

# Simulació quàntica: configurant l'horitzó de la tecnologia del futur

Maciej Lewenstein, Joana Fraxanet, Tymoteusz Salamon



Cables quàntics i el planeta Terra. Conceptualització: Luisa Quiroga

Encara que els mitjans de comunicació sovint plantegen la computació quàntica en el marc d'una revolució, la computació quàntica és, fonamentalment, una extensió de l'esforç humà persistent per accelerar la transferència d'informació i augmentar-ne la densitat. Aquest viatge va començar amb dades pictogràfiques que civilitzacions antigues gravaven a les parets de les coves, i després va evolucionar cap a l'ús del paper, que feia possible transportar la informació escrita per mitjà de coloms o de cavalls. D'altra banda, la informació va passar dels pictogrames als alfabetos, cosa que va permetre una codificació més densa de la informació. La invenció de la tipografia va augmentar la velocitat de creació i reproducció d'informació més enllà de l'escriptura a mà. Però el canvi més substancial va arribar amb el telègraf, que utilitzava l'electricitat com a portadora d'informació.

Curiosament, això va marcar un límit aproximat per a l'evolució de la velocitat de la distribució de la informació. Amb la informació desplaçant-se pels cables elèctrics, aproximadament al 70%-80% de la velocitat de la llum, l'augment aconseguit amb la fibra òptica no va ser gran cosa en comparació amb el canvi que va representar passar dels cavalls a l'electricitat. L'aspecte revolucionari del telègraf també es basa en l'ús d'electrons per codificar la informació. Simplificant-ho, l'absència d'un electró es representa amb un 0, mentre que la seva presència simbolitza l'1; es tracta d'un sistema binari que codifica tota

la informació necessària, ara coneguda com a bit, que encara s'utilitza en tots els nostres dispositius electrònics.

Així doncs, què és la computació quàntica i per què resulta tan atractiva? En essència, és un pas progressiu més enllà del mètode binari contemporani de codificació i processament de la informació. La computació quàntica hi aprofundeix més, controlant l'estat del portador i codificant informació en la seva estructura (l'*spin* d'un electró o la polarització d'un fotó, per exemple), etiquetada com a qbit. Això facilita que el processament i la transferència de la informació siguin més densos i, per tant, més eficients, l'objectiu últim de totes les exploracions científiques en computació quàntica.

La computació quàntica és, fonamentalment, una extensió de l'esforç humà persistent per accelerar la transferència d'informació i augmentar-ne la densitat. En essència, és un pas progressiu més enllà del mètode binari contemporani de codificació i processament de la informació

No obstant això, aquesta perspectiva innovadora per transmetre i processar informació té implicacions substancials. Requereix enfocaments completament nous per al processament de la informació i utilitzar sistemes quàntics (qbits) com a portadors d'aquesta informació. Les regles de la física quàntica, com ara l'entrellaçament i la superposició dels estats 0 i 1, s'han d'aprofitar per a un processament més ràpid de la informació, la qual cosa dona lloc a un avantatge quàntic. Aquest avantatge s'esdevé quan un ordinador quàntic en supera un de clàssic en una tasca computacional. Però per aconseguir-ho cal dissenyar portes lògiques completament noves i fabricar-les físicament, garantir la connectivitat total entre els qbits i establir estratègies innovadores per minimitzar els possibles errors. La informació codificada en sistemes quàntics és extremament delicada i determinats factors ambientals, com ara la temperatura, poden alterar-la. A més, la manca d'algoritmes quàntics demostrats més ràpids que els ordinadors clàssics és un obstacle notable, amb un progrés limitat des de la introducció dels algoritmes de Shor (1994) i de Grover (1996).

Per tant, potser algú es preguntarà si la computació quàntica no és simplement una exageració. Nosaltres, però, considerem que és més que una moda passatgera: és un viatge científic important i transcendent. Pot ser que l'escepticisme del públic sigui conseqüència de promeses exagerades fetes per empreses quàntiques i que no s'han pogut materialitzar. A més, sembla que és excessiva l'orientació a aconseguir la supremacia quàntica. Nosaltres suggerim veure la computació quàntica com una empresa científica nova i compartida. Ja ens ha permès manipular àtoms, fotons, electrons i molt més de maneres que mai ens hauríem pogut imaginar. La computació quàntica ha estimulat enormes avenços científics i tecnològics en moltes àrees; per exemple, la fabricació de fotònica integrada, els circuits

superconductors, la criogènia, el control de la llum, el desenvolupament d'algoritmes i la generació d'entrellaçament. Aquests assoliments per si sols justifiquen el suport i el desenvolupament continu de la computació quàntica, fins i tot si la supremacia quàntica pràctica no es materialitza mai.

Un avantatge innegable de desenvolupar un ordinador quàntic universal seria la capacitat de crear un simulador quàntic digital, capaç de simular qualsevol material o reacció química, una gesta impossible d'assolir amb els ordinadors clàssics. Sorprenentment, per a això no es necessiten nous algoritmes: la comunitat de físics ja ha desenvolupat el formalisme necessari per a aquestes simulacions i està a punt per implementar-les en un simulador quàntic digital quan estigui disponible. Creiem que aquesta és una de les aplicacions més prometedores i impactants de la computació quàntica.

Tanmateix, fins que no es resolguin els problemes de l'ordinador quàntic universal amb correcció d'errors, l'obtenció d'aplicacions realistes i pràctiques de la computació quàntica que siguin importants per a la ciència i la tecnologia continuarà en el domini dels ordinadors quàntics de finalitat especial, és a dir, els simuladors quàntics.

La idea darrere de la simulació quàntica es pot esbossar breument de la manera següent. Sabem que existeixen molts fenòmens quàntics interessants com ara la superconductivitat, que poden tenir aplicacions tecnològiques importants. Aquests fenòmens sovint són difícils de descriure per mitjà d'ordinadors clàssics. En canvi, podem utilitzar un altre sistema quàntic més senzill i que es pot controlar millor per simular, comprendre i controlar aquests fenòmens, tal com van proposar inicialment Y. I. Manin i R. P. Feynman. Aquest sistema funcionaria, doncs, com un ordinador quàntic de finalitat especial, i això és el que anomenem simulador quàntic.

Actualment ja hi ha diverses plataformes ben desenvolupades en què es fa simulació quàntica i s'ha aconseguit la supremacia quàntica «pràctica». En aquest punt, també hem de remarcar que la simulació quàntica pot ser analògica o digital. En l'últim cas, qualsevol plataforma que ofereixi eines per a la computació quàntica universal també es pot utilitzar amb finalitats especials, és a dir, per a la simulació quàntica. En els següents paràgrafs presentem alguns exemples de la llarga llista de plataformes fàcilment disponibles.

## Plataformes de simulació quàntica

D'una banda, grans empreses com ara Google i D-Wave utilitzen qbits superconductors, que permeten, en principi, una computació quàntica sorollosa, però universal, i que molt sovint s'utilitzen per a la simulació quàntica digital. Altres opcions per a la simulació quàntica digital són el circuit QED —sistemes de qbits superconductors situats en microcavitats—, punts quàntics, qbits de spin en semiconductors, sistemes fotònics —que, combinats amb el recompte de fotons, poden imitar un ordinador quàntic universal— o ions atrapats, que permeten la computació quàntica universal, però que també es poden utilitzar com a simuladors quàntics analògics per descriure, per exemple, sistemes de spin semienter, en lloc de models de Hubbard.

Un avantatge innegable de desenvolupar un ordinador quàntic universal seria la capacitat de crear un simulador quàntic digital, capaç de simular qualsevol material o reacció química, una gesta impossible d'assolir amb els ordinadors clàssics

D'altra banda, els àtoms ultrafreds són bons candidats per a la simulació quàntica analògica i es poden capturar amb trapes o, més sovint, amb xarxes òptiques. Són molt flexibles i permeten simular models complexos de Hubbard, així com sistemes de spin. Altres plataformes per a la simulació quàntica analògica són els àtoms de Rydberg, uns àtoms que es poden excitar fins a estats de Rydberg alts i quedar atrapats en pinces òptiques, molt útils per imitar sistemes de spin amb interaccions de llarg abast; o els sistemes twistrònics, doble capa de grafè amb rotació o altres sistemes de materials 2D. Per un petit angle de gir «màgic», es formen patrons de moaré periòdics a escala de longitud molt més gran que l'escala típica de la matèria condensada, de tal manera que es poden considerar com a simuladors quàntics de matèria condensada.

Totes aquestes plataformes de simulació quàntica ja s'utilitzen per a les tasques i objectius que s'esmenten al final d'aquest apartat. L'aplicació més desenvolupada és l'estudi dels problemes fonamentals de la física, en què es creu que molts dels resultats obtinguts assoleixen l'avantatge quàntic. En segon lloc, es poden fer servir per a aplicacions de la química quàntica, si bé aquest camp és força nou i encara està lluny de la precisió i l'exactitud de la química quàntica teòrica contemporània. Finalment, la simulació quàntica també es pot aplicar a problemes d'optimització clàssics o quàntics per a la tecnologia. Aquesta aplicació també es troba en una fase inicial i encara no pot competir amb els mètodes clàssics dels superordinadors.

En les pròximes dècades, tal com es reflecteix clarament en els futurs programes de Quantum Flagship, esperem que les plataformes utilitzades es mantinguin igual, malgrat que els reptes i els enfocaments seran molt diferents. Els simuladors quàntics del futur hauran de ser dispositius robustos, escalables, programables, accessibles externament i estandarditzats, a més de verificables, comprovables i certificables. D'altra banda, les prioritats pel que fa a tasques i objectius s'invertiran. S'espera que els problemes d'optimització aplicables a la tecnologia ocupin el primer lloc del podi i que la química quàntica es mantingui en el segon lloc, mentre que els problemes fonamentals de la física no perdran importància, però sí el seu estatus de ser els únics problemes en aquesta àrea on es poden assolir avantatges quàntics pràctics. En resum, en el futur la simulació quàntica s'ocuparà de la llista de prioritats següent:

- Generació, manipulació i aplicacions d'estats massivament entrellaçats, útils per a la comunicació quàntica, la metrologia quàntica, la teledetecció i la detecció.
- Problemes d'optimització clàssics i quàntics en l'àmbit de la tecnologia.

- Química quàntica, inclosos nous mètodes de simulació de química quàntica que van més enllà dels dispositius NISQ i els simuladors analògics.
- Problemes fonamentals de física, amb un enfocament específic en simulacions de sistemes per a matèria condensada, física d'altres energies (FAE) i teoria quàntica de camps (TQC).

## Catalunya en l'àmbit de la simulació quàntica

En els paràgrafs següents, presentem algunes simulacions quàntiques de problemes fonamentals de la física sobre els quals avui es fa recerca a Catalunya i analitzem alguns dels grans assoliments de la simulació quàntica dels darrers anys.

Model de Fermi-Hubbard: un sistema clàssic paradigmàtic i notòriament difícil de simular és, per descomptat, el model de Fermi-Hubbard, que molts creuen que constitueix el moll de l'os del fenomen de la superconductivitat a alta temperatura. El grup de Markus Greiner de Harvard és el líder dels simuladors quàntics de Fermi-Hubbard. Un bon exemple del que poden fer els simuladors quàntics en aquest context és, com escriuen els autors, el següent: «Entendre els estats quàntics de molts cossos fortament correlacionats és un dels reptes més difícils de la física moderna. Per exemple, encara hi ha preguntes fonamentals obertes sobre el diagrama de fase del model de Hubbard, que descriu electrons fortament correlacionats en sòlids [...]. Realitzem el hamiltonià de Hubbard i busquem patrons específics dins de les imatges individuals de moltes realitzacions de fermions ultrafreds fortament correlacionats en una xarxa òptica».

Gotes quàntiques: un altre tipus de sistemes que solen ser difícils de simular són els que presenten inestabilitat intrínseca compensada per fortes interaccions, fluctuacions quàntiques o altres mecàniques, que porten a la creació de solitons autolimitats, gotes líquides (vegeu la figura 2) i textures semblants. Líquids i gasos són dues fases diferents de la matèria que formen part de la nostra vida quotidiana. Així com els gasos són diluïts, compressibles i adopten la mida del recipient que els conté, els líquids són densos, tenen un volum fix i formen gotes en petites quantitats. Les gotes són conjunts de partícules que romanen lligades per si mateixes i tenen una superfície lliure que les separa del medi. Si s'augmenta la temperatura, es pot induir una transició de fase de líquid a gas. És el que passa exactament quan fem bullir aigua en una olla. Però els gasos sempre són diluïts i els líquids sempre són densos? Normalment sí, però les coses poden ser molt diferents a temperatures molt baixes. Recentment, el grup de Leticia Tarruell de l'ICFO ha creat un líquid cent milions de vegades més diluït que l'aigua i un milió de vegades més prim que l'aire.

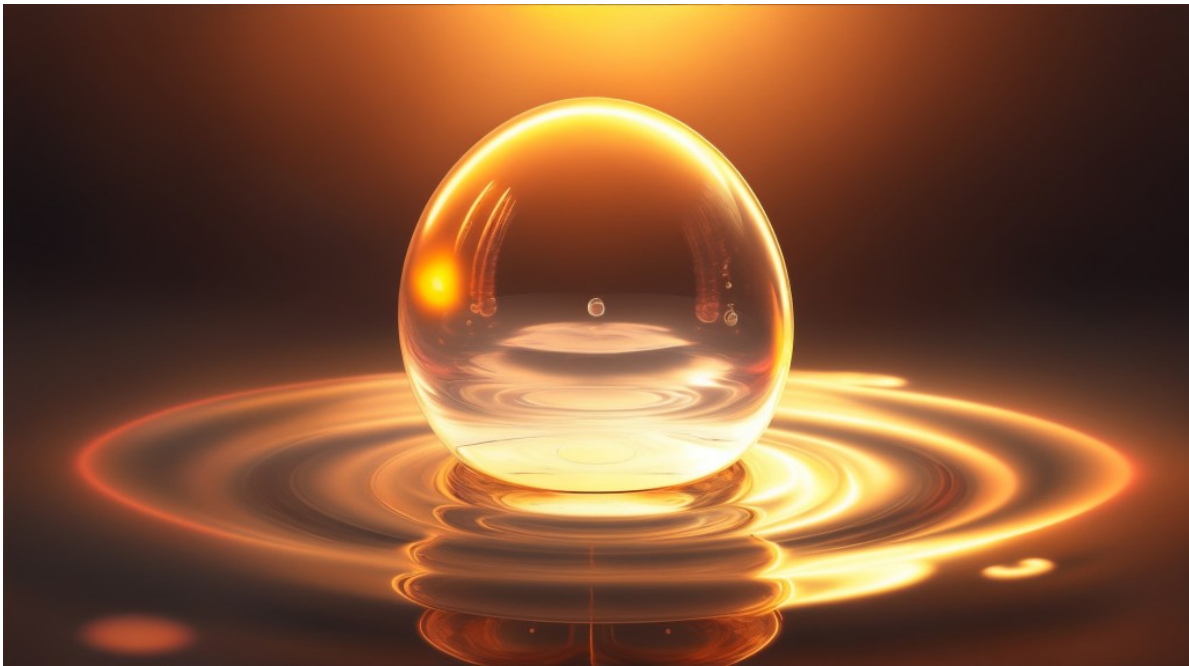


Figura 1. Visió artística d'una gota de líquid quàntic formada barrejant dos gasos d'àtoms de potassi ultrafreds. Adaptació gràfica. Imatge original: ©ICFO/PovarchikStudiosBarcelona

Sistemes fonamentals de matèria condensada, FAE i TQC: En els darrers anys, s'ha prestat una gran atenció a la simulació quàntica de models FAE (física d'alta energia) i a les teories de gauge en reticle i sistemes relacionats. En aquest cas, el repte és controlar interaccions de molts cossos: interaccions «magnètiques» sobre les plaquetes del reticle i interaccions «elèctriques» regides per la llei de Gauss, és a dir, la invariància de contrast local.

El model de Schwinger: la versatilitat dels ions atrapats els fa especialment adequats tant per a la simulació digital com analògica de la teoria de gauge en reticle. Aquests sistemes poden servir com a ordinadors quàntics universals i, en principi, realitzar interaccions i restriccions de pocs cossos. El grup de Rainer Blatt va aconseguir «la primera demostració experimental d'una simulació quàntica digital d'una teoria de gauge en reticle, realitzant electrodinàmica quàntica (1 + 1)-dimensional (model de Schwinger) en un ordinador quàntic de ions atrapats de pocs qbits». Els interessava l'evolució en temps real del mecanisme de Schwinger, que descriu la inestabilitat del buit nu (*bare vacuum*) a causa de fluctuacions quàntiques, i que es manifesta en la creació espontània de parells electró-positró.

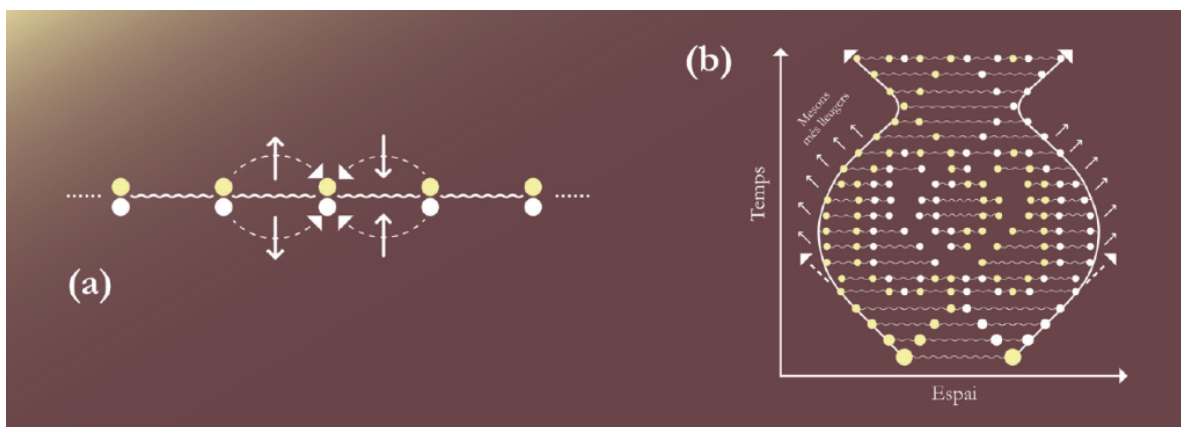


Figura 2. Un parell partícula-antipartícula (un mesó) es comença a estendre i termalitzar, però de seguida comença a notar efectes de confinament i oscil·la *ad infinitum* sense termalització aparent. Crèdit d'imatge: Titas Chanda

Model de Schwinger bosònic: les teories relativistes quàntiques de gauge són teories fonamentals de la matèria que descriuen la naturalesa. En són exemples paradigmàtics l'electrodinàmica quàntica —que descriu les interaccions electromagnètiques de partícules carregades i fotons—, la cromodinàmica —que descriu les interaccions fortes de quarks i gluons— i el model estàndard, que unifica les dues últimes amb les interaccions febles. Malgrat l'enorme progrés pel que fa a la nostra comprensió de les teories quàntiques de gauge, les qüestions relatives al comportament dels sistemes descrits per aquestes teories en presència de correlacions fortes continuen àmpliament obertes: des de la naturalesa mateixa del confinament del quark fins al comportament del quark-gluó-plasma a altes densitats i temperatures. D'altra banda, la dinàmica quàntica de no equilibri de les teories quàntiques de gauge cau fora de l'abast dels ordinadors actuals. És per això que es treballa intensament per dissenyar i investigar simuladors quàntics d'aquests tipus de sistemes.

En el model de Schwinger, el model paradigmàtic de la teoria quàntica de gauge en una dimensió espacial i en el temps, els electrons «carregats» (fermions) interactuen amb els fotons (bosons) en una dimensió. Com que les simulacions quàntiques amb fermions són extremament difícils, el grup d'òptica quàntica de l'ICFO, en col·laboració amb el grup de Cracòvia de Jakub Zakrzewski, va proposar una versió bosònica del model de Schwinger. Utilitzant mètodes d'última generació de física teòrica, es va investigar com es comporta la matèria bosònica quan es troba en no equilibri mitjançant la creació d'un parell partícula-antipartícula sobre el buit del sistema. Els tres resultats principals són importants per entendre les teories quàntiques de gauge en general (vegeu la figura 3). Aquest treball obre un camí cap a simulacions quàntiques de teories quàntiques de gauge en règims nous i inexplorats.

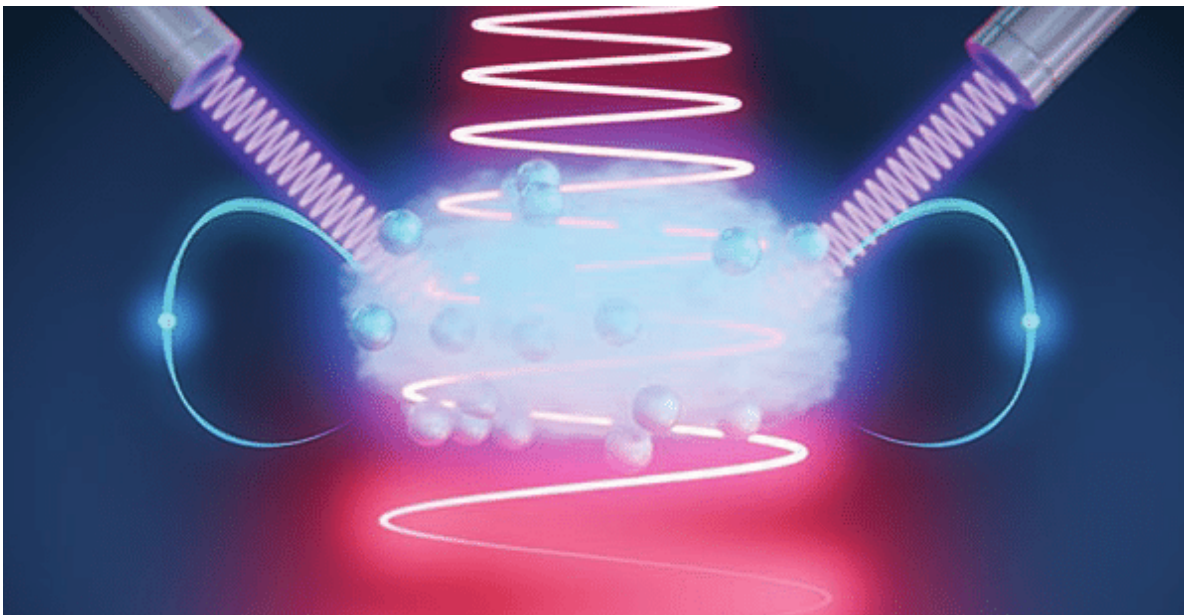


Figura 3. Estats òptics del gat de Schrödinger en interacció intensa làser-matèria. ©ICFO / Scixel - E. Sahagun

Nous simuladors quàntics (NOQIA): recentment, l'ICFO ha proposat una plataforma completament nova per a la simulació quàntica d'attociència i processos ultraràpids. Durant les últimes quatre dècades, s'han fet avenços sorprenents en el camp de les tecnologies de làser i en la comprensió de les interaccions llum-matèria en el règim no lineal. Gràcies a això, els científics han pogut dur a terme experiments summament complexos relacionats, per exemple, amb polsos de llum ultraràpids en el rang visible i infraroig, i assolir objectius crucials com ara l'ús dels mateixos electrons d'una molècula per obtenir imatges de la seva estructura i veure com es reordena, vibra o es trenca durant una reacció química.

El desenvolupament de làsers d'alta potència va permetre als científics estudiar la física de les interaccions ultraintenses làser-matèria. La versió estàndard del model d'estudi, però, només s'ocupa dels polsos de làser de conducció ultracurts i ultraforts des d'un punt de vista clàssic. La famosa teoria coneguda com a «model de l'home simple» o «model de les tres fases» —que va celebrar el seu 25è aniversari el 2019— descriu elegantment la interacció d'un electró amb el seu nucli pare en un entorn de camp làser fort, segons els processos clàssics i quàntics. No obstant això, com que aquests polsos de làser són altament coherents i contenen una enorme quantitat de fotons, la descripció de la interacció en el camp làser fort fins ara ha estat incompleta, perquè el sistema atòmic es tracta d'una manera quàntica mentre que el camp electromagnètic es tracta d'una manera clàssica. Actualment, en la descripció dels processos més rellevants de la física de les interaccions ultraintenses làser-matèria —per exemple, generació d'alts harmònics, ionització per sobre del llinar, difracció d'electrons induïda per làser, ionització multielectrònica seqüencial i no seqüencial, etc.— els efectes de fluctuació quàntica del camp elèctric làser, per no parlar dels camps magnètics, són insignificants.

El camp dels simuladors quàntics és una de les àrees més boniques de la física contemporània, que barreja totes les

## branques i els gèneres de la física

Actualment, en la descripció dels processos més rellevants de la física de les interaccions ultraintenses làser-matèria —per exemple, generació d'alts harmònics, ionització per sobre del llindar, difracció d'electrons induïda per làser, ionització multielectrònica seqüencial i no seqüencial, etc.— els efectes de fluctuació quàntica del camp elèctric làser, per no parlar dels camps magnètics, són insignificants.

Tanmateix, la naturalesa quàntica de la totalitat dels camps electromagnètics sempre està present en aquests processos, cosa que planteja la pregunta següent: aquesta naturalesa quàntica es manifesta? I en quines situacions apareix? En un estudi recent dut a terme amb el grup FORTH de Paraskevas Tzallas s'ha informat sobre la demostració teòrica i experimental que les interaccions làser-àtom intenses poden donar lloc a la generació massiva d'estats de llum altament no clàssics, un dels Sants Guals de la simulació quàntica contemporània (vegeu la figura 4). Aquests resultats s'han obtingut utilitzant el procés de generació d'alts harmònics en àtoms, en què un gran nombre de fotons d'un pols de làser de conducció de freqüència infraroja es converteixen en fotons de freqüències més altes en el rang espectral ultraviolat extrem. La teoria electrodinàmica quàntica formulada en aquest estudi prediu que, si l'estat inicial del làser conductor és coherent, es manté coherent, però canvia en amplitud després de les interaccions amb el medi atòmic. De manera semblant, els estats quàntics dels modes harmònics es tornen coherents amb amplituds coherents petites. Tanmateix, l'estat quàntic del pols de làser que impulsa la generació d'alts harmònics pot ser condicionat per tenir en compte aquesta interacció, i això el transforma en l'anomenat estat òptic del gat de Schrödinger. Aquest estat correspon a una superposició quàntica de dos estats de llum coherents diferents: l'estat inicial del làser i l'estat coherent reduït en amplitud que resulta de la interacció amb els àtoms.

## Gaudir de la física i més enllà

Acabem aquest article destacant que el camp dels simuladors quàntics és, en tots els sentits, una de les àrees més boniques de la física contemporània, que barreja totes les branques i els gèneres de la física i no només de la física. La conclusió que sempre repetim és que cal gaudir de la física i més enllà. Des de l'ICFO ens agrada anar més enllà de la física per intentar interpretar els processos de la mecànica quàntica, i més específicament l'aleatorietat quàntica en àmbits com la música d'avantguarda contemporània. Aquest projecte s'anomena sonificació de la física quàntica. També intentem incorporar processos aleatoris quàntics utilitzant els generadors de nombres aleatoris quàntics autèntics, que ens proporciona QUSIDE, empresa derivada de l'IFCO. Un dels assoliments més destacats de la nostra tasca va ser el concert de gairebé una hora de durada, «Interpreting Quantum Randomness», presentat al famós festival SONAR 2021, i l'LP de vinil i l'àlbum digital disponibles a Bandcamp.

---

## CRÈDITS

Aquest article és una versió curta i simplificada del capítol «The Coming Decades of Quantum Simulation» dels mateixos autors, Joana Fraxanet, Tymoteusz Salamon i Maciej Lewenstein, a «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 és professor ICREA a l'Institut de Ciències Fotòniques (ICFO), on dirigeix el grup d'investigació sobre teoria d'òptica quàntica des de l'any 2005. Físic teòric, les seves contribucions més destacades són en l'àmbit de la física quàntica i la ciència de l'attosegon (la trilionèsima part d'un segon). Autor de més de 500 publicacions, també ha fet recerca en l'àmbit de les xarxes òptiques, la física d'àtoms freds condensats i la teoria de l'entrellaçament quàntic, especialment en tot allò relacionat amb el desenvolupament de simuladors quàntics.



### **Joana Fraxanet**

Joana Fraxanet Morales és investigadora doctoral a l'Institut de Ciències Fotòniques (ICFO), dins del grup de recerca sobre teoria d'òptica quàntica. Té un màster en Física per la Universitat de Leiden. Les seves investigacions se centren en el camp dels gasos atòmics ultrafreds.



### **Tymoteusz Salamon**

Tymoteusz Salamon és investigador doctoral a l'Institut de Ciències Fotòniques (ICFO) dins del grup de recerca sobre teoria d'òptica quàntica. Té un màster en Física per la Universitat d'Ulm. Actualment, investiga el desenvolupament d'un simulador quàntic basat en àtoms freds de grafè bicapa, font potencial de superconductivitat no convencional.