

Simulaciones cuánticas

Dominique Spehner

*Departamento de Ingeniería Matemática
Universidad de Concepción, Chile*

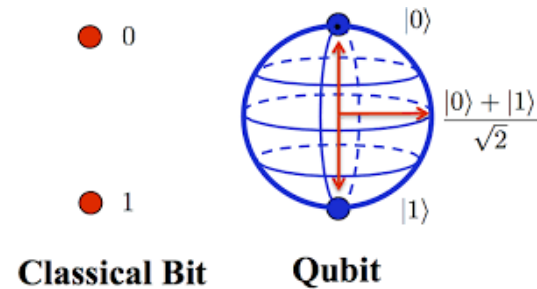
3^{na} escuela en computación cuántica, Santiago, 6-10/01/2025

Outlines

- Introducción: computación cuántica

Bits cuánticos (qubits)

El **estado de un sistema cuántico** se representa por un **vector normalizado de $\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$** (ó de un espacio de Hilbert \mathcal{H} de dim. infinita)



◇ **1 qubit** : $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \in \mathbb{C}^2$$

$c_{0,1} \in \mathbb{C}$ componentes complejos tales que $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$.

◇ **n qubits** : $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^n}$, base computacional

$$\{|x\rangle = |x_{n-1} \dots x_0\rangle = |x_{n-1}\rangle \dots |x_0\rangle; x_i = 0, 1\}$$

$$|\psi\rangle = \sum_{x \in \{0,1\}^n} c_x |x\rangle \in \mathbb{C}^{2^n}$$

$c_x \in \mathbb{C}$ componentes complejos tales que $\sum_x |c_x|^2 = 1$.

Computadores clásico y cuántico

- **Computador clásico :**

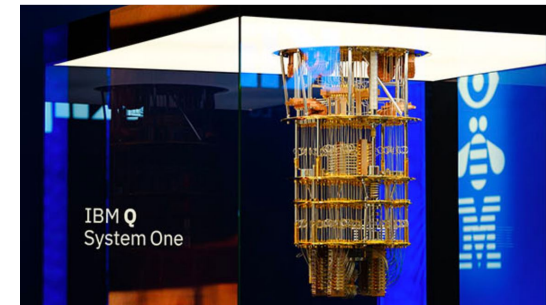
$$\begin{cases} \text{input:} & x = x_n \dots x_1 \in \{0, 1\}^n \\ \text{output:} & y = y_m \dots y_1 \in \{0, 1\}^m \end{cases}$$



- **Computador cuántico :**

$$\begin{cases} \text{input:} & |\psi_0\rangle \in \mathbb{C}^d, \quad d = 2^n \\ \text{output:} & |\psi\rangle = U|\psi_0\rangle \in \mathbb{C}^d \end{cases}$$

U operador unitario (matriz $d \times d$).



Medición en la base computacional $\{|x\rangle; x \in \{0, 1\}^n\}$:

↪ resultado **aleatorio** $y \in \{0, 1\}^n$ con proba $p_y = |\langle y|\psi\rangle|^2$

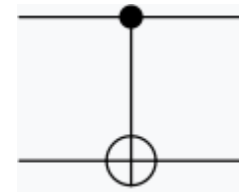
↪ Se extrae **información clásica** del estado cuántico $|\psi\rangle$

Circuitos cuánticos

- Una *puerta cuántica* es un operador unitario U que transforma el estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ de n qubits en otro estado $U|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

- Ejemplo:** puerta CNOT para 2 qubits. En la base computacional:

$$\text{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$



- Un *conjunto universal* es un conjunto de puertas tal que **cualquiera transformación unitaria U sobre n qubits puede implementarse en un circuito finito compuesto únicamente por puertas de este conjunto, con un error arbitrariamente chico.**

| | | | |
|---------------------------|--|--|--|
| Pauli-X (X) | | | $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ |
| Pauli-Y (Y) | | | $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ |
| Pauli-Z (Z) | | | $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ |
| Hadamard (H) | | | $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ |
| Phase (S, P) | | | $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$ |
| $\pi/8$ (T) | | | $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$ |
| Controlled Not (CNOT, CX) | | | $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ |

- $\{\text{puertas de 1 qubit, CNOT}\}$ y $\{\text{H, S, T, CNOT}\}$ son universales.

Outlines

- ✓ Introducción: computación cuántica
- Simulaciones cuánticas

Dificultades en simular sistemas cuánticos

Los computadores clásicos **no son eficientes** para simular la dinámica de sistemas cuánticos con un gran número de partículas.

- Se necesita resolver numericamente la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$$

$|\Psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ estado del sistema al tiempo t

\mathcal{H} espacio de Hilbert del sistema

H Hamiltoniano (= operador auto-adjunto sobre \mathcal{H})

- Problema estacionario: determinar el estado basal $|\Psi_0\rangle$,

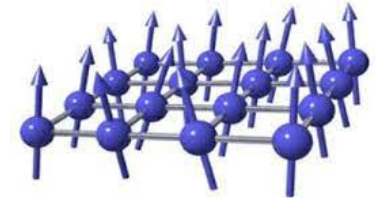
$$H |\Psi_0\rangle = E_0 |\Psi_0\rangle$$

Sistemas cuánticos con N partículas

Espacio de Hilbert: $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{(N)}$

\mathcal{H} tiene dimensión $\dim \mathcal{H} = d_1 d_2 \dots d_N \sim d^N$

$d_i = \dim \mathcal{H}^{(i)}$ dimensión del espacio de la
 i -ésima partícula



Ejemplo: sistema de N spin $1/2$ (N qubits):

$$\dim \mathcal{H} = 2^N$$

↪ Cuando las partículas *interactúan fuertemente*, debido a la forma del Hamiltoniano H se necesita resolver la ecuación de Schrödinger sobre el espacio total \mathcal{H} , cuya **dimensión crece exponencialmente con N** .

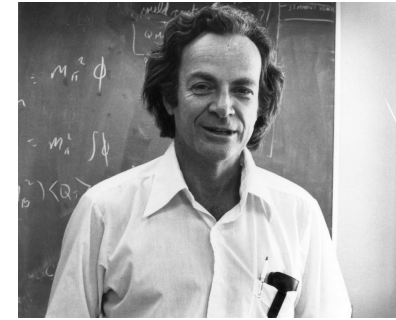
Para un (super)computador clásico: *imposible si $N \gtrsim 100$*

Un computador cuántico para simular... sistemas cuánticos

Can physics be simulated by a universal computer?

The full description of quantum mechanics for a large system with R particles [...] has too many variables, it cannot be simulated with a normal computer with a number of elements proportional to R [...] but it can be simulated with quantum computer elements.

(R. Feynman 1982)



- Un computador cuántico evoluciona con la ecuación de Schrödinger, por tanto el **puede simular sistemas cuánticos de manera eficiente.**
- Para simular un sistema de N partículas, basta que el número de qubits sea proporcional a N (o N^α).

¿ Que es un buen simulador cuántico?

El sistema usado como simulador debe ser tal que:

- ▶ se puede **controlar** y **cambiar** su estado y su Hamiltoniano
- ▶ se puede efectuar las simulaciones en un **tiempo muy corto**, antes la pérdida de las propiedades cuánticas por efectos de decoherencia.
- ▶ los qubits deben **interactuar entre sí** de manera controlada, para así crear entrelazamiento.
- ▶ el Hamiltoniano del sistema por simular se puede descomponer en suma de términos más simples.

Ejemplos: *iones atrapados, átomos fríos, circuitos supraconductores, fotones, NV-centers,...*

Simuladores analógicos y digitales

Tres tipos de simuladores cuánticos:

- ▶ **Simulador digital:** simula la dinámica con un circuito cuántico compuesto de puertas de un conjunto universal.
↪ el mismo computador puede simular cualquiera evolución
- ▶ **Simulador analógico:** mapea el sistema y su Hamiltoniano H en un sistema cuántico controlable con un Hamiltoniano similar
↪ simulador no universal, pero más eficiente (se necesitan menos puertas)
- ▶ **Simulador híbrido:** digital-analógico
↪ puede ser universal y necesita menos puertas que un simulador digital (Hamiltoniano analógico = recurso poderoso)

Método general

- Discretización en el tiempo:

$$t_i < t_i + \Delta t < \dots < t_i + k\Delta t < \dots < t_f \text{ con } \Delta t = (t_f - t_i)/m$$

- Solución de la ecuación de Schrödinger:

$$|\psi(t_f)\rangle = e^{-iH(t_f-t_i)}|\psi_i\rangle = (e^{-iH\Delta t})^m|\psi_i\rangle$$

- Aproximación del operador de evolución: si $H = \sum_{\ell=1}^L H_\ell$ donde los H_ℓ actúan sobre q partículas, $q = 1, 2, \dots$, luego

$$e^{-iH\Delta t} = \prod_{\ell=1}^L e^{-iH_\ell\Delta t} + O(\Delta t)^2$$

NOTA: el error es $\neq 0$ si los H_ℓ no conmutan entre sí

Aproximación de $e^{-iH\Delta t}$

$$e^{-iH\Delta t} = \prod_{\ell=1}^L e^{-iH_\ell \Delta t} + O(\Delta t)^2, \quad \Delta t = \frac{t_f - t_i}{m} \text{ con } m \gg 1$$

Dem. (caso $L = 2$) Por la fórmula de Taylor,

$$e^{-i(H_1+H_2)\Delta t} = \mathbb{1} - i(H_1 + H_2)\Delta t + O(\Delta t^2)$$

$$\begin{aligned} e^{-iH_1\Delta t} e^{-iH_2\Delta t} &= (\mathbb{1} - iH_1\Delta t + O(\Delta t^2))(\mathbb{1} - iH_2\Delta t + O(\Delta t^2)) \\ &= \mathbb{1} - i(H_1 + H_2)\Delta t + O(\Delta t^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Error} &= e^{-i(H_1+H_2)\Delta t} - e^{-iH_1\Delta t} e^{-iH_2\Delta t} \\ &= -\left((H_1 + H_2)^2 - H_1^2 - H_2^2 - 2H_1H_2\right) \frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3) \\ &= [H_1, H_2] \frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3) \end{aligned}$$

$$\text{Aproximación más precisa: } e^{-i(H_1+H_2)\Delta t} = e^{-iH_1 \frac{\Delta t}{2}} e^{-iH_2 \Delta t} e^{-iH_1 \frac{\Delta t}{2}} + O(\Delta t^3)$$

Fórmula de Trotter-Kato

- Para todos operadores auto-adjuntos H_1 y $H_2 : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$,

$$e^{-i(H_1+H_2)(t_f-t_i)} = \lim_{m \rightarrow \infty} (e^{-iH_1\Delta t} e^{-iH_2\Delta t})^m$$

con $\Delta t = (t_f - t_i)/m$.

- ALGORITMO:

$|\psi_0\rangle =$ aproximación del estado inicial $|\psi(t_i)\rangle$ en el espacio del simulador

$k = 0$

WHILE $(k\Delta t \leq t_f - t_i)$ DO

$$|\psi_{k+1}\rangle = e^{-iH_1\Delta t} \dots e^{-iH_L\Delta t} |\psi_k\rangle$$

$$k \leftarrow k + 1$$

END DO

Ejemplo: Hamiltoniano de Heisenberg

Cadena de espines 1/2 en una red unidimensional

$$H = - \sum_{j=1}^N \left(J_x \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + J_y \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + J_z \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + h \sigma_j^z \right)$$

$\sigma_j^{x,y,z}$ = espin al sitio j en la dirección x, y, z

h = campo magnético en la dirección z



Como H acopla todos los espines, no se puede simular fácilmente $e^{-iH\Delta t}$

Ejemplo: Hamiltoniano de Heisenberg

Cadena de espines 1/2 en una red unidimensional

$$H = - \sum_{j=1}^N \left(J_x \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + J_y \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + J_z \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + h \sigma_j^z \right)$$

$\sigma_j^{x,y,z}$ = espin al sitio j en la dirección x, y, z

h = campo magnético en la dirección z



Como H acopla todos los espines, no se puede simular fácilmente $e^{-iH\Delta t}$

Pero se puede simular de manera eficiente $e^{ih\sigma_j^z\Delta t}$,
 $e^{iJ_x\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x\Delta t}$, $e^{iJ_y\sigma_j^y\sigma_{j+1}^y\Delta t}$ y $e^{iJ_z\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z\Delta t}$

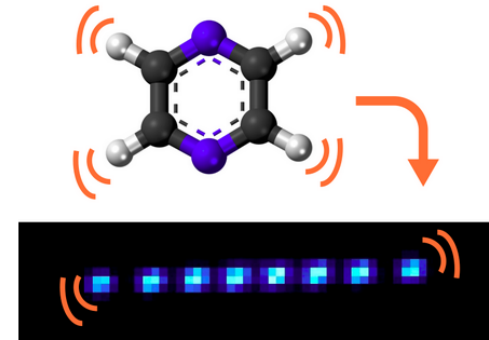
Fórmula de Trotter

$$e^{-iH(t_f-t_i)} = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(e^{ih \sum_j \sigma_j^z \Delta t} \prod_{j=1}^N e^{iJ_x \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x \Delta t} e^{iJ_y \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \Delta t} e^{iJ_z \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \Delta t} \right)^m$$

Algunas aplicaciones de las simulaciones cuánticas

◇ Química cuántica, medicina:

- propiedades químicas de moléculas (energía, tasa de reacción,...)
- aplicaciones farmacéuticas

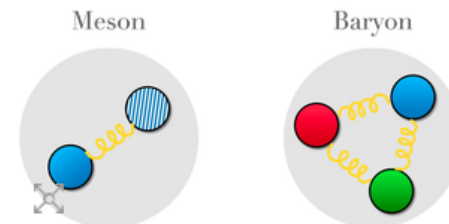


◇ Nanotecnología

- dispositivos semiconductores, nuevos materiales

◇ Física fundamental

- superconductividad, sistemas afuera de equilibrio
- física de alta energía (QED, QCD)

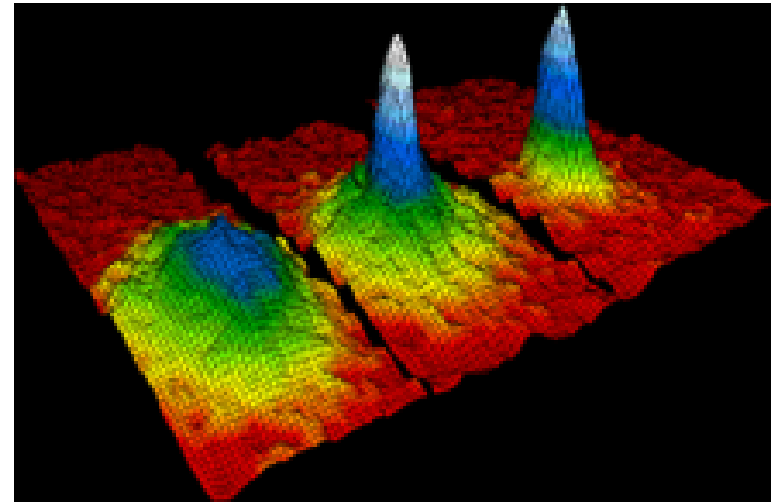


Outlines

- ✓ Introducción: computación cuántica
- ✓ Simulaciones cuánticas
 - Átomos fríos

Condensados de Bose-Einstein

- La condensación de Bose-Einstein ha sido observada por primera vez en 1995 por E. Cornell, C. Wieman, y W. Ketterle (*premios Nobel 2001*), enfriando un gas diluido de átomos de Rubidium atrapados magnéticamente hasta una temperatura de ~ 100 mK.

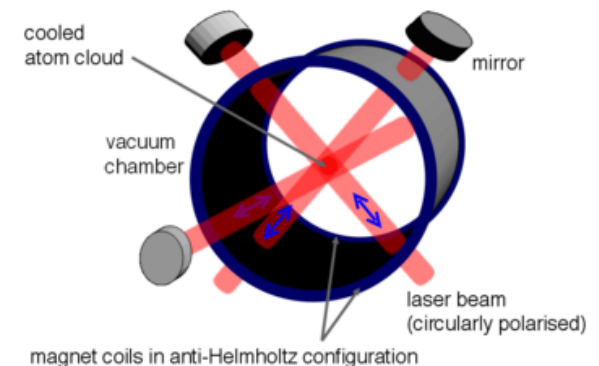


Observación en NIST/JILA en 1995 de un condensado con un número macroscópico de átomos en su estado fundamental ($T < T_c$).

- Desde entonces, muchos grupos experimentales han producidos condensados de B-E con átomos fríos atrapados en potenciales ajustables, controlando sus estados internos con láser.

Gases de átomos fríos en trampas ópticas

- Interacciones entre átomos ajustables (atractivas / repulsivas) mediante resonancias de Feshbach
- Diseño del potencial de confinamiento en tiempo real
- Análogo a circuitos superconductores, pero
 - bosones/fermiones en vez de electrones
 - acoplamiento con el entorno más débil (los átomos neutros no son sensibles al campo eléctrico ambiente)
 - menos efectos de decoherencia
 - escalabilidad (hasta $\sim 10^5$ átomos)
 - campo magnético artificial obtenido al rotar los átomos o mediante lasers (hasta $100\times$ más grandes que en materia condensada)

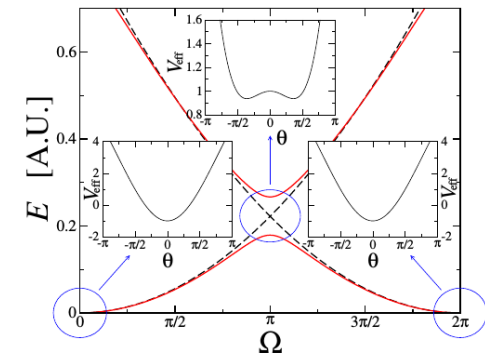


Aplicaciones a las tecnologías cuánticas

- ◇ **Simulaciones** del estado fundamental y de la **dinámica afuera de equilibrio** de sistemas de materia condensada
- ◇ **Metrología cuántica:** interferometría ultraprecisa, sensores del campo magnético, ...
 - ↪ saca provecho del entrelazamiento multipartito entre átomos
 - ↪ interferómetro de Mach-Zehnder con átomos atrapados en potenciales de doble pozo o de un solo pozo en dos estados internos.

[Gross et al., Nature 464, 1164 ('10)], [Riedel et al., Nature 464, 1170 ('10)]

- ◇ **Computación cuántica:** “flux qubits” con átomos atrapados ópticamente en redes en forma de anillo con un campo magnético (AQUID) *[Aghamalyan et al., NJP 17, 045023 ('15)]*

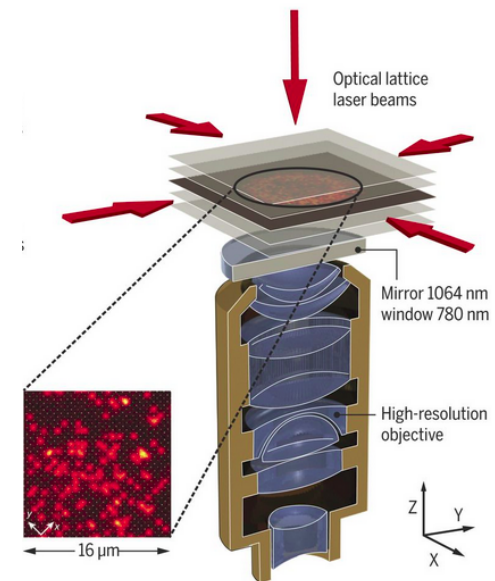


Simulaciones cuánticas con átomos fríos

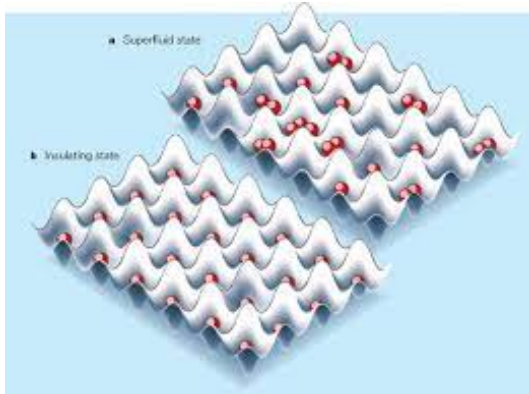
Los átomos fríos forman un **simulador analógico ideal** debido a su alto grado de controlabilidad (dimensión, geometría, desorden,...) [Gross, Bloch, *Science* 357, 995 ('17)]

En particular, se puede simular sistemas discretos confinados en redes en 1,2 y 3 dimensiones

Microscopios de gases cuánticos permiten detectar los átomos en cada sitio con una alta eficiencia [Sherson et al., *Nature* 467, 68 ('10)]



Modelo de Bose-Hubbard, sistemas de espines



- **Modelo de Bose-Hubbard:** Observación de la transición superfluido-aislante de Mott *[Greiner et al., Nature 415, 39 ('02)]*

- **Cadena de espines:** Modelo de Ising (antiferromagnetismo)

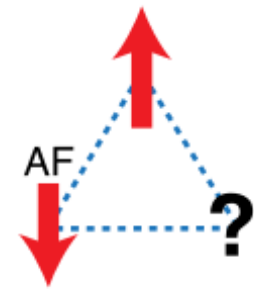
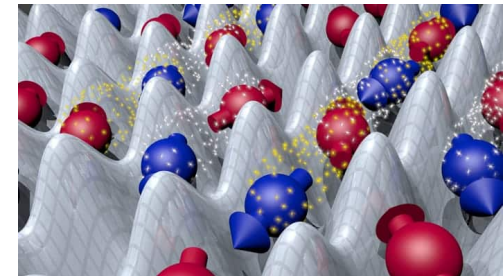
[Simon et al., Nature 472, 307 ('11)]

Modelo de Heisenberg isótropo (dinámica de espines, magnons)

[T.Fukushara et al., Nat. Phys. 9, 235 ('13);x Nature 502, 76 ('13)]

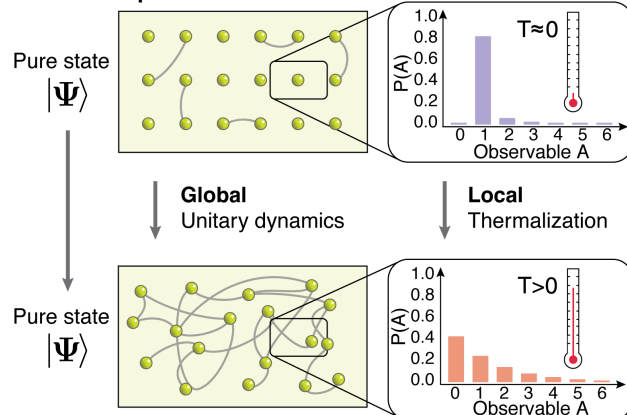
- **Magnetismo en sistemas de espines frustrados**

[J. Struck et al., Science 333, 996 ('11)]



Termalización vs localización

Quantum quench



- Termalización de sistemas con muchas partículas

[T. Langen et al, Nat.Phys. 9, 640 ('13)]

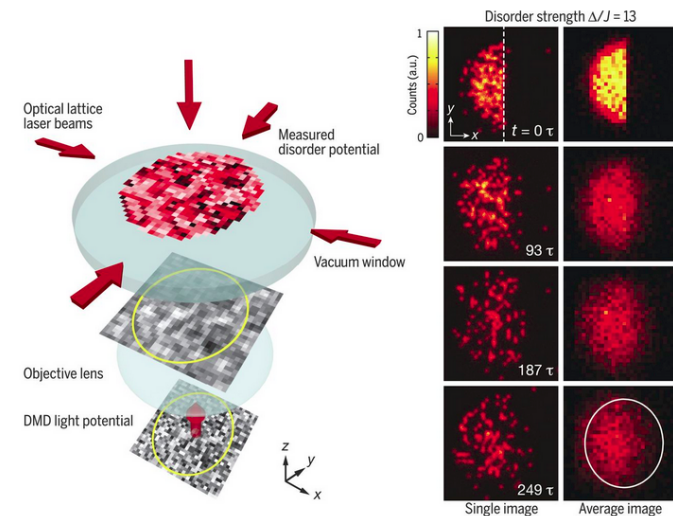
[H. Kaufman et al, Science 353, 794 ('16)]

- Localización de Anderson con muchos cuerpos en 1 o 2 dimensiones

[J.Y. Choi et al, Science 352, 1547 ('16)]

[S.S. Kondov et al. PRL 114, 083002 ('15)]

[J. Smith et al., Nat. Phys. 12, 907 ('16)]



Gracias por su atención!