

# Cuántica por Cuántica: química cuántica con computadoras cuánticas

Carlos Amador Bedolla y Alán Aspuru Guzik

## ABSTRACT (Quantum by Quantum: Quantum Chemistry by Quantum computation)

Superposition and entanglement are properties of the quantum nature that suggest the construction, programming and functioning of quantum computers. Specifically, they have been imagined as a means for solving the Schrödinger equation and calculating the energy of a quantum system, i. e. doing quantum chemistry on quantum computers. It has been shown recently that this is possible in principle. We present the basic ideas of the quantum algorithm for the solution of Schrödinger's equation and the estimation of the resources needed for a quantum computer to achieve this task.

**KEY WORDS:** Quantum computation, quantum algorithms, quantum chemistry.

Es realmente difusa la barrera entre la revisión de la investigación de frontera de un tema especializado y una contribución para la actualización docente. Esta sección recoge artículos de revisión adecuados para la enseñanza. En esta ocasión conviene colocar aquí una guía para el lector recomendada por los autores, algo así como una advertencia: las secciones 1, 2 y 5 presentan el problema de manera general y las secciones 3 y 4 contienen los detalles del algoritmo. En pocas palabras, que las secciones 1, 2 y 5 son las generalidades del tema, las que no pueden ni deben soslayarse, y que las secciones 3 y 4 son más dirigidas para quienes tengan algo más de antecedentes de mecánica cuántica.

## Resumen

La superposición de estados y el intrincamiento son características de la naturaleza cuántica que invitan a especular acerca de la construcción, la programación y el funcionamiento de computadoras cuánticas. En particular, se ha especulado acerca de la posibilidad de usarlas para resolver la ecuación de Schrödinger y calcular la energía de un sistema cuántico, es decir, la posibilidad de hacer química cuántica en computadoras cuánticas. Recientemente se demostró que, en principio, esto es posible. Presentamos las ideas básicas del algoritmo cuántico para la solución de la ecuación de Schrödinger y las estimaciones de los recursos que deberá tener la computadora cuántica que implemente este algoritmo.

## 1. Bits y qubits, cómputo clásico y cómputo cuántico

La era digital nos ha acostumbrado a la idea de sistemas de numeración diferentes del decimal. Después de todo, las

computadoras funcionan mediante la implementación de un sistema binario basado en algún medio físico que puede ser el paso/interrupción de corriente a través de un conductor, la magnetización en una dirección/dirección opuesta, o la presencia/ausencia de carga en un capacitor. La combinación de un gran número de estos interruptores binarios ( $2^{30}$  en una memoria RAM típica actual de 1GB) permite codificar grandes cantidades de información y da lugar a todas las maravillas de la era digital: la internet, la música en mp3, las fotografías digitales y las computadoras que efectúan un millón de millones de operaciones por segundo (un teraflops) y que nos permiten hacer química computacional.

Richard Feynman (1982), una de las máximas luminarias de la física de la segunda mitad del siglo XX, sugirió la existencia de otro paradigma de digitalización basado en el comportamiento cuántico de la materia. En este paradigma la materia concreta que sirve para la realización de los puentes lógicos no es la corriente eléctrica sino la medición del estado cuántico del sistema. Empecemos por tratar de aclarar esta idea al recordar algunas de las características esenciales del mundo cuántico.

Con todo lo extraño que es el mundo de la cuántica, estamos más o menos familiarizados con dos de sus peculiaridades: la propia cuantización y la medición cuántica de propiedades que implica la indeterminación. Nos conviene elegir un sistema sencillo para ilustrar estas características, así que tomaremos como ejemplo uno de los sistemas más sencillos que además nos resulta familiar a los químicos: el sistema de dos estados de espín. Un electrón tiene un momento angular intrínseco —espín— de tamaño constante y conocido pero de orientación indeterminada. Lo único que sabemos acerca de esa orientación es que su proyección a lo largo de un eje fijo puede tomar uno de dos valores: un medio de  $\hbar$  positivo o un medio de  $\hbar$  negativo.

Decimos entonces que los electrones tienen “espín para arriba” o “espín para abajo”. El uso de un campo magnético, por un lado, nos permite separar a los electrones con uno u

<sup>1</sup> Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México.

Correo electrónico: carlos.amador@unam.mx

<sup>2</sup> Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University.

Correo electrónico: aspuru@fas.harvard.edu

otro tipo de espín. Cierta interacción controlada de los electrones con la radiación electromagnética, por otro lado, nos permite modificar el espín de los electrones y cambiarlo de espín para arriba a espín para abajo o viceversa. La idea del cómputo cuántico es emplear esos valores de espín como los dos estados posibles de un bit, al asociar, por ejemplo, el espín para arriba con el 0 y el para abajo con el 1. La cuantización nos ofrece directamente un sistema físico para representar un bit. Más adelante veremos que este bit tiene importantes diferencias con un bit clásico, así que de una vez lo llamaremos *qubit*.

Si se pudiera implementar esta idea para hacer un aparato, habríamos logrado reemplazar el medio tradicional de las computadoras —la corriente eléctrica— por un medio más pequeño, que requiere menos energía, que se puede compactar más, etcétera —el espín del electrón—. Esto constituiría un gran avance incremental en la línea de desarrollo que se ha seguido hasta la fecha. Pero la idea del cómputo cuántico es mucho más profunda debido a una característica esencial de la mecánica cuántica: la indeterminación.

En general, un sistema de un electrón —antes de que lo hagamos interactuar con el campo magnético que nos revelará el valor de su espín— puede estar en un estado mezclado con un valor de espín que no sabemos si es 0 o 1, lo que sabemos es que tiene una probabilidad  $c_0^2$  de resultar con espín hacia arriba y una probabilidad  $c_1^2$  de resultar con espín hacia abajo; desde luego  $c_0^2 + c_1^2 = 1$ . Recuérdese que la probabilidad observable es proporcional al cuadrado de la función de onda; así, el estado del sistema está descrito por una función de onda (de un qubit, por eso el subíndice) de la forma

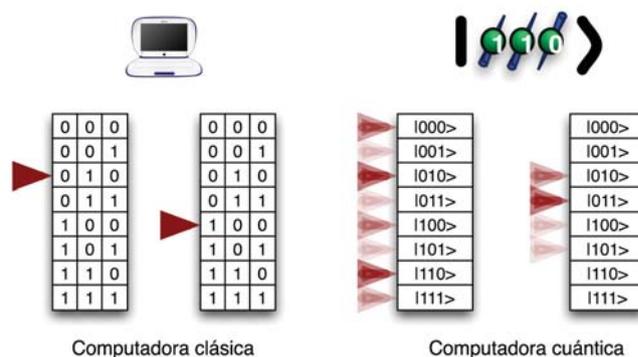
$$\Psi_1 = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$$

¿Qué pasa si tenemos ahora dos qubits? El estado del sistema antes de que realicemos una medición está descrito por la función de onda (de dos qubits, por eso el subíndice),

$$\Psi_2 = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle$$

Nótese que si tuviéramos tres qubits, el estado del sistema sería una combinación lineal de *ocho* estados. Y si tuviéramos  $n$  qubits sería una de  $2^n$  estados. Hasta aquí las cosas pueden resultar parecidas al caso clásico. Después de todo en el caso clásico con 10 bits podemos representar  $2^{10}$  estados (un kilobit). La diferencia *fundamental* con el cómputo cuántico es que debido a la indeterminación los  $2^{10}$  estados *están presentes al mismo tiempo*.

Vamos a detenernos aquí un momento porque ésta es una de las ideas más desconcertantes del tema. En el caso clásico tenemos la posibilidad de representar, con 10 bits, cualquiera de  $2^{10}$  estados, pero una vez que decidimos cuál representar eso es todo lo que tenemos. En el caso cuántico, por el contrario, la función de onda que describe a los 10 qubits contiene los  $2^{10}$  estados al mismo tiempo. Claro que cuando hagamos una medición sólo vamos a detectar uno de ellos —y eso, probabilísticamente. Pero mientras no hagamos una medición, mientras no *colapsemos* a la función de onda, los  $2^{10}$  estados



**Figura 1.** Una de las diferencias entre una computadora clásica, que puede operar en un solo bit a la vez (izquierda) y una computadora cuántica (derecha), que puede existir en una superposición de varios estados al mismo tiempo.

están presentes. Y si encontramos la forma de manipular esa función de onda, haremos una manipulación simultánea sobre esa multitud de estados... Debido a la indeterminación, el cómputo cuántico es intrínsecamente paralelo. El diagrama de la figura 1 es una manera visual de representar este concepto.<sup>1</sup>

Claro que está la formidable objeción de cómo vamos a hacer para medir significativamente la función de onda. Dijimos que los  $2^{10}$  estados están presentes antes de medir; cuando midamos sólo veremos uno, y ni siquiera sabemos cuál, ya que la medición corresponderá a cualquiera de ellos con probabilidad igual al cuadrado de su coeficiente. Pero ya regresaremos a ese problema. Por lo pronto emocionémonos ante la perspectiva de contar con una forma de calcular la evolución de  $2^n$  estados con sólo  $n$  espines.

## 2. La química cuántica deconstruida

Reducido a su mínima expresión, el trabajo de la química cuántica es bastante directo: hay que escoger una molécula, hay que escoger una geometría, hay que resolver la ecuación de Schrödinger. Para fines del abordaje del cómputo cuántico a la química cuántica, recuérdese que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que queremos resolver para encontrar la energía es la solución estacionaria de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo,

$$H|\Psi\rangle = i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t}$$

<sup>1</sup> Como era de esperarse, las cosas son un poquito más complicadas. La superposición por sí sola no es responsable de la enorme potencialidad de las computadoras cuánticas. El otro elemento fundamental es el "intrincamiento". Las compuertas de dos bits, por ejemplo, las compuertas controladas, generan estados intrincados o entrelazados (*entangled* en inglés) que no pueden ser descritos clásicamente. Las dos características juntas (superposición e intrincamiento) son suficientes para proveer a las computadoras cuánticas de su poder de cómputo.

Que, para hamiltonianos independientes del tiempo, tiene como solución formal

$$|\Psi\rangle = e^{\frac{-itH}{\hbar}} |\Psi_0\rangle,$$

donde  $|\Psi_0\rangle$  representa la función de onda inicial y  $|\Psi\rangle$  a la función de onda al tiempo  $t$ . Ahora imaginemos que podemos *simular* el paso del tiempo. Como las soluciones estacionarias,  $|\phi_n\rangle$ , de la ecuación de Schrödinger que nos interesa forman un conjunto completo —y existen, aunque no las conocemos—, cualquier función que postulemos como función de onda inicial será una combinación lineal de éstas,

$$|\Psi_0\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle,$$

y la función de onda al tiempo  $t$  será también una combinación lineal de funciones estacionarias multiplicadas cada una de ellas por una fase que oscila con una frecuencia proporcional a su energía,

$$|\Psi\rangle = \sum_n e^{\frac{-it\varepsilon_n}{\hbar}} c_n |\phi_n\rangle.$$

Entonces, si podemos simular la evolución de la función de onda, vamos a obtener una combinación de funciones oscilatorias, cada una de ellas con una frecuencia proporcional a la energía de ese estado estacionario. El análisis de la transformada de Fourier de esa combinación de funciones nos permitirá conocer el espectro energético del sistema. La aplicación tal cual de este esquema es el método espectral de Feit, Fleck y Steiger (1982). (Por cierto, si el tiempo es artificialmente sustituido por un tiempo imaginario puro,  $t \rightarrow i\tau$ , las exponenciales de la ecuación anterior decaen como función del tiempo y la única que sobrevive es la que corresponda a la energía más baja, el estado basal. Este es el fundamento del método de Monte Carlo Cuántico [Hammond, Lester Jr. y Reynolds, 1994].)

¿Cómo se puede simular la evolución del sistema en la computadora cuántica? Aspuru-Guzik, Dutoi, Love y Head-Gordon (2005) atacaron ese problema, al suponer que conocemos la matriz hamiltoniana del problema para la interacción de configuraciones completa (FCI, por sus siglas en inglés) en cierta base de funciones. Hagamos un pequeño paréntesis para recordar lo que esto quiere decir.

Conviene hacer énfasis, primero, que la descripción realizada del trabajo de la química cuántica es completamente general, es decir, éste es válido para sistemas de cualquier número de electrones toda vez que el hamiltoniano de la química es conocido. Desde luego, la aplicación práctica de este esquema plantea considerables dificultades y da lugar a la especialidad de la química computacional que ha desarrollado métodos muy ingeniosos para obtener soluciones aproximadas en las computadoras clásicas. En la invención de los algoritmos del cómputo cuántico para tratar los problemas químicos mencionaremos el método de Hartree-Fock —la mejor aproximación orbital a un sistema de muchos electrones que

respeto el principio de exclusión— y el método de interacción de configuraciones completa —la solución exacta, para una base finita, al problema multielectrónico.

La química computacional debe una buena parte de su éxito a las sorprendentes propiedades de las funciones gaussianas. Como las funciones gaussianas forman un conjunto completo, cualquier otra función se puede expresar como una combinación lineal de gaussianas. En particular, las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger —cuyo integrante con eigenvalor más bajo buscamos— se pueden escribir como combinaciones lineales de gaussianas. Para hacer exacta esta representación, tendríamos que emplear un número infinito de funciones gaussianas, empresa claramente imposible. Pero, para aproximar la solución, podríamos emplear un número *finito* de funciones gaussianas es decir, una base finita. La aproximación más cruda posible en cuanto a la selección de la base, consiste en usar una base mínima, el número mínimo de orbitales atómicos que tengan la simetría del sistema estudiado; la implementación de este estilo más usada es conocida como STO-3G. Con esas gaussianas se puede construir, con relativa facilidad, la matriz hamiltoniana del sistema y encontrar la mejor combinación —la que produce el estado de menor energía— de orbitales atómicos en orbitales moleculares, es decir la solución de Hartree-Fock, el determinante de Slater de menor energía. Y todavía se puede ir más allá al postular una función de onda que sea, a su vez, una combinación lineal de determinantes de Slater. Para una base pequeña, como la base mínima STO-3G —y una molécula pequeña—, el número de determinantes de Slater distintos no es estratosféricamente grande y al construirlos todos, es posible obtener la combinación de ellos que hace mínima la energía —la otra gran deuda de la química computacional es con el principio variacional—. Lo que acabamos de describir es la construcción de la matriz hamiltoniana de *interacción de configuraciones completa* para la base elegida. Por ejemplo, en el caso de la molécula de agua, la matriz de FCI combina 196 determinantes de Slater distintos.

Existe un método llamado partición de Trotter que puede ser usado para construir la matriz de FCI en una computadora cuántica en un tiempo que crece polinomialmente con el tamaño del sistema. El método está descrito en el artículo de Aspuru-Guzik, Dutoi, Love y Head-Gordon (2005), y en detalle en un artículo en elaboración (Whitfield, Biamonte, Mohseni y Aspuru-Guzik, en preparación).

Dejemos de lado, por el momento, la construcción de la matriz de FCI y simplemente supongamos que la conocemos. El algoritmo cuántico de estimación de fase nos permitirá calcular su eigenvalor más bajo.

### 3. El álgebra de los qubits

La *abstracción* necesaria para estudiar las posibilidades del cómputo cuántico es distinta de la que empleamos en el cómputo clásico y con la que, a través de los años, hemos alcanzado ya alguna familiaridad. La del cómputo cuántico está basada en el álgebra matricial y puede parecer un hueso

duro de roer. Presentaremos ahora unos elementos mínimos de su funcionamiento. Invitamos al lector a hacer un esfuerzo por seguir estos desarrollos. Las matemáticas no son excesivamente complicadas y sólo requieren recordar las operaciones matriciales elementales. A pesar de que el campo del cómputo cuántico es muy nuevo, se cuenta ya con un texto introductorio clásico (Nielsen y Chuang, 2000) en el que está basada la presentación siguiente.

Las computadoras cuánticas funcionarán soportadas por algún medio físico. Pero para programarlas necesitamos una representación matemática abstracta. Contamos para ello con el álgebra matricial. Veamos cómo se pueden representar las operaciones en esta notación. Empecemos con un qubit, representado por un vector de dos elementos, en sus dos estados posibles,

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ y } |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix};$$

los estados de dos qubits —cuatro— se pueden representar mediante el producto directo de los de un qubit, por ejemplo el,  $|00\rangle$ .

$$|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

o el

$$|10\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 1 & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Así representaremos a los estados de  $n$  qubits como vectores columna con  $2^n$  entradas. Para manipular estos estados de  $n$  qubits, necesitaremos matrices unitarias —para conservar al estado cuántico normalizado— de  $2^n \times 2^n$  entradas. Veamos algunos ejemplos de estas operaciones. Empecemos con una que actúa sobre un sólo qubit, la operación de Hadamard, representada por la matriz

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

y que tiene como efecto, sobre los estados puros,

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|0\rangle + |1\rangle],$$

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|0\rangle - |1\rangle],$$

como se puede comprobar fácilmente si se llevan a cabo las multiplicaciones. Nótese que podemos construir la operación de Hadamard para dos qubits al aplicar la misma regla del producto directo,

$$\begin{aligned} H^{\otimes 2} &= H \otimes H \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} & 1 & \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ 1 & \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} & -1 & \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

La operación de Hadamard toma cualquier estado puro y lo convierte en una superposición equivalente de todos los estados. Todo esto se puede extender penosamente a 3, 4, ... qubits, pero nos quedaremos con ejemplos de dos qubits porque, siendo manejables, alcanzan a mostrar la complejidad del manejo de varios qubits.

Otra operación de gran importancia es la operación controlada por el primer qubit, que ejemplificaremos con la operación  $c - R_2^{-1}$

$$c - R_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-2\pi i/2^2} \end{pmatrix}$$

El efecto de esta operación sobre los cuatro estados puros de dos qubits es

$$c - R_2^{-1}|00\rangle = |00\rangle$$

$$c - R_2^{-1}|01\rangle = |01\rangle$$

$$c - R_2^{-1}|10\rangle = |10\rangle$$

$$c - R_2^{-1}|11\rangle = e^{-2\pi i/2^2}|11\rangle;$$

que vamos a interpretar de la siguiente forma: cuando el primer qubit vale cero —los dos primeros casos— el estado de dos qubits no se altera, pero cuando el primer qubit vale uno —los dos casos finales— el estado de dos qubits puede ser alterado (aunque en este caso particular solo hay efecto si el segundo qubit es uno). Es decir, el resultado está *controlado* por el valor del primer qubit, si es cero no hay efecto, si es uno habrá un efecto cuya interpretación detallaremos más adelante. Este tipo de operaciones se llaman operaciones “controladas” por esta razón.

Armados con esta álgebra, podemos proceder ahora a la descripción del algoritmo de estimación de fase que nos va a servir para extraer el eigenvalor más bajo de la matriz de interacción de configuraciones completa.

#### 4. El algoritmo de estimación de fase

Los algoritmos cuánticos buscan la manipulación controlada

de estados cuánticos. Como se indicó anteriormente, un estado cuántico de dos qubits, por ejemplo, es una combinación lineal de cuatro estados cuánticos

$$\Psi_2 = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle$$

Una manipulación de este estado la convertirá en

$$\Psi'_2 = d_{00}|00\rangle + d_{01}|01\rangle + d_{10}|10\rangle + d_{11}|11\rangle$$

bajo la condición de que la nueva función de onda conserve la normalización,

$$\sum c_{ij}^2 = \sum d_{ij}^2 = 1$$

Una representación de esta manipulación es una matriz —de cuatro por cuatro, en este caso, de  $2^n \times 2^n$  para  $n$  qubits— unitaria. Pero la exponencial imaginaria de cualquier matriz es una matriz unitaria. De tal manera que la expresión

$$U|\Psi\rangle = e^{-iHt}|\Psi\rangle,$$

permite aplicar el hamiltoniano en la forma de un operador unitario. Pero además, el efecto del hamiltoniano sobre la función de onda es

$$e^{-iHt}|\Psi\rangle = e^{-iet}|\Psi\rangle = e^{-i2\pi\omega t}|\Psi\rangle.$$

En donde hemos aprovechado que  $|\Psi\rangle$  es función propia del hamiltoniano, con eigenvalor  $\varepsilon$ , y hemos escrito al producto  $\varepsilon t$  como  $2\pi\omega t$ . Esto último con el fin de interpretar el resultado de aplicar este operador unitario como el de multiplicar a la función de onda por una fase que oscila armónicamente con frecuencia  $\omega$ .

Y ésta es la clave del algoritmo cuántico para calcular la energía de un sistema electrónico. Como la cantidad que hemos construido es la función de onda multiplicada por una función periódica que oscila con frecuencia  $\omega$ , y esta frecuencia es proporcional a la energía, sólo hace falta calcular la frecuencia; y contamos con un algoritmo cuántico de estimación de fase (Kitaev, 1995), que describiremos a continuación.

Para empezar imaginemos un número entre 0 y 1 escrito en sistema binario

$$\frac{x_1}{2} + \frac{x_2}{2^2} + \frac{x_3}{2^3} + \dots = 0.x_1x_2x_3\dots,$$

en donde  $x_i$  es 0 o 1. Multipliquemos ese número por  $2^n$

$$2^n(0.x_1x_2x_3\dots) = x_1x_2\dots x_n.x_{n+1}x_{n+2}\dots$$

de tal forma que si lo usamos en una exponencial compleja

$$e^{-2\pi i 2^n(0.x_1x_2x_3\dots)} = e^{-2\pi i(0.x_{n+1}x_{n+2}\dots)},$$

ya que la parte entera del argumento produce una exponencial igual a uno ( $e^{2\pi im} = 1$  si  $m$  es entero). O sea que tenemos una forma de recorrer los dígitos de un número: cada vez que multiplicamos por 2, traemos un nuevo dígito a la primera posición. Ya nada más nótese que esta multiplicación se puede hacer al aplicar el operador unitario en repetidas ocasiones —potencias de 2—: aplicarlo dos veces equivale a multiplicar

el argumento por dos, cuatro veces, por cuatro y así sucesivamente.

Ahora consideremos con más detalle la operación  $c - R_2^{-1}$  que conocimos en la sección anterior. Apliquémosla al estado de dos qubits

$$|1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{2\pi i(0.x_1x_2)}|1\rangle),$$

nótese que esto equivale a realizar la operación matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-2\pi i/2^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2}e^{2\pi i(0.x_1x_2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2}e^{2\pi i(0.x_1)} \end{pmatrix}$$

que es el estado<sup>4</sup>

$$|1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{2\pi i(0.x_1)}|1\rangle),$$

es decir, la operación  $c - R_2^{-1}$  elimina el segundo dígito del argumento de la exponencial, y deja todo lo demás intacto.

En seguida consideremos un estado peculiar de un qubit

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_1}|1\rangle],$$

donde debe notarse que el número binario tiene sólo un dígito —o sea que es 1/2 o cero— y que es el estado del segundo qubit en la operación anterior. Hagámosle la transformación conocida como la compuerta de Hadamard, que está representada por la matriz

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix};$$

el resultado es

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} |\phi\rangle = \frac{1}{2} [ |0\rangle + |1\rangle + e^{2\pi i 0.x} |0\rangle - e^{2\pi i 0.x} |1\rangle ] = |x\rangle$$

ya que si  $x$  es igual a cero, la fase es igual a uno y se cancela el estado  $|1\rangle$ , mientras que si es igual a uno, la fase es igual a menos uno y se cancela el estado  $|0\rangle$ . Es decir, tenemos una forma de “medir” un dígito de un número.

Ahora si ya podemos armar los retazos. Tenemos por un lado una manera de ir “recorriendo” los dígitos de un número a la primera posición, luego tenemos una manera de ir “eliminando” los dígitos de las posiciones siguientes a la primera, para dejar a ésta sola. Y finalmente tenemos una manera de extraer el dígito de la primera posición después de que lo

<sup>4</sup>Hágase la multiplicación de matrices que se indica y luego recuerdese la definición del producto directo de la sección 3, para entender la factorización que sigue.

aislamos. Pues eso vamos a hacer para estimar el valor del número que aparece en el argumento de la exponencial en el estado

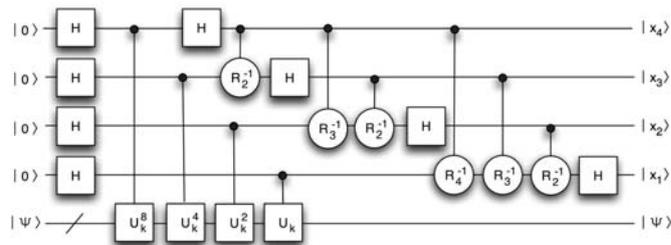
$$e^{-iHt} |\Psi\rangle = e^{-i2\pi\omega t} |\Psi\rangle = e^{-i2\pi(0.x_1x_2x_3\dots)t} |\Psi\rangle$$

El algoritmo representado en la figura 2 realiza estas operaciones. El algoritmo requiere de dos tipos de qubits, los que sirven para representar a la función de onda —un número por el momento indeterminado que se representa con la línea inclinada en la parte inferior del diagrama— y los que sirven para calcular y almacenar el resultado de la medición de la fase —en el diagrama están representados cuatro de ellos, así que, con este diagrama obtendríamos una precisión no mayor de  $1/2^4$ , aunque previsiblemente emplearíamos muchos más en una aplicación real del algoritmo—. La medición de la energía se hace con los qubits superiores. Empezamos con un estado puro  $|0\rangle$  al que convertimos en una superposición igual de  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  con la compuerta de Hadamard. Luego aplicamos el operador de evolución un número distinto de veces en cada uno de los qubits para traer a la primera posición un dígito diferente. Quitamos los dígitos sobrantes a la derecha —con la aplicación de cuantas  $c - R_n^{-1}$  como sean necesarias— y aplicamos de nuevo la compuerta de Hadamard para extraer el dígito correspondiente. Los leemos y terminamos.

## 5. El diablo en los detalles

Hemos descrito algunas de las ideas elementales que servirán para emplear las computadoras cuánticas en aplicaciones de la química cuántica. Desde luego, el problema está lejos de haber sido resuelto por completo y existen miles de detalles que requieren soluciones brillantes. Lo bueno es que precisamente eso es lo que sabe hacer el sistema de investigación actual: ante un programa de investigación promisorio y bien definido, los científicos conocedores de estas posibilidades se aplicarán en la solución de estos problemas y, muy probablemente, veremos su aplicación real en poco tiempo.

Los detalles son fáciles de ver. Algunos de ellos tienen que ver con la preparación del estado que metimos al algoritmo descrito. ¿Cómo hicimos para representar a la función de onda? ¿De dónde sacamos la matriz de FCI? Otros tienen que ver con detalles técnicos de la construcción de las computadoras cuánticas. En el algoritmo descrito supusimos que tenemos compuertas que saben hacer las operaciones que nos ocupan —exponenciaciones, operaciones  $c - R_n^{-1}$ , compuertas de Hadamard, etc.—, mientras que en los intentos reales de construir compuertas cuánticas sólo se cuenta con un conjunto limitado de operaciones —las contenidas en las matrices de Pauli, por ejemplo—. Sin embargo se sabe que se pueden combinar estas compuertas conocidas para construir las com-



**Figura 2.** Diagrama de flujo que representa el algoritmo cuántico para obtener la energía de un sistema cuando se conoce su hamiltoniano de interacción de configuraciones completa, en una determinada base finita. La aplicación de potencias del hamiltoniano permite extraer uno por uno los dígitos del eigenvalor.

puertas necesarias. ¿Cuántas hacen falta? ¿Qué ocurre con la propagación de ruido en un sistema cuántico así de complejo?

Éstas son algunas de las preguntas que se abordan en la investigación actual de las posibilidades del uso del cómputo cuántico en la química computacional. La literatura de un tema tan novedoso y que se desarrolla a gran velocidad es poca y cambiante. Recomendamos como lecturas adicionales sobre química cuántica moderna el libro de Szabo y Ostlund (1996) y sobre cómputo cuántico, al ya citado de Nielsen y Chuang (2000).

## Referencias

- Aspuru-Guzik, A., Dutoi, A. D., Love, P. J. and Head-Gordon, M., Simulated Quantum Computation of Molecular Energies, *Science*, **309**(5741), 1704-1707, 2005.
- Feit, M. D., Fleck, J. A. and Steiger, A., Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method, *Journal of Computational Physics*, **47**(3), 412-433, 1982.
- Feynman, R. P., Simulating Physics with Computers, *International Journal of Theoretical Physics*, **21**(6/7), 467-488, 1982.
- Hammond, B. L., Lester, Jr., W. A. and Reynolds, P. J., *Monte Carlo Methods in Ab Initio Quantum Chemistry*, World Scientific, Singapore, 1994.
- Kitaev, A. Y., Quantum measurements and the Abelian Stabilizer Problem, arXiv e-print, *quant-ph/9511026*, 1995.
- Nielsen, M. A. and Chuang, I. L., *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- Szabo, A. and Ostlund, N. S., *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover Publications, New York, USA, 1996.