

LOS SIMULADORES CUÁNTICOS Y SUS APLICACIONES

JUAN IGNACIO CIRAC SASTURÁIN

Rector Magnífico de la Universidad de Zaragoza
Excelentísimas e ilustrísimas autoridades
Ilustrísimos señores doctores
Miembros del Claustro Universitario
Señoras y señores

Es un gran honor recibir el doctorado honoris causa por la Universidad de Zaragoza, una institución que ha ocupado y ocupa un lugar preponderante en la vida académica española. Es, además, una gran satisfacción personal, dados los vínculos que me unen a esta ilustre Universidad y a la comunidad aragonesa. Mi madre, Juana Sasturáin, estudió Matemáticas aquí, y la familia de mi padre, Vicente Cirac, proviene de Caspe, esa ciudad aragonesa que ha dejado un sello especial en la historia de nuestro país. Mi vida como científico no se podría entender sin la influencia que ambos me han transmitido a través de sus experiencias, que, en gran parte, han transcurrido en esta región. El discurso que voy a pronunciar a continuación se titula «Los simuladores cuánticos y sus aplicaciones» y describe un campo de investigación emergente que puede dar lugar a una nueva revolución científica en el siglo XXI.

Hoy en día existe una variedad de técnicas para simular el comportamiento de la mayoría de los objetos que nos rodean. Los arquitectos pueden diseñar edificios complejos con la ayuda de un ordenador y asegurarse de su estabilidad bajo condiciones extremas. Los ingenieros también diseñan la mayor parte de las piezas de coches, trenes, barcos o aviones con la ayuda de ordenadores, con total seguridad de que, una vez construidos, tendrán las características deseadas. A principios del siglo pasado, sin embargo, esto no era así. Por ejemplo, para saber si un avión iba a volar necesitaban primero construirlo y luego probarlo. El advenimiento de los ordenadores modernos, el desarrollo de la teoría de materiales, de la electrónica y de otros muchos campos de la ciencia, así como el adelanto en las técnicas y algoritmos computacionales, nos han abierto la puerta de la simulación y, con ello, el acceso a una sociedad tecnológica avanzada.

La posibilidad que tenemos de simular el comportamiento de los objetos del mundo que nos rodea contrasta con la dificultad que aparece cuando queremos estudiar los objetos microscópicos. Así, no sabemos predecir, incluso utilizando los ordenadores más modernos y los algoritmos más avanzados, cómo se comportan unos cientos de átomos, electrones u otras partículas microscópicas, bajo ciertas condiciones. Es ciertamente paradójico el hecho de que no podamos llevar a cabo estos estudios, mientras que sí somos capaces de describir con precisión objetos macroscópicos, formados por una cantidad ingente de átomos y electrones. Este contraste radica en que, para estos últimos, basta con aplicar la Física Clásica, mientras que para las partículas microscópicas necesitamos las leyes de la Física Cuántica. Esta es una teoría introducida a principios del siglo pasado y que explica la naturaleza con una precisión extraordinaria. Está basada

en unos principios sencillos, pero sorprendentes, que han cambiado nuestra visión de la naturaleza. Sus leyes son fáciles de enunciar, pero, en cuanto queremos aplicar sus ecuaciones a modelos concretos que incluyen varias partículas, resulta imposible resolverlas. Desafortunadamente, existen muchos problemas relevantes en donde se da esta situación, tales como el estudio de compuestos y reacciones químicas, el diseño de materiales con características eléctricas y magnéticas especiales, o la predicción de las propiedades de las partículas elementales, tal y como describe el Modelo Estándar. Por tanto, uno de los desafíos más relevante de la Física moderna es encontrar métodos eficientes para simular sistemas cuánticos compuestos por muchas partículas.

Para comprender la dificultad que acarrearán las simulaciones cuánticas, hay que repasar primero el «principio de superposición», un concepto básico de la Física Cuántica. Sus consecuencias son espectaculares, y aparecen en muchos de los experimentos realizados en el siglo pasado con luz y átomos. Tal vez, la forma más pedagógica de presentarlo es a través del experimento de la doble rendija de Young. Si lanzamos partículas microscópicas hacia una pantalla con dos rendijas, y observamos dónde aparecen en otra pantalla situada a continuación, veremos que solo lo hacen en unas regiones determinadas. El resultado de este experimento es incompatible con el hecho de que cada partícula haya pasado por un agujero determinado. Para explicarlo, debemos suponer que cada partícula ha estado en una «superposición» de dos estados, uno correspondiente al paso por una rendija y el otro, por la otra. Hablando coloquialmente: ¡La partícula ha debido pasar por los dos agujeros a la vez! De acuerdo con la Física Cuántica, un solo objeto puede estar en una superposición, lo que conlleva que sus propiedades no están

determinadas hasta que no lo observamos. Otro ejemplo más relevante para la discusión que vamos a llevar a cabo está relacionado con otra propiedad de algunos objetos microscópicos: el espín. Es la que da lugar a que algunos materiales sean magnéticos, y se puede medir viendo cómo reacciona la partícula en presencia de un campo magnético generado por un imán. En particular, el espín de algunas partículas puede tomar dos valores distintos, hacia arriba, \uparrow , o hacia abajo, \downarrow , según se desvíen al pasar por un campo magnético inhomogéneo. El principio de superposición permite tener dos estados a la vez, algo que denotamos como $c_0|\downarrow\rangle + c_1|\uparrow\rangle$. Los coeficientes c_0 y c_1 son números complejos cuyo módulo nos indica la probabilidad de que obtengamos un resultado u otro cuando medimos. Es decir, las propiedades magnéticas de la partícula están codificadas en estos coeficientes, de tal forma que, para hacer predicciones experimentales sobre qué ocurrirá cuando medimos, debemos conocer su valor. Si tenemos ahora varias partículas, podemos tener varias configuraciones de sus espines. Por ejemplo, pueden estar todos hacia abajo, o todos menos el último, o solo los tres primeros... Es fácil convencerse de que existen 2^N configuraciones distintas, en donde N es el número de partículas. Pero, además, podemos tener una superposición de todas ellas. En general, escribimos el estado de los espines como $c_{00\dots0}|\downarrow\dots\downarrow\rangle + c_{00\dots1}|\downarrow\dots\uparrow\rangle + \dots + c_{11\dots1}|\uparrow\dots\uparrow\rangle$. El estado y, por tanto, las propiedades magnéticas de las partículas dependen de los valores de los coeficientes c . En consecuencia, para poder caracterizarlas necesitamos conocer todos estos coeficientes. Y ahí radica precisamente la dificultad de describir objetos cuánticos formados por varias partículas, ya que hay un número exponencial de coeficientes. Para almacenar un coeficiente en la memoria de un ordenador necesitamos 8 *bytes*, así que la

información correspondiente a 40 espines requiere unos 8 *terabytes*. Y si tenemos 300, necesitaríamos 8×2^{300} *bytes*. Esta cifra es mayor que el número aproximado de partículas que hay en el universo; así que, incluso si pudiésemos almacenar un *byte* en cada partícula del universo, no podremos describir el estado de 300 espines. Más aún, para poder determinar el comportamiento de todas ellas deberemos hacer cálculos con todos esos coeficientes, de tal forma que el tiempo de ejecución del programa correspondiente también escala exponencialmente con el número de partículas. Y lo mismo ocurre con otras propiedades, como la posición que ocupan en el espacio, o su energía cinética. En definitiva, el principio de superposición de la Física Cuántica tiene como consecuencia la dificultad intrínseca de los problemas que aparecen en el mundo microscópico cuando tenemos varias partículas.

Este obstáculo es conocido desde los orígenes del desarrollo de la Física Cuántica. Richard Feynman, uno de los pioneros de la Electrodinámica Cuántica, ya avanzó una posible solución en un artículo visionario que escribió en el año 1982 [1]. En él, razona que no es natural intentar resolver problemas cuánticos con ordenadores que están basados en las leyes de la Física Clásica, en donde no existen superposiciones. Propone, por el contrario, utilizar simuladores cuánticos para atacar estos problemas. La idea de Feynman era utilizar partículas que obedezcan las leyes de la Física Cuántica, como átomos, para almacenar y procesar las superposiciones de los objetos que queremos describir. Esto es, en lugar de almacenar la superposición $c_{00\dots 0} | \downarrow \downarrow \dots \downarrow \rangle + c_{00\dots 1} | \downarrow \downarrow \dots \uparrow \rangle + \dots + c_{11\dots 1} | \uparrow \uparrow \dots \uparrow \rangle$, podemos preparar nuestro simulador en este estado. Y si queremos predecir cualquier propiedad física, simplemente la medimos en nuestro simulador. La ventaja es obvia. Para estudiar N espines necesitamos N átomos, y

no 2^N , como con los ordenadores habituales. Así, si queremos describir un material compuesto por 300 espines, podemos tomar en su lugar 300 átomos. Por supuesto, el precio que hay que pagar es que debemos tener un control absoluto sobre esos átomos para poder preparar las superposiciones cuánticas.

Las ideas de Feynman pueden ser consideradas como un prelude de los ordenadores cuánticos. Estos utilizan las superposiciones para hacer cálculos que no son posibles con los ordenadores usuales, incluso con los más modernos superordenadores. La idea fundamental es que un conjunto de átomos pueden estar en superposiciones y, por tanto, realizar varias tareas a la vez. En cierto modo, es como si un solo ordenador cuántico pudiese realizar la tarea de 2^N ordenadores clásicos en paralelo. Este *paralelismo cuántico* puede ser utilizado para resolver ciertos problemas de manera mucho más eficiente que con los ordenadores clásicos. Lo que proponía Feynman, en definitiva, era utilizar un ordenador cuántico para simular sistemas de muchas partículas [2].

Aunque existen ya pequeños prototipos de ordenadores cuánticos, compuestos por 10 o 15 átomos, no es fácil construir equipos mayores. La razón es que es complicado tener un control absoluto sobre los átomos que lo componen, ya que siempre están en contacto con algún otro objeto (moléculas de aire, fotones), lo que distorsiona las superposiciones. Una colisión de uno de los átomos con una molécula de su entorno cambiará la superposición, lo que contaminará el resultado de la computación. A pesar de que es posible corregir los errores causados por esos otros objetos, todavía estamos lejos de poderlo hacer de una manera práctica.

La sensibilidad de los ordenadores cuánticos a su entorno conlleva, en principio, que todavía deberíamos

esperar un tiempo apreciable para poder construir equipos capaces de simular materiales, moléculas o partículas elementales. Afortunadamente, esto no es así. De hecho, no es necesario construir un aparato de ese calibre para ese propósito, dado que las aplicaciones más interesantes en el campo de la simulación no requieren el conocimiento preciso de la superposición [3]. Nos es suficiente poder saber si el material será magnético, conductor, si se producirá cierta reacción, o la masa de alguna partícula elemental. Estas propiedades son típicamente robustas ante las interacciones de nuestros átomos con lo que les rodea. Aunque uno de los átomos colisione con una molécula, esto afectará mínimamente a tales propiedades físicas en su conjunto. Además, para hacer la simulación solo tenemos que conseguir que nuestros átomos se comporten de la misma manera que el sistema a simular. Esto no requiere ningún algoritmo sofisticado, sino un control parcial sobre los átomos.

En estos momentos existen dos tipos de experimentos en donde se están construyendo simuladores cuánticos. El primero consiste en atrapar átomos neutros y manipular sus propiedades utilizando láseres y campos magnéticos [4]. El segundo utiliza iones atrapados también en redes y, además de láseres, requiere campos eléctricos [5]. La idea de tener los átomos en redes también proviene de Feynman, quien propuso discretizar el espacio (y el tiempo), de la misma forma que hacen los ingenieros y arquitectos con sus programas de elementos finitos, y expresar las leyes de la Física Cuántica para las partículas en la red.

Átomos neutros (típicamente alcalinos o alcalinotérreos) pueden ser confinados en redes ópticas. Para ello se utiliza luz láser propagándose en distintas direcciones, de tal forma que la intensidad forme un patrón periódico

en el espacio. Los átomos quedan polarizados dinámicamente por el campo eléctrico de la luz, y a su vez reaccionan con ella de tal forma que son atraídos a las zonas de mínima (o máxima) intensidad, que forman pozos de potencial. El análogo magnético a este proceso es el siguiente: un campo magnético generado por un imán puede imanar otro objeto, que a su vez es atraído o repelido por el imán. Con luz también podemos enfriar los átomos; esto es, hacer que se frenen y que ocupen las zonas del espacio en donde haya más intensidad. Una vez atrapados y enfriados, se pueden mover a través de la red óptica utilizando el efecto túnel. La facilidad para moverse de esta forma se puede controlar a través de la intensidad de los láseres: cuanto más intensos, más profundos son los pozos de potencial y, por tanto, menos disposición al efecto túnel. Además, si dos átomos se encuentran en el mismo pozo de potencial, interactuarán entre ellos. La intensidad de la interacción también puede cambiar utilizando campos magnéticos a través de las resonancias de Feshbach. Estos comportamientos son muy similares a los que ocurren en los materiales reales que deseamos simular. En ellos, las partículas dinámicas son los electrones, y los pozos de potencial periódicos vienen definidos por orbitales de los átomos a los que están sujetos. Los electrones pueden saltar de un pozo a otro por el efecto túnel, y también interactúan entre ellos cuando están alrededor de un mismo átomo. De hecho, átomos en redes ópticas fueron originalmente propuestos [6] para simular el comportamiento de las partículas que forman los materiales, tanto bosónicas [6] (como los fonones) como fermiónicas [7] (como los electrones) y espines. Recientemente, nuevas investigaciones indican que con este sistema físico también se podrían simular modelos que aparecen en la Física de altas energías [8]. Por el

momento, se ha logrado hacer las primeras simulaciones del llamado modelo de Hubbard para bosones [9] y fermiones [10,11]. En el primer caso, se ha observado la transición entre una fase superfluida y otra aislante de Mott. En el segundo, también se ha observado esta última fase, aunque la temperatura de los átomos es demasiado alta como para poder observar otros fenómenos, como antiferromagnetismo. En cuanto esto se consiga, será posible investigar qué ocurre en dos dimensiones, cuando los átomos están confinados en un plano, y variar su densidad [7]. Esto nos permitirá responder a varias preguntas cruciales relacionadas con la superconductividad de alta temperatura, algo cuya explicación sigue siendo un misterio después de veinticinco años de su descubrimiento.

El otro escenario en donde la simulación cuántica se está investigando profusamente consiste en un conjunto de iones (alcalinotérreos, con un electrón de menos), atrapados alrededor de unos electrodos [12]. El campo eléctrico creado por estos permite hacer levitar a los iones formando una red en una o dos dimensiones. Los iones poseen espín, que puede ser utilizado para simular propiedades magnéticas de materiales [13]. El espín de un ion puede ser afectado por medio de un láser externo con cierta polarización y frecuencia. También se puede conseguir que cada pareja de espines interactúe de la forma que deseemos. Esta interacción está mediada por el movimiento conjunto de los iones. Si un ion absorbe un fotón de un láser y cambia su espín, también recibirá un empujón debido al retroceso generado por la absorción. Esto pondrá a toda la cadena de iones en movimiento de tal forma que otro átomo en otro lugar puede absorber ese movimiento, a la vez que cambia su espín e intercambia un fotón con el láser. Las propiedades del láser, como la intensidad, polarización y frecuencia, nos

permiten entonces diseñar la interacción entre espines de tal forma que simulemos el modelo deseado [13]. De este modo, pues, con iones atrapados se pueden investigar las propiedades magnéticas de los materiales. Los primeros experimentos con este sistema demostraron el principio de la simulación con dos iones [14]. Actualmente, es posible realizar simulaciones con más de una veintena [15], y es de esperar que dentro de poco se pueda hacer con varios cientos de iones.

La repercusión de los simuladores cuánticos en el diseño de materiales o compuestos químicos puede tener una gran relevancia en el desarrollo tecnológico al que estamos asistiendo, de la misma manera que lo están teniendo los ordenadores clásicos. Además, pueden jugar un papel fundamental en el progreso de varias disciplinas científicas. En primer lugar, pueden ayudarnos a desarrollar teorías para describir eficientemente sistemas cuánticos de varias partículas. Ya sabemos que, si expresamos los estados en términos de superposiciones de todas las configuraciones posibles, no podremos ser capaces de ir más allá de unas pocas partículas. Sin embargo, otras descripciones pueden ser mucho más eficientes y vencer la ley exponencial que aparece naturalmente en estos problemas. Las redes de tensores aparecen como claros candidatos para ejercer este papel, ya que dan lugar a una descripción que solo necesita un número de parámetros que crece polinómicamente con el número de partículas. Uno de los problemas actuales para el desarrollo de estas teorías es que no existen bancos de pruebas con las que ser validadas. Y es ahí en donde los simuladores cuánticos podrían ayudarnos, ya que nos permitirían testar y comprobar todas las predicciones. Otro de los campos donde, eventualmente, estos equipos pueden ayudarnos es en el la Física de altas energías. El Modelo Estándar, desarrollado en los años setenta del

siglo pasado, es un modelo de la Física Cuántica que describe las partículas elementales que conocemos, así como las interacciones entre ellas, exceptuando la gravitatoria. Sin embargo, tal y como ocurre en otros muchos casos, es prácticamente imposible resolver sus ecuaciones en algunas situaciones debido al hecho que hemos examinado anteriormente. Así que, otra vez, los simuladores cuánticos pueden abrirnos las puertas para entender mejor este modelo, poder hacer más predicciones y, tal vez, darnos la pauta a seguir para encontrar alguna teoría más general.

Referencias

- [1] R. Feynman. Simulating physics with computers. *Int. J. Theoret. Phys.* 21, 467-488 (1982).
- [2] S. Lloyd. Universal quantum simulators. *Science* 273, 1073-1078 (1996).
- [3] J. I. Cirac and P. Zöller. Goals and opportunities in quantum simulations. *Nat. Phys.* 8, 264-266 (2012).
- [4] I. Bloch, J. Dalibard and S. Nascimbène. Quantum simulations with ultracold quantum gases. *Nat. Phys.* 8, 267-276 (2012).
- [5] R. Blatt and C. F. Roos. Quantum simulations with trapped ions. *Nat. Phys.* 8, 277-284 (2012).
- [6] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. Gardiner and P. Zöller. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 81, 3108-3111 (1998).
- [7] W. Hofstetter, J. I. Cirac, P. Zöller, E. Demler and M. D. Lukin. High-temperature superfluidity of fermionic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 89, 220407 (2002).
- [8] J. I. Cirac, P. Maraner and J. K. Pachos. Cold atom simulation of interacting relativistic quantum field theories. *Phys. Rev. Lett.* 105, 190403 (2010).
- [9] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch and I. Bloch, Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature* 415, 39-44 (2002).

- [10] R. Jordens, N. Strohmaier, K. Günter, H. Moritz and T. Esslinger. A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice. *Nature* 455, 204-207 (2008).
- [11] U. Schneider, L. Hackermüller, S. Will, Th. Best, I. Bloch, T. A. Costi, R. W. Helmes, D. Rasch and A. Rosch. Metallic and insulating phases of repulsively interacting fermions in a 3D optical lattice. *Science* 322, 1520-1525 (2008).
- [12] E. Jane, G. Vidal, W. Dür, P. Zoller, J. I. Cirac. Simulation of quantum dynamics with quantum optical systems. *Quant. Inf. Comp.* 3, 15-37 (2003).
- [13] D. Porras and J. I. Cirac. Effective quantum spin systems with trapped ions. *Phys. Rev. Lett.* 92, 207901 (2004).
- [14] C. Schneider, D. Porras and T. Schätz. Experimental quantum simulations of many-body physics with trapped ions. *Rep. Prog. Phys.* 75, 024401 (2012).
- [15] R. Blatt. Quantum simulations with trapped ions. APS March Meeting 2014 (Colorado Convention Center Denver, Colorado, 2014-03-03).