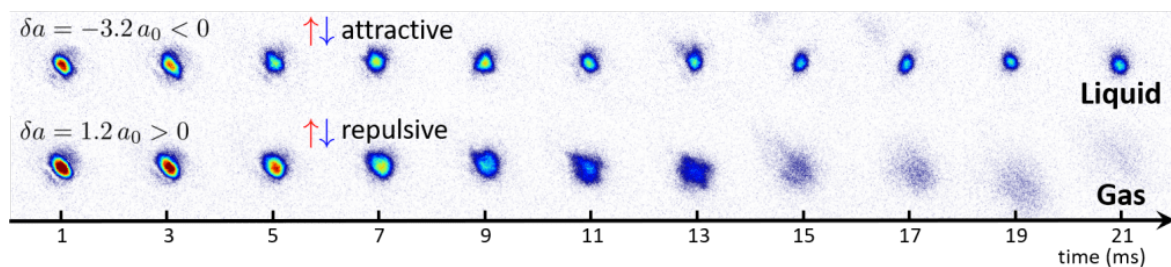


Figura 3. Observació de fases quàntiques exòtiques de la matèria amb simuladors quàntics; aquí, gotes de líquid quàntic en una barreja de dos gasos d'àtoms bosònics de potassi amb interaccions en competència. En obrir una "caixa de làser" en temps  $t = 0$  ms, un gas s'expandeix mentre un líquid manté la seva forma perquè ha format una gota

## Conclusió

En aquest article, hem fet una breu introducció a la simulació quàntica: l'*art* de resoldre problemes quàntics difícils que els ordinadors tradicionals (clàssics) no poden abordar i d'obtenir noves formes de matèria quàntica més enllà del que és accessible a la natura. Ens

hem referit al fet que els simuladors quàntics es poden entendre com a ordinadors quàntics (en molts casos analògics) de finalitat especial. Tot seguit, hem presentat els àtoms neutres ultrafreds com un maquinari quàntic molt avançat del qual ja podem disposar per fer aquestes simulacions quàntiques. Finalment, hem comentat alguns dels problemes que s'exploren actualment amb simuladors quàntics, posant com a exemple algunes de les capacitats que hem desenvolupat a Catalunya durant els darrers anys. La simulació quàntica és un camp que evoluciona molt ràpidament: en el futur pròxim esperem veure un augment constant tant de la qualitat com de la potència del maquinari de simulació quàntica, així com de la gamma de problemes que es poden resoldre mitjançant aquesta tècnica.

#### REFERÈNCIES I NOTES

- 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 és investigadora a l'Institut de Ciències Fotòniques (ICFO). Va estudiar Física a Madrid i a París, i va obtenir el doctorat l'any 2008, amb una tesi sobre la superfluïdesa fermiònica a l'École Normale Supérieure de París. Durant el postdoctorat, va estudiar els gasos de Fermi en xarxes òptiques a l'ETH Zürich. Després de treballar com a investigadora CNRS a l'Institut d'Òptica de Bordeus, es va incorporar a l'Institut de Ciències Fotòniques (ICFO) com a directora de grup l'any 2013, i el 2022 va passar a ser professora ICREA. El grup de recerca Ultracold Quantum Gases que ha creat a l'ICFO porta a terme experiments de simulació quàntica amb mesclades de condensacions de Bose-Einstein de potassi, gasos d'estronci ultrafreds en xarxes òptiques i agrupacions d'àtoms de Rydberg. Tarruell va ser guardonada el 2015 amb el Premi Investigador Jove atorgat per la Reial Societat Espanyola de Física. El 2016 va rebre una beca Ramón y Cajal, i l'any 2020 una beca de consolidació del Consell Europeu de Recerca.