

EXPLORACIÓN DE LITERATURA

La búsqueda constante de nuevos materiales en el campo de la Física del Estado Sólido ha llevado a la exploración de diversas técnicas de simulación para comprender mejor las propiedades de estos materiales (**De Raedt et al., 2019**). Uno de los aspectos cruciales en esta investigación se centra en las propiedades térmicas de los nanomateriales, con aplicaciones que abarcan desde la producción de energía hasta la nanoelectrónica (**Zhang & Li., 2010**). Sin embargo, la simulación de sistemas a nanoescala se complica debido a la presencia de efectos cuánticos, que desafían la capacidad de las computadoras clásicas para llevar a cabo estas simulaciones, incluso con los superordenadores más potentes (**Connor et al., 2023**).

En este contexto, los computadores cuánticos emergen como una prometedora solución, ya que son eficientes para simular sistemas cuánticos de muchos cuerpos (**Smith et al., 2019**). A pesar de los avances en la simulación de sistemas a temperaturas cercanas al cero absoluto en computadores cuánticos, las técnicas para calcular propiedades a temperaturas finitas son menos abundantes. Uno de los principales desafíos en este campo radica en la preparación de estados termodinámicos adecuados para llevar a cabo estas simulaciones (**Bassman et al., 2021**).

Actualmente, las técnicas cuánticas para la preparación de estados termodinámicos se dividen en dos categorías. La primera involucra la inicialización de qubits en un estado termodinámico completo, lo que permite el cálculo directo de observables relacionados con propiedades termales. Sin embargo, estas técnicas a menudo requieren circuitos cuánticos de gran tamaño, lo que las hace inadecuadas para computadores cuánticos de escala intermedia, conocidos como NISQ (**Preskill, 2018**). Otras técnicas se basan en enfoques variacionales, como los termodinamizadores cuánticos variacionales, pero se vuelven más difíciles de escalar a medida que aumenta la complejidad del sistema (**Foldager et al., 2022**).

La segunda categoría se enfoca en la preparación de un conjunto de estados puros (**Sugiura & Shimizu, 2013**), uno a la vez, donde cada estado se muestrea según la distribución termodinámica correcta. Aunque esta categoría es más prometedora en términos de recursos computacionales (**Terhal & DiVincenzo, 2000**), la cantidad de muestras necesarias tiende a aumentar con el tamaño del sistema, lo que puede requerir una inversión significativa de recursos.

En contraposición, el algoritmo Canonical Thermal Pure Quantum (TPQ) ofrece una solución que no experimenta un aumento significativo en la complejidad a medida que crece el tamaño del sistema. Este innovador algoritmo se basa en una función no unitaria que depende del hamiltoniano del sistema y la inversa de la temperatura para preparar el estado adecuado. Sin embargo, el obstáculo en su implementación directa radica en que las

computadoras cuánticas solo pueden realizar operaciones unitarias, por lo que debe implementarse una aproximación unitaria de la transformación no unitaria basada en los recursos cuánticos disponibles. En particular, se preferirá usar el método FABLE para codificar adecuadamente en bloque (**Camps & Van Beeumen, 2022**) a fin de obtener el operador de interés, al verificar ser el más favorable en términos de profundidad del circuito y tiempo de generación (**Connor et al., 2023**).

Hasta la fecha, el TPQ ha demostrado resultados prometedores, especialmente en comparación con el modelo clásico de Heisenberg al calcular la evolución térmica de la energía interna. Se espera que este algoritmo facilite la estimación de propiedades a temperaturas finitas en sistemas cuánticos en computadores cuánticos de escala intermedia y, a medida que la tecnología cuántica evolucione, su utilidad siga creciendo (**Lu et al., 2021**).

En particular, introduciremos el algoritmo preparador de estados termales en trabajos relacionados con las interacciones responsables de la formación de estados helimagnéticos, pues algunas de estas interacciones desempeñan un papel crucial en la generación de skyrmiones magnéticos en un sistema Heisenberg 2D (**Haller et al., 2022**), los cuales son una propuesta para las tecnologías del futuro (**Mandrus, 2023**). En ese sentido, investigaremos la evolución térmica de la energía interna de los estados helimagnéticos mediante el cálculo de observables como la energía interna, la capacidad calorífica, la susceptibilidad y la magnetización, los cuales deberán ser contrastados con los obtenidos a través de un modelo clásico de Heisenberg.

1. REFERENCIAS

- 1.1. De Raedt, H. et al. Massively parallel quantum computer simulator, eleven years later. (2019).
- 1.2. Zhang, G. & Li, B. Impacts of doping on thermal and thermoelectric properties of nanomaterials. (2010).
- 1.3. Bassman, L., Klymko, K., Liu, D., Tubman, N. M. & de Jong, W. A. Computing free energies with fluctuation relations on quantum computers. (2021).
- 1.4. Powers, C., Bassman Oftelie, L., Camps, D., & de Jong, W. A. Exploring finite temperature properties of materials with quantum computers. (2023).
- 1.5. Smith, A., Kim, M. S., Pollmann, F. & Knolle, J. Simulating quantum many-body dynamics on a current digital quantum computer.
- 1.6. Preskill, J. Quantum computing in the nisq era and beyond. (2018).
- 1.7. Foldager, J., Pesah, A. & Hansen, L. K. Noise-assisted variational quantum thermalization. (2013).
- 1.8. Sugiyura, S. & Shimizu, A. Canonical thermal pure quantum state.
- 1.9. Terhal, B. M. & DiVincenzo, D. P. Problem of equilibration and the computation of correlation functions on a quantum computer. (2000).

- 1.10. Camps, D. & Van Beeumen, R. Fable: Fast approximate quantum circuits for block-encodings. (2022).
- 1.11. Lu, S., Bañuls, M. C. & Cirac, J. I. Algorithms for quantum simulation at finite energies. (2021).
- 1.12. Haller, A., Groenendijk, S., Habibi, A., Michels, A., & Schmidt, T. L. Quantum skyrmion lattices in Heisenberg ferromagnets. (2022).
- 1.13. Mandrus, D. Helimagnetism: Fundamental Physics and Applications to Electronics. (2023).