

REAL ACADEMIA DE CIENCIAS
EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

**LA DIFICULTAD DE RESOLVER
PROBLEMAS DE MUCHOS
CUERPOS EN FÍSICA CUÁNTICA**

DISCURSO LEÍDO EN EL ACTO DE SU RECEPCIÓN
COMO ACADÉMICO DE NÚMERO POR EL
EXCMO. SR. D. JUAN IGNACIO CIRAC SASTURÁIN

Y CONTESTACIÓN DEL
EXCMO. SR. D. ALBERTO GALINDO TIXAIRE
EL DÍA 25 DE MAYO DE 2016



MADRID
Domicilio de la Academia
Valverde, 22

REAL ACADEMIA DE CIENCIAS
EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

LA DIFICULTAD DE RESOLVER PROBLEMAS DE MUCHOS CUERPOS EN FÍSICA CUÁNTICA

DISCURSO LEÍDO EN EL ACTO DE SU RECEPCIÓN
COMO ACADÉMICO DE NÚMERO POR EL
EXCMO. SR. D. JUAN IGNACIO CIRAC SASTURÁIN

Y CONTESTACIÓN DEL
EXCMO. SR. D. ALBERTO GALINDO TIXAIRE
EL DÍA 25 DE MAYO DE 2016



MADRID
Domicilio de la Academia
Valverde, 22

ISSN: 0214-9540
ISBN: 978-84-87125-52-2
Depósito Legal: M-14.761-2016

La dificultad de resolver problemas de muchos cuerpos en Física Cuántica

J. Ignacio Cirac

Excelentísimo Sr. Presidente de la Real Academia.
Excelentísimas Sras. Académicas y Sres. Académicos.
Queridos compañeros y amigos.
Señoras y señores:

Agradecimientos

En primer lugar, quiero mostrar mi agradecimiento a todos los miembros de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales por haberme acogido en esta gran institución. En particular, a los Excmos. Señores D. Carlos Sánchez del Río y Sierra, D. Antonio Hernando Grande y D. Alberto Galindo Tixaire por haber propuesto mi candidatura. Mi agradecimiento especial a este último, por haber aceptado contestar a este discurso y efectuar la presentación oficial.

Me corresponde ocupar la Medalla número 54, que no tiene antecesor. Espero hacerlo con dignidad y merecerme el honor de estar entre los académicos tan ilustres que han formado y continúan formando parte de esta academia.

Como la mayoría de científicos, yo no hubiera dedicado mi vida a la investigación de no haber sido por mis maestros. Por tanto, quiero agradecer a todos ellos el haber despertado mi curiosidad y pasión por la ciencia. En particular, deseo mencionar explícitamente a algunos que han jugado un papel esencial en mi formación, tanto como Físico, como como investigador. D. Carlos Sánchez del Río y Sierra fue mi profesor en el primer curso de Física que tuve en la universidad, y fue él quién me contagió la pasión por esta disciplina. D. Alberto Galindo Tixaire fue mi profesor de Física Cuántica, la especialidad a la que he dedicado mi investigación. De él y de sus libros, no sólo he aprendido esta materia, sino también a combinar la intuición, el rigor y la pasión en la investigación. El profesor Peter Zoller, académico correspondiente de esta institución, ha sido fundamental en mi vida científica. El me sumergió en el área de la Óptica Cuántica, y juntos nos adentramos en el mundo de la Computación Cuántica. Durante toda mi carrera, he tenido el privilegio de colaborar con muchos investigadores, españoles y extranjeros y, que han hecho posible que hoy esté aquí. Sería demasiado largo mencionar todos sus nombres, pero todos ellos quedan constatados en las publicaciones científicas que hemos compartido. A todos ellos, mi más sincero agradecimiento. Además, deseo dar las gracias a las instituciones en las que he trabajado y que han jugado un papel crucial en mi profesión: la Universidad Complutense de Madrid, en donde estudié la carrera e hice mi

doctorado; la Universidad de Castilla-La Mancha, en donde trabajé como profesor titular; la Universidad de Colorado, en donde hice mi estancia como postdoc; la Universidad de Innsbruck, en donde fui profesor de Física Teórica; la universidad Técnica de Munich, en donde soy profesor honorario; el Instituto de Ciencias Fotónicas, en donde soy profesor invitado desde su constitución; y, por último, el Instituto Max-Planck de Óptica Cuántica, en donde he realizado mi tarea investigadora en los últimos quince años. Finalmente, mi mayor agradecimiento a mi familia y amigos más cercanos, por haberme acompañado durante todo este tiempo. Sin su apoyo, tampoco estaría en estos momentos disfrutando de tan grato honor.

LA DIFICULTAD DE RESOLVER PROBLEMAS DE MUCHOS CUERPOS EN LA FÍSICA CUÁNTICA

1. Introducción

Hoy en día existe una variedad de técnicas para simular el comportamiento de la mayoría de los objetos que nos rodean, como edificios, coches, trenes, aviones, o naves espaciales. Este hecho 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. 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. Ésta 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 hay que repasar primero el *principio de superposición* [1], un concepto básico de la Física Cuántica. Sus consecuencias son dramáticas, y aparecen en muchos de los experimentos realizados en el siglo pasado con luz, átomos y otras partículas microscópicas. Tal vez, la forma más pedagógica de presentarlo es a través del experimento de la doble rendija de Young [2]. Si lanzamos partículas microscópicas hacia una pantalla con dos rendijas, y observamos dónde aparecen en otra pantalla situada a continuación, veremos que sólo lo hacen en unas regiones determinadas. El resultado de este experimento

es incompatible con el hecho que cada partícula haya pasado por un agujero determinado. Para explicarlo, debemos asumir 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, el estado de 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 [3]. 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 [4]. En particular, el espín de algunas partículas puede tomar varios valores distintos. Por ejemplo, en las más sencillas pueden tomar dos: hacia arriba, \uparrow , o hacia abajo, \downarrow , según se desvíen al pasar por un campo magnético inhomogéneo. El principio de superposición permite combinar los dos estados, algo que denotamos como $c_0|\uparrow\rangle + c_1|\downarrow\rangle$. Los coeficientes c_0 y c_1 son números complejos cuyo módulo al cuadrado nos indica la probabilidad de que obtengamos un resultado u otro cuando medimos [5]. 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 sólo 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. El estado y, por lo tanto, las propiedades magnéticas de las partículas dependen de los valores de los coeficientes correspondientes, $c_{00\dots 0}, c_{00\dots 1}, \dots, c_{11\dots 1}$. En consecuencia, para poder caracterizarlas necesitamos conocerlos todos. 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 (ver, por ejemplo, [6]); así que, incluso si pudiésemos almacenar un Byte en cada partícula del universo, no podremos describir el estado de más 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, además de dar lugar a fenómenos extraordinarios, 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 publicó en el año 1982 [7]. 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 sistemas 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 introducir en la memoria de nuestro ordenador los coeficientes de las superposiciones, podemos preparar nuestro simulador en el estado correspondiente. 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 preludio de los *ordenadores cuánticos* [8]. Éstos 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 (esta analogía no es del todo correcta, ya que en el proceso de medida no se puede seleccionar el resultado, sino que éste es aleatorio, y la probabilidad correspondiente depende de los coeficientes de la superposición). Este paralelismo cuántico puede ser utilizado para resolver ciertos problemas de manera mucho más eficiente que con los ordenadores clásicos [9]. Lo que proponía Feynman, en definitiva, era utilizar un ordenador cuántico para simular sistemas de muchas partículas.

Aunque existen ya pequeños prototipos de ordenadores cuánticos, compuestos por 10 o 15 átomos [10, 11], 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 del aire, fotones), lo que distorsiona las superposiciones y da lugar a la llamada descoherencia [12]. 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 [13], 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. 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 sólo 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. Así, la alternativa al ordenador cuántico es lo que hoy conocemos como *simulador cuántico* (análogo) [14]. Éste es un sistema físico que podemos controlar con gran precisión, y podemos hacer que se comporte como el problema que queremos simular. Más precisamente, es un sistema en el que podemos sintonizar algunos parámetros externos para ajustar su dinámica (Hamiltoniano), y hacer que se comporte como el objeto que queremos estudiar. Normalmente, sólo seremos capaces de ajustar algunos de esos parámetros, lo que restringe el conjunto de problemas que podemos atacar con ellos. Sin embargo, entre ellos se incluyen muchos de los problemas de espines, o transporte de partículas que aparecen en otros campos de la Física. Además, para estos simuladores no hace falta corregir los errores si son lo suficientemente minúsculos ya que, como hemos dicho, éstos no producirán efectos significantes en los resultados obtenidos.

En estos momentos existen varios tipos de experimentos en donde se están construyendo simuladores cuánticos [15], aunque dos de ellos son los más avanzados. El primero consiste en atrapar átomos neutros en las llamadas redes ópticas y manipular sus propiedades utilizando láseres y campos magnéticos [16]. El segundo utiliza iones atrapados también en redes y,

además de láseres, requiere campos eléctricos [17]. La idea de utilizar 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.

A pesar de la dificultad inherente en problemas cuánticos de muchas partículas, en algunos casos se pueden atacar con técnicas numéricas más tradicionales. Existen varios métodos que se pueden aplicar a problemas concretos y que dan muy buenos resultados [18]. En el campo de la Física Estadística que estudia problemas de muchos cuerpos, tal vez, el más exitoso sea el de Monte-Carlo [19], en el que se muestrean un número (que crece polinómicamente con N) de las configuraciones posibles. Este método, así como muchos de los otros, fallan en el caso en que las interacciones entre las partículas o espines sean fuertes, en muchos problemas donde las partículas tiene carácter fermiónico (como los electrones) o, en general, si queremos estudiar la dinámica del sistema físico [20]. Para estos casos serían especialmente útiles los simuladores cuánticos.

Otro campo de investigación que está surgiendo actualmente para atacar los problemas cuánticos de muchas partículas, especialmente para los que no funcionan los métodos estándar, es el de las *redes de tensores* [21]. Al estudiar los ordenadores cuánticos y, en general, otras formas de procesar la información basados en la Física Cuántica, se han desarrollado potentes teorías matemáticas. En estas teorías, el *entrelazamiento* [22], tal vez la propiedad cuántica más sorprendente, juega un papel fundamental. Aparece cuando tenemos superposiciones en más de un sistema físico, y dan lugar a correlaciones que no se pueden explicar con teorías locales realistas [23] y, por tanto, a aparentes paradojas [24]. Esta propiedad juega un papel fundamental en las aplicaciones de la Física Cuántica al procesamiento y transmisión de la información y es, por tanto, un tema central de estudio en el desarrollo de la teoría cuántica de la información [25]. Esta teoría ha puesto de manifiesto nuevas formas de describir matemáticamente el entrelazamiento y, con ello, las superposiciones en sistemas cuánticos complejos. En los últimos años, los científicos han comprobado que estas teoría se pueden extender más allá de la computación cuántica y se pueden aplicar a la resolución de problemas cuánticos de muchas partículas. Las *redes de tensores*, una nueva forma de tratar estos problemas, constituyen la base de todas estas extensiones. En estos momentos ya existen varios escenarios en los cuales las redes de tensores han dado soluciones a cuestiones que no se podían resolver con otros métodos [26].

Esta memoria pretende describir el problema de la simulación de pro-

blemas de muchas partículas en redes, y explicar cómo se están intentado resolver por medio de los simuladores cuánticos y las redes de tensores. Comenzamos con el planteamiento del problema clásico, para poderlo comparar con el cuántico y, así, exponer con relativa precisión en donde se encuentran las diferencias. A continuación explicaremos en qué consisten las redes de tensores, cómo se pueden emplear para resolver problemas, y mencionaremos algunos de los resultados más recientes en donde se ha demostrado su utilidad. Más adelante relataremos cómo funcionan los simuladores cuánticos y nos concentraremos en dos de ellos: los basados en átomos fríos en redes ópticas y en iones fríos atrapados. Finalizaremos con unas breves conclusiones. En el apéndice revisamos algunos de los modelos que se están intentado resolver por medio de las técnicas que explicamos aquí. La exposición precisa de los modelos requiere la introducción de algunos conceptos técnicos. También expondremos y analizaremos algunas versiones sencillas del método de Monte Carlo.

Las dos primeras secciones introducen el lenguaje y los problemas que deseamos tratar con los nuevos métodos. Hemos intentado ser concisos, pero relativamente rigurosos y consistentes. Es posible que los lectores no familiarizados con la Física Estadística y la Física Cuántica, encuentren alguna dificultad en seguir el texto en una primera lectura. Para ellos, sugerimos que, después de una lectura muy superficial de estas dos secciones, vayan directamente a las dos últimas pues, en ellas, se encuentran los resultados más novedosos explicados de una manera más divulgativa. Dado que el campo de investigación en el que se enmarca esta memoria es tan extenso y activo, aquí nos concentraremos preferentemente en los resultados obtenidos por el autor del texto y sus colaboradores.

2. Sistemas clásicos de muchos cuerpos

Comenzamos esta memoria describiendo los sistemas clásicos de espines en equilibrio térmico, tal y como se hace en el campo de la Física Estadística. Nos concentraremos en analizar la dificultad de resolver este tipo de problemas, para luego compararla con la que se encuentra en los sistemas cuánticos. Gran parte del contenido de esta sección se puede encontrar, mucho más detallado, en libros de Física Estadística como, por ejemplo, el de la referencia [27].

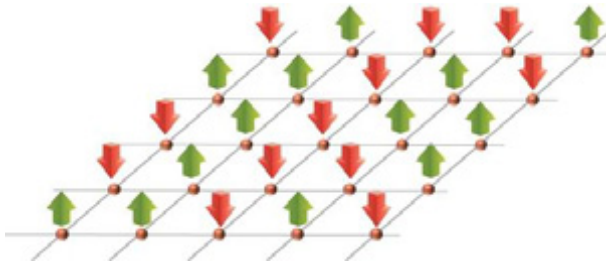


Figura 1: Representación esquemática de un conjunto de espines en una red cuadrada de dos dimensiones espaciales. Los valores de los espines, ± 1 , están representados por flechas de color verde y rojo. La figura representa una configuración concreta.

2.1. Problemas de espines

Consideremos un problema muy fácil de plantear: un conjunto de espines clásicos en una red. Los espines residen en los vértices de la red, y pueden apuntar en varias direcciones. Así que los representamos por flechas en la dirección correspondiente (Figura 1). Debido a las interacciones entre los espines, cada configuración, c , posee una energía distinta, $E(c)$. El objetivo es describir las propiedades físicas de este sistema en equilibrio térmico a cierta temperatura T .

Matemáticamente, podemos describir este problema de la siguiente manera. Nuestra red está caracterizada por un grafo, $\mathcal{G}_N = (\mathcal{V}_N, \mathcal{E}_N)$, en donde \mathcal{V}_N representa los vértices de la red cuadrada, y \mathcal{E}_N las aristas. El número de vértices es $|\mathcal{V}_N| = N$, y están numerados; esto es, $v_n \in \mathcal{V}_N$ denota un vértice, en donde $n = 1, \dots, N$. Dotaremos también a la red con una distancia, de tal forma que entre dos vértices coincida con el mínimo número de aristas que tenemos que atravesar para ir de uno a otro. Dos vértices son vecinos próximos si la distancia entre ellos es uno. Normalmente utilizaremos redes cuadradas.

Llamaremos \mathcal{C} al conjunto de configuraciones, y $c \in \mathcal{C}$ a cada una de ellas. El número de configuraciones $|\mathcal{C}| = d^N$, en donde d es el número de valores que puede adoptar cada espín. Por ejemplo, en el caso más sencillo tenemos $d = 2$, correspondiente a tener el espín apuntando hacia arriba o hacia abajo. La energía está caracterizada por un conjunto de funciones, E_λ en donde λ denota a su vez un grupo de espines separados por una distancia máxima r , el rango de interacción. La función $E_\lambda(c)$ depende, pues, de la configuración de los espines que están contenidos en λ . Al conjunto de los

posibles grupos λ lo llamamos Λ . Así, la energía de una configuración, c , la podemos escribir como

$$E(c) = \sum_{\lambda \in \Lambda} E_{\lambda}(c). \quad (1)$$

En otros problemas físicos estamos interesados en las configuraciones correspondientes a un equilibrio térmico. En esta situación, a cada configuración $c \in \mathcal{C}$ le asociamos una probabilidad,

$$P_{\text{Gibbs}}(c) = \frac{e^{-\beta E(c)}}{Z}, \quad (2)$$

en donde $\beta = 1/\kappa T$, κ es la constante de Boltzmann, T la temperatura, E tiene unidades de energía, y

$$Z = \sum_{c \in \mathcal{C}} e^{-\beta E(c)} \quad (3)$$

es la función de partición. Las propiedades físicas vienen expresadas como promedios con respecto a la función P_{Gibbs} . Por ejemplo, la *densidad de energía* viene dada por

$$e = \frac{1}{N} \sum_{c \in \mathcal{C}} P_{\text{Gibbs}}(c) E(c). \quad (4)$$

mientras que la *magnetización* es

$$\frac{1}{N} \sum_{c \in \mathcal{C}} P_{\text{Gibbs}}(c) \sum_n \sigma_n(c), \quad (5)$$

en donde la suma se extiende a todos los vértices de la red. Aquí hemos asociado a cada una de las configuraciones un vector de N componentes, $\sigma(c) = [\sigma_1(c), \dots, \sigma_N(c)]$, en donde $\sigma_n(c)$ es el valor que toma el espín situado en el vértice v_n para la configuración $c \in \mathcal{C}$.

El ejemplo más paradigmático de modelos de espines es el *modelo de Ising* [28]. En él, cada espín puede tomar dos valores que se denominan \Downarrow (hacia abajo) y \Uparrow (hacia arriba). Cada configuración c corresponde, pues, a una secuencia de espines hacia arriba y hacia abajo. La variable $\sigma_n(c) = \pm 1$, dependiendo de si el espín en el vértice v_n está hacia arriba o hacia abajo. El conjunto Λ contiene a todos los pares de vértices cuya distancia es 1, y $E_{\lambda}(c) = J_{n,m} \sigma_n(c) \sigma_m(c) + \frac{h_n}{z_n} \sigma_n(c) + \frac{h_m}{z_m} \sigma_m(c)$, en donde v_n y v_m son los vértices contenidos en λ , $J_{n,m} \in [-J, J]$, $h_n \in [-h, h]$ y z_n es el número de

coordinación del vértice v_n (esto es, el número de próximos vecinos). En este y otros casos es más conveniente escribir la energía como

$$E(c) = \sum_{\langle n,m \rangle} J_{n,m} \sigma_n(c) \sigma_m(c) + \sum_n h_n \sigma_n(c), \quad (6)$$

en donde la primera suma se extiende a vértices que son próximos vecinos. El modelo de *Ising homogéneo* tiene $J_{n,m} = J$ y $h_n = h$ toma el mismo valor para todos los vértices.

2.2. Métodos y resultados

A continuación distinguiremos entre problemas de espines a temperatura cero y a temperatura distinta de cero. La razón por la que separamos los primeros es que en ellos se pueden codificar un conjunto de problemas muy extenso; entre éstos se encuentran los de optimización, que juegan un papel central en la teoría de la computación. La resolución de estos problemas es, en general, muy difícil, ya que el tiempo de computación escala con el número de espines. La relevancia de los sistemas a temperatura finita esta prácticamente restringida a problemas de Física Estadística.

2.2.1. Espines a temperatura cero

Uno de los objetivos más relevantes en el escenario que estamos considerando es encontrar la configuración que minimizan la energía. Esto corresponde a los estados en los que se encontrarían los espines a temperatura cero, tal y como se deduce de la ecuación (2) en el límite $T \rightarrow 0$. En general, pues, el fin es encontrar la configuración c que minimiza la función $E(c)$ dadas las E_λ .

Como la configuración que buscamos será la misma si multiplicamos la energía por cualquier número positivo, siempre podemos considerar que E_λ es una cantidad adimensional, que toma valores en el intervalo $[-1, 1]$. Una forma de resolver este problema es hacer una lista de todos los valores que toma E (uno para cada c) y, al final, encontrar el mínimo. Sin embargo, esto requiere, en primer lugar, almacenar 2^N valores de la energía (una por cada configuración) y, además, realizar un número de operaciones que también escala exponencialmente con N . Esto supone un obstáculo si queremos tratar problemas donde $N > 50$, ya que no hay forma de almacenar tanta información y el tiempo de cálculo se haría eterno, incluso con los ordenadores más potentes con los que contamos. Lo primero no supone realmente un problema, ya que no hace falta almacenar todos los datos; siempre podemos

quedarnos sólo con el menor según vamos determinando la energía de las configuraciones. Lo segundo, sin embargo, supone, en general, un verdadero obstáculo, ya que no existe un método que evite que el tiempo necesario para resolver el problema escale exponencialmente con el número de espines. En el lenguaje de la complejidad computacional, este problema (formulado en el lenguaje apropiado) es "NP-hard", incluso para el modelo de Ising (6) en dos o más dimensiones espaciales [29].

El ejemplo descrito en el párrafo anterior está asociado a problemas de optimización, y aparece en muchos problemas prácticos. Típicamente, existe una función (en nuestro caso, la energía) de las configuraciones, y el objetivo es encontrar la configuración que optimiza (minimiza) esta función. La mayoría de los problemas de optimización se pueden reducir al problema anterior y tienen una dificultad que escala con el número de configuraciones. Un ejemplo concreto son los problemas de satisfactibilidad (llamados SAT), que juegan un papel primordial en la teoría de la complejidad computacional [30]. En estos problemas, el objetivo es averiguar si existe una asignación de N bits que satisfaga un conjunto de cláusulas lógicas. Bajo condiciones generales, este problema se puede expresar de forma parecida al anterior, simplemente asociando a cada cláusula una energía igual a uno si la configuración de los bits no la cumple, y de cero si sí lo hace. Si cada cláusula contiene sólo un número máximo de bits, k , el problema se puede relacionar como el descrito anteriormente (pero con un número de bits mayor y con términos no-locales en la energía; esto es, λ contiene grupos arbitrarios formados por k espines).

La cuestión descrita en los párrafos precedentes, en donde las interacciones son locales, aparece también en problemas físicos de espines (clásicos), cuando la energía describe las interacciones magnéticas entre espines. Existen situaciones en las cuales la dificultad del problema se puede reducir, de tal forma que el tiempo de resolución sólo aumente moderadamente con el tamaño del sistema. Por ejemplo, en una dimensión la programación lineal proporciona la solución de manera eficiente [31]. En dimensiones mayores, si tenemos alguna simetría, es posible en muchos casos obtener el resultado de manera sencilla. En particular, si nuestro sistema de espines es homogéneo (y la red es sencilla, de tal forma que no haya frustración); esto es, cuando E_λ no depende de λ . Así sucede en el modelo de Ising homogéneo. En una red cuadrada o cúbica, si $J < 0$ y $h = 0$, existen dos configuraciones que minimizan la energía: aquella que tiene todos los espines apuntando hacia arriba, y la que los tiene hacia abajo. Esta configuración de espines se suele llamar *orden ferromagnético*. Si $h < 0$ ($h > 0$), entonces la primera (última) es la configuración óptima. Si, por el contrario, tomamos $J > 0$ y $h = 0$ las

soluciones corresponden a espines alternados, u *orden antiferromagnético*. Este resultado se puede encontrar por simple inspección, y no requiere hacer ningún cálculo. Existen materiales cuyas propiedades magnéticas a bajas temperaturas pueden ser descritas por este modelo tan sencillo. En el primer caso se trata de materiales ferromagnéticos, mientras que en el segundo son antiferromagnéticos.

En definitiva, los problemas clásicos de espines, como el que hemos enunciado aquí, son difíciles de resolver en general, ya que el tiempo de ejecución en un ordenador puede escalar exponencialmente con el tamaño del sistema. Sin embargo, en muchas situaciones prácticas, existen algoritmos simples para encontrar las soluciones de una manera mucho más eficiente.

2.2.2. Espines en equilibrio térmico

En muchos problemas físicos no estamos interesados en la configuración que minimiza la energía, sino en las configuraciones correspondientes a un equilibrio térmico. En general, es muy difícil calcular el valor de las propiedades físicas relevantes y se tiene que recurrir a técnicas numéricas. Las más usadas están basadas en el llamado *método de Monte Carlo* [32], que consiste en generar configuraciones de manera aleatoria de acuerdo con la probabilidad P_{Gibbs} (2). Los distintos algoritmos permiten generar esas configuraciones de manera local y eficiente. Si generamos M configuraciones, $c^{(1)}, \dots, c^{(M)}$ podemos aproximar los valores esperados de cualquier propiedad física promediando con respecto a estas configuraciones. Por ejemplo, la densidad de energía

$$e \approx \frac{1}{MN} \sum_{m=1}^M E(c^{(m)}). \quad (7)$$

El error viene determinado por la ley de los grandes números y escala como $1/\sqrt{M}$ en el límite $M \rightarrow \infty$, siempre y cuando el muestreo sea fidedigno.

En el apéndice A.1 explicamos como se deduce el tiempo de computación en función del tamaño del sistema. Éste depende de una propiedad del método de resolución llamada "gap", Δ , y que depende a su vez del problema que queramos resolver. Para asegurarnos de que el error en la estimación de cualquier propiedad física sea despreciable, si llamamos n_0 al número de operaciones elementales, tenemos que

$$\frac{O[N \log(N)]}{\Delta} \leq n_0 \leq \frac{O(N^2)}{\Delta} \quad (8)$$

La dependencia con N de la cota inferior es fácil de comprender, ya que para poder converger es necesario muestrear cada uno de los espines por lo menos $\log(N)$ veces (y, por lo tanto, necesitaremos al menos $N \log(N)$ pasos). La cota superior también se puede deducir de una manera muy simple utilizando técnicas de álgebra lineal.

En general, Δ depende de la temperatura y el número de espines (además de la forma específica de las E_λ). A altas temperaturas, Δ está acotado inferiormente por una constante, con lo que el tiempo de ejecución de una simulación utilizando el método de Monte Carlo escala sólo polinómicamente con el número de espines. Sin embargo, incluso en el modelo de Ising homogéneo en redes cuadradas de dos o más dimensiones espaciales, existe una temperatura para la cual Δ decrece exponencialmente (más precisamente, superpolinómicamente) con el número de espines [33]. Para esa temperatura, por tanto, los métodos numéricos necesitan, en general, un tiempo que crece exponencialmente con el tamaño del sistema. A temperaturas más bajas existe una variedad de comportamientos y, en el límite $T \rightarrow 0$, se tiene la escala exponencial mencionada anteriormente.

3. Sistemas cuánticos de muchos cuerpos

Consideremos ahora la versión cuántica del problema anterior. Seguimos teniendo un conjunto de espines en una red, pero ahora admitimos estados que son superposiciones cuánticas. Como antes, podemos asignar a cada estado de este tipo una energía, que puede ser expresada como una suma correspondiente a los estados de espines próximos. El objetivo es encontrar el estado que minimiza la energía, el correspondiente al equilibrio térmico, o bien, a la dinámica del sistema.

En esta sección, después de revisar brevemente los conceptos básicos de la Física Cuántica, los aplicaremos a los sistemas de muchas partículas y mencionaremos algunas formas de resolverlos. Como en el caso clásico, nos concentraremos en la dificultad de esto último y, en particular, en como escala el tiempo del cálculo con el tamaño del sistema. Los conceptos básicos de Física Cuántica se pueden encontrar en libros de texto modernos, como la referencia [5]. La formulación y las técnicas de resolución de los problemas de muchas partículas se pueden encontrar en libros y revisiones avanzadas [18].

3.1. Física Cuántica

En Física Cuántica, para describir matemáticamente los estados o configuraciones de un sistema debemos asociar a éste un espacio de Hilbert, \mathcal{H} . Un estado puro, Ψ , es un elemento (rayo) de este espacio, i.e., $\Psi \in \mathcal{H}$. Este estado contiene toda la información accesible sobre la situación en la que se encuentra nuestro sistema. A menudo, debido a que no conocemos las condiciones de preparación de un sistema, o bien, por que esté entrelazado con otro, debemos utilizar estados mezcla. Matemáticamente, éstos vienen representados por un operador lineal, ρ , que actúa en el espacio de Hilbert, i.e., $\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, y cumple $\rho = \rho^\dagger$ (autoadjunto), $\rho \geq 0$ (semi-definido positivo) y $\text{tr}(\rho) = 1$. En particular, siempre podemos considerar un estado puro como uno mezcla escribiendo $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, en donde utilizaremos la notación de Dirac para los estados puros.

Cada observable viene representado por un operador lineal autoadjunto, $O = O^\dagger \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$, de tal forma que los valores esperados los podemos determinar como $\langle O \rangle_\Psi = \langle \Psi | O | \Psi \rangle$, o $\langle O \rangle_\rho = \text{tr}(O\rho)$, para estados puros y mezclas, respectivamente. En lo que sigue simplificaremos la notación y, por ejemplo, no escribiremos los subíndices Ψ y ρ en los valores esperados.

Un observable que juega un papel central en la Física Cuántica es el llamado *hamiltoniano*, H . Por un lado, ya que genera la dinámica del sistema de acuerdo con la Ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar|\dot{\Psi}(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle, \quad (9)$$

en donde $\dot{\Psi}$ denota la derivada temporal de Ψ y \hbar es la constante de Planck, que tomaremos como unidad en lo que sigue, $\hbar = 1$. Para estados mezcla existe una ecuación similar, $\dot{\rho}(t) = -i[H, \rho(t)]$. El hamiltoniano puede depender del tiempo. Si esto no es así, tenemos que la evolución de un estado puro viene dada por

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi(0)\rangle, \quad (10)$$

y de manera similar para estados mezcla.

Por otro lado, el hamiltoniano determina los estados cuánticos en equilibrio térmico, ya que está asociado a la energía total del sistema. Esto es, a una temperatura T , el estado de un sistema en equilibrio viene dado por el operador densidad de Gibbs,

$$\rho_{\text{Gibbs}} = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (11)$$

en donde $Z = \text{tr}(e^{-\beta H})$ es la función de partición y $\beta = 1/\kappa T$. Nótese la similitud de esta fórmula con la de la distribución clásica de Gibbs (2).

3.2. Problemas de espines, bosones y fermiones

De acuerdo con la Física Cuántica, si tenemos varios sistemas físicos, el espacio de Hilbert correspondiente al sistema completo es el producto tensorial de los espacios individuales (con algunas restricciones, si hay reglas de super-selección, y alguna modificación en el caso de fermiones [5]). Para un conjunto de espines en una red, primero asociamos un espacio de Hilbert finito de dimensión d , $\mathcal{H}_d \cong \mathbb{C}^d$, a cada vértice de la red. El espacio de Hilbert de los espines es entonces el producto tensorial de todos éstos,

$$\mathcal{H} = \otimes_{n=1}^N \mathcal{H}_d. \quad (12)$$

Si llamamos $|k\rangle_n$ con $k = 1, \dots, d$ a una base ortonormal en \mathcal{H}_d (asociada a las distintas configuraciones clásicas, \mathcal{C} , del espín), podemos escoger como base en el espacio \mathcal{H} total

$$|k\rangle \equiv |k_1, \dots, k_N\rangle = |k_1\rangle_1 \otimes \dots \otimes |k_N\rangle_N; \quad (13)$$

esto es, aquella en la que cada espín toma un valor determinado. Esta es una base formada por *estados producto*, ya que cada uno de ellos tiene el estado de cada espín determinado. Un estado general del espacio de Hilbert, Ψ , lo podemos escribir en esta base como

$$|\Psi\rangle = \sum_{k_1, \dots, k_N} c_{k_1, \dots, k_N} |k_1, \dots, k_N\rangle, \quad (14)$$

en donde los coeficientes $c \in \mathbb{C}$ y sus módulos al cuadrado suman uno. Esta expresión ilustra directamente el principio de superposición mencionado en la introducción, y que es una consecuencia directa de la descripción de los estados como vectores en un espacio de Hilbert. El hecho de que tengamos productos tensoriales tiene, asimismo, la propiedad del entrelazamiento como consecuencia.

Como en el caso clásico, aquí estaremos interesados en problemas formulados en redes, en donde los espines o partículas ocupan los vértices. Definimos como *observables locales* aquellos que actúan no-trivialmente en una región acotada de la red; esto es, la distancia entre todos los vértices es menor que un número que no depende del tamaño total de la red. Un ejemplo de un observable local es O_1 , que actúa sobre el primer vértice (y sobre el resto lo hace trivialmente). En lo que sigue no escribiremos el operador identidad, \mathbb{I} , para simplificar la notación.

En el resto de esta presentación nos concentraremos en *hamiltonianos locales*,

$$H = \sum_{\lambda \in \Lambda} h_\lambda, \quad (15)$$

en donde $\lambda \in \Lambda$ contiene un conjunto de vértices separados por una distancia menor que un número fijo, r , llamado el *rango* de la interacción entre espines, y $h_\lambda = h_\lambda^\dagger$ actúa no-trivialmente sólo en este conjunto. En este tipo de hamiltonianos resulta conveniente definir el "gap", δ , de la misma forma que lo hicimos para las matrices estocásticas (ver apéndice A.1): es la diferencia entre los dos autovalores menores de H .

Los problemas cuánticos, comparados con los clásicos, poseen una dificultad adicional. A temperatura cero, el estado fundamental de un hamiltoniano local (15) será una superposición lineal de todos los estados, tal y como aparece en la ecuación (14). Para conocer el estado debemos determinar todos los coeficientes complejos c . Sin embargo, como hay d^N , será imposible incluso almacenarlos si N es lo suficientemente grande. Además, el simple proceso de determinar los coeficientes nos llevará un tiempo al menos proporcional a d^N , con lo que los recursos temporales también dificultan tratar con un número alto de espines. Desafortunadamente, las simetrías no son de gran ayuda en el caso cuántico, al contrario de lo que ocurre en el clásico. Si tenemos simetría de traslación (debido a que nuestro problema es homogéneo), la dimensión del subespacio de Hilbert (y, por tanto, el número de coeficientes) que tiene esta propiedad todavía crece como d^N/N ; esto es, ganamos como mucho un factor N , pero esto es insignificante si nos enfrentamos a una ley exponencial. En el caso clásico, por ejemplo, sólo hay D configuraciones que son translacionalmente invariantes: aquellas que todos los espines apuntan en la misma dirección. Sin embargo, en el caso cuántico, cualquier superposición del tipo

$$|k_1, \dots, k_N\rangle + |k_2, \dots, k_1\rangle + \dots + |k_N, \dots, k_{N-1}\rangle \quad (16)$$

(apropiadamente normalizada), tiene esta propiedad para cualquier valor de las k s. Otras simetrías globales, como la correspondiente al grupo $SU(2)$, $U(1)$, etc, tampoco esquivan la ley exponencial. En la práctica, utilizando los ordenadores más potentes y los algoritmos más sofisticados, se pueden llegar a resolver problemas de hasta 40-50 espines exactamente con $d = 2$ [34]. En el caso de temperaturas finitas, o si estudiamos la dinámica, nos enfrentamos a un problema similar.

Al final de esta memoria damos como ejemplo algunos de los modelos de espines más relevantes. Existen, asimismo, otros problemas cuánticos en redes que no se pueden escribir como modelos de espines y que son muy relevantes en Física. Normalmente corresponden a partículas que se mueven a lo largo de la red, y que interaccionan entre ellas. Este problema es, en general, mucho más rico que el clásico correspondiente. La razón es que existen

dos tipos de partículas cuánticas, que obedecen leyes estadísticas distintas. Estas son los llamados bosones y fermiones. Para los primeros, los estados deben ser simétricos con respecto al intercambio de dos partículas, mientras que para los segundos, deben ser antisimétricos. Esto es, el espacio de Hilbert tiene restricciones, ya que sólo los estados cumpliendo esta propiedad están permitidos [5]. Todas las partículas elementales se pueden clasificar en bosones y fermiones (de hecho, las partículas materiales, como los electrones, son todas fermiones y las de interacción, como los fotones, bosones). Las partículas compuestas, como los átomos, también se comportan como bosones o fermiones en un gran rango de energías, siempre y cuando no sea perceptible su composición. Esto hace que muchos de los experimentos con átomos o materiales a bajas temperaturas se deban describir teniendo en cuenta si los constituyentes son bosones o fermiones. En los apéndices revisamos brevemente la descripción de estas partículas y damos varios ejemplos relevantes de modelos específicos. Como en el caso de los espines, en este caso el número de coeficientes necesarios para describir estos problemas crece exponencialmente con el tamaño de la red. En general, pues, para resolver los problemas debemos utilizar métodos numéricos aproximados.

3.3. Métodos y resultados

Algunos de los métodos más comunes de resolución aproximada de problemas cuánticos de muchos cuerpos son [18]: (i) funcional de la densidad; (ii) campo medio y Hartree-Fock; (iii) aproximación Gaussiana y ondas de espines; (iv) campo medio dinámico; (v) cluster acoplados; (vi) Monte Carlo cuántico. Los cuatro primeros funcionan muy bien en estados poco correlacionados (por ejemplo, cuando tenemos sistemas de espines o electrones que interactúan débilmente) y permiten tratar valores de N muy grandes; el quinto da resultados excelentes, pero para valores de N muy moderados; con el último, es posible alcanzar valores de N muy grandes también, pero sólo se aplica a problemas muy especiales.

El método del campo medio y las aproximaciones Gaussianas [35] están basados en un *principio variacional* [36]. Para $T = 0$, el estado del sistema (esto es, el de mínima energía), Ψ_0 , es aquel que minimiza

$$E(\Psi) = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (17)$$

como se deduce de (11). Ahora bien, si tenemos una familia de estados que

depende de varios parámetros $p = p_1, \dots, p_v$, $\Psi(p)$, tenemos

$$E(\Psi_0) \leq \min_p \frac{\langle \Psi(p) | H | \Psi(p) \rangle}{\langle \Psi(p) | \Psi(p) \rangle}, \quad (18)$$

en donde la igualdad se da en el caso en que la familia contenga el estado Ψ_0 . Si conocemos una familia de estados que puede aproximar bien para alguno de los valores de sus parámetros a Ψ_0 , entonces, en caso de que podamos computar la minimización en (18), podremos encontrar un buen resultado. Por supuesto, es necesario tener a mano un algoritmo para determinar los factores que aparecen en esa ecuación de manera eficiente (cuyo tiempo de ejecución o memoria no crezca exponencialmente con N). Desafortunadamente, existen muy pocas familias para las que esto es así, con lo que el método variacional queda restringido a familias de estados muy sencillas, que dan buenos resultados si las interacciones son débiles. La más usada es aquella formada por estados producto, $|\Psi\rangle = \prod_{n=1}^N |\varphi_n\rangle_n$, que es la base del método de campo medio. Pero como se puede entender fácilmente, esta familia no describe correlaciones entre los distintos sistemas. Las teorías Gaussianas [37] (como la de Bardeen, Cooper y Shrieffer, la Bogoliubov-de Gennes, o la de ondas de espín) están basadas en otros estados que sí contienen correlaciones, aunque son muy especiales, con lo que no dan buenos resultados en general. Sin embargo, describen muy bien problemas de superfluidos o de superconductores [35]. Para $T \neq 0$ también podemos definir un principio variacional. El estado de Gibbs (11) minimiza la energía libre

$$F(\rho) = \text{tr}(\rho H) - \frac{1}{\beta} S(\rho), \quad (19)$$

con las condiciones $\rho = \rho^\dagger \geq 0$ y $\text{tr}(\rho) = 1$, y en donde

$$S(\rho) = -\text{tr}[\rho \log(\rho)] = -\sum_k \rho_k \log(\rho_k) \quad (20)$$

es la entropía de von Neumann, ρ_k son los autovalores de ρ y donde adoptamos el convenio de que $0 \log 0 = 0$. Así que, si tenemos una familia de estados mezcla que depende de otro conjunto de parámetros, podemos encontrar una cota superior si minimizamos la energía libre en función de ellos. Como antes, para obtener un buen resultado es necesario que nuestra familia contenga estados próximos al de Gibbs, y que podamos realizar los cálculos de manera eficiente. De nuevo, los estados más utilizados son los productos $\rho = \otimes_{k=1}^N \rho_k$ y los Gaussianos. Los resultados suelen ser muy buenos cuando tenemos sistemas que interactúan débilmente, como el caso

de los gases atómicos diluidos en los que se observa la *condensación de Bose Einstein* [38], algunos sistemas de espines especiales, gases de Fermi, y superconductores que no están fuertemente correlacionados.

El método de Monte Carlo cuántico [19] está relacionado con el clásico que hemos mencionado en el capítulo anterior. La idea fundamental es que para determinar valores esperados en un estado de Gibbs (11), podemos escribir

$$\langle X \rangle = \sum_k P(k) x_k \quad (21)$$

en donde

$$P(k) = \frac{\langle k | e^{-\beta H} | k \rangle}{\sum_k \langle k | e^{-\beta H} | k \rangle}, \quad (22)$$

siempre y cuando $X|k\rangle = x_k|k\rangle$; esto es, para los observables diagonales en la base producto (13). Esta fórmula tiene la misma forma que la que da el valor medio en el caso clásico, con lo que podríamos generar configuraciones k de acuerdo con $P(k)$ y utilizar las ideas del método de Monte Carlo explicado anteriormente, (7). Sin embargo, esto no se puede hacer, en general. La razón es que para cualquier configuración no es posible determinar $P(q)$ eficientemente. Al contrario, para ello debemos de exponenciar la matriz H (en la base k); y eso es complicado, en general, ya que tiene dimensiones $d^N \times d^N$ y, por tanto, este proceso requiere un tiempo que crece exponencialmente con N . En contadas ocasiones se puede resolver este problema utilizando una técnica alternativa [19]. En el Apéndice A.2 exponemos una de ellas, y explicamos de donde proviene el *problema del signo* [20], que hace que el tiempo de ejecución siga creciendo exponencialmente con N en el caso más general. Afortunadamente, existen problemas relevantes en los cuales no se presenta este problema, y en ellos se pueden obtener resultados muy precisos, siempre y cuando el gap Δ (de la matrix estocástica correspondiente) no disminuya rápidamente con N , como en el caso clásico.

4. Redes de tensores

Las redes de tensores [21] proporcionan una nueva avenida para describir sistemas cuánticos de muchas partículas. La idea principal consiste en escribir el estado cuántico (puro o mezcla) del sistema en términos de unos tensores, cuyos índices son contraídos adecuadamente. Normalmente, asignamos un tensor a cada vértice de la red, de tal forma que hay N tensores en total. Si el número de parámetros de cada tensor, K_N , no es muy grande, el número total de parámetros que necesitaremos para describir nuestro estado

será $NK_N \ll d^N$. En particular, si K_N sólo crece polinómicamente con N , éste número también lo hará, evitando la ley exponencial.

La primera cuestión que surge es: ¿En qué circunstancias podemos utilizar las redes de tensores?. Después de definir las redes de tensores y proporcionar los ejemplos más relevantes en la primera subsección, veremos que esto ocurre, básicamente, en los problemas que estamos analizando; esto es, en equilibrio térmico y con hamiltonianos locales. La siguiente cuestión que analizaremos será: ¿cómo podemos utilizar el lenguaje de tensores para resolver problemas concretos, como los mencionados en el capítulo anterior?. En una dimensión espacial la respuesta es relativamente sencilla, ya que existen algoritmos variacionales que proporcionan la solución de manera eficaz. En dimensiones mayores, los algoritmos existentes no son tan eficaces aunque, afortunadamente, el tiempo de ejecución sólo crece polinómicamente con N para muchos de los problemas más interesantes.

4.1. Descripción de estados de muchos cuerpos

Comenzamos con los estados más sencillos, conocidos como *Matrix Product States* (MPS) [39], y que describen sistemas de espines en una dimensión espacial. Para ello, consideramos una cadena de N espines, y asignamos a cada espín n un tensor, $A[n]$, en donde $n = 1, \dots, N$. Este tensor tiene tres índices, con lo que está compuesto de coeficientes complejos que llamaremos $A_{\alpha,\beta}^k[n]$, en donde $k = 1, \dots, d$, y $\alpha, \beta = 1, \dots, D$. Aquí, d es la dimensión del espacio de Hilbert correspondiente a un espín, mientras que D es un número entero que se llama *dimensión del enlace*. Este parámetro nos permite controlar el nivel de precisión con el que vamos a aproximar el estado de los espines.

Expresamos los coeficientes del estado Ψ (14) de la siguiente forma:

$$c_{k_1, \dots, k_N} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N=1}^D A_{\alpha_1, \alpha_2}^{k_1}[1] A_{\alpha_1, \alpha_2}^{k_1}[2] \dots A_{\alpha_N, \alpha_1}^{k_N}[N] \quad (23)$$

Esto es, para determinar cada uno de los coeficientes deberíamos fijar los valores de las k_n , y multiplicar y sumar los coeficientes de los tensores apropiadamente. Esta fórmula se puede simplificar si definimos las matrices $D \times D$, $A^k[n]$, cuyos elementos son precisamente los coeficientes $A_{\alpha,\beta}^k[n]$. De esta forma, podemos escribir

$$c_{k_1, \dots, k_N} = \text{tr} \left(A^{k_1}[1] A^{k_2}[2] \dots A^{k_N}[N] \right), \quad (24)$$

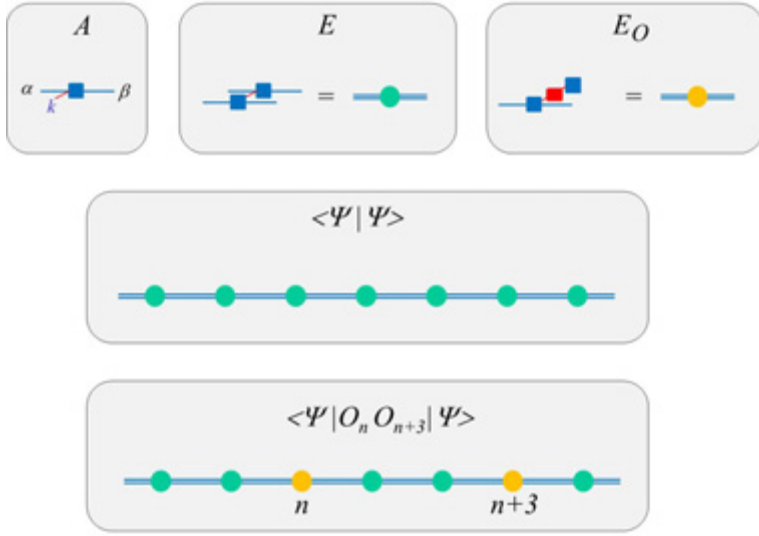


Figura 2: Representación esquemática de los tensores en un MPS. El tensor A tiene tres índices, representados por líneas. Las contracciones de los índices se representan uniendo líneas. El tensor E se obtiene contrayendo el índice físico del tensor A y su conjugado. El tensor E_O se obtiene de la misma forma, pero incluyendo el operador O , que es un tensor de dos índices, en la contracción. La norma del vector Ψ se puede calcular contrayendo los tensores E , y el valor esperado del operador $O_n O_{n+3}$, reemplazando el tensor E por el E_O en las posiciones adecuadas.

ya que la suma sobre los valores de α corresponde a la multiplicación de matrices, excepto para el primer y último tensor, que corresponden a tomar la traza. Como vemos, los MPS son aquellos cuyos coeficientes se pueden poner como productos de matrices, y de ahí su nombre. En general, en lugar de escribir fórmulas complicadas como la (23), es más conveniente utilizar una notación gráfica. Para ello, cada tensor $A[n]$ es sustituido por una caja con tres líneas; cada una de ellas corresponde a cada uno de los índices, k, α, β . La contracción de un índice de dos tensores lo representamos identificando las líneas asociadas a él (ver Figura 2). Los coeficientes del MPS vienen, pues, representados gráficamente de la forma descrita en la figura.

Podemos seguir la misma receta para describir estados con redes de tensores en sistemas de espines en dimensiones mayores a través de los llamados *Projected Entangled-Pair States* (PEPS) [40] (ver Figura 3). Para ello, con-

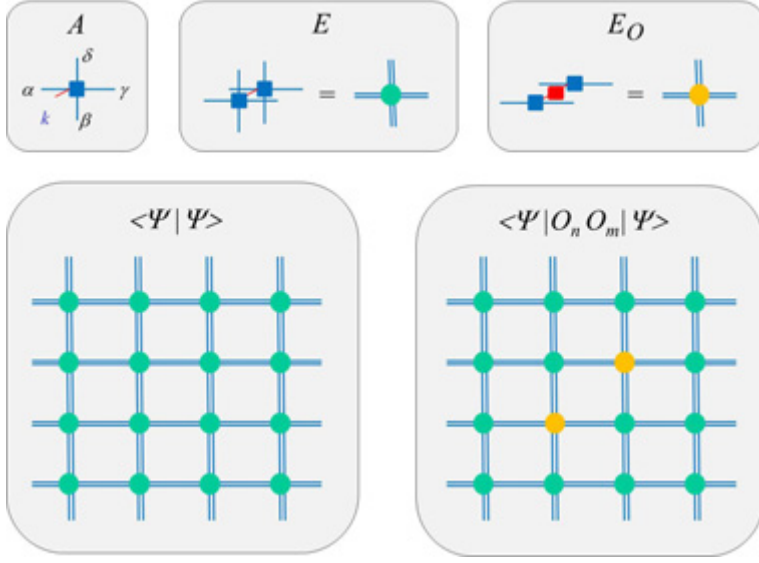


Figura 3: Representación esquemática de los tensores en un PEPS de dos dimensiones en una red cuadrada. Comparar con la figura anterior.

sideramos una red de espines cuadrada en dos dimensiones y, como antes, asignamos un tensor $A[n]$ a cada espín. Ahora, el tensor tiene rango cinco; esto es, coeficientes $A_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}^k[n]$ en donde $k = 1, \dots, d$ y $\alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, \dots, D$. El índice k corresponde al estado del espín, mientras que el resto son auxiliares y están contraídos con sus próximos vecinos. Los coeficientes c_{k_1, \dots, k_N} vienen dado por la suma de los productos de los $A[n]$, correspondiendo a la contracción de los índices auxiliares. Esta construcción se generaliza de manera natural a otros tipos de redes (triangulares, hexagonales, etc), y a dimensiones mayores.

El número de parámetros necesarios para describir un estado con PEPS en una red regular viene dado por NdD^z , en donde z es el número de coordinación. La razón es que hay N tensores, y cada uno de ellos viene caracterizado por dD^z coeficientes. Es fácil demostrar que cualquier estado puede ser descrito como un PEPS, siempre y cuando la dimensión D sea lo suficientemente grande. Como veremos más adelante, para los problemas en los que estamos interesados, D sólo crece polinómicamente con N , con lo cual podemos afirmar que los PEPS proporcionan una descripción eficiente.

En el caso homogéneo, podemos escoger todos los tensores iguales, $A[n] = A[m]$, lo que disminuye el número de parámetros. Por otro lado, existen otras

familias de estados con diferentes redes de tensores. Entre ellos, caben destacar los *tensores de árbol* [41] y los *Multi-scale entanglement renormalization ansatz* [42].

4.1.1. Ejemplos

El ejemplo más sencillo de PEPS corresponde a aquellos con dimensión del enlace $D = 1$. En este caso, es fácil ver que se obtienen estados producto que constituyen la base del método del campo medio. Por tanto, los métodos de estudio basados en PEPS contienen como caso más sencillo el del campo medio. Por ejemplo, para $d = 2$, el estado

$$|1, 1, \dots, 1\rangle \quad (25)$$

se obtiene eligiendo $A^1 = 1$ y $A^2 = 0$.

Otro ejemplo sencillo corresponde a los estados de Greenberger, Horne y Zeilinger (GHZ) [44],

$$|1, 1, \dots, 1\rangle + |2, 2, \dots, 2\rangle. \quad (26)$$

Éstos se obtienen para un MPS con $D = 2$, $A_{1,1}^1 = A_{2,2}^2 = 1$ y el resto de los coeficientes son nulos.

Otros ejemplos de redes de tensores incluyen los estados W [43], el código tórico [45, 46], las redes de cuerdas [47], los estados de enlace de valencias resonantes [48], estados topológicos quirales [49], y muchos más. Además, es posible expresar estados mezcla también utilizando redes de tensores y, en particular, mediante el método de la purificación [21]. Asimismo, es posible describir sistemas fermiónicos [50].

4.2. Aproximaciones eficientes

Uno de los objetivos fundamentales de la investigación sobre redes de tensores se centra en demostrar que proporcionan una descripción eficiente de los estados que aparecen en equilibrio térmico. Esto significa que la dimensión D escale sólo polinómicamente con el tamaño de la red. Este hecho automáticamente implica que el número de parámetros necesarios para describir los estados de equilibrio también lo hace y, por tanto, en este sentido, se puede evitar la ley exponencial mencionada anteriormente. Para demostrar esto, se pueden seguir dos caminos: el primero consiste en encontrar una propiedad física que todos los estados de equilibrio térmico satisfagan, y luego demostrar que todos los estados que cumplan esta propiedad se pueden describir eficientemente como redes de tensores. El segundo consiste en demostrar directamente, a partir de la fórmula (11), este mismo hecho.

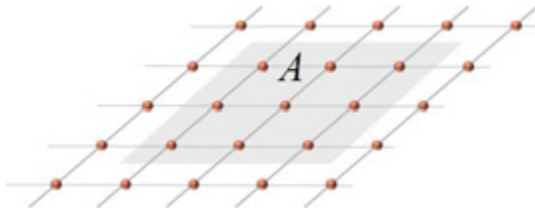


Figura 4: Ley de área: si escogemos un conjunto de espines en la región A y computamos la entropía de von Neumann al trazar el resto, se obtiene un resultado proporcional al número de espines en la frontera de la región A .

4.2.1. Ley de área

La ley de área [51] es la candidata a cumplir lo dicho anteriormente; a saber, es una propiedad que todos los estados de equilibrio térmico (para un hamiltoniano local) son susceptibles de cumplir. Para estados puros, afirma que si seleccionamos una región de la red de espines y determinamos la entropía de esa región, ésta escala con el área (o, más precisamente, el perímetro) de la región. Esto contrasta con lo que ocurre con estados mezcla, o estados puros arbitrarios, en donde la entropía es una propiedad extensiva y, por tanto, escala con el volumen de la región. En particular, dada una región A (ver Figura 4), definimos el estado reducido de esta región como $\rho_A = \text{tr}_{\bar{A}}(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$, en donde la traza está tomada con respecto al espacio de Hilbert de la zona complementaria a A . La ley de área establece que

$$S(\rho_A) \leq \eta |\partial A| \quad (27)$$

en donde η es una constante, S es la entropía de von Neumann (20), y $|\partial A|$ denota el número de espines en la frontera de la región. Esta cantidad caracteriza el entrelazamiento existente entre la región A y su complemento, \bar{A} . Por ello, la ley de área viene a decir que el entrelazamiento en un estado es muy pequeño, comparado con lo que puede llegar a ser para estados arbitrarios. A veces se encuentran estados que violan ligeramente (27); esto es, en lugar de escalar como el volumen lo hacen con un factor extra, e.g. $\log |\partial A|$ [52]. En ese caso, decimos que existen una violación logarítmica a la ley de área.

Para estados mezcla como el de Gibbs (11), la ley de área dice que la *información mutua* $I(A) = S(\rho_A) + S(\rho_{\bar{A}}) - S(\rho)$ entre una región A y su complementaria, \bar{A} , también está acotada por el número de espines en la frontera (salvo una constante de proporcionalidad) [53]. Como la información

mutua mide las correlaciones, si un estado cumple esta ley, esto indica que las correlaciones existentes son mucho menores de lo que podrían ser.

La relación entre redes de tensores y la ley de área ha sido establecida rigurosamente para estados puros en una dimensión espacial. En este caso es posible demostrar que si un estado cumple la ley de área, o existe una violación logarítmica, entonces existe una descripción eficiente en términos de MPS [54]. Por otro lado, también se ha demostrado que los estados fundamentales de hamiltonianos locales con gap (críticos) cumplen la ley de área (con violación logarítmica) [55]. Estos resultados han permitido establecer que, para los problemas unidimensionales habituales, los MPS proporcionan una descripción eficiente.

En dimensiones mayores está establecido que todos los PEPS cumplen una ley de área [56]. La implicación recíproca no ha sido demostrada, excepto si se incluye en ella alguna condición adicional. En cualquier caso, es de esperar que, tal y como ocurre en una dimensión, para hamiltonianos con gap o críticos, los PEPS proporcionen también una descripción eficiente.

Por otro lado, en cualquier dimensión espacial y para un estado de Gibbs a temperatura distinta de cero, la ley de área ha sido demostrada con toda generalidad [53]. En particular, para el hamiltoniano (12) y a temperatura T , se tiene

$$I(A) \leq \mu \frac{|\delta A|}{\kappa T} \quad (28)$$

en donde μ es el autovalor máximo (en valor absoluto) de los h_λ .

4.2.2. Construcción directa

Existe otro camino alternativo para demostrar que las redes de tensores proporcionan aproximaciones eficientes para los estados en equilibrio térmico. La idea es aproximar ρ_{Gibbs} (11) por una expresión que se puede escribir directamente en términos de una red de tensores, y demostrar que D escala sólo polinómicamente con N .

El caso más sencillo se da cuando los términos locales del hamiltoniano (12) conmutan entre ellos, $[h_\lambda, h_{\lambda'}] = 0$. Entonces podemos escribir ρ_{Gibbs} como un producto de exponenciales, en donde cada una de ellas contiene sólo un término local, h_λ . Es fácil ver que cada exponencial puede expresarse como una red de tensores en la zona λ , y que el producto produce, pues, una red de tensores en donde el valor de D es constante, independiente de N . Por tanto, para esta situación queda demostrado lo que queríamos para cualquier dimensión y temperatura [56].

Para el caso general, nos podemos inspirar en la técnica que se utiliza en el método de Monte Carlo (36) y descrita en el apéndice A.2. Esto es, escribir el estado de Gibbs como un producto de M estados de Gibbs, cada uno a temperatura MT [57]. Si M es lo suficientemente grande, cada uno de estos estados se comporta como el caso anterior. Esto es, podemos aproximar ahora la exponencial de la suma de h_λ por el producto de las exponenciales, con lo que el error total que cometemos decrece linealmente con M . Así, cada uno de estos estados los podemos escribir ahora como una red de tensores con dimensión D_0 constante. El estado de Gibbs total es el producto de todos ellos; se puede poner también como una red de tensores con dimensión D_0^M . Desafortunadamente, como M tiene que ser lo suficientemente grande, esto no da el resultado deseado. Sin embargo, utilizando técnicas relativamente sofisticadas de compresión de información, es posible demostrar que cualquier estado de Gibbs puede ser aproximado (con un error ϵ) por un PEPS, en donde D escala solamente polinómicamente con N/ϵ , aunque exponencialmente con β [58]. De la misma forma, bajo la condición adicional de que la densidad de estados de H no crezca excesivamente (lo que ocurre para la inmensa mayoría de los problemas con gap conocidos), esta afirmación se puede extender a temperatura zero (en realidad, se demuestra una cota superior sub-exponencial).

4.3. Métodos

Las redes de tensores forman la base de algunos de los algoritmos más potentes para describir estados cuánticos de muchas partículas. La idea fundamental consiste en fijar la dimensión del enlace, D , y encontrar los tensores que dan lugar a un MPS o PEPS que aproxime óptimamente el estado que se quiere describir [21, 26]. Los métodos utilizados para encontrar los tensores suelen ser variacionales, aunque también se utilizan otros métodos.

Consideremos en primer lugar el problema de encontrar el estado de un sistema de espines a temperatura $T = 0$ con interacciones locales. Como hemos discutido en la sección anterior, los PEPS constituyen una familia de estados que deberían aproximar eficientemente este estado. Para encontrar los tensores que realizan esta tarea, podemos utilizar el método variacional. Éste constituye una herramienta fundamental en el estudio de problemas de muchas partículas, y ha permitido resolver y describir problemas fundamentales como la superconductividad (con los estados BCS) o el efecto Hall cuántico fraccionario (con las funciones de onda de Laughlin). Sin embargo, en contraste con lo que ocurre en todos estos sistemas físicos, los PEPS no proporcionan una familia de estados para resolver un problema concreto,

sino *todos los problemas* de espines o fermiones a baja temperatura y con interacciones locales.

Para poder utilizar el método variacional con un estado Ψ en una red, necesitamos poder determinar el valor de $\langle \Psi | \Psi \rangle$ y $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ eficientemente; esto es, de manera que el tiempo de cálculo escale favorablemente con N . Si esto es posible, entonces el problema se reduce a minimizar la energía (17) con respecto a todos los parámetros que caracterizan el estado Ψ ; en nuestro caso, los coeficientes de los tensores $A[n]$. Esta operación se puede hacer utilizando técnicas numéricas habituales, como el método del gradiente conjugado [59]. Sin embargo, la forma más habitual es la siguiente. En primer lugar, se eligen de manera aleatoria los coeficientes de todos los tensores, excepto el primero, $A[1]$. Si expresamos la energía en función de los coeficientes del tensor $A[1]$,

$$E(A[1]) = \frac{\langle \Psi(A[1]) | H | \Psi(A[1]) \rangle}{\langle \Psi(A[1]) | \Psi(A[1]) \rangle} \quad (29)$$

vemos que es un cociente de polinomios de segundo grado. La minimización de esta función con respecto a esos coeficientes da lugar a una ecuación de autovalores generalizada, que puede ser resuelta mediante métodos tradicionales. De esta forma obtenemos valores para el primer tensor, y una energía, que llamamos E_1 . Ahora fijamos los valores del primer tensor y mantenemos los del resto, excepto los del segundo tensor, $A[2]$, y procedemos de la misma forma; esto es, minimizamos la energía con respecto a estos nuevos coeficientes, lo que corresponde a resolver un problema de autovalores generalizados. Esto da lugar a nuevos valores para $A[2]$, y la energía E_2 . A continuación, realizamos la misma operación con el resto de los tensores, uno a uno, obteniendo E_3, \dots, E_N . Volvemos luego a escoger el primero, y repetimos esta tarea hasta que el valor de la energía haya convergido a un valor con un error predeterminado. La sucesión E_n es monotónicamente decreciente ya que, en el n -ésimo paso, siempre podemos reproducir la energía del paso anterior si mantenemos los valores de $A[n]$; como realizamos una minimización, la energía E_n debe ser, como mucho, la anterior. Como, además, E_n está acotado inferiormente por la energía del estado fundamental de H , esta sucesión debe converger. En principio, nada asegura que la convergencia sea al PEPS que minimiza la energía (ya que podría haber mínimos locales). En la práctica, esto raramente ocurre y el estado que se obtiene es el adecuado.

La cuestión que queda por resolver es cómo determinamos las propiedades físicas de un PEPS y, en particular, la energía, para poder utilizar el método variacional. Dado que la energía y los otros observables interesantes se pueden escribir como una suma (de un producto) de términos locales, en

general estamos interesados en determinar valores esperado de observables, $\langle \Psi | O_i O_j \dots O_l | \Psi \rangle$, en donde O_n actúa sobre el n -ésimo espín. Se puede ver gráficamente (Figura 3) que este valor esperado corresponde a una contracción de tensores. En particular, si definimos nuevos tensores

$$E_O[n] = \sum_k \langle k | O_n | k' \rangle A^k[n] A^{k'}[n]^* \quad (30)$$

el valor esperado deseado resulta ser la contracción de estos tensores a lo largo de la red.

En una dimensión espacial, los tensores $E[n]$ resultan ser matrices $D^2 \times D^2$, con lo que el cálculo de valores esperados se reduce a una multiplicación de matrices. Esta se puede realizar de manera eficiente, con un número de pasos que escala sólo linealmente con N (ya que hay que realizar N multiplicaciones). En este caso, el método variacional que hemos descrito coincide con el llamado *Density matrix renormalization group* (DMRG) [60], introducido por S. White en 1991, y que es el que proporciona los resultados más precisos para este tipo de problemas. A pesar de que originariamente fue introducido de una manera distinta, sin hacer referencias a los MPS, más adelante se vio la relación con estos estados [61]. A principios del nuevo siglo se estableció una conexión mucho más profunda con los MPS [62], lo que permitió obtener métodos más precisos, así como extender el método DMRG a dimensiones mayores.

El cómputo de valores esperados de manera exacta en dos o más dimensiones espaciales requiere un esfuerzo exponencial en N . Sin embargo, es posible evitar este problema utilizando técnicas especiales, basadas en la *reducción dimensional* [40]. La idea fundamental es que el problema de contraer los tensores de una red cuadrada en, digamos, dos dimensiones, puede hacerse columna a columna, con lo que se convierte en un problema en una dimensión el cual, a su vez, se puede resolver aproximadamente utilizando el método que damos en el siguiente párrafo. De la misma forma, el problema en tres dimensiones se puede reducir a uno de dos que, a su vez, puede reducirse a uno de una.

La técnica fundamental para llevar a cabo el proceso anterior se apoya en una forma de aproximar estados, Ψ , por otro, Ψ_B , descrito mediante una red de tensores con una dimensión de enlace D y tensores $B[n]$ [63]. La forma de hacerlo es minimizando la distancia $\| |\Psi\rangle - |\Psi_B\rangle \|^2$ con respecto a los tensores $B[n]$. Esta tarea se realiza de uno en uno, tal y como lo hemos explicado anteriormente para el método variacional. Como antes, el problema es cuadrático en los coeficientes de cada tensor, con lo que al final debemos resolver un problema de autovalores generalizado. Equipados

con esta técnica, podemos contraer los tensores en dos dimensiones añadiendo cada vez una columna y aproximando el resultado con otro tensor, de manera que la dimensión del enlace no supere un valor predeterminado. Es fácil ver que, siempre y cuando la dimensión máxima crezca como mucho polinómicamente con N (para obtener un error fijo, ϵ), el resultado final se obtiene de manera eficiente.

Esta técnica permite, además, determinar la evolución temporal de un PEPS, $|\Psi_A\rangle$, o calcular estados en equilibrio térmico a temperatura finita, ρ [63, 64]. Para lo primero, uno toma $|\Psi[(n+1)t/M]\rangle = e^{-iHt/M\hbar}|\Psi_B(nt/M)\rangle$, y lo aproxima por un PEPS $\Psi_B[(n+1)t/M]$, empezando con $\Psi_B(0) = \Psi_A$. Iterando M veces se obtiene la aproximación al estado final. Para lo segundo, uno comienza con el estado correspondiente a $\beta = 0$, que puede describirse como un PEPS con $D = 1$, y evoluciona en tiempo imaginario; esto es, como en el caso anterior pero reemplazando $e^{-iHt/M}$ por el operador $e^{-\beta H/2M}$.

4.4. Resultados

Existen numerosos problemas que han sido resueltos utilizando algoritmos basados en redes de tensores. Es imposible dar cuenta de todos ellos, así que aquí daremos un resumen muy superficial. En primer lugar, el método DMRG [65] ha dado lugar a una revolución en el campo de la Física de la Materia Condensada, ya que permite resolver prácticamente todos los problemas unidimensionales a temperatura cero. Este éxito se ha trasladado recientemente a la Física Atómica y a la de Altas Energías. En este último caso, por ejemplo, se ha podido resolver el modelo de Schwinger con la mayor precisión conocida, tanto a temperatura cero como a temperaturas finitas [66, 67]. También se ha estudiado la dinámica en modelos más complejos (no abelianos) en una dimensión espacial [68]. Los métodos para estudiar el equilibrio térmico y la dinámica han abierto las puertas a nuevos estudios que incluyen, por ejemplo, la descripción precisa de experimentos con gases fríos [69], o la caracterización de un nuevo fenómeno, denominado *localización de muchos cuerpos* [70], que generaliza la localización de Anderson a sistemas interaccionantes.

Los resultados en dimensiones mayores son todavía escasos, ya que los algoritmos desarrollados hasta ahora escalan como D^{10} (comparar con la escala D^3 de los de una dimensión). Aun así, utilizando estos métodos se han podido atacar problemas con mucha mayor precisión que con métodos tradicionales, como el modelo de Hubbard fermiónico en dos dimensiones, en donde se ha encontrado el diagrama de fases a temperatura cero [71]. También se han resuelto problemas de espines frustrados [72], o problemas

donde aparecen estados topológicos [73].

Cabe destacar que los MPS han sido generalizados al continuo [74] para describir teorías cuánticas de campos, y al caso en el que las matrices $A^k[n]$ son reemplazadas por campos conformes [75], lo que abre las puertas al uso de estos métodos para describir sistemas críticos exactamente. Finalmente, también es posible trabajar directamente en el límite termodinámico, $N \rightarrow \infty$ [76].

5. Simulación Cuántica

En los últimos años ha surgido una nueva forma de atacar problemas de muchas partículas. La idea original se le atribuye a R. Feynman [7], y consiste en utilizar un *sistema cuántico* para resolver problemas cuánticos de muchos cuerpos. Como hemos visto, el problema adicional que surge si queremos resolver este tipo de problemas, es que solamente almacenar en una memoria el estado que lo describe resulta difícil, ya que la información crece exponencialmente con el tamaño de la red en la que embebemos el sistema. La solución propuesta por Feynman consiste en no almacenar la información que describe el estado. En su lugar, sugiere escoger otro sistema cuántico auxiliar, y prepararlo en el estado cuántico que queremos almacenar. Si queremos extraer alguna información sobre las propiedades físicas asociadas a ese estado, tan solo tenemos que medir nuestro sistema auxiliar tantas veces como sea necesario. Ese sistema auxiliar es lo que llamamos el *simulador cuántico*.

5.1. Ordenadores Cuánticos

El procedimiento propuesto por Feynman puede considerarse como un antecedente de los ordenadores cuánticos [8]. El está interesado en describir teorías cuánticas de campos, que son las más fundamentales de la Física, tales como las que aparecen en el contexto del Modelo Standard. Propone discretizar el espacio y el tiempo, de tal forma que podamos describir la dinámica con una red en la que la evolución temporal se produce paso a paso. El sistema auxiliar, el simulador, estaría formado entonces por sistemas cuánticos en una red, en la que se alternan interacciones (puertas lógicas cuánticas) de manera secuencial entre los próximos vecinos. El hecho de que estas interacciones sean locales es una consecuencia de que las teorías de campos relativistas tienen esta propiedad. En un lenguaje más moderno, lo que Feynman propone sería utilizar un ordenador cuántico (el sistema auxiliar), en el que las interacciones necesarias para realizar la dinámica son

puertas lógica cuánticas. De hecho, en 1996 S. Lloyd [77] formalizó la idea de Feynman y mostró cómo un ordenador de este tipo podría reproducir la evolución de un sistema de muchas partículas en una red de manera eficiente.

Para problemas de equilibrio térmico, también existen algoritmos cuánticos, que podrían ejecutarse en un ordenador cuántico. Por ejemplo, para preparar estados fundamentales (a temperatura $T = 0$) [78] o en equilibrio térmico de hamiltonianos locales [79]. Sin embargo, para la mayoría de ellos no sabemos si son más eficientes que los algoritmos clásicos. Una excepción remarcable la constituye el algoritmo presentado en Ref. [80] y que permite obtener estados en equilibrio térmico para hamiltonianos clásicos (y cuánticos, si los h_λ conmutan). El algoritmo prepara una purificación del estado de Gibbs; esto es, un estado puro entrelazado del sistema en cuestión y otro sistema auxiliar de tal forma que si trazamos este último, obtenemos (11). Para los problemas clásicos, si el "gap" Δ definido en la Sección 2 está acotado inferiormente por una constante, el número de pasos del algoritmo escala como $N \log(N)$, con lo que el tiempo de ejecución es un factor N menor que la cota superior clásica (8). De hecho, el algoritmo cuántico es paralelizable, en cuyo caso el tiempo escala como $\log(N)$, lo que proporciona una reducción exponencial con respecto al método clásico.

La construcción de un ordenador cuántico es uno de los grandes desafíos de este siglo. A pesar de que ya existen algunos prototipos, todavía no es posible obtenerlos a escalas mayores. La dificultad fundamental radica en la proliferación de errores. Si en el transcurso de una computación se produce algún error en uno de los componentes del ordenador (un qubit), el resultado al final será completamente erróneo. La probabilidad de que no se produzca algún error en ninguno de los componentes durante un tiempo determinado decrece exponencialmente con el número de componentes, y ese resulta ser precisamente el problema al intentar construir ordenadores más y más grandes. Afortunadamente, existe una solución para combatir este gran obstáculo, que es la corrección de errores [13]. La idea primordial consiste en utilizar un número de sistemas redundante de tal forma que, a cada paso, podemos comprobar si se ha producido un error en alguno de los componentes y, si esto es así, corregirlo. Sin embargo, esto introduce un nuevo obstáculo, ya que al detectar el error o al corregirlo, podemos introducir más errores. La solución final la da la corrección de errores con tolerancia a fallos [13], en la cual se pueden corregir éstos, y todos los asociados con la detección y correcciones posteriores. Para que esta idea funcione es necesario que la probabilidad de error en el intervalo de tiempo en que se realice una puerta lógica sea menor que un valor, llamado umbral de error. Dependiendo del modelo de errores que se utilice, este umbral está entre el 0.01 %

y el 1 %. Además, como tenemos que introducir redundancia, se necesitan muchos qubits adicionales, cuyo número depende el cómo de cerca estemos del umbral de error. En los experimentos actuales se ha conseguido, para pequeños prototipos, traspasar el umbral de error. Sin embargo, el número de qubits adicionales es todavía gigantesco para esas cotas de error. Más aún, con los modelos actuales la probabilidad de error en un qubit crece con el número de ellos. Todo esto hace que, hoy en día, no dispongamos de un ordenador cuántico que pueda resolver problemas de muchas partículas (y otros muchos problemas). Adicionalmente, para evitar estas complicaciones se necesita, probablemente, el desarrollo de nuevas tecnologías, que todavía pueden llevar mucho tiempo en llegar.

5.2. Simuladores Cuánticos

Afortunadamente, no es necesario construir un ordenador cuántico para resolver muchos de los problemas de muchas partículas que aparecen en el campo de la Física. En particular, podemos utilizar un *simulador cuántico* (analógico), que no requiere la discretización en el tiempo propuesta por Feynman, ni la aplicación de puertas lógicas cuánticas [14]. En estos simuladores, si queremos estudiar el estado a temperatura $T = 0$ de un cierto hamiltoniano H en una red, el procedimiento sería el siguiente. En primer lugar, debemos tener a nuestra disposición un sistema cuántico auxiliar que controlemos muy bien, de tal forma que su dinámica sea ajustable a la descrita por el hamiltoniano del problema. Una vez hecho esto, enfriamos nuestro sistema auxiliar a temperatura zero, y medimos sobre él las propiedades físicas requeridas. De esta forma, obtendremos la información que deseamos.

Enfriar un sistema en una red con fuertes interacciones puede ser complicado en la práctica. Normalmente, es mucho más fácil enfriar un sistema si no se producen interacciones entre los constituyentes, o éstas son débiles. De ahí que se utilicen *algoritmos adiabáticos* [81] para preparar los estados fundamentales de hamiltonianos con interacciones fuertes. Si queremos preparar Ψ , el estado fundamental de un cierto hamiltoniano, H , en nuestro simulador cuántico, estos algoritmos funcionan de la siguiente forma. Primero, sintonizamos los parámetros de nuestro simulador para que su dinámica venga descrita por un hamiltoniano, H_0 , que no contenga interacciones. Así, será fácil enfriarlo y obtener su estado fundamental, Ψ_0 . A continuación, ajustamos las interacciones lentamente de tal forma que $H_0 \rightarrow H$. Esto es, nuestro simulador viene descrito por $H(t)$ para todo tiempo t : en el instante inicial, $t = 0$, $H(0) = H_0$, y en el final, $t = t_f$, $H(t_f) = H$. Si la variación es

suficientemente lenta (adiabática) y no se producen cruces de niveles, al final del proceso el estado de nuestro simulador será el deseado, Ψ . La condición sobre los niveles significa que el hamiltoniano $H(t)$ tenga un "gap", $\delta(t) > 0$ para todo t . Es fácil de entender cualitativamente el proceso, ya que el estado se va adaptando con el tiempo para ser en, todo momento, el fundamental de $H(t)$. Las condiciones para que obtengamos nuestro objetivo dependen no solo de t_f , sino también de $H(t)$ y, por tanto, del número de spines de nuestro simulador. En efecto, $\delta(t)$ dependerá de N , y es posible que sea una función decreciente de esta variable. Es fácil ver que, siempre y cuando esa función esté acotada inferiormente por la inversa de cualquier polinomio de grado N , el tiempo t_f requerido por el régimen adiabático crece sólo polinómicamente con el tamaño del sistema y, por lo tanto, la simulación cuántica permite resolver este tipo de problemas de manera eficiente. En la práctica, en la mayoría de problemas que aparecen en Física (excluidos los cristales de espín), es de esperar que el "gap", δ , cumpla esta condición.

Otra cuestión fundamental en los simuladores cuánticos analógicos es la acumulación de los errores. En la práctica es imposible que nuestro simulador cuántico venga descrito exactamente por el hamiltoniano deseado, H . Siempre habrá algún tipo de error, con lo que en vez de éste, tendremos $\tilde{H} = H + \epsilon V$, en donde $\epsilon \ll 1$ si nuestro simulador es lo suficientemente bueno. La perturbación V será típicamente local; esto es, una suma de N términos, V_n , cada uno de ellos acotado por una constante, J ($\|V_n\|_\infty \leq J$), en donde J es el máximo valor tomado por los h_λ ($\|h_\lambda\|_\infty$, ver (15)). Por consiguiente, la magnitud de los valores que puede tomar V ($\|V\|_\infty$) será proporcional a N , con lo que el valor típico de la perturbación crecerá con N . En consecuencia, el estado que preparemos en nuestro simulador no será el deseado, sino que corresponderá a un hamiltoniano muy distinto. Esto no debería ser un problema en la mayoría de los casos, siempre y cuando ϵ sea lo suficientemente pequeño. La razón es que, en el campo de la simulación cuántica, estamos interesados en cantidades intensivas; esto es, que están definidas por cada espín o partícula (energía por partícula, densidad, magnetización promedio, susceptibilidades, etc) que pueden ser muy próximas a la del problema que queramos responder, incluso si nuestro estado está muy alejado. Esto, que resulta ser así en la práctica, no está demostrado rigurosamente más que en algunos casos especiales. Así que siempre es posible que nuestro simulador no funcione bien, a pesar de que los errores locales sean casi despreciables. De hecho, ésta constituye una de las preguntas abiertas más interesantes dentro del campo de la simulación cuántica.

A continuación revisamos dos de los sistemas físicos más avanzados en el campo de la simulación cuántica: los átomos fríos en redes ópticas y los

iones atrapados.

5.2.1. Átomos fríos en redes ópticas

Uno de los sistemas físicos más prometedores para construir simuladores cuánticos es el compuesto por átomos en redes ópticas [82]. En esta implementación, un conjunto de átomos, típicamente alcalinos, se atrapan en el vacío mediante luz proveniente de láseres. El patrón de luz láser se escoge de tal forma que los átomos queden levitando en una red regular (ver Figura 5), que corresponden a los máximos de intensidad de la luz emitida por los láseres. Los átomos pueden pasar de un mínimo del potencial a otro contiguo, a través del efecto túnel, con lo que se pueden mover en la red. Además, cuando dos o más átomos se encuentran en el mismo vértice de la red, interaccionan entre ellos. Estos dos fenómenos se pueden regular utilizando campos externos. Por un lado, incrementando la intensidad de los láseres, los pozos de potencial se hacen más profundos, con lo que el efecto túnel se hace más difícil. En particular, la masa efectiva de los átomos en la red se puede regular de esta forma. Por el otro, utilizando campos magnéticos u ópticos, se puede sintonizar la interacción entre átomos, haciéndola atractiva, repulsiva, o nula [83]. Se pueden usar, también, diferentes configuraciones geométricas de los láseres, y, por tanto, crear una variedad extensa de redes (cuadradas, triangulares, hexagonales, etc). Asimismo, se puede controlar la dimensión espacial, simplemente ajustando la intensidad de los láseres para que los átomos no puedan moverse más que en una, dos, o las tres direcciones. Los átomos pueden ser bosones (si el número total de electrones, neutrones y protones que los forma es par) o fermiones (en caso contrario). De hecho, existe una variedad grande de átomos con los que se realizan estos experimentos (además de los alcalinos, alcalino-térreos, tierras raras, e incluso moléculas), y se pueden manejar distintos isótopos. Además, se pueden utilizar uno o varios estados internos (hiperfinos) de los átomos, correspondientes al nivel electrónicos fundamental y, por tanto, estables (con vidas medias del orden de años). Todas estas posibilidades le dan a este sistema físico una flexibilidad extraordinaria que permite simular una multitud de problemas relevantes [16].

Los experimentos con átomos en redes ópticas son realmente complicados. En primer lugar, la temperatura de los átomos debe ser muy baja, del orden de unos pocos nK, probablemente la más baja que se pueda encontrar en todo el universo. Esto se debe a que, para que los átomos se comporten de acuerdo con los hamiltonianos de redes en los que estamos interesados, su energía no puede superar la barrera que separa los nodos de la red. Además,

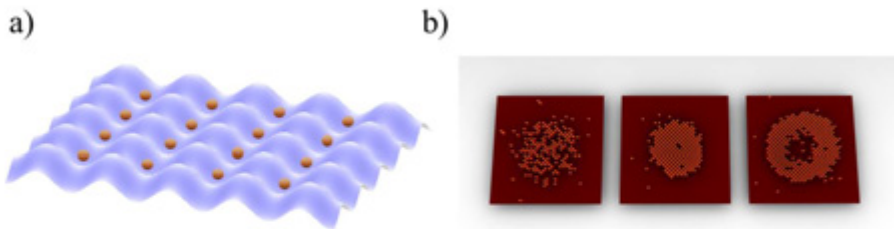


Figura 5: a) Representación esquemática de átomos en redes ópticas; b) Fotografías en la que se ven átomos individuales. La primera corresponde a un superfluido, la segunda a un aislante de Mott, y la tercera a otro aislante, pero con un hueco central debido a que hay dos átomos por sitio que no aparecen en la imagen. Figura preparada por Stefan Kuhr e Immanuel Bloch, del Instituto Max-Planck de Óptica Cuántica, correspondiente a su experimento.

para que los modelos sean los que deseamos, la temperatura debe ser menor que las energías asociadas a los procesos túnel, o las interacciones entre átomos. Afortunadamente, hoy en día se puede llegar a temperaturas de nK de una manera rutinaria [38]. Una vez atrapados en campos magnéticos u ópticos, los átomos se pueden enfriar por medio de luz láser, de tal forma que en cada ciclo absorción-emisión, el átomo pierde energía asociada a su movimiento (e.g., cinética). Esto se puede conseguir fácilmente seleccionando la frecuencia del láser (además de la polarización e intensidad). Con esta técnica se puede reducir la temperatura desde la ambiente hasta unos pocos μK . Para conseguir bajarla todavía tres órdenes de magnitud se suelen utilizar técnicas de evaporación, en la que los átomos más energéticos abandonan la trampa que los confina, y los demás re-termalizan por medio de colisiones.

En segundo lugar, el vacío en el que se encuentran los átomos debe ser casi perfecto, con presiones menores que 10^{-11}mbar . Con ello se consigue que no colisionen con otras partículas durante la ejecución del experimento, que suele prolongarse por unos segundos. Además, los experimentos deben estar perfectamente aislados del exterior, para que no penetren campos eléctricos o magnéticos no deseados (por ejemplo, los campos magnéticos externos no pueden ser mayores que unos pocos μGauss). Además, los láseres que confinan, enfrían o manipulan los átomos deben ser muy estables, ya que fluc-

tuaciones en la frecuencia o intensidad calientan las muestras (para algunos de los experimentos se requieren láseres con anchos de banda por debajo de un Hz, lo que conlleva una estabilidad extrema, con un error relativo de la frecuencia $\Delta\omega/\omega \leq 10^{-15}$).

El mecanismo que atrapa a los átomos con la luz de los láseres es muy sencillo. Aunque los átomos son neutros, la presencia de un láser los puede polarizar, convirtiéndolos en pequeños dipolos eléctricos, cuyo momento es proporcional al campo eléctrico del láser. Esto ocurre si la frecuencia del láser no está próxima a la de una transición atómica, pues en aquel caso se produciría absorción y emisión espontánea. La constante de proporcionalidad puede ser negativa o positiva dependiendo de la frecuencia del láser. A su vez, esos dipolos interactúan con el campo eléctrico del láser, creando un potencial proporcional al campo y al momento dipolar. En total, el átomo experimenta un potencial proporcional a la intensidad del láser. Cuando esta intensidad varíe en el espacio, el átomo estará sometido, pues, a una fuerza, que es la que lo mantiene levitando en el vacío. Si utilizamos dos láseres de la misma frecuencia, pero propagándose en direcciones contrarias, se formará una onda estacionaria, cuya intensidad varía en el espacio como una función sinusoidal. Por lo tanto, el átomo verá un potencial periódico y, si su temperatura es lo suficientemente baja, se asentará en alguno de los pozos del potencial, pudiendo también saltar de un pozo a otro contiguo a través del efecto túnel. Escogiendo láseres en distintas direcciones se pueden conseguir otras redes con distintas geometrías.

La primera propuesta de simular modelos utilizando átomos en redes ópticas se publicó en 1998 [82]. En ella se demuestra que en las condiciones anteriores, el conjunto de átomos viene descrito por el modelo de Hubbard bosónico. En este modelo (48), los parámetros son controlables a través de la intensidad de los láseres. En particular, se predijo que (en el límite termodinámico) se podría observar una transición de fase entre un superfluido y un aislante de Mott. Esta predicción fue corroborada experimentalmente cuatro años más tarde [84], lo que abrió la puerta a la simulación de otros modelos. En particular, a propuestas para simular el modelo de Hubbard fermiónico [85], o modelos de espines como los introducidos en secciones anteriores [86, 87]. Actualmente existen más de veinte grupos experimentales, repartidos por todo el mundo, simulando estos y otros problemas con este tipo de sistemas.

Recientemente se ha visto que con átomos en redes ópticas también se pueden simular modelos que aparecen en el campo de la Física de Altas Energías [88, 89, 90, 91]. Para ello es necesario mezclar dos especies atómicas, una fermiónica y otra bosónica. La primera juega el papel de la materia

en estos modelos y la segunda, el de los campos gauge responsables de las fuerzas. Propuestas para simular modelos pertenecientes al ámbito de la Electrodinámica y la Cromodinámica Cuántica en una, o más dimensiones espaciales, han sido publicadas recientemente. La más sencilla corresponde al modelo de Schwinger [92] (54), un modelo en una dimensión. En este caso, los fermiones deben tener dos estados internos: si un átomo se encuentra en uno de ellos, esto indica que tenemos una partícula (electrón) en esa posición, mientras que si existe un hueco en el otro estado interno, tenemos una antipartícula. La red uni-dimensional está diseñada para que las partículas sólo puedan ocupar sitios pares, y la antipartículas, impares. Entre dos de estos sitios, es decir, en las aristas, se encuentran atrapados los bosones en otra red distinta. Estos átomos también pueden ocupar dos estados internos (de los muchos que poseen). Si el número de átomos en una de estas aristas en los dos estados internos coincide, decimos que el campo eléctrico es nulo, si difiere en dos, que tiene el valor $+1$, etc. En general, el valor del campo eléctrico asociado a los bosones es la diferencia entre los átomos en los dos estados internos, dividida por dos. Los átomos fermiónicos, para pasar de un pozo del potencial al contiguo, deben cambiar el estado interno. Eso se produce mediado por una interacción con los bosones que hay entre medio que, debido a la conservación del momento angular, también deben cambiar el estado interno. Este proceso, de acuerdo a la interpretación de los distintos estados que hemos dado, corresponde al mecanismo de Schwinger. Se crea un hueco en un sitio impar y un átomo aparece en uno par, con lo que se crea un par partícula-antipartícula. El cambio de los átomos bosónicos corresponde a la aparición de un campo eléctrico entre ambas. Es fácil ver que el modelo que uno obtiene ajustando los parámetros es precisamente el de Schwinger mencionado en el apéndice B.4.1.

5.2.2. Iones atrapados

Otro sistema físico con el cual se hacen simulaciones cuánticas analógica es el formado por iones [93]. Estos suelen ser átomos alcalino-térreos a los que les falta un electrón, con lo que tienen una estructura electrónica próxima a la de los alcalinos. Dado que están cargados, se pueden utilizar campos eléctricos creados por electrodos para confinarlos en una región del espacio, de tal forma que cristalicen formando una red. Otra posibilidad es atraparlos en microtrampas (Figura 6). Una vez atrapados y enfriados por medio de láseres, se puede manipular su movimiento y sus estados internos para generar la dinámica de los modelos que deseamos simular. Esto se consigue con la ayuda de láseres y campos magnéticos. Además, se pueden utilizar

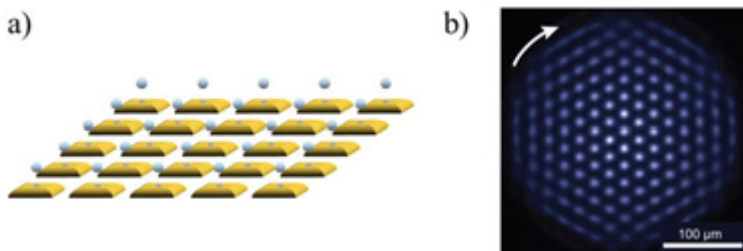


Figura 6: a) Representación esquemática de iones atrapados en una trampa de superficie; b) fotografías de iones en una trampa de Penning del grupo de John Bollinger en el National Institute of Standards and Technology (crédito Britto/NIST).

distintos niveles internos de los iones, así como trampas que den lugar a diferentes geometrías.

Como en el caso anterior, los iones deben estar aislados del exterior, y a presiones y temperaturas bajas (típicamente del orden de unos pocos μK) [94]. Se suelen atrapar bombardeando un haz de átomos neutros con otro de electrones, en una zona en donde haya campos eléctricos creados por los electrodos. Cuando uno de los átomos colisiona con un electrón, esto puede causarle su ionización, con lo cual empieza a sentir el campo eléctrico. Éste se diseña para que el átomo quede confinado en la región deseada. Los campos deben variar con el tiempo, ya que es imposible atrapar objetos cargados con campo estáticos. Una vez se han atrapado los iones, se pueden enfriar utilizando el mismo mecanismo que se usa con los átomos neutros. Tras alcanzar las temperaturas adecuadas, los iones quedan a disposición para comenzar con las simulaciones. Estas pueden ser de dos tipos: de modelos de espines [93, 95] o de modelos Hubbard bosónicos [96].

La simulación de modelos de espines se ejecuta a través de haces de luz láser que empujan los iones ligeramente en una dirección u otra, dependiendo de si están en un estado interno u otro. Esto hace que, dependiendo de la configuración, la distancia entre ellos varíe y, con ello, la energía de Coulomb. Por tanto, la energía de los iones depende de la configuración de los espines, que es lo que se pretende en los modelos de espines. De hecho, es fácil deducir el hamiltoniano para describir este sistema y observar que, eligiendo los parámetros de los láseres adecuadamente, se pueden diseñar una gran variedad de hamiltonianos. La primera confirmación experimental de este efecto se realizó en [97], con un par de iones. En los últimos años se han

realizado más experimentos con un número mayor de iones, de hasta treinta [98, 99].

La simulación de modelos de Hubbard es algo más complicada. Para poder entender como funciona, debemos recordar que el movimiento de una partícula confinada en un potencial armónico se puede describir en términos de fonones: dependiendo de si se encuentra en el estado fundamental, el primer excitado, segundo, etc, podemos decir que tenemos cero, uno, dos, etc, fonones. Así, el movimiento de un conjunto de iones atrapados en potenciales armónicos se puede describir en términos de un conjunto de fonones (habrá tantos modos, como grados de libertad). Debido a la fuerza de Coulomb, el movimiento de un ion puede afectar a otro, lo que da lugar a un trasvase de fonones [100]. De hecho, estos fonones son muy distintos de los que aparecen en materiales ya que los iones están separados por distancias de 20-30 μm , y levitando en la trampa externa. Por ello, se puede ver que no se pueden crear o destruir (ya que eso llevaría a una violación de la conservación de la energía), pero sí pueden pasar de un ion a otro. Como los fonones son bosones, esto quiere decir que se comportan como en el modelo de Hubbard, desapareciendo de un sitio y apareciendo en otro. Además, si las trampas en las que están confinados los iones no son armónicas, eso da lugar a que la energía de dos fonones sea distinta a dos veces la de un fonón, lo que es equivalente a decir que interactúan. Así, ajustando la anarmonicidad de las trampas, podemos ajustar las interacciones en el modelo de Hubbard. Finalmente, podemos combinar los modelos de espines y los de Hubbard utilizando, a la vez, los estados internos de los iones. Aunque todavía no se ha realizado ninguna simulación de este tipo, es de esperar que dentro de poco podamos ver los resultados de los primeros experimentos.

5.3. Situación actual y perspectivas

La simulación cuántica con átomos fríos en redes ópticas y con iones atrapados está progresando rápidamente en los últimos años. A pesar de que los primeros resultados han sido muy alentadores, todavía queda un largo camino por recorrer. En primer lugar, hace falta enfriar los átomos a temperaturas más bajas, ya que muchos de los fenómenos que se pretenden estudiar ocurren a escalas energéticas menores de las que se alcanzan en los experimentos. También hace falta mejorar la precisión en los experimentos, y controlar aún mejor los parámetros externos. En el caso de los iones, es necesario también aumentar su número para poder responder a las preguntas más relevantes relativas a los modelos que se pretenden simular. La utilización de trampas de superficie o trampas de Penning proporciona una

solución a este problema, ya que se espera que con ellas se puedan almacenar muchos más iones [101]. En el caso de los átomos, sería altamente deseable poder dirigirse a cada uno de los vértices de la red independientemente, ya que ello permite hacer observaciones que revelen las propiedades de la materia exótica. Recientemente, parte de este objetivo ya ha sido conseguido a través del desarrollo de unos microscopios especiales [102, 103]. Existen también varias sugerencias para construir nuevas trampas en las que los átomos interaccionen más fuertemente, lo que suaviza los requerimientos sobre la temperatura. En particular, se está contemplando utilizar trampas basadas en plasmones [104], cristales fotónicos [105], o vórtices en superconductores [106].

También cabe destacar que existen propuestas de simuladores cuánticos basadas en otros sistemas [15]. Por ejemplo, se han realizado algunas simulaciones con fotones, aunque estas no son escalables debido a la corta vida media y la dificultad de crear más de una docena de ellos. Las propuestas basadas en los llamados átomos artificiales en sistemas sólidos son más prometedores: bien con puntos cuánticos organizados en redes, bien con matrices de pequeños qubits superconductores. En ambos casos la ventaja principal sobre los sistemas atómicos es que se pueden utilizar técnicas avanzadas para escalar los experimentos. La desventaja primordial es que es muy difícil conseguir que los átomos artificiales sean idénticos, lo que hace que las simulaciones no den los resultados deseados. Aun así, el rápido progreso de las nanotecnologías augura muchas posibilidades para estos sistemas.

6. Una mirada al futuro

La repercusión de los simuladores cuánticos y las redes de tensores 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 los 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 somos capaces de ir más allá de unas pocas partículas. Sin embargo, otras descripciones deberían ser mucho más eficientes y vencer la ley exponencial que aparece de manera natural en estos problemas. Las *redes de tensores* aparecen como claros candidatos para ejercer este papel, ya que dan lugar a una descripción que sólo necesita un número de parámetros que crece po-

linómicamente 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 las predicciones. Los simuladores cuánticos, por su parte, nos ayudarán a comprender muchos de los fenómenos microscópicos complejos asociados a la presencia del entrelazamiento en sistemas de muchas partículas, y que dan lugar a fenómenos extraordinarios.

Otro de los campos donde, eventualmente, estas técnicas resultarán útiles es el de 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 discutido abundantemente en este texto. 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.

En cualquier caso, los temas tratados aquí se encuentran en plena ebullición científica y es muy probable que en los próximos años podamos dar un paso más en el estudio de sistemas cuánticos complejos. Sin embargo, el desarrollo intelectual y tecnológico al que está dando lugar la investigación nos traerá nuevas sorpresas y, lo más seguro, conexiones con otros campos de la ciencia.

A. Métodos de Monte Carlo

En este apéndice damos algunos detalles de como se analizan y resuelven problemas de espines en redes con métodos de Monte Carlo tradicionales. Analizaremos el tiempo de resolución de un problema basado en este método, así como sus limitaciones, con el objetivo de poderlo comparar con las redes de tensores y los simuladores cuánticos. Trataremos dos métodos concretos que se aplican a problemas de espines clásicos y cuánticos, respectivamente.

A.1. Problemas clásicos de espines

A continuación damos un breve análisis de cómo se describen los métodos de Monte Carlo desde el punto de vista matemático, y se analiza el tiempo de ejecución en un ordenador. Para más detalles se puede consultar la referencia [33].

Cada algoritmo para generar las secuencia aleatorias (7) viene descrito en términos de una matriz estocástica, \mathbb{T} , que proporciona la probabilidad de pasar de una configuración a otra. Es conveniente escribir en forma de vector de d^N componentes la probabilidad de cada configuración, $P_m = P(c_m)$. Por ejemplo, si tomamos $d = 2$, c_1 es la configuración con todos los espines hacia abajo, c_2 la que tiene el último hacia arriba, etc. Si llamamos $P^{(n)}$ el vector correspondiente al n -ésimo paso del algoritmo, tenemos

$$P^{(n+1)} = \mathbb{T}P^{(n)}, \quad (31)$$

en donde la probabilidad inicial $P^{(0)}$ suele tomarse completamente aleatoria (esto es, el vector con todas las componentes iguales a $1/d^N$). Los algoritmos se escogen de tal forma que se cumpla el principio del *balance detallado* [33], que implica que \mathbb{T} tiene todos los autovalores reales y contenidos en el intervalo $[0, 1]$, y un sólo autovalor con magnitud igual a uno, no degenerado, con autovector (por la derecha) correspondiente a la configuración de equilibrio (2). En tal caso

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P^{(n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{T}^n P^{(0)} = P_{Gibbs}, \quad (32)$$

ya que todos los autovalores con magnitud menor que uno no contribuyen en el límite.

Decimos que el método ha convergido después de n pasos con un error ϵ si para todo $m \geq n$

$$\|P^{(m)} - P^{(0)}\|_1 < \epsilon \quad (33)$$

para cualquier probabilidad inicial $P^{(0)}$. La norma $\|\dots\|_1$ se define como la suma de las magnitudes de todas las componentes, y la fórmula (33) asegura que el error en la estimación de cualquier propiedad física será menor que ϵ (siempre y cuando normalicemos la propiedad física adecuadamente, por ejemplo, si determinemos cantidades intensivas, $X(c)$, cuyos valores máximos cumplan $|x(c)| \leq 1, \forall c \in C$). Obviamente, n dependerá de ϵ , con lo que escribiremos $n_0(\epsilon)$ como el mínimo número de pasos necesarios para obtener convergencia con un error ϵ .

El tiempo de convergencia del método depende crucialmente del espectro de la matriz \mathbb{T} y, en particular, en el "gap" (brecha) correspondiente. Éste se suele definir primero expresando $\mathbb{T} = e^{\mathbb{S}/N}$. Si llamamos $\lambda_0 > \lambda_1 \geq \dots$ a los autovalores de \mathbb{S} ordenados de mayor a menor, entonces $\lambda_0 = 0$ y el "gap" se define como $\Delta = -\lambda_1 > 0$. Es fácil deducir las cotas inferiores y superiores a $n_0(\epsilon)$ dadas en (8). Nótese que en esas desigualdades hemos omitido la dependencia de ϵ . Además, S compensa el factor N del denominador en la relación entre \mathbb{T} y \mathbb{S} , ya que es extensivo. Así que la escala global del número

de pasos será $n\Delta$, lo que explica que Δ aparezca en los denominadores de la expresión (8).

A.2. Problemas cuánticos de espines

Como hemos visto, el método de Monte Carlo se puede aplicar a problemas cuánticos. Sin embargo, uno se enfrenta al problema de determinar la exponencial de una matriz muy grande, lo que hace que el tiempo de ejecución del programa escale exponencialmente con N . Este problema se puede evitar en algunos casos [19]. Una de las técnicas consiste en definir otra función

$$\begin{aligned} Q[k^{(n)}, k^{(n+1)}] &= \langle k^{(n)} | e^{-\beta H/M} | k^{(n+1)} \rangle \\ &\approx \delta_{k^{(n)}, k^{(n+1)}} - \frac{\beta}{M} \langle k^{(n)} | H | k^{(n+1)} \rangle + O(1/M^2). \end{aligned} \quad (34)$$

En orden de aproximación $1/M$ podemos determinar esta función, ya que no se requiere la exponenciación de matrices, sino N cálculos sencillos (ya que H es la suma de N términos). Además, podemos escribir

$$\langle X \rangle = \sum_{k^{(1)}, \dots, k^{(M+1)}} Q_0[k^{(1)}, \dots, k^{(M+1)}] x_{k^{(1)}}, \quad (35)$$

en donde

$$Q_0[k^{(1)}, \dots, k^{(M+1)}] \propto \prod_{n=1}^M Q[k^{(n)}, k^{(n+1)}] \delta_{k^{(1)}, k^{(M+1)}} \quad (36)$$

donde el factor de proporcionalidad asegura que la suma en las k s es la unidad. En el caso en que Q_0 sea positivo para todos los valores de éstas, podemos identificar la suma con la que aparece en el caso clásico, y tomando M suficientemente grande podemos también computar Q . Sin embargo, en el caso general Q_0 no tiene por que ser positiva para todos los valores de k , con lo que este método no es aplicable. Decimos entonces que el modelo presenta el problema del signo [20]. Existen también otras formas de re-expresar el problema cuántico como uno clásico, susceptible de ser tratado con el método de Monte Carlo; aunque para la mayoría de los problemas, el problema del signo persiste [19].

B. Sistemas cuánticos de espines, bosones y fermiones

En este apéndice exponemos algunos de los problemas más relevantes para la simulación cuántica. En primer lugar, trataremos sistemas de espines cuánticos. Estos extienden los problemas clásicos al ámbito de la Física Cuántica de tal forma que, además de poder tomar los valores clásicos discretos, también se incluyen las superposiciones cuánticas. En segundo lugar consideraremos los problemas en los cuales partículas se pueden mover en la red. Distinguiremos dos tipos de partículas, los bosones y los fermiones, ya que ambos tienen formulaciones distintas en Física Cuántica. Los bosones pueden ocupar el mismo sitio, mientras que dos fermiones no pueden estar en el mismo estado (lo que está conectado con el principio de exclusión de Pauli). También consideraremos problemas que combinan espines, bosones y fermiones, y daremos algunos de los ejemplos más relevantes. Una introducción a la mayoría de los modelos que presentamos aquí se puede encontrar en las referencias [107, 108].

B.1. Sistemas de espines cuánticos

Los problemas cuánticos con sistemas de espines son los más sencillos de formular. Aquí daremos varios ejemplos relevantes de modelos de este tipo. Los más estudiados suelen consistir en espines $1/2$; esto es, en donde la dimensión del espacio de Hilbert $d = 2$. En esta caso es conveniente definir unos ejes de coordenadas y una base ortonormal de estados en este espacio, $|\downarrow\rangle$ y $|\uparrow\rangle$. Éstos corresponden a tener el espín en la dirección $-z$ y z del eje de coordenadas. En caso de que los espines estén asociados a momentos dipolares magnéticos (eg., el espín de un electrón), estos estados corresponden a la dirección de ese momento. En el lenguaje de la información cuántica, cada espín es un qubit y los estados $|0\rangle := |\downarrow\rangle$ y $|1\rangle := |\uparrow\rangle$. También es útil definir los operadores de Pauli,

$$\sigma^x = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \quad (37)$$

$$\sigma^y = i|0\rangle\langle 1| - i|1\rangle\langle 0| \quad (38)$$

$$\sigma^z = |1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0| \quad (39)$$

y $s^\alpha = \frac{1}{2}\sigma^\alpha$ que cumplen las reglas de conmutación del grupo $SU(2)$,

$$[s^\alpha, s^\beta] = i\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma}s^\gamma, \quad (40)$$

en donde $\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma}$ es el tensor de Levi-Civita: $\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} = 0$ si alguno de los índices coincide con otro; $\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} = 1$ si $(\alpha, \beta, \gamma) = (x, y, z)$ o alguna permutación

cíclica de estos índices; en caso contrario, $\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} = -1$. En lo que sigue utilizaremos la notación s_n^α para designar el operador s^α actuando sobre el espín en el vértice v_n .

B.1.1. Ejemplos

El primer ejemplo que consideraremos es el *modelo de Ising* en presencia de un campo transversal. El hamiltoniano en este caso se escribe como

$$H_{\text{Ising}} = \sum_{\langle n,m \rangle} J_{n,m} \sigma_n^z \sigma_m^z + \sum_n B_n \sigma_n^x \quad (41)$$

en donde las sumas se extienden a todos los vértices próximos vecinos, y a las B se les denomina campos magnéticos. Para el caso $B = 0$ este modelo está íntimamente relacionado con el modelo de Ising clásico con $h = 0$. Se puede ver muy fácilmente que las propiedades físicas, tanto en el estado de mínima energía como el de equilibrio térmico, coinciden con las del caso clásico (2). La situación más usual corresponde al modelo de Ising homogéneo, en donde $J_{n,m} = J$ y $B_n = B$. Este modelo se puede resolver exactamente en una dimensión espacial convirtiéndolo en otro de fermiones libres a través de la transformación de Jordan-Wigner [109]. En particular, se pueden determinar fórmulas sencillas para expresar los valores esperados de las funciones locales y de correlación a temperatura arbitraria.

Una generalización del caso anterior lo constituyen los *modelos XXZ* (homogéneos), cuyo Hamiltoniano es

$$H_{\text{XXZ}} = J \sum_{\langle n,m \rangle} (s_n^x s_m^x + s_n^y s_m^y) + J_z \sum_{\langle n,m \rangle} s_n^z s_m^z + B \sum_n s_n^x. \quad (42)$$

En una dimensión espacial este modelo también es exactamente resoluble en términos del Ansatz de Bethe [110]. Para $J_z = 0$ el modelo se llama *XX*, para $J = 0$ obtenemos el modelo de Ising, y para $J_z = J$, el *modelo de Heisenberg*. Este último es especialmente relevante, ya que tiene una simetría global dada por el grupo $SU(2)$. Esto es, dada una representación bidimensional de dicho grupo, u_g con $g \in SU(2)$,

$$u_g^{\otimes N} H u_g^{\dagger \otimes N} = H \quad \forall g. \quad (43)$$

Esta simetría la hereda el estado de Gibbs (11), así como el estado fundamental (en caso de que no haya degeneración).

Los modelos anteriores se pueden generalizar a dimensiones y espines mayores. Por ejemplo, el modelo de Heisenberg lo podemos escribir en general

$$H_{\text{Heis}} = J \sum_{\langle n,m \rangle} (s_n^x s_m^x + s_n^y s_m^y + s_n^z s_m^z) \quad (44)$$

en donde ahora los s_α son matrices $d \times d$ que cumplen las reglas de conmutación (40). En lenguaje más técnico, corresponden a representaciones irreducibles del grupo $SU(2)$ de dimensión d .

Desde el punto de vista físico, estos modelos suelen describir las propiedades microscópicas de materiales magnéticos. Los espines representan momentos magnéticos de los electrones que interactúan los unos con los otros debido a la interacción de intercambio, la dipolar magnética, etc.

En una dimensión espacial y a temperatura cero se conoce muy bien el diagrama de fases de los modelos XXZ en función de J_z/J y B/J . Para campos magnéticos altos, el estado fundamental es ferromagnético, con los espines tendiendo a apuntar en la dirección del campo. Para un intervalo de los valores de los parámetros, existe una región crítica en las que las funciones de correlación decaen siguiendo una ley de potencias en función de la distancia, y a distancias suficientemente grandes existe invariancia de escala (de hecho, las funciones de correlación vienen descritas por una teoría de campos conformes con carga central $c = 1$). En la región complementaria, las correlaciones decaen de manera exponencial. Este decaimiento depende de una longitud, llamada *longitud de correlación*, que diverge cuando nos acercamos a la zona crítica. De hecho, las dos zonas están separadas por una *transición de fase cuántica* [108]. A temperatura finita, todas las correlaciones decaen exponencialmente, y la longitud de correlación depende de la temperatura. La zona del espacio de fases donde la longitud de correlación está dominada por la temperatura (y no por las fluctuaciones cuánticas) se llama de *criticalidad cuántica*. En dimensiones mayores, el diagrama de fase es mucho más rico y desconocido. Para redes cuadradas a temperatura zero se sabe que el modelo de Heisenberg y el XX poseen *order de largo alcance*; esto es, existe una rotura espontánea de simetría de tal forma que el estado fundamental posee funciones de correlación que no decaen a cero. Esto sigue siendo cierto a temperaturas suficientemente pequeñas en dimensiones mayores que dos. Todos estos resultados se pueden obtener utilizando el método de Monte Carlo cuántico, ya que no hay problema de signo. Para redes más sofisticadas, como la de Kagomé, los efectos de frustración hacen que los estados a temperatura cero no rompan ninguna simetría y que sean muy complejos, superposiciones lineales de muchos estados que son difíciles de

describir o calcular. En particular, el método de Monte-Carlo se tropieza con el problema del signo.

B.2. Sistemas de bosones

En este caso, asociamos a cada vértice un espacio de Hilbert de dimensión infinita, $\mathcal{H}_n \cong \mathbb{L}^2(\mathbb{R})$. También definimos operadores creación y aniquilación en cada vértice, a_n , y a_n^\dagger que cumplen las reglas de conmutación canónicas, $[a_n, a_m] := a_n a_m - a_m a_n = 0$ y $[a_n, a_m^\dagger] = \delta_{n,m}$. Estas reglas de conmutación corresponden a operadores bosónicos, y por tanto decimos que tenemos un sistema de este tipo. El operador $N_n = a_n^\dagger a_n$ representa el número de partículas en el vértice v_n . El estado de vacío, $|\Omega\rangle$, cumple

$$a_n |\Omega\rangle = 0 \quad (45)$$

para todo vértice v_n y, por lo tanto, no tiene ninguna partícula; esto es, $N_n |\Omega\rangle = 0$. Podemos generar el espacio de Hilbert total, llamado *espacio de Fock*, $\mathcal{H} = \bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_n$ a través de una base ortonormal generada aplicando los operadores de creación al vacío.

Aunque el espacio de Hilbert tiene dimensión infinita, esto no impone ningún problema, ya que normalmente nos restringimos a un subespacio con un número de partículas fijas; esto es, propio del operador total de número. Para todo estado Ψ en el subespacio,

$$N|\Psi\rangle = \sum_n N_n |\Psi\rangle = N|\Psi\rangle. \quad (46)$$

A veces resulta conveniente dotar a los bosones con otra estructura interna, que puede corresponder a otros grados de libertad de las partículas, como el momento angular o el espín. En ese caso definimos los operadores $a_{n,\sigma}$, en donde σ toma d valores distintos, y que actúan en el vértice v_n . Las reglas de conmutación son las canónicas,

$$[a_{n,\sigma}, a_{m,\mu}] = 0, \quad [a_{n,\sigma}, a_{m,\mu}^\dagger] = \delta_{n,m} \delta_{\sigma,\mu}. \quad (47)$$

El espacio de Fock se puede definir, como antes, a partir del vacío.

B.2.1. Ejemplos

El ejemplo más sencillo de bosones en una red es la llamado *modelo de Bose-Hubbard*. Viene determinado por el hamiltoniano

$$H = -t \sum_{\langle n,m \rangle} a_n^\dagger a_m + \frac{U}{2} \sum_n a_n^{\dagger 2} a_n^2, \quad (48)$$

en donde t se denomina energía de túnel, y U energía de interacción. En efecto, si determinamos el valor esperado del segundo término sólo será no nulo si hay dos o más partículas en el vértice v_n . En tal caso, dará un valor positivo o negativo dependiendo del signo de la constante U , con lo cual describe la repulsión ($U > 0$) o atracción ($U < 0$) entre las partículas. El primer término describe la desaparición (aniquilación) de una partícula en el vértice v_m y su aparición en otro próximo, v_n , con lo cual representa el movimiento de los bosones en la red.

Otros ejemplos más sofisticados son los modelos de Bose-Hubbard con espín, como por ejemplo

$$H = - \sum_{\langle n,m \rangle, \sigma} t_{\sigma} a_{n,\sigma}^{\dagger} a_{m,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \mu} U_{\sigma, \mu} \sum_n a_{n,\sigma}^{\dagger} a_{n,\mu}^{\dagger} a_{n,\mu} a_{n,\sigma}, \quad (49)$$

Por supuesto, se pueden definir modelos en donde las partículas interactúan de manera distinta dependiendo del espín, o que incluso cambian su valor debido a la interacción. También se suelen considerar modelos en los que el movimiento de las partículas depende del espín (y, por ello, t), o éste varía, o con interacciones o movimiento más allá de los próximos vecinos, etc.

Los modelos de Hubbard bosónicos no aparecen de una forma natural en el campo de la Física de la Materia Condensada. Sin embargo, si lo hace en el caso de la Física Atómica, o en descripciones efectivas de otros modelos. Por ejemplo, átomos atrapados en redes ópticas (ver sección 5.2.1) que se mueven a través del efecto túnel de un pozo de potencial a otro próximo, y que interactúan a baja energía (en onda s), vienen descritos por estos modelos.

El modelo de Bose-Hubbard (homogéneo) no presenta el problema del signo, con lo que en equilibrio térmico puede ser resuelto eficientemente con el método de Monte Carlo cuántico. El diagrama de fase se conoce muy bien. A temperatura cero, el estado fundamental se comporta como un superfluido para valores pequeños de U/t , mientras que para valores mayores se comporta como un aislante de Mott (si el número de partículas, M , es conmensurable con el número de vértices, N). Entre los dos comportamientos aparece una transición de fase cuántica. El aislante de Mott puede ser entendido como un estado con escasas fluctuaciones en la densidad: de hecho, en el límite $U/J \rightarrow \infty$, el estado fundamental es un estado producto de la forma (13), con $k_i = M/N \in \mathbb{N}$ constante. El estado fundamental tiene un "gap", del orden de U , y las funciones de correlación decrecen exponencialmente con la distancia. Según nos acercamos a la transición de fase, la longitud de

correlación diverge, y aparece el estado superfluido. En éste, el número de partículas con momento lineal nulo es proporcional a N (o \sqrt{N} en una dimensión). Decimos que el sistema es un *condensado de Bose-Einstein*. Esta condensación persiste a temperaturas finitas en tres dimensiones, hasta una temperatura crítica, T_c , en donde desaparece y el comportamiento es como el de un gas sin interacciones. La condensación de Bose-Einstein viene caracterizada matemáticamente por el hecho de que la matriz $M_{n,m} = \langle a_n^\dagger a_m \rangle$ tiene un autovalor $O(N)$.

En el caso en que las interacciones dependen de los estados internos, el valor de t es complejo y/o dependiente de los vértices de la red, o en redes como la triangular o la kagome, es mucho más complicado obtener el diagrama de fases, ya que ningún método funciona bien en dos o más dimensiones. De hecho, en algunos casos se conoce (o se conjetura) la existencia de fases exóticas, como los líquidos de espín, o los estados con orde topológico.

Otros modelos que se utilizan a menudo son los llamados Gaussianos. En ellos, el hamiltoniano contiene sólo términos lineales y cuadráticos en términos de los operadores creación y aniquilación. Estos modelos se pueden resolver eficientemente, con un esfuerzo computacional que escala polinómicamente con N . La razón es que el estado fundamental y térmico de estos hamiltonianos vienen caracterizados por $O(N^2)$ parámetros (ya que son Gaussianos), y éstos se pueden determinar de una manera sencilla utilizando el principio variacional, que resulta exacto. Además, los estados Gaussianos cumplen las condiciones del teorema de Wick [111], con lo que los valores esperados de todos los observables se pueden expresar en términos de los valores esperados de términos lineales y cuadráticos en los operadores creación y aniquilación.

B.3. Sistemas de fermiones

Los sistemas fermiónicos en redes son similares a los bosónicos. Definimos también los operadores creación y aniquilación, a_n^\dagger y a_n en cada vértice, v_n , con reglas de anticonmutación $[a_n, a_m]_+ := a_n a_m + a_m a_n = 0$ y $[a_n, a_m^\dagger]_+ = \delta_{n,m}$. El espacio de Hilbert se construye a partir del vacío, $|\Omega\rangle$, que cumple (45), aplicando los operadores creación. Decimos, entonces, que el operador a_n^\dagger crea un fermión en el vértice v_n . Como las reglas de anticonmutación implican que $a_n^{\dagger 2} = 0$, sólo podemos crear un solo fermión en cada vértice, lo que está íntimamente relacionado con el principio de exclusión de Pauli. El espacio de Hilbert es pues, finito, y tiene dimensión 2^N (ya que puede haber cero o un fermión en cada vértice). Hay que tener cuidado con la definición de la base del espacio de Hilbert creado de esta forma, ya que si elegimos

un orden distinto de operadores, los estados pueden diferir en un signo. Así, por ejemplo, $a_1^\dagger a_2^\dagger |\Omega\rangle = -a_2^\dagger a_1^\dagger |\Omega\rangle$ debido a las reglas de anticonmutación. Lo más natural es elegir un orden en los vértices, tal y como hemos hecho nosotros, y definir los estados de la base

$$|n_1, \dots, n_N\rangle = a_n^{\dagger n_1} \dots a_N^{\dagger n_N} |\Omega\rangle, \quad (50)$$

en donde $n_k = 0, 1$. De hecho, podemos ahora identificar esta base con una de espines con $d = 2$, lo que nos permite trabajar con espines en vez de con fermiones. Sin embargo, los operadores a_n se transforman en operadores no locales de espines, que actúan de forma no trivial en todos los vértices v_m con $m \leq n$. La transformación entre fermiones y espines se conoce como la *transformación de Jordan-Wigner* [109] y es muy útil para representar fermiones tanto en cálculos numéricos, como en estudios analíticos en una dimensión (ver los ejemplos de espines dados anteriormente).

Como antes, podemos fijar el número de fermiones imponiendo la condición (46), en donde N se define de la misma manera que para los bosones. También podemos tener en cuenta la estructura interna de los fermiones y, en particular, el espín. Para ello definimos los operadores $a_{n,\sigma}$, en donde σ toma d valores distintos, y que actúan en el vértice v_n . Las reglas de conmutación son las mismas que en (47), pero cambiando $[\cdot]$ por $[\cdot]_+$. El espacio de Hilbert se puede definir, como antes, a partir del vacío.

Cabe mencionar también, que todos los observables físicos (medibles) deben de ser pares bajo si transformamos $a_n \rightarrow -a_n$ en todos los vértices debido a la *regla de superselección* de la paridad fermiónica. La razón de esta regla es que si existiese un observable que no fuera cumpliera esta propiedad, es muy fácil diseñar un experimento en el que se puede violar la causalidad, uno de los principios fundamentales de la Física. Como consecuencia de esta regla de superselección, los hamiltonianos fermiónicos sólo pueden contener términos con un número par de operadores creación y aniquilación.

B.3.1. Ejemplos

El caso paradigmático de fermiones en redes viene descrito por el *modelo de Fermi-Hubbard* (o, simplemente, modelo de Hubbard). Describe el movimiento de los electrones, con dos valores del espín, en un sólido. El hamiltoniano es

$$H = -t \sum_{\langle n,m \rangle, \sigma} a_{n,\sigma}^\dagger a_{m,\sigma} + U \sum_n a_{n,\uparrow}^\dagger a_{n,\downarrow}^\dagger a_{n,\downarrow} a_{n,\uparrow}. \quad (51)$$

La red la proporcionan los átomos (iones positivos) que conforman el sólido, y cada vértice representa un orbital del átomo correspondiente. Los electrones se pueden mover de un orbital a otro contiguo, lo que viene caracterizado por el primer término de H , en donde t es la energía asociada a ese movimiento (energía cinética). Cuando dos electrones de espín contrario se encuentran en el mismo orbital, existe una interacción cuya energía es U . El valor de esta cantidad puede ser positivo o negativo. Esta interacción suele ser mediada por los fonones del sólido, ya que la fuerza de Coulomb suele estar apantallada por los iones positivos. El valor de U puede ser positivo o negativo, en cuyo caso denominamos al modelo repulsivo o atractivo.

Existen muchas variaciones del modelo de Hubbard. Aparte de distintas geometrías, se pueden tener interacciones de más largo alcance (o incluso de Coulomb, si esta fuerza no está apantallada), o más orbitales por átomo, lo que resulta en una estructura interna de los operadores a más compleja. La solución del modelo de Hubbard es, en general, muy complicada. Salvo en contadas ocasiones, los modelos de fermiones no pueden ser simulados con métodos de Monte Carlo debido al problema del signo mencionado anteriormente. Para el caso atractivo y dimensiones espaciales mayores que uno, el método Gaussiano da resultados cualitativamente correctos: a temperaturas suficientemente bajas los electrones se aparean formando *pares de Cooper*, uno con momento k y espín \uparrow y el otro con momento $-k$ y espín \downarrow , y estos pares se mueven como en un superfluido, dando lugar al fenómeno de la superconductividad [35]. A temperaturas mayores que una crítica, los pares se rompen y desaparece esta propiedad. Para el caso repulsivo o en una dimensión, el método Gaussiano no funciona. De hecho, en dos dimensiones espaciales el diagrama de fases constituye una de las mayores controversias de la Física Cuántica. La importancia de este caso radica en que se especula que este modelo de Hubbard describe los materiales en los que se observa el fenómeno de la *superconductividad de alta temperatura*, algo que no se puede comprobar ya que no podemos resolver o simular el modelo de ninguna forma. En caso de que esto fuese cierto, podríamos intentar averiguar el origen de este fenómeno extraordinario y, todavía, misterioso [112].

Como en el caso de los sistemas bosónicos, los hamiltonianos cuadráticos en operadores creación y destrucción se pueden resolver de manera eficiente. Debido a la regla de superselección, sin embargo, ahora no pueden existir términos lineales en estos operadores. Tanto el estado fundamental como el de equilibrio térmico son estados Gaussianos, dependientes de $O(N^2)$ parámetros, a los que se les aplica el teorema de Wick [111].

B.4. Sistemas de fermiones y bosones

Algunos sistemas físicos contienen tanto bosones como fermiones. En el caso de materiales, por ejemplo, aparte de los electrones, que son partículas fermiónicas, los bosones pueden ser los fonones que resultan del movimiento de los átomos que forman la red cristalina, o bien fotones que interactúan con los átomos. Sin embargo, el escenario en donde ambos tipos de partículas aparecen de una manera natural (y son necesarios para explicar todos los fenómenos) es el de las *teorías gauge*, que describen las partículas elementales. En ese caso, los fermiones forman la materia y los bosones los campos gauge que median las interacciones. En esta sección revisaremos muy brevemente algunos de los modelos más relevantes. Una buena introducción al campo de las teorías cuánticas de campo y que analiza estos problemas, se encuentra en la referencia [113].

En el escenario más sencillo de la electrodinámica cuántica (QED), los fermiones corresponden a los electrones y sus antipartículas, los positrones, mientras que los bosones se asocian al campo electromagnético. En el caso de la cromodinámica cuántica (QCD), los fermiones son los quarks y antiquarks, mientras que los bosones corresponden al campo de gluones. Estas teorías gauge son teorías cuánticas de campos que están definidas solamente a través de el procedimiento de la renormalización. Una forma concreta de realizar este proceso es considerar una versión discreta de la teoría; esto es, considerar que los bosones y fermiones forman parte de una red en una, dos, o tres dimensiones espaciales (y una temporal). El proceso de renormalización [114] consiste en resolver el problema en una red finita, fijar las constantes de los modelos en términos de cantidades físicas, y luego tomar el límite en el que la constante de la red tiende a cero. Esto hace que los parámetros que aparecen en la teoría (en el Hamiltoniano), varíen durante el proceso de renormalización. En definitiva, las teorías de campos gauge que involucran bosones y fermiones tienen un sentido muy natural en una red como la que estamos considerando.

Aunque las teorías gauge se suelen presentar a través del formalismo de la integral de camino, existen también formulaciones en términos de hamiltonianos, como los que estamos tratando aquí. Kogut y Susskind [115] fueron los primeros en establecer esta teoría en una red a mediados de los años setenta. De acuerdo a su formulación, en una teoría de campos gauge en la red, las partículas fermiónicas están asociadas a los vértices, mientras que las bosónicas a las aristas (ver Figura 7). El hamiltoniano está compuesto de tres términos

$$H_{\text{GT}} = H_{\text{mat}} + H_{\text{cam}} + H_{\text{int}}. \quad (52)$$

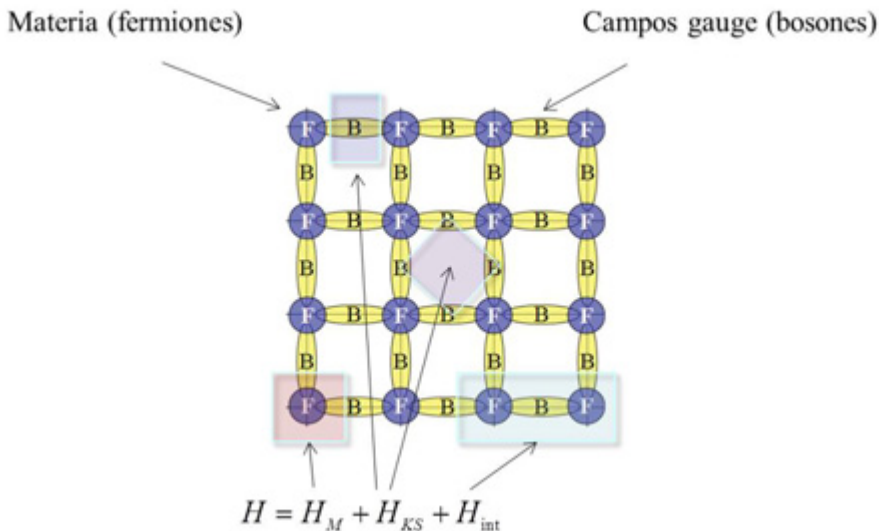


Figura 7: Red de Kogut y Susskind para simular teorías gauge de campos. Los campos de materia (fermiónicos) se encuentran en los vértices, y los gauge (bosónicos) en las aristas. El hamiltoniano consta de tres partes, una que actúa sobre los vértice, otra sobre las aristas, y la otra en ambos.

Aquí, H_{mat} actúa localmente en cada uno de los vértices y describe términos de masa de la materia. H_{cam} tiene dos partes, $H_{\text{cam}} = H_E + H_B$; la primera actúa en cada una de las aristas individualmente, mientras que la segunda lo hace en las aristas correspondientes a cada plaqueta (en dos dimensiones en cada cuadrado y en tres en cada cubo; en una, este término no aparece). En el caso de la QED, estos términos se corresponden con la energía del campo eléctrico y magnético, respectivamente. Finalmente, H_{int} contiene las interacciones entre la materia y los campos gauge.

El hamiltoniano (52) está caracterizado por un grupo de simetrías locales, llamadas *grupo gauge*. Esto es, existe un conjunto de operadores hermiticos, $G_{n,\alpha}$, que actúan sobre los fermiones en el vértice v_n y los bosones que aparecen en las aristas de éste. Estos operadores generan una representación de cierto grupo, G , que depende de la teoría de la que se trate. Además, el hamiltoniano conmuta con todos estos operadores,

$$[G_{n,\alpha}, H_{\text{GT}}] = 0, \quad (53)$$

con lo que G es el grupo de simetría local. Por ejemplo, para QED, $G =$

$U(1)$, mientras que para QCD, $G = SU(3)$. El primero grupo es abeliano (i.e., $g_1 g_2 = g_2 g_1 \forall g_1, g_2 \in G$), mientras que el segundo no lo es. Como consecuencia de (53), si un estado es autoestado de cualquiera de los G_n , lo será durante toda la evolución. Eso significa que debemos fijar un subespacio del espacio de Hilbert, correspondiente al *espacio físico*, en donde la dinámica tiene lugar. Esta selección viene fijada por la ley de Gauss, que se puede expresar como $G_{n,\alpha}|\Psi\rangle = 0$ para todo n y g . En el caso de QED, esta es la ley de Gauss usual que aparece en electrodinámica.

B.4.1. Ejemplos

A continuación mostramos el ejemplo más sencillo de teoría gauge: *QED compacta* en una dimensión espacial o *modelo de Schwinger* [92] en la formulación de Kogut-Susskind. El hamiltoniano viene dado por (en unidades en las que $\hbar = c = 1$)

$$H_{Sch} = -\frac{i}{2a} \sum_n \left(a_n^\dagger e^{i\theta_n} a_{n+1} - a_{n+1}^\dagger e^{-i\theta_n} a_n \right) + m \sum_n (-1)^n a_n^\dagger a_n + \frac{ag^2}{2} \sum_n L_n^2 \quad (54)$$

En esta fórmula, a_n es un operador fermiónico actuando en el vértice v_n , mientras que θ_n y L_n actúan en la arista entre este vértice y el v_{n+1} . Las reglas de conmutación son las correspondientes a un rotor, $[\theta_n, L_n] = i\delta_{n,m}$, en donde el espectro de θ_n es continuo en el intervalo $[0, 2\pi)$, y el de L_n coincide con \mathbb{Z} . De hecho, el primero se puede identificar con el potencial vector ($\theta_n = -aqA_n^1$), mientras que el segundo con el campo eléctrico ($gL_n = E_n$). El nombre de *compacto* proviene del hecho que el espacio de Hilbert está definido sobre un conjunto compacto, y esto hace que el campo eléctrico tome valores enteros, en contraste con lo que ocurre en la formulación usual (no en una red). Por otro lado, en una dimensión espacial no existe campo magnético, ya que el potencial vector tiene sólo dos componentes. En (54), m representa la masa de los electrones y positrones, que se corresponden con los fermiones que ocupan los vértices pares y los huecos (ausencia de fermión) en los impares, respectivamente. El valor de g determina la interacción, y a es la constante de la red que tiene que ser llevada a cero durante el proceso de renormalización.

La interpretación de (54) es muy sencilla. El último término representa la energía eléctrica, proporcional a la suma de E_n^2 . El anterior da la masa en reposo de los electrones y los positrones, ya que si uno de los primeros está presente, o falta uno de los segundos, se añade una energía mc^2 (con la velocidad de la luz $c = 1$). El primer término indica que cada vez que un

fermion pasa de un vértice impar a otro par, tenemos un electron (partícula en el vértice par) y un positrón (hueco en uno impar), además de aumentar en una unidad el campo eléctrico en la arista (causado por el operador $e^{i\theta_n}$). Los generadores de la simetría gauge y responsables de la ley de Gauss son

$$G_n = \left(a_n^\dagger a_n - \frac{1}{2}[1 - (-1)^n] \right) - (L_n - L_{n-1}). \quad (55)$$

La ley de Gauss, $G_n|\Psi\rangle = 0$ nos indica que la diferencia de campo eléctrico entre dos aristas consecutivas es igual a la carga que hay en el vértice intermedio.

El modelo de Schwinger es resoluble en varios límites [92]. También se pueden aproximar los resultados eficientemente utilizando el método de Monte Carlo, o el perturbativo basado en el acoplamiento fuerte [116].

Conclusión

Al final de mi intervención deseo reiterar mi más sincero agradecimiento a los miembros de la Academia por haberme acogido entre ellos. Asimismo, quiero dar mi reconocimiento a mis profesores y colaboradores, con los cuales he aprendido y disfrutado de lo que es hoy en día mi pasión: la investigación. Por último, deseo dar las gracias a mi familia y, en particular, a mis padres, por haberme enseñado, entre otras cosas, que la educación es el mejor legado que se le puede dejar a un hijo.

Referencias

- [1] P.A.M. Dirac, *Principles of Quantum Mechanics*. The Clarendon Press, cuarta edición (1930).
- [2] T. Young, *A Course of Lectures on Natural Philosophy and the Mechanical Arts*, Vol. 1. William Savage. Lecture 39, (1807).
- [3] W. Pauli, Z. Physik **31**, 373 (1925).
- [4] W. Gerlach y O. Stern, Zeitschrift für Physik. **9**, 349 (1922).
- [5] A. Galindo y P. Pascual, *Mecánica Cuántica I y II*, Eudema, Madrid (1989).
- [6] B. Ryden, *Introduction to Cosmology*, Addison Wesley (2003).

- [7] R. Feynman, International Journal of Theoretical Physics **21**, 467 (1982).
- [8] A. Galindo y M. A. Martín-Delgado, Rev. Mod. Phys. **74**, 347 (2002); J.I. Cirac, Revista Española de Física **14**, 48 (2000);
- [9] A. M. Childs y W. van Dam, Rev. Mod. Phys. **82**, 1 (2010).
- [10] T. Monz *et al*, Phys. Rev. Lett. **106**, 130506 (2011).
- [11] J. Kelly *et al*, Nature **519**, 66 (2015).
- [12] W. H. Zurek, Rev. Mod. Phys. **75**, 715 (2003).
- [13] B. M. Terhal, Rev. Mod. Phys. **87**, (2015).
- [14] J. I. Cirac y P. Zoller, Nat. Physics **8**, 264 (2012).
- [15] *Insight issue*, Nat. Physics **8**, No 4 (2012).
- [16] I. Bloch, J. Dalibard y S. Nascimbène , Nat. Physics **8**, 267 (2012).
- [17] R. Blatt y C. F. Roos, Nat. Physics **8**, 277 (2012).
- [18] *Strongly Correlated Systems: Numerical Methods*, Editado por Adolfo Avella y Ferdinando Mancini, Springer Series in Solid-State Sciences **176** (2013).
- [19] M.P. Nightingale y C.J. Umrigar, *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Solids*, Proceedings of the NATO Advanced Study Institute, Kluwer Academic Publishers (1999).
- [20] M. Troyer y U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **94**, 170201 (2005).
- [21] J. I. Cirac, F. Verstraete, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 504004 (2009).
- [22] E. Schrödinger Naturwissenschaften **23**, 807 (1935).
- [23] J. S. Bell, Physics. **1**, 195 (1964).
- [24] A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
- [25] M. A. Nielsen y I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).
- [26] R. Orus, Annals of Physics **349**, 117 (2014).

- [27] R.J. Baxter, *Exactly solved model in statistical mechanics* Academic Press (1982).
- [28] E. Ising, *Zeitschrift für Physik*, **31**, 253 (1925).
- [29] F. Barahona, *J. Phys. A:Math. Gen.* **15**, 3241 (1982).
- [30] S. Arora y B. Barak, *Computational Complexity: A Modern Approach*, Cambridge University Press (2009).
- [31] A. Schrijver, *Theory of Linear and Integer Programming*, John Wiley & Sons (1998).
- [32] N. Metropolis, A.W.Rosenbluth, M.N.Rosenbluth, A.H.Teller y E. Teller, *J. of Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [33] F. Martinelli, *Lectures on Glauber Dynamics for Discrete Spin Models*, *Lecture Notes in Mathematics* **1717**, 93, Springer (2004).
- [34] H. J. Changlani y A. M. Läuchli, *Phys. Rev. B* **91**, 100407 (2015).
- [35] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*. Springer, Tercera Edición (2000).
- [36] P. Blanchard y E. Brüning, *Variational Methods in Mathematical Physics: A Unified Approach*, Springer (1992).
- [37] C. Weedbrook *et al*, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 621 (2012).
- [38] L. P. Pitaevskii y S. Stringari, *Bose Einstein Condensation*, Clarendon Press (2003).
- [39] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M.M. Wolf y J.I. Cirac, *Quant. Inf. And Comp.* **7**, 401 (2007).
- [40] F. Verstraete y J.I. Cirac, *cond-mat/0407066*; *Phys. Rev. A* **70**, 060302(R) (2004).
- [41] I. Markov y Y. Shi, *SIAM Journal on Computing* **38**, 963 (2008); Y. Shi, L.-M. Duan y G. Vidal, *Phys. Rev. A* **74**, 022320 (2006).
- [42] G. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 110501 (2008).
- [43] W. Dür, G. Vidal, y J. I. Cirac, *Phys. Rev. A* **62**, 62314 (2000).

- [44] D. M. Greenberger, M. A. Horne, A. Shimony y A. Zeilinger, en *Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe*, Kluwer Academic, 1989.
- [45] A. Kitaev, Ann. Phys. **303**, 2 (2003).
- [46] N. Schuch, I. Cirac, y D. Pérez-García, Annals of Physics **325**, 2153 (2010).
- [47] M. Levin y X.-G. Wen, Phys.Rev. B **71**, 045110 (2005).
- [48] N. Schuch, D. Poilblanc, J. I. Cirac y David Pérez-García, Phys. Rev. B **86**, 115108 (2012).
- [49] T.B. Wahl, H.-H. Tu, N. Schuch y J.I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **111**, 236805 (2013).
- [50] C. V. Kraus, N. Schuch, F. Verstraete, J. I. Cirac, Phys Rev. A **81**, 052338 (2010).
- [51] J. Eisert, M. Cramer y M. B. Plenio, Rev. Mod. Phys. **82**, 277 (2010).
- [52] P. Calabrese y J. Cardy, J. Stat. Mech. P06002 (2004).
- [53] M.M. Wolf, F. Verstraete, M.B. Hastings y J.I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **100**, 070502 (2008).
- [54] F. Verstraete y J.I. Cirac, Phys. Rev. B **73**, 094423 (2006).
- [55] M. Hastings, J. Stat. Mech. P08024 (2007).
- [56] F. Verstraete, M. M. Wolf, D. Perez-Garcia y J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **96**, 220601 (2006).
- [57] M. B. Hastings, Phys. Rev. B **73**, 085115 (2006).
- [58] A. Molnár, N. Schuch, F. Verstraete y J. I. Cirac, Phys. Rev. B **91**, 045138 (2015).
- [59] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling y B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The art of scientific computing*, Cambridge University Press (1986).
- [60] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [61] S. Rommer y S. Östlund, Phys. Rev. B **55**, 2164 (1997).

- [62] F. Verstraete, D. Porras y J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **93**, 227205 (2004).
- [63] F. Verstraete, J. J. Garcia-Ripoll y J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **93**, 207204 (2004).
- [64] M. Zwolak y G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **93**, 207205 (2004).
- [65] U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
- [66] M. C. Bañuls, K. Cichy, K. Jansen y J. I. Cirac, JHEP **11**, 158 (2013).
- [67] M. C. Bañuls, K. Cichy, J. I. Cirac, K. Jansen y H. Saito, arXiv:1505.00279.
- [68] S. Kühn, E. Zohar, J. I. Cirac y M. C. Bañuls JHEP **07**, 130 (2015).
- [69] S. Trotzky *et al.*, Nat. Phys. **8**, 325 (2012).
- [70] J. H. Bardarson, F. Pollmann y J. E. Moore, Phys. Rev. Lett. **109**, 017202 (2012).
- [71] P. Corboz, arXiv:1508.04003.
- [72] P. Corboz, T. M. Rice y M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **113**, 046402 (2014).
- [73] D. Poilblanc, N. Schuch, D. Pérez-García y J. I. Cirac, Phys. Rev. B **86**, 014404 (2012).
- [74] F. Verstraete y J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **104**, 190405 (2010).
- [75] J. I. Cirac y G. Sierra, Phys. Rev. B **81**, 104431 (2010).
- [76] J. Jordan, R. Orus, G. Vidal, F. Verstraete y J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **101**, 250602 (2008).
- [77] S. Lloyd, Science **273**, 5278 (1996).
- [78] T. Kadowaki y H. Nishimori, Phys. Rev. E **58**, 5355 (1998).
- [79] K. Temme, T. J. Osborne, K. G. Vollbrecht, D. Poulin y F. Verstraete, Nature **471**, 87 (2011).
- [80] Y. Ge, A. Molnar y J.I. Cirac, arxiv:1508.00570.

- [81] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, J. Lapan, A. Lundgren, y D. Preda, *Science* **292**, 472 (2001).
- [82] D. Jaksh, C. Bruder, J.I. Cirac, C. Gardiner y P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).
- [83] I. Bloch, J. Dalibard y W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).
- [84] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch e I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [85] W. Hofstetter, J.I. Cirac, P. Zoller, E. Demler y M.D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 220407, (2002).
- [86] L.-M. Duan, E. Demler y M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 090402 (2003).
- [87] J. J. Garcia-Ripoll, M. A. Martin-Delgado y J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 250405, (2004).
- [88] J. I. Cirac, P. Maraner y J. K. Pachos, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 190403 (2010),
- [89] E. Zohar, J. I. Cirac y B. Reznik, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 125302 (2012).
- [90] E. Zohar, J. I. Cirac y B. Reznik, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 055302 (2013).
- [91] E. Zohar, J. I. Cirac y B. Reznik, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 125304 (2013).
- [92] J. Schwinger, *Phys. Rev.* **128**, 2425 (1962).
- [93] D. Porras y J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 207901, (2004).
- [94] D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe y D. Wineland, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 281 (2003).
- [95] D. Porras y J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 250501 (2006).
- [96] D. Porras y J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 263602, (2004).
- [97] A. Friedenauer, H. Schmitz, J. T. Glueckert, D. Porras y T. Schätz, *Nature Phys.* **4**, 757 (2008).
- [98] J. T. Barreiro *et al.*, *Nature* **470**, 486 (2011).
- [99] C. Senko *et al.*, *Phys. Rev. X* **5**, 021026 (2015).

- [100] J. I. Cirac y P. Zoller, *Nature* **404**, 579 (2000).
- [101] J. W. *et al.*, *Nature* **484**, 489492 (2012).
- [102] C. Weitenberg *et al.*, *Nature* **471**, 319 (2011).
- [103] W. S. Bakr, J. I. Gillen, A. Peng, S. Foelling y M. Greiner, *Nature* **462**, 74 (2009).
- [104] M. Gullans, T. G. Tiecke, D. E. Chang, J. Feist, J. D. Thompson, J. I. Cirac, P. Zoller y M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 235309 (2012).
- [105] A. González-Tudela, C.-L. Hung, D. E. Chang, J. I. Cirac y H. J. Kimble, *Nat. Photonics* **9**, 320-325 (2015).
- [106] O. Romero-Isart, C. Navau, A. Sanchez, P. Zoller y J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 145304 (2013).
- [107] A. Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism*, Springer (1998).
- [108] S. Sachdev, *Quantum phase transitions*, Cambridge University Press, segunda edición (2011).
- [109] P. Jordan y E. Wigner, *Zeitschrift für Physik* **47**, 631 (1928).
- [110] H Bethe, *Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei* **71**, 205 (1931).
- [111] G.C. Wick, *Phys. Rev.* **80**, 268 (1950).
- [112] P. A. Lee, N. Nagaosa, y X. G. Wen, *Rev. Mod. Phys* **78**, 17 (2006).
- [113] S. Weinberg, *The quantum theory of fields*, Cambridge University Press, (2005).
- [114] K. G. Wilson, *Phys. Rev. D* **10**, 2445 (1974)
- [115] J. Kogut y L. Susskind, *Phys. Rev. D* **11**, 395 (1975).
- [116] C. J. Hamer, J. Kogut, D. P. Crewther y M. M. Mazzolini, *Nuclear Physics B* **208**, 413 (1982).

CONTESTACIÓN
DEL

ECMO. SR. D. ALBERTO GALINDO TIXAIRE

Excmo. Sr. Presidente,
Sras. y Sres. Académicos,
Señoras y Señores,

Es para mí un gran honor haber sido designado por nuestro Presidente para dar la bienvenida institucional al Profesor D. Juan Ignacio Cirac Sasturáin, y responder a su discurso.

Laudatio

Conozco al nuevo Académico desde los años 86 y 87, época en que asistía como alumno a mis clases, primero de Mecánica Cuántica I y II, y luego de Gravitación y Cosmología. Volví a saber de él una década más tarde, cuando su nombre resonaba internacionalmente gracias a su seminal trabajo con Peter Zoller acerca de la implementación cuántica de la puerta lógica CNOT y su influjo potenciador sobre la computación cuántica.¹ Escuchemos cómo lo narra esto, en su Conferencia Nobel, el testigo David Wineland, quien con Serge Laroche compartía en 2012 el Nobel en Física por sus espectaculares experimentos con átomos y fotones, respectivamente, bajo control individual.²

“En la Conferencia Internacional sobre Física Atómica celebrada en Boulder, Colorado, en el año 1994, Artur Ekert dio una conferencia en la que exponía las ideas básicas de la computación cuántica, un tema nuevo para la mayor parte de los asistentes. Esta conferencia estimuló y llevó a Ignacio Cirac y Peter Zoller, allí presentes, y ambos muy familiarizados con las posibilidades (y limitaciones) de los experimentos con trampas de iones, a proponer un esquema básico de un computador cuántico basado en iones.

¹Cirac, J.I. & Zoller, P.: *Quantum computations with cold trapped ions*, Phys. Rev. Lett. **74**, 4091-4094 (1995).

²Wineland, D.J.: *Nobel Lecture: Superposition, entanglement, and raising Schrödinger's cat*, Rev. Mod. Phys. **85**, 1103-1114 (2013).

Este trabajo, pionero y fértil, fue la primera propuesta completa de cómo construir un procesador de información cuántica”.

Ignacio Cirac es hoy una autoridad mundial en su campo, y la importancia de su labor investigadora ha sido reconocida y galardonada con multitud de premios (BBVA Fronteras del Conocimiento, Príncipe de Asturias,...), sobresaliendo, entre todos, el Premio Wolf en 2013, compartido con Zoller, “por sus contribuciones pioneras en información cuántica, óptica cuántica y física de gases cuánticos”. (Otros tres españoles lo han recibido también, pero en el campo de las Artes: Antoni Tàpies, Eduardo Chillida, y Plácido Domingo.) Este premio, concedido por la Fundación Wolf en Israel, es considerado, al menos en Física, como antesala del Nobel; desde su comienzo en 1978 hasta la fecha, se han concedido 31 de estos premios, y entre los galardonados hay 14 que luego han recibido el Nobel. Creo que con esto queda claro el impresionante palmarés del Prof. Cirac; insistir más podría herir su natural modestia de gran científico.

Pero a estos méritos acompañan otros no menores; desde su puesto de Director de la División Teórica del Instituto Max-Planck de Óptica Cuántica (Max-Planck-Institut für Quantenoptik) en Garching, Alemania, Cirac ha impartido un espectacular impulso a la información cuántica, y en especial, ha catapultado a multitud de brillantes jóvenes investigadores entre los que figuran no pocos españoles. Nunca dice no a cualquier llamada o requerimiento para dar conferencias, figurar en comités consultivos, participar en actos conmemorativos, o apoyar acciones a favor de la ciencia o de los científicos.

Así es Ignacio Cirac; un brillante investigador, y un hombre generoso y humilde.

Su relación con la Real Academia de Ciencias se remonta al año 2002, cuando fue elegido Académico Correspondiente Nacional; su íntimo colaborador y amigo el Profesor Peter Zoller lo sería como Académico Correspondiente Extranjero en el año 2009. Finalmente, en 2012 Cirac fue elegido Académico de Número de nuestra institución, tomando posesión de su cargo en el día de hoy.

Reflexiones

El discurso de ingreso que acabamos de escuchar es una impecable y autorizada lección sobre la importancia de la simulación cuántica y de sus logros hasta el presente. Por mi parte, me limitaré a unas modestas reflexiones generales sobre la física, desde la que conocí como estudiante de matemáticas (lustró 1952/57), hasta la que me ocupa y divierte hoy como octogenario.

En aquellos años de estudios universitarios las dos grandes revoluciones epistémicas del siglo XX, las relatividades y los quanta, estaban tristemente ausentes de los planes de estudios. Esta importante carencia tuvimos que suplirla individualmente de forma autodidacta, con los defectos que esto entrañaba y que tardarían años en corregirse. Solo cuando hube de enseñar esas materias a otros caí en la cuenta de mis errores y ausencias; corregidos como pude, ahora creo convivir en relativa armonía con dichas disciplinas. Y digo relativa, porque soy consciente de que persisten problemas abiertos en ambas que esperan solución así como de amplios vacíos en mi conocimiento.

La “Termo” de siempre

Hubo, entre todas, una disciplina que se me atragantó. La termodinámica, esa parcela del conocimiento físico sobre la que Sommerfeld, en anecdótico relato, confesaba que la primera vez que la estudias, no entiendes nada, a la segunda ya la entiendes, salvo un par de cosillas, y a la tercera sabes que no la entiendes, pero para entonces estás tan acostumbrado a ello, que no te importa. La termodinámica está al lado de las demás áreas físicas, aunque un tanto distante, viendo como aquellas vienen y se van, crecen y marchitan, y acudiendo en su auxilio cuando es requerida. La termodinámica no pretende explicar el mundo, sino enseñarnos a aprovechar mejor sus recursos.

Salida de los fogones del gran ingeniero Carnot,³⁴ y motor científico de la revolución industrial, a la termodinámica acudimos incluso para leer la historia del cosmos en las diminutas irregularidades observadas en la distribución de temperaturas del baño de fotones que permea el universo a la temperatura media actual de 2.726 K. Ciencia del fuego, o ciencia del calor; así empezó a

³Carnot, S.: RÉFLEXIONS SUR LA PUISSANCE MOTRICE DU FEU ET SUR LES MACHINES PROPRES À DÉVELOPPER CETTE PUISSANCE, Paris, Bachelier, 1824.

⁴Feynman, R.P. , Leighton, R.B., Sands, M.: THE FEYNMAN LECTURES ON PHYSICS, Vol. I, p. 44-2, Addison-Wesley, Reading, 1963. Es destacable que Feynman, en sus famosas LECCIONES DE FÍSICA, al ensalzar la obra de Sadi Carnot como una de los pocos casos en que la ingeniería ha contribuido de modo fundamental al desarrollo de la física, añade como ejemplo similar la aportación de otro ingeniero, Claude Shannon, con su teoría de la información. Ya en 1963 reconocía y señalaba Feynman la conexión entre ambas contribuciones.

ser llamada. Pero la palabra “calor” es a menudo impropia- mente usada. Se acepta que el calor, como el trabajo, no es un tipo de energía, sino un proceso de transferencia de energía (no en vano es una forma diferencial inexacta); no es ninguna sustancia, ni como energía reside en parte alguna. Algunos aconsejan no utilizar la palabra calor como sustantivo; a lo sumo, hablar del proceso de calentar o enfriar cuando se transfiere energía de un cuerpo caliente a otro frío por razón de su diferencia de temperaturas.

¿Y qué diremos de la entropía? Esa magnitud irreal, espiritual, pero que mueve el mundo, como escribió Thirring. La palabra entropía fue introducida explícitamente en la física termodinámica por Clausius en 1865, para denotar la función de estado cuya existencia había inferido del estudio del ciclo de Carnot. Quiso darle un nombre de origen clásico, para que fuese robusto ante el cambio de lenguas. Y eligió el nombre griego ἐντροπή (“transformación”), próximo al de energía (ἐνέργεια).

Pero, ¿sabe ya alguien qué es la entropía? Porque cuando von Neumann le recomendó su uso a Shannon, allá a finales de la década de los 40, como sinónimo de la información perdida o información que falta, le dio dos razones: una, que en la mecánica estadística se empleaba ya en ese sentido, y segunda, y más importante, porque “como nadie sabe qué es realmente la entropía, llevarás ventaja en cualquier discusión”. Incluso el gran Maxwell, siguiendo a Tait, confundió entropía con energía “disponible” en las primeras tres ediciones de su *THEORY OF HEAT* (1871, 1872, 1872). La lectura de trabajos de Gibbs llevó a Maxwell en 1873 a darse cuenta de su error, y a partir de la cuarta edición de su libro en 1875 definió ya la entropía *à la* Clausius, tras reconocer humildemente su error.⁵

¿Es la entropía una medida del desorden? Si por desorden de un colectivo de cosas entendemos disposiciones de las mismas que nos resultan extrañas, poco placenteras o familiares, entonces la entropía no es necesariamente una medida de ese desorden, aunque de tal “mito persistente” seríamos legión los científicos que alguna vez hemos caído irreflexivamente en esa trampa de palabras; pues si bien es una afirmación cierta en muchos casos, falsa es en otros. Por ejemplo, la cristalización del Helio-3 líquido a temperaturas inferiores a 0.3 K requiere aporte de calor. Para ser cuidadosos, podríamos decir algo así: la entropía mide la dispersión en el reparto de energía entre los

⁵Maxwell, J.C.: *THEORY OF HEAT*, 4th Edition, London, Longmans, Green & Co, 1875. En nota al pie de la página 189, escribe: “In former editions of this book the meaning of the term Entropy, as introduced by Clausius, was erroneously stated to be that part of the energy which cannot be converted into work. The book then proceeded to use the term as equivalent to the available energy; thus introducing great confusion into the language of thermodynamics. In this edition I have endeavoured to use the word Entropy according to its original definition by Clausius.”

distintos microestados de un macroestado determinado a una temperatura dada; o si no, la entropía mide la falta de información sobre el microestado de un sistema. La siguiente definición de desorden es inigualable, y adecuada su medida como definición verbal de la entropía; se debe a Feynman, quien con su habitual genio/ingenio, define y mide “técnicamente” el desorden como el número de maneras de disponer los interiores sin que cambie el aspecto exterior.⁶

Tanto el crecimiento de la entropía, como la expansión del Universo, han marcado la flecha del tiempo. Así resumía Clausius en 1865 las dos leyes fundamentales de la termodinámica:⁷

Die Energie der Welt ist konstant.

Die Entropie der Welt strebt einen Maximum zu.

Cambiando por “sistema aislado” la palabra “mundo” o “universo” evitarían las afirmaciones de Clausius muchas críticas justificadas, dada la dificultad, por no decir imposibilidad, de definir la energía o entropía del cosmos. Se trata, en mi opinión, de una licencia literaria a la que se recurre a veces para resaltar la importancia del mensaje.

La fe en la monotonía de la entropía llevó a Eddington a exclamar:⁸

If someone points out to you that your pet theory of the universe is in disagreement with Maxwell's equations—then so much the worse for Maxwell's equations. If it is found to be contradicted by observation—well these experimentalists do bungle things sometimes. But if your theory is found to be against the second law of thermodynamics I can give you no hope; there is nothing for it but to collapse in deepest humiliation.

⁶Feynman, R.P., Leighton, R.B., Sands, M.: loc. cit. Vol. I, p. 46-7. Se lee: “We measure ‘disorder’ by the number of ways that the insides can be arranged, so that from the outside it looks the same.”

⁷Clausius, R.: *Über verschiedene für die Anwendung bequeme Formen der Hauptgleichungen der mechanischen Wärmetheorie*, Annalen der Physik und Chemie **125**, 353-400 (1865). Novena y última memoria en la magnífica traducción por J. Tyndall de la obra de R. Clausius: *THE MECHANICAL THEORY OF HEAT – WITH ITS APPLICATIONS TO THE STEAM ENGINE AND TO PHYSICAL PROPERTIES OF BODIES*, London, John van Voorst, 1867.

⁸Eddington, A.S.: *The Running-Down of the Universe*, Ch. IV, *THE NATURE OF THE PHYSICAL WORLD*, McMillan, (1928), libro que recoge las conferencias Gifford dadas por A.S.E. en los años 1926 y 1927. También puede leerse en ese capítulo esta sugerente y pictórica afirmación sobre los límites naturales: “Shuffling is the only thing which Nature cannot undo.”

Maxwell recurrió a un ser (δαίμων o demonio lo llamó Lord Kelvin) capaz de manipular moléculas e invertir la flecha entrópica. Esto escribía Maxwell en 1878:⁹

The truth of the second law is therefore a statistical, not a mathematical, truth, for it depends on the fact that the bodies we deal with consist of millions of molecules, and that we never can get a hold of a single molecule.

Casi un siglo después Bennett, apoyándose en el principio de Landauer,¹⁰ exorcizó a este diablillo mostrando que el borrado de la información almacenada en su memoria para proceder a un nuevo ciclo generaba entropía suficiente con la que compensar la aparente disminución conseguida con su actuación previa.¹¹ De nuevo prevalecía la segunda ley. Menos mal, porque ahora los físicos sí saben ya cómo coger moléculas individuales, y podrían actuar de δαίμονες.

Recordemos brevemente las leyes de la termodinámica clásica, y su aparición en la historia,^{12,13} antes de presentar sus cambios actuales.

- La ley 0: si dos cuerpos A, B están en equilibrio térmico entre sí, y también lo están B, C , entonces A y C también lo estarán entre sí.

Esta propiedad de transitividad, junto a las obvias de reflexividad y reciprocidad, permite, como es sabido, introducir el concepto de temperatura (abstracta) como propiedad común compartida por todos los cuerpos en equilibrio térmico mutuo. Los físicos han convertido este concepto en una magnitud medible.^{14,15}

⁹Maxwell, J.C.: *Tait's 'Thermodynamics' (I)*, Nature, Jan. 31, 257-259 (1878).

¹⁰Landauer, R.: *Irreversibility and heat generation in the computing process*, IBM J. Res. Develop. **5**, 183-191 (1961).

¹¹Bennett, C.H.: *The Thermodynamics of Computation – a Review*, Int. J. Theor. Phys. **21**, 905-940 (1982).

¹²Sandler, S.I., Woodcock, L.V.: *Historical Observations on Laws of Thermodynamics*, J. Chem. Eng. Data **55**, 4485-4490 (2010).

¹³Fernández-Pineda, C., Velasco, S.: *Comment on "Historical Observations on Laws of Thermodynamics"*, J. Chem. Eng. Data **57**, 1347-1347 (2012).

¹⁴Aquí, cuando hablemos de temperatura T , supondremos siempre la absoluta.

¹⁵En presencia de campos de largo alcance como los gravitatorios hay que tener ciertas precauciones teóricas. Ver, p.e., H.M. Haggard and C. Rovelli: *Death and resurrection of the zeroth principle of thermodynamics*, Phys. Rev. D **87** (2013) no.8, 084001, arXiv:1302.0724 [gr-qc]. La temperatura de un cuerpo en equilibrio termodinámico no tiene, en principio, por qué ser uniforme cuando hay presente un campo gravitatorio estático; de hecho, satisface la relación $T(x)\sqrt{g_{00}(x)} = \text{const.}$, donde $g_{00}(x) \approx (1 + 2\phi(x)/c^2)$, siendo $\phi(\cdot)$ es el potencial gravitatorio, nulo en el infinito. (¡Cómo no!, ya Einstein había llegado

La ley 0, con tal nombre, apareció por vez primera en una nota de Fowler¹⁶ publicada en la revista *Nature* en 1936, y formalmente en un libro de Fowler y Guggenheim sobre Termodinámica Estadística (1939), aunque su esencia puede remontarse a 1786, con Black.

- La ley 1: expresa la conservación de la energía afirmando que el cambio ΔE de energía interna de un sistema cerrado en un proceso termodinámico es igual al calor Q que se le ha transferido desde el exterior durante ese proceso más el trabajo W que sobre el sistema se ha realizado. En fórmula:

$$\Delta E = Q + W.$$

Si el proceso experimentado por el sistema cerrado es cuasi-estático, podemos escribir la relación diferencial

$$dE = \delta Q + \delta W (:= \sum F_i dX_i + \dots).$$

donde δW es la 1-forma diferencial explicitada del trabajo como suma de los trabajos elementales $F_i dX_i$ ejercidos desde el exterior, con fuerzas generalizadas F_i , sobre las distintas variables extensivas X_i mecánicas, eléctricas, magnéticas,... macroscópicas del sistema, y δQ , como diferencia $dE - \delta W$, es también una 1-forma.

La primera formulación de la ley 1 de la termodinámica en la forma habitual se debe a Rankine en 1855, aunque la ley de conservación de la energía se remonta a Mayer (1843) y a Joule (1843), en este orden, y fue presentada formalmente por Helmholtz en 1847.

- La ley 2: existe una función de estado aditiva, la entropía S , que en cualquier proceso termodinámico de un sistema aislado es monótona creciente. Esto es:

$$S_{t_2} \geq S_{t_1} \quad \text{si } t_2 > t_1,$$

tendiendo $S(t)$ a alcanzar un máximo.

en 1912 a conclusión similar, expresada en la forma $T(x)c(x) = \text{const.}$, donde $c(x)$ es la velocidad local de la luz en el sistema de referencia estático. Ver A. Einstein: *Zur Theorie des statischen Gravitationsfeldes*, Ann. der Physik **38**, 443-458 (1912). Ver también R.C. Tolman, *Thermodynamics and Relativity*, The Tenth Josiah Willard Gibbs Lecture, 1932.) Para campos ordinarios, como el terrestre, los efectos prácticos de esa variación de la temperatura con el campo gravitatorio son ignorables.

¹⁶Fowler, R.H.: *Heat a Mode of Motion: A Modern Version*, Nature **137**, 554-556 (1935). Ver Fernández Pineda, C., Velasco, S.: *loc. cit.*

Si dos estados 1 y 2 de equilibrio de un sistema cerrado están unidos por un proceso arbitrario γ_{12} cualquiera, su diferencia de entropías satisface

$$S_2 - S_1 \geq \int_{\gamma_{12}} \frac{\delta^* Q}{T^*};$$

donde la igualdad se alcanza si y solo si dicho proceso es reversible. Por T^* indicamos las temperaturas de los diferentes focos términos con los que el sistema intercambia calor en cuantías $\delta^* Q$.

La ley 2 fue enunciada por vez primera por Clausius en 1865.

Las leyes 1 y 2 permiten una generalización conducente a la siguiente e importante relación diferencial de Gibbs, en su forma energética, entre dos estados de equilibrio infinitamente próximos de un sistema abierto:

$$dE = T dS + \sum_i F_i dX_i + \sum_i \mu_i dN_i,$$

donde el último sumatorio es la 1-forma que representa el cambio de energía consecuencia de las variaciones dN_i de los números de partículas de los distintos componentes del sistema, acompañado el i -ésimo componente de su potencial químico μ_i .

- La ley 3: es imposible alcanzar $T = 0$, esto es, el cero de temperatura absoluta, en un número finito de procesos físicos de duración finita.

La controvertida ley 3 se debe a Nernst en 1906 en la forma de su teorema del calor; en 1910 Sackur y Planck, de modo independiente, elevaron este teorema a ley y principio (o convenio), respectivamente. Planck extendió el teorema, concluyendo que la entropía de cualquier sustancia cristalina pura tiende a una constante universal cuando la temperatura se acerca a 0 K; tomando esa constante como origen de entropías, la formulación de Planck para esta ley se resume en: $S \rightarrow 0$ cuando $T \rightarrow 0$. No es universal, por su limitación a ciertas sustancias. Nernst, en 1912, propuso sustituir su teorema por el principio de inaccesibilidad del cero de temperaturas absolutas en un número finito de pasos físicos y en tiempo finito. Einstein terció en estas discusiones, contribuyendo a clarificar el problema con su certera crítica. Einstein sostenía que las afirmaciones de esos teoremas no podían ser demostradas dentro del propio sistema de la termodinámica clásica, sino que requerían los nuevos conceptos e hipótesis de la entonces incipiente teoría cuántica. No siempre fueron recibidos de buen grado los argumentos de Einstein, lle-

gando Nernst a dirigirse a él de modo un tanto impertinente (*ziemlich frech*).^{17,18}

Muchos piensan que la ley 3 no debiera estar entre los principios básicos de la termodinámica. No introduce conceptos ni comportamientos nuevos (como hacen las leyes 0, 1, y 2 con la temperatura, la energía y la entropía). Sin embargo, al afirmar, en alguna de sus versiones, que la entropía se mantiene finita cuando $T \rightarrow 0$, es heraldo de los cuanta (Einstein, con su genial visión, se lo anticipó a Nerst, como indicamos antes), pues con la física cuántica es elemental colegir que a muy bajas temperaturas la entropía debe comportarse como el logaritmo de la multiplicidad, por lo general finita, del estado fundamental del sistema en cuestión. O si se prefiere, para que S se mantenga finita en las proximidades de $T = 0$, las capacidades caloríficas deben tender a 0, y esto exige, como nos enseñó para los sólidos Einstein primero (1907) y luego más correctamente Debye (1912), el mandato de los principios cuánticos.

La termodinámica cuántica

La incursión investigadora en el dominio microscópico ha obligado a replantearse la termodinámica; por ejemplo, uno de los resultados de la termodinámica considerados como más universales, el espectro de la radiación de un cuerpo negro, falla inevitablemente cuando el tamaño de los sistemas es comparable a la longitud de onda de Wien, y su análisis requiere el recurso de una termodinámica de fluctuaciones. Los últimos años han visto un renacimiento de la termodinámica para extenderla a sistemas de pocas partículas, y en particular, de una sola. En tales condiciones, los principios cuánticos hacen acto de presencia, y con la teoría de la información ofrecen un marco teórico conjunto para analizar los intercambios energéticos a escala nanoscópica.

Toda una termodinámica cuántica y de la información está creciendo a buena marcha, acompañada de experimentos cuya explicación sirve de reto y guía. La termodinámica cuántica pretende nada menos que argumentar la emergencia de la termodinámica clásica, y de sus leyes, a través de esa mecánica cuántica a cuyo nacimiento tan decisivamente contribuyó.

¹⁷Kox, A.J.: *Confusion and clarification: Albert Einstein and Walther Nernst's heat theorem, 1911-1916*, Studies in history and philosophy of modern physics, **37**, 101-114 (2005).

¹⁸Klimenko, A.Y.: *Teaching the third law of thermodynamics*, The Open Thermodynamics Journal, **6**, 1-14 (2012).

Resulta muy sorprendente que sistemas de pocas partículas puedan mostrar comportamiento termodinámico, alcanzando estados de equilibrio en tiempo finito. Esta cuestión ha sido objeto de mucha atención teórica en los últimos años; si para análoga pregunta en la física clásica convencional se recurría a la ergodicidad o al mezclado, en el marco cuántico se ha propuesto la tipicidad como la esencia del estado termodinámico de equilibrio: casi todos los estados puros del sistema “universo” (subsistema pequeño más un ambiente con muchos más grados de libertad) son localmente (es decir, con respecto al subsistema) indistinguibles del estado mezcla equiprobable o totalmente caótico del universo. En especial, para una energía total dada, esto implica la canonicidad gibbsiana del estado del sistema a la temperatura asociada. Y todo ello, por un curioso e importante lema de 1919 del probabilista Paul Pierre Lévy referente a la concentración de una medida al crecer la dimensión;¹⁹ por ejemplo, casi todo el volumen de una esfera S^N de alta dimensión se halla en una estrecha faja en torno a uno cualquiera de sus meridianos. Es la razón por la que casi todos los estados de un sistema cuántico multipartito están fuertemente entrelazados. En el fondo, la mencionada tipicidad es consecuencia del intenso entrelazamiento que se desarrolla entre el pequeño subsistema y el gran ambiente. Uno pensaría ingenuamente que el entrelazamiento se destruye al crecer la temperatura; no es necesariamente así, y existen testigos termodinámicos de su presencia incluso en sistemas macroscópicos.²⁰

Pero, ¿basta con la tipicidad para la termalización? Evidentemente no, el argumento anterior es cinemático, estático, y no está garantizado que la evolución dinámica preserve la tipicidad. ¿Por qué, sin embargo, la dinámica no impide que los estados tiendan a un estado en el que las propiedades medibles prácticamente no cambian con el tiempo? Así es; y por ejemplo, bajo la condición genérica de que el espectro del hamiltoniano de evolución total no presente brechas degeneradas (aunque niveles degenerados sí son admisibles) y que la dimensión hilbertiana del ambiente sea mucho mayor que la del pequeño sistema de nuestra atención, se demuestra que cualquier estado inicial evoluciona de modo que llega a ser prácticamente indistinguible de su promedio temporal.^{21,22} Contrastan estos logros con la dificultad

¹⁹Milman, V.D., Schechtman, G.: ASYMPTOTIC THEORY OF FINITE-DIMENSIONAL NORMED SPACES, LNM 1200, Appendix IV, Springer Verlag, 1986.

²⁰Amico, L., Fazio, R., Osterloh, A., Vedral, V.: *Entanglement in many-body systems*, Rev. Mod. Phys. **80**, 517-576 (2008).

²¹Linden, N., Popescu, S., Short, A.J., Winter, A.: *Quantum mechanical evolution towards thermal equilibrium*, Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics **79**, No. 6, 061103, 06.2009.

²²Goold, J., Huber, M., Riera, A., del Rio, L., Skrzypczyk, P.: *The role of quantum*

matemática que presenta el problema análogo en la física clásica. No es totalmente inesperado; recordemos que la complejidad del problema clásico de tres o más cuerpos supera a la de su pariente cuántico, pues el principio de indeterminación suaviza las colisiones.

¿Y qué les pasa a las leyes de la termodinámica clásica al descender al dominio cuántico?

En el marco cuántico, las leyes de la termodinámica clásica se adaptan a las nuevas bases conceptuales. La ley 0 (transitividad del equilibrio) se transforma en la hipótesis de que, dado un sistema aislado con hamiltoniano dado, existe una familia de estados de equilibrio termodinámico, parametrizados por la temperatura, tales que no es posible extraer de cualquier conjunto isoterma de ellos ningún trabajo (estos estados son los estados canónicos de Gibbs).²³

La ley 1, el principio de conservación de la energía, se mantiene con igual formulación, especificando que la variación de la energía (interna) se reparte como el calor recibido más el trabajo experimentado; este segundo es controlable y medible a través de la variación de los parámetros de que depende el hamiltoniano, y el segundo generalmente escapa de nuestra capacidad de control y conocimiento pues depende de la variación temporal del estado cuántico. Y dada la vinculación del calor con la entropía, debemos aceptar la naturaleza de ésta como nuestra falta de información sobre el estado microscópico del sistema.

En cuanto a la famosa ley 2, en la termodinámica cuántica no hay “una” ley 2, sino “muchas” leyes 2. Y no es la entropía la función monótona central, sino unas energías libres. Se sabe que la transición térmica de un estado ρ a otro ρ' de un sistema de Hamiltoniano H , con el que ambos conmutan, es posible si y solo si el estado inicial termo–mayora al estado final.²⁴ A veces esa transición no es posible y hay que echar mano de un catalizador cuántico auxiliar que la facilite, un sistema ancila o siervo que, al terminar el ciclo, debe, en principio, volver a su estado κ de origen ($\kappa \otimes \rho \rightarrow \kappa \otimes \rho'$). En ese caso, y en la misma suposición de que los estados ρ y ρ' , a la temperatura T de un baño térmico, sean diagonales en bloque con la energía, esto es, ambos satisfagan $[H, \rho] = [H, \rho'] = 0$, se ha demostrado²⁵ que la condición necesaria y suficiente para que alguna transición catalítica $\kappa \otimes \rho \rightarrow \kappa \otimes \rho'$ sea posible

information in thermodynamics – a topical review, J. Phys. A: Math. Theor. **49**, 143001 (2016).

²³Brandão, F.G.S.L., Horodecki, M., Ng, N.H.Y., Oppenheim, J., Wehner, S.: *The second laws of quantum thermodynamics*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **112**, 3275-3279 (2015).

²⁴Horodecki, M., Oppenheim, J.: *Fundamental limitations for quantum and nano thermodynamics*. Nat. Commun. **4**, 2059 (2013).

²⁵Brandão, F.G.S.L., *et al.*: *loc. cit.*

es que todas las “energías libres” de una familia continua

$$F_\alpha(\rho, \rho_\beta) := \beta^{-1}[D_\alpha(\rho||\rho_\beta) - \log Z_\beta],$$

donde $D_\alpha(\rho||\rho_\beta)$ denotan las divergencias Rényi de exponente α , y

$$\beta := (k_B T)^{-1}, \rho_\beta := e^{-\beta H} / Z_\beta, Z_\beta := \text{tr } e^{-\beta H},$$

sean monótonas decrecientes:

$$F_\alpha(\rho, \rho_\beta) \geq F_\alpha(\rho', \rho_\beta), \quad \forall \alpha \in \mathbf{R}.$$

Si se admite además el auxilio de un qubit ancila en estado puro, a devolver intacto, podemos restringir las condiciones anteriores a la familia $\alpha \geq 0$. Para sistemas macroscópicos que no estén altamente correlacionados, todas estas energías libres confluyen asintóticamente en $F_1(\rho, \rho_\beta)$, que es la clásica energía libre de Helmholtz

$$F(\rho) := \langle E(\rho) \rangle - k_B T S(\rho), \langle E(\rho) \rangle := \text{tr}(\rho H), S(\rho) := -\text{tr}(\rho \log \rho).$$

Cuando los estados no conmutan con el hamiltoniano, las divergencias Rényi presentan ambigüedad; con las opciones

$$\begin{aligned} \tilde{D}_\alpha(\rho||\rho_\beta) &:= \frac{\text{sgn } \alpha}{\alpha-1} \log \text{tr}(\rho^\alpha \rho_\beta^{1-\alpha}), \\ \tilde{F}_\alpha(\rho, \rho_\beta) &:= \beta^{-1}[\tilde{D}_\alpha(\rho||\rho_\beta) - \log Z_\beta], \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \hat{D}_\alpha(\rho||\rho_\beta) &:= \frac{1}{\alpha-1} \log \text{tr}((\rho_\beta^{(1-\alpha)/2\alpha} \rho \rho_\beta^{(1-\alpha)/2\alpha})^\alpha), \\ \hat{F}_\alpha(\rho, \rho_\beta) &:= \beta^{-1}[\hat{D}_\alpha(\rho||\rho_\beta) - \log Z_\beta], \end{aligned}$$

se obtienen las siguientes monotonías necesarias (pero no suficientes) para que la transición catalítica de ρ a ρ' sea posible:

$$\begin{aligned} \hat{F}_\alpha(\rho, \rho_\beta) &\geq \hat{F}_\alpha(\rho', \rho_\beta), \quad \forall \alpha \geq \frac{1}{2}, \\ \hat{F}_\alpha(\rho_\beta, \rho) &\geq \hat{F}_\alpha(\rho_\beta, \rho'), \quad \forall \alpha \in [\frac{1}{2}, 1], \\ \tilde{F}_\alpha(\rho, \rho_\beta) &\geq \tilde{F}_\alpha(\rho', \rho_\beta), \quad \forall \alpha \in [0, 2]. \end{aligned}$$

Finalmente, la polémica ley 3. Un siglo después de su aparición en escena, se ha presentado una demostración del teorema de inaccesibilidad a partir de primeros principios.²⁶ Se acota inferiormente la temperatura alcanzable a través de una potencia negativa del tiempo utilizado para ello. Es un complemento valioso a la información dada por las leyes 1 y 2; éstas nos dicen qué transformaciones termodinámicas son posibles, y la ley 3 nos orienta sobre la duración de dichos procesos.

²⁶Masanes, L., Oppenheim, J.: *A derivation (and quantification) of the third law of thermodynamics*, arXiv:1412.3828v3 [quant-ph] 8 Jun 2015.

La AN-termodinámica

La teoría de la gravitación einsteiniana, que hace unos meses cumplió su primer centenario, alberga, como todos sabemos, unas criaturas sorprendentes: los agujeros negros (ANs). Son, por un lado, objetos sumamente elementales y simples, caracterizados en su estado estacionario por unos escasos parámetros (masa, cargas, momento angular); carecen de otros “pelos”. Pero, por otro lado, son los entes físicos más complejos que existen, pues su entropía supera, en muchos órdenes de magnitud, a la de otros cuerpos de similar masa, sugiriendo con ello una enorme complejidad interior a la que su horizonte de sucesos nos impide acceder desde el exterior. Sus propiedades dinámicas se plasman en cuatro leyes formalmente análogas a las cuatro leyes de la termodinámica. Esas leyes de la AN-dinámica, conocidas en su conjunto desde 1972, son:²⁷

- Ley 0: la gravedad superficial²⁸ producida por un AN estacionario es igual en todos los puntos de su horizonte de sucesos.^{29,30}
- Ley 1: dos AN estacionarios axisimétricos y cargados, de parámetros M, J, Q infinitamente próximos, cumplen la relación (en unidades geometrizadas $G_N = c = k_B = \hbar = 1$):

$$dM = \frac{1}{8\pi} \kappa dA + \Omega_h dJ + \Phi_h dQ,$$

donde M, A, J y Q son la masa, área del horizonte (de sucesos), momento angular y carga eléctrica de esos ANs, y κ, Ω_h y Φ_h la gravedad sobre el horizonte, la velocidad angular de éste y su potencial eléctrico, debidamente definidos.^{31,32}

- Ley 2: bajo cualquier proceso clásico, el área del horizonte de sucesos es monótona creciente con el tiempo

$$dA \geq 0 \quad \text{si } t \nearrow,$$

²⁷Bardeen, J.M., Carter, B., Hawking, S.W.: *The Four Laws of Black Hole Mechanics*, Commun. Math. Phys. **31**, 161-170 (1973). Hawking, S.W., Ellis, G.F.R.: *THE LARGE SCALE STRUCTURE OF SPACE-TIME*, Cambridge University Press 1973.

²⁸Por tal se entiende la aceleración, justo por encima del horizonte, de una partícula con momento angular nulo, medida desde el infinito.

²⁹Bardeen, J.M., Carter, B., Hawking, S.W.: *loc. cit.*

³⁰Carter, B.: *Black Hole Equilibrium States*, in C. DeWitt, B.S. DeWitt, eds., *BLACK HOLES*, 57-214, Gordon and Breach, New York, 1973.

³¹Bardeen, J.M., Carter, B., Hawking, S.W.: *loc. cit.*

³²Wald, R.M.: *The First Law of Black Hole Mechanics*, in *DIRECTIONS IN GENERAL RELATIVITY*, Proceedings of the 1993 International Symposium, Maryland: Papers in Honor of Charles Misner, Volume 1, pp. 358-366, Cambridge Univ. Press 1993.

y si varios agujeros negros se fusionan, el área del horizonte de sucesos del agujero negro resultante supera a la suma de las áreas individuales.^{33,34}

- Ley 3: es imposible conseguir reducir a 0 la gravedad superficial κ sobre el horizonte de sucesos de un AN en un número finito de procesos.³⁵

Los ANs, como sumideros de información y por tanto de entropía, han obligado a generalizar la segunda ley de la termodinámica: en un sistema termodinámico clásico que incluya agujeros negros, es la entropía total, suma de la entropía de estos y la entropía del exterior, la que es monótona creciente.

Pero se plantea un problema, conocido como “paradoja de la pérdida de información” (que todavía no ha encontrado una respuesta que satisfaga a la mayoría de expertos): supongamos que el AN proviene del colapso de materia en un estado cuántico puro; el efecto de su evaporación Hawking es devolver al exterior radiación en estado mezcla (espectro de cuerpo negro). Esto parece ir en contra la unitariedad de la evolución cuántica; digo parece, porque no es claro, ya que quizás la puridad se ha perdido porque se ha tomado trazas sobre el horizonte. Muy recientemente (enero 2016) Hawking, Perry y Strominger han propuesto un mecanismo que podría salvaguardar la información: según estos autores, los ANs tienen “pelos” blandos (gravitones y fotones de energía cero sobre el horizonte), que en la frontera del infinito futuro del mismo codifican holográficamente el estado de cada partícula capturada por el AN.³⁶ Es prudente esperar.

³³Christodoulou, D.: *Reversible and Irreversible Transformations in Black-Hole Physics*, Phys. Rev. Lett. **25**, 1596-1597 (1970); Christodoulou, D., Ruffini, R.: *Reversible Transformations of a Charged Black Hole*, Phys. Rev. D **4**, 3552-3555 (1971).

³⁴Hawking, S.W.: *Gravitational Radiation from Colliding Black Holes*, Phys. Rev. Lett. **26**, 1344-1346 (1971); *Black Holes in General Relativity*, Commun. math. Phys. **25**, 152-166 (1972).

³⁵Israel, W.: *Third Law of Black-Hole Dynamics: A Formulation and Proof*, Phys. Rev. Lett. **57**, 397-399 (1986).

³⁶Hawking, S.W., Perry, M.J., Strominger, A.: *Soft Hair on Black Holes*, arXiv: 1601.00921.

La entropía de los ANs

En 1972 Bekenstein asignó por primera vez entropía a un AN,³⁷ como respuesta a la pregunta que le planteó Wheeler, su director de tesis:^{38,39} ¿qué ocurre si arrojas tu taza de té a un AN que pasa por tu lado? Estimó el joven Bekenstein que el AN no solo engordaba ligeramente, sino que su entropía aumentaba de forma proporcional al área de su horizonte. Esta conclusión fue criticada y desechada por Hawking, que compartía entonces la opinión generalizada de que las aparentes similitudes entre la termodinámica y los agujeros negros eran meras casualidades, sin conexión alguna con la física cuántica. Irónicamente, al poco tiempo (1974) Hawking conseguía una tímida unión de la relatividad general y la mecánica cuántica y demostraba que los ANs estacionarios emiten radiación con un espectro térmico de cuerpo negro, como si estuvieran a una temperatura $T = \kappa/2\pi$, siendo κ su gravedad en el horizonte.⁴⁰ Con este central hallazgo, la comparación de las leyes 1 de la termodinámica clásica y de los ANs sugiere de inmediato que la entropía de estos últimos viene dada por la fórmula de Bekenstein-Hawking

$$S = \frac{A}{4}.$$

Curiosamente, el sencillo factor $\frac{1}{4}$ de proporcionalidad no depende del tipo de AN o constructo negro (Schwarzschild, Kerr, cuerda, brana, . . .), ni de la dimensión del espacio/tiempo. La entropía dada por la fórmula anterior

³⁷Bekenstein, J.D.: *Black holes and the second law*, Lettere al Nuovo Cimento **4**, 737-740 (1972); *Black holes and entropy*, Physical Review D **7**, 2333-2346 (1973).

³⁸Así cuenta Wheeler en su libro *A JOURNEY INTO GRAVITY AND SPACETIME*, Scientific American Library, W.H. Freeman & Co., New York, 1990, su diálogo con Jacob Bekenstein: "One afternoon in 1970 Bekenstein –then a graduate student– and I were discussing black-hole physics in my office in Princeton's Jadwin Hall. I told him the concern I always feel when a hot cup of tea exchanges heat energy with a cold cup of tea. By allowing that transfer of heat I do not alter the energy of the universe, but I do increase its microscopic disorder, its information loss, its entropy. The entropy of the world always increases in an irreversible process like that. "*The consequence of my crime, Jacob, echo down to the end of time,*" I noted. "*But if a black hole swims by, and I drop the teacups into it, I conceal from all the world the evidence of my crime. How remarkable!*" Bekenstein, a man of deep integrity, takes the lawfulness of creation as a matter of utmost seriousness. Several months later, he came back with a remarkable idea. "*You don't destroy entropy when you drop those teacups into the black hole. The black hole already has entropy and you only increase it!*" Bekenstein went on to explain that the surface area of a black hole is not only analogous to entropy, it is entropy, and the surface gravity of a black hole (measured, for example, by the downward acceleration of a rock as it crosses the horizon) is not only analogous to temperature, it is temperature. A black hole is not totally cold!..."

³⁹Bekenstein, J.D.: *Black-hole thermodynamics*, Physics Today, 24-31 (Jan. 1980).

⁴⁰Hawking, S.W.: *Black hole explosions?* Nature **248**, 30-31 (1974).

le asigna valores enormes si se comparan, para objetos astrofísicos, con los correspondientes a materia ordinaria; la razón estriba en que la entropía de esta última es esencialmente proporcional al número N de partículas constituyentes o de grados de libertad, y por tanto a la masa, mientras que la de un AN crece con N^2 , pues el área A (de un AN Schwarzschild) es proporcional al cuadrado del radio del horizonte, y por tanto al cuadrado de la masa del AN, es decir, al cuadrado del número de partículas que ha debido engullir para integrar su masa. Por ejemplo, la entropía de un solo AN supermasivo, como puede ser el que alberga nuestra galaxia en su núcleo ($4,3 \times 10^6$ masas solares), con un valor de $2 \times 10^{90} k_B$, es comparable a la entropía del resto (fotones, neutrinos, materia oscura, material interestelar e intergaláctico, y estrellas) del Universo visible.

La pregunta inmediata es, como dice Maldacena en su tesis doctoral:⁴¹ ¿cuáles son los grados de libertad que “cuenta” la entropía de Hawking-Bekenstein? Es decir, cómo se justifica, al estilo de la mecánica estadística, esto es, *à la* Boltzmann, la anterior expresión para la entropía: ¿es efectivamente $A/4$ el logaritmo del número de “microestados” del AN compatibles con los valores macroscópicos de éste? ¿Se sabe dar razón de ese fabuloso número $10^{10^{77}}$ de microestados que según la fórmula de Bekenstein-Hawking son compatibles con el macroestado de un AN estacionario de masa estelar? Conviene recordar que en la física estadística ordinaria el cálculo de la entropía de un sistema tan simple como un gas ideal exige la discretización que solo la física cuántica ofrece, y que se reduce a que hay un solo estado por partícula (salvo degeneración de espín) en cada volumen $(2\pi\hbar)^3$ del espacio fase. Otro tanto ocurre con los ANs, donde S involucra directamente las tres constantes c, \hbar, G_N ($:= G_N^{(4)}$) básicas de la física (tener en cuenta que

$$S = k_B c^3 A / (4 G_N \hbar) = k_B A / (4 \ell_P^2), \quad \ell_P := \sqrt{G_N \hbar / c^3},$$

tras reintroducir por un instante las constantes que para simplificar las fórmulas hemos tomado iguales a 1), por lo que su cálculo solo es posible dentro de una teoría cuántica, en mayor o menor grado, de la gravitación.⁴²

La más ambiciosa teoría cuántica de la gravitación de que disponemos actualmente es la teoría de supercuerdas; en este marco Strominger y Vafa consiguieron en 1996 contar los estados cuánticos posibles para ciertos agujeros negros extremales y supersimétricos (agujeros extremales, saturados Bogomolnyi-Prasad-Sommerfield o BPS, y por tanto estables) en 1+4 dimen-

⁴¹Maldacena, J.M.: *Black Holes in String Theory*, Ph.D. thesis, hep-th/9607235.

⁴²Denotamos por $G_N^{(D)}$ la constante de la gravitación en un espacio-tiempo de dimensión D . Se sabe que $G_N^{(D)} = G_N^{(4)} V_c^{(D-4)}$, donde $V_c^{(D-4)}$ es el volumen del espacio $(D-4)$ -dimensional de compactación.

siones, con carga y masa determinadas, corroborando espectacularmente con dicho conteo la relación exacta entropía-área.⁴³ Los constituyentes últimos de estos ANs vistos desde la teoría de supercuerdas son cuerdas y D-branas (branas de tipo Dirichlet), fuertemente acopladas. Disminuyendo la constante de acoplo gravitacional puede conseguirse un régimen de acoplo débil, en el que el conteo de estados cuánticos compatibles con la carga y la masa del AN es posible. La supersimetría remanente en este caso extremal en (1+4)D protege de correcciones cuánticas a este cómputo y lo mantiene invariable hasta el límite de acoplo fuerte, como el exigido por los ANs reales.

Se ha extendido el recuento de estados microscópicos en el límite débil a otros agujeros negros extremales o cuasi-extremales en otras dimensiones, en particular, en la ordinaria 1+3.^{44,45}

Otra propuesta de cuantificación de la gravedad, como la teoría de lazos, también ha abordado esta cuestión, y consigue explicar la proporcionalidad entre entropía y área del horizonte, pero no el factor concreto de $\frac{1}{4}$. Lo mismo ocurre con otros muchos intentos. En cierto modo, la termodinámica de los ANs se ha convertido en banco de prueba (similar, diríamos con Maldacena, a lo que representó el “átomo de hidrógeno” en el primer cuarto del siglo XX) para los diversos ensayos hacia una esperada teoría cuántica de la gravitación que sea aceptada por la mayoría de la comunidad científica.

En su evaporación Hawking, los ANs pierden energía y entropía; pero la ley segunda generalizada (LSG) que antes enunciamos garantiza que la entropía total (del AN más la exterior) crece.⁴⁶ Abundan los argumentos

⁴³Strominger, A., Vafa, C.: *Microscopic Origin of the Bekenstein-Hawking Entropy*, Phys. Lett. B **379**, 99-104 (1996).

⁴⁴Maldacena, J.M.: *loc.cit.*; Maldacena, J.M., Strominger, A.: *Statistical entropy of four-dimensional extremal black holes*, Phys. Rev. Lett. **77**, 428-429 (1996).

⁴⁵Por ejemplo, un AN tipo Reissner-Nordström (RN) extremal, en nuestro espacio-tiempo (1+3)D, admite diversas modelizaciones microscópicas en teoría de cuerdas en 10D, dependientes de la compactificación adoptada para la reducción dimensional de 10D a 4D. Según una de ellas (ver Maldacena y Maldacena-Strominger, *loc.cit.*), un AN de tipo RN extremal estaría microscópicamente formado por sendos números (enteros) N_6 de D6-branas, N_5 de 5-branas solitónicas y N_2 de D2-branas, enrollando sendos toros $\mathbf{T}^6 = S'^1 \times \mathbf{T}^4 \times S^1$, $S'^1 \times \mathbf{T}^4$, \mathbf{T}^4 de compactificación de \mathbf{R}^{10} a $\mathbf{T}^6 \times \mathbf{R}^4$, y de N unidades de momento Kaluza-Klein en la dirección de la coordenada que se compactifica en S^1 . Cada una de esas branas y cada unidad de momento KK tienen número de enrollamiento igual a 1. En función de los enteros anteriores el área del horizonte de este AN es $A = 8\pi\sqrt{N_6 N_5 N_2 N}$. Por otro lado, la degeneración D del estado fundamental del AN tiene un comportamiento asintótico para grandes números que, según una familiar fórmula de Cardy, es $D \sim \exp(2\pi\sqrt{N_6 N_5 N_2 N})$; por tanto, la entropía estadística del AN extremal Reissner-Nordström con esta elección concreta de interiores cuánticos es $S = \log D \sim 2\pi\sqrt{N_6 N_5 N_2 N}$, por lo que $S = A/4$.

⁴⁶Bekenstein, J.D.: *Generalized second law of thermodynamics in black-hole physics*,

parciales en apoyo de esta LSG, aunque no se conoce ninguna demostración suficientemente general de la misma.

La estrecha conexión termodinámica-gravitación no acaba con lo anterior. No me resisto a citar aquí otros inesperados y sorprendentes puntos de contacto entre ambas teorías. Por ejemplo, de las leyes de los ANs (con el factor universal $1/4$ para la entropía en función del área) pueden deducirse las propias ecuaciones de la gravitación que Einstein nos ofreció el 25 de noviembre de 1915, con el término de constante cosmológica que añadiría en 1917: basta hacer uso de la temperatura de Unruh asociada a un observador acelerado, de la ecuación de Raychaudhuri para la desviación geodésica en un espacio-tiempo pseudoriemanniano, y del calor como energía que fluye a través del horizonte Rindler local.⁴⁷ El horizonte, con su característica de ocultar información, impide conocer el destino posterior de la energía que lo cruza.

Dualidad holográfica

Resulta singular el protagonismo de la termodinámica; no escapa de su influencia ni siquiera algo tan íntimo a la física como es el propio espacio-tiempo, ese escenario o arena en que ocurren las cosas en algún sitio y en algún momento; ese marco que Newton introduce sin definir, pues es, dice en sus PRINCIPIA, de todos conocido. En los últimos años hemos visto una explosión de publicaciones anunciando el fin del espacio-tiempo como concepto primitivo y su posible emergencia secundaria a través de la nueva visión holográfica del mundo proclamada en la década de los 90 por 't Hooft y Susskind, con la conjetura de que el universo es un holograma cuya descripción básica yace en su frontera.⁴⁸

La correspondencia AdS/CFT, alias conjetura de Maldacena (noviembre 1997),⁴⁹ alias dualidad gravedad/gauge, alias dualidad volumen/frontera,

Phys. Rev. D **9**, 3292-3200 (1974).

⁴⁷Jacobson, T.: *Thermodynamics of Spacetime: The Einstein Equation of State*, Physical Review Letters **75**, 1260-1263 (1995).

⁴⁸'t Hooft, G.: *Dimensional Reduction in Quantum Gravity*, Essay dedicated to Abdus Salam, Utrecht preprint THU-93/26 (gr-qc/9310026); id. *Black holes and the dimensionality of space-time*, in Proceedings of the Symposium "The Oskar Klein Centenary", 19-21 Sept. 1994, Stockholm, Sweden. Ed. U. Lindström, World Scientific 1995, p. 122.

Susskind, L., Thorlacius, L., Uglum, J.: *The stretched horizon and black hole complementarity*, Phys. Rev. D **48**, 3743-3761 (1993); Susskind, L.: *The world as a hologram*, Journal of Mathematical Physics **36** (11): 6377-6371 (1995).

⁴⁹Maldacena, J.M.: *The large N limit of superconformal field theories and supergravity*, Adv. Theor. Math. Phys. **2**, 231-252, 1998, hep-th/9711200; Gubser, S., Klebanov, I., Polyakov, A.: *Gauge theory correlators from non-critical string theory*, Physics Letters B

alias... , ha propiciado un espectacular y entusiasta impulso al proyecto holográfico. Dicha correspondencia afirma, originariamente, que la gravedad cuántica dada por la teoría IIB de supercuerdas en un universo 10D asintóticamente de la forma $AdS_5 \times S^5$, donde el primer factor es un espacio-tiempo o universo 5D de tipo anti-de Sitter (curvatura negativa constante), es equivalente a una teoría de campos Yang-Mills conformes, con $\mathcal{N} = 4$ supersimetrías, definida sobre la frontera 4D de AdS_5 . Es obligado señalar que tal correspondencia, todavía por demostrar de modo completo y riguroso, pero que goza de numerosos respaldos parciales, tiene la importante propiedad de ser dual en el sentido de asociar regímenes de acoplo débil/fuerte en un espacio con regímenes de acoplo fuerte/débil en el otro espacio. Su ofrecimiento de resultados en situaciones no perturbativas a través de la dualidad fuerte \leftrightarrow débil ha llevado a una actividad febril en la aplicación de una dualidad operacional, simplemente conjeturada, a todos los campos, sin excepción, de la física; y ahí tenemos a físicos de altas energías, de materia condensada, de hidrodinámica,... interesados en los ANs de variadas dimensiones, en las D-branas,..., buscando respuestas a interrogantes que diez años atrás ni siquiera soñaban que fuesen calculables de algún modo.

La correspondencia de Maldacena invita a pensar que tal vez la gravedad y nuestra visión tridimensional del espacio de cada día sean meras ilusiones holográficas, con origen en una existencia físicamente equivalente, carente de gravedad y codificada en las dos dimensiones espaciales de la lejana frontera del universo.⁵⁰

Cuesta aceptar, de entrada, que dos teorías aparentemente tan dispares y que viven en ambientes de dimensiones distintas puedan resultar equivalentes. ¿Acaso la gravedad reclama una dimensión extra? A lo mejor: suponiendo que el gravitón estuviese compuesto de dos mesones vectoriales gauge (como la teoría de representaciones del grupo de Poincaré hace posible), un teorema de Weinberg-Witten impediría su existencia; por tanto el gravitón no puede compartir como emergente su hábitat con los bosones vectoriales gauge que lo prohijan, y se abre una nueva dimensión macroscópica para darle cobijo. Esta dimensión debía estar oculta en el espacio de partida; se propone que sea la escala de energías, pues las supersimetrías obligan a la constante de acoplo Yang-Mills a no moverse al crecer la energía.⁵¹

Fruto colateral de esta euforia digno de citarse es una sorprendente, ambiciosa y provocadora contribución de uno de los físico/matemáticos gemelos holandeses Verlinde, en la que responsabiliza a la termodinámica de casi todo;

428, 105-114 (1998); Witten, E.: *Anti-de Sitter space and holography*, Adv. Theor. Math. Phys. **2**, 253-291 (1998).

⁵⁰Maldacena, J.M.: *The illusion of gravity*, Scientific American **293** (5), 56-63 (2005).

⁵¹Horowitz, G.T., Polchinski, J.: 2006 *Gauge/gravity duality*, arXiv:gr-qc/0602037.

no solo de la gravitación universal, que presenta como una fuerza entrópica, generada por el gradiente de entropía, sino también del propio espacio-tiempo, de la inercia, y de las leyes newtonianas de la mecánica.⁵²

Es hora de terminar mi intervención. Hemos podido apreciar, espero, que la vieja termodinámica se ha vestido de gala, y comparte mesa y mantel con lo más florido de la física actual. Ya tengo tajo para algún tiempo si he de familiarizarme con todo esto.

Recepción

Mientras, demos nuestra más calurosa acogida a Juan Ignacio Cirac Sas-turáin. Va a ser un bastión fundamental de nuestra Academia, ahora y en la futura historia. No solo entra con él uno de los más valiosos exponentes de la ciencia actual; también su juventud y su enorme prestigio nos van a estimular para hacer que nuestra Institución abra más sus puertas al talento científico joven que bulle en nuestra sociedad.

¡Sé, Ignacio, bienvenido a esta Real Academia!

⁵²Verlinde, E.P.: *On the Origin of Gravity and the Laws of Newton*, JHEP **04**, 1-26 (2011), arXiv:1001.0785 [hep-th].