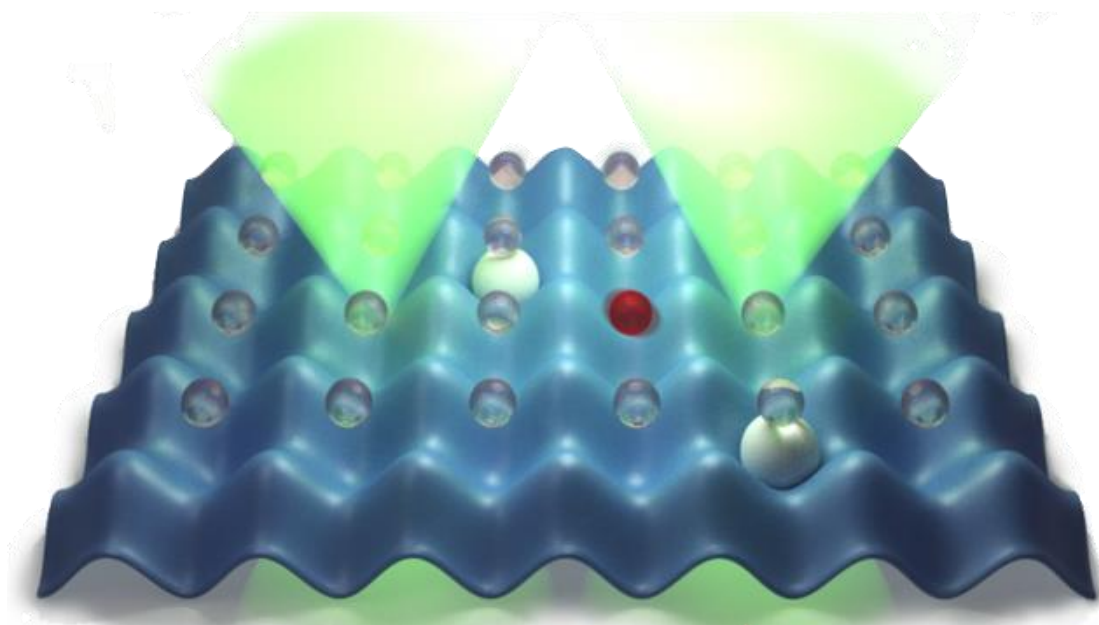


Madrid, jueves 10 de octubre de 2019

La simulación cuántica analógica de problemas de química es posible

- El estudio, con participación del CSIC a través de la Plataforma de Tecnologías Cuánticas, ha sido publicado en la revista 'Nature'.
- Los resultados podrían ayudar en un futuro a desarrollar herramientas más eficientes para el diseño molecular
- Estas mejoras podrían dar lugar, a largo plazo, al diseño de nuevos fármacos y fertilizantes con mejores capacidades, entre otras aplicaciones



Visión artística de la propuesta: átomos red óptica./ J. Argüello-Luengo

Un estudio con participación del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) ha propuesto por primera vez un simulador cuántico analógico para resolver problemas de química. Los resultados del estudio, [publicados en la revista *Nature*](#), podrían ayudar a estudiar problemas moleculares y mejorar las herramientas para su descripción eficiente. Estas mejoras podrían dar lugar en el largo plazo al diseño de nuevos fármacos y fertilizantes con mejores capacidades, entre otras aplicaciones. Este trabajo se enmarca dentro de los esfuerzos de las nuevas Plataformas Tecnológicas impulsadas desde el CSIC, concreto de la Plataforma de Tecnologías Cuánticas.

Las moléculas son los elementos básicos de toda la materia conocida. Su comportamiento viene principalmente determinado por lo que se conoce como estructura electrónica molecular, que es como se distribuyen los electrones en la molécula debido a su atracción con los núcleos y repulsión entre ellos.

A pesar de conocer todas las reglas sobre cómo los electrones y núcleos interactúan, resolver este problema de manera exacta hoy en día es extremadamente difícil. La principal dificultad es que, debido a las leyes de la mecánica cuántica, la complejidad computacional del problema crece exponencialmente con el tamaño de las moléculas. Eso hace que solo podamos resolver de manera exacta moléculas pequeñas.

“Encontrar formas eficientes y precisas de resolver este tipo de problemas para moléculas más complejas es uno de los principales retos hoy en día en química cuántica, ya que abriría las puertas a mejoras en el diseño molecular. Esto podría tener impacto no solo fundamental, sino en el largo plazo también en la industria, por ejemplo, ayudando a encontrar nuevos fármacos o fertilizantes con funcionalidades mejoradas”, explica el investigador **Alejandro González Tudela**, del [Instituto de Física Fundamental del CSIC](#).

Paradigma de Feynmann

Tradicionalmente, la forma de tratar estos problemas ha sido reducir la complejidad del problema usando aproximaciones que permitieran resolver estos problemas en ordenadores potentes. Sin embargo, con los últimos avances en el control de sistemas cuánticos ha cogido fuerza un nuevo paradigma, propuesto por el físico Richard Feynmann, que consiste en usar sistemas cuánticos para simular estos problemas.

“Esta idea, conocida como simulación cuántica, se puede implementar de dos maneras: la digital que se basa en usar ordenadores cuánticos programables, como el IBMQ, con el que el CSIC ha suscrito recientemente un acuerdo, o la analógica, en la que se diseñan las interacciones de un sistema cuántico para que se comporte como el sistema concreto que queremos simular. La digital es más versátil, pues permitiría resolver mayor tipo de problemas, pero está actualmente muy limitada en tamaño y precisión. La analógica es, en principio, más robusta al ruido y permite sistemas mayores, lo que ya ha dado lugar a resultados muy espectaculares en problemas de materia condensada”, añade González Tudela.

“En el campo de la química cuántica, sin embargo, todos los esfuerzos se han centrado hasta ahora en la búsqueda de algoritmos eficientes para ordenadores cuánticos,

principalmente porque no se conocían sistemas que pudieran dar lugar a interacciones de largo alcance como las que se necesitan en los problemas de química. En nuestro trabajo proponemos por primera vez un simulador cuántico analógico que puede hacer frente a problemas de química”, continúa el investigador.

Funcionamiento del simulador

En concreto, el trabajo propone emplear átomos fríos atrapados con láseres en vacío para simular de manera analógica la estructura electrónica de moléculas complejas. Para ello, los investigadores proponen usar átomos fermiónicos, a modo de electrones, que van saltando alrededor de una red tridimensional simulando el movimiento de los electrones.

La interacción atractiva con los núcleos se obtiene usando unos potenciales ópticos localizados con la forma adecuada, de manera que la dinámica sea exactamente igual a la inducida por los núcleos en la molécula. La clave de la propuesta, sin embargo, es cómo transformar las interacciones locales que aparecen en estos sistemas en una interacción repulsiva de largo alcance entre los electrones simulados, tal y como ocurre en moléculas.

“Para ello proponemos usar un *átomo auxiliar* que viaje más rápido que los otros, y que bajo ciertas condiciones sea capaz de mediar una interacción efectiva entre los átomos fermiónicos. Para extraer la información de esta simulación, bastaría con medir *in-situ* en el experimento con técnicas bien establecidas. Puesto que nuestro sistema puede ser controlado y analizado en tiempo real, se puede obtener información que mediante los métodos tradicionales sería muy difícil de conseguir”, concluye Alejandro González Tudela.

Javier Argüello-Luengo, Alejandro González-Tudela, Tao Shi, Peter Zoller, and J. Ignacio Cirac. Analog quantum chemistry simulation. *Nature*. DOI: [10.1038/s41586-019-1614-4](https://doi.org/10.1038/s41586-019-1614-4)

Marta García Gonzalo / CSIC Comunicación