

Computación cuántica con moléculas magnéticas

Guillem Aromí, Alejandro Gaita-Ariño y Fernando Luis

No es un secreto que vivimos en un mundo condicionado por una enorme capacidad de adquirir y procesar información, ni que estos avances han sido posibles, en gran parte, gracias a la miniaturización continua de dispositivos electrónicos. De seguir al ritmo actual, los componentes de estos dispositivos alcanzarán en unos años el tamaño de moléculas. Su comportamiento físico se verá entonces afectado, en mayor o menor medida, por efectos cuánticos. La información cuántica trata de convertir esta amenaza, que se cierne sobre nuestro desarrollo tecnológico, en una oportunidad.

Un ordenador cuántico, cuando exista, será una máquina que procese información codificada en los estados cuánticos de unidades llamadas “qubits”. La diferencia radical con un ordenador convencional, o clásico, es que dichos qubits no sólo pueden encontrarse en los estados ‘0’ o ‘1’ sino también en cualquier superposición de la forma $a \times '0' + b \times '1'$ permitida por la física cuántica. La idea de aplicar las leyes cuánticas al campo de la información fue propuesta por Richard Feynman con el fin de simplificar la simulación de sistemas físicos [1]. Años más tarde, se demostró que la aplicación de estados superposición reduce la complejidad de algunos tipos de problemas computacionales considerados “difíciles”. Entre ellos se incluyen la factorización de números primos [2], base de la criptografía y la búsqueda en grandes bases de datos [3].

El potencial de la computación cuántica en aspectos relacionados con la simulación de fármacos y materiales, la gestión de cantidades masivas de datos y la seguridad justifica el interés creciente de la comunidad científica, de agencias de financiación y, más recientemente, de gigantes de la informática como Google, Intel e IBM [4]. Sin embargo, incluso hoy en día sabemos mucho más sobre qué podremos hacer con un ordenador cuántico que de cómo construirlo. Resulta fácil comprender por qué: construir un ordenador cuántico requiere superar importantes retos para la física y la tecnología. Es preciso controlar y medir de manera precisa el estado cuántico de los sistemas físicos individuales que actúan como qubits, tales como circuitos, átomos, núcleos; es necesario también comunicarlos entre sí, dando lugar a estados cuánticos “entrelazados”; y todo ello debe hacerse mientras se aíslan convenientemente de perturbaciones externas.

Qubits

El elemento básico de la información cuántica, el qubit, es un sistema físico que posee dos estados cuánticos bien definidos, asociados a los estados de información ‘0’ y ‘1’, y que puede ser manipulado de manera predecible (mediante la física cuántica) usando un estímulo externo, por ejemplo luz. La lista de potenciales candidatos es extensa e incluye, entre otros, iones atrapados en trampas ópticas [5] y circuitos superconductores [6]. Un candidato natural y especialmente sencillo es el momento magnético de un núcleo, por ejemplo el protón que forma el

núcleo de hidrógeno [7], o el de un electrón atrapado en un semiconductor, como el silicio [8]. Los estados ‘1’ y ‘0’ corresponden a orientaciones opuestas del spin $S = \frac{1}{2}$, cuyas energías se pueden sintonizar mediante un campo magnético. Una ventaja importante, además de su sencillez, es que tanto los protones como los espines de impurezas en silicio están bien aislados de fuentes de ruido, o decoherencia, que tienden a destruir rápidamente ciertos estados superposición. Sin embargo, por el mismo motivo, resulta difícil acoplar varios de estos espines entre sí y, por tanto, construir arquitecturas computacionales complejas. Una alternativa para abordar esta cuestión, que ofrece además posibilidades de diseño casi ilimitadas, consiste en usar espines electrónicos alojados en moléculas.

Qubits moleculares

Las moléculas de las que nos ocupamos en este artículo constan de un centro formado por uno o varios átomos magnéticos y rodeado por una nube de moléculas no magnéticas (o ligandos) que lo estabilizan y separan del resto de núcleos activos. Estas moléculas forman cristales ordenados y son también estables en disolución, lo que permite estudiarlas en diversas formas materiales e integrarlas en dispositivos. Cada molécula se puede describir como un espín S que está sometido a la acción del campo eléctrico que generan los ligandos. A través de la interacción espín-órbita, este campo cristalino da lugar a que la energía dependa de la orientación del espín, un efecto conocido como anisotropía magnética. Resulta entonces posible, tal y como se muestra en la figura 1, elegir dos de estos estados para representar los estados ‘0’ y ‘1’.

En principio, los estados del qubit se pueden controlar mediante un campo de microondas, es decir, de manera análoga a un experimento de resonancia, sintonizando con un campo

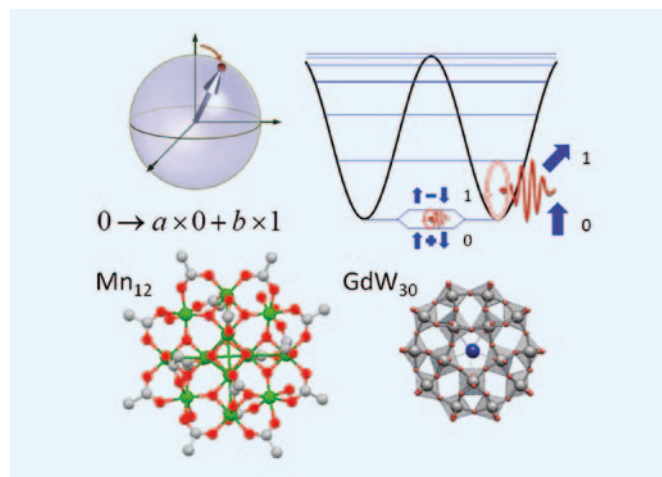
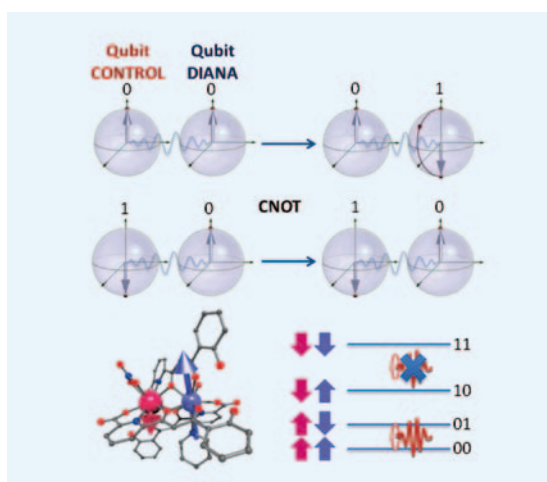


Fig. 1. Los puntos de la superficie de la esfera de Bloch (arriba a la izquierda) representan las posibles superposiciones de los estados ‘0’ (flecha hacia arriba) y ‘1’ (flecha hacia abajo). Los estados de espín de moléculas magnéticas pueden servir para realizar uno de estos qubits.

Fig. 2. Arriba: Esquema de operación de una puerta CNOT sobre dos qubits. Abajo: El acoplamiento entre espines de iones de Ce^{3+} (rojo) y de Er^{3+} (azul) en una molécula da lugar a un esquema de niveles de energía no equi-espaciados. Un fotón de microondas se puede sintonizar para que sólo induzca la transición asociada con esta puerta lógica.



magnético externo la separación energética entre los dos niveles hasta que coincidan con la energía de cada fotón. Sin embargo, en el caso de moléculas-imán como Fe_8 o Mn_{12} , que contienen un número elevado de átomos magnéticos, las condiciones experimentales son muy exigentes. Debido a la elevada anisotropía magnética, la frecuencia requerida para llevar el estado con proyección $m = +S$ sobre el eje de anisotropía al $m = +(S-1)$ es del orden de 230 GHz para Mn_{12} (120 GHz para Fe_8), muy por encima del rango típico (2-10 GHz) de las tecnologías de microondas más usadas en el laboratorio. Por otra parte, la probabilidad de transición entre los estados de mínima energía, asociados con las proyecciones $+S$ y $-S$, es proporcional a la probabilidad de efecto túnel de espín y extremadamente baja. Este efecto refleja la fragilidad de ciertos estados superposición frente a la interacción con el entorno, que se vuelve extrema en objetos de tamaño "mesoscópico" como estas moléculas relativamente complejas.

Resulta, por este motivo, más adecuado buscar qubits moleculares sencillos, formados por un único átomo magnético "atrapado" por ligandos. Un ejemplo particularmente atractivo es el del ion Gd^{3+} . De acuerdo con las reglas de Hund, un ion Gd^{3+} libre tiene un espín $S = 7/2$ (el más alto de la tabla periódica) y una estructura electrónica esférica. Al interactuar con el campo cristalino, da lugar a una anisotropía muy débil. La figura 1 muestra el caso de una molécula de GdW_{30} , con forma de oblea. Para esta simetría y en ausencia de campo, el desdoblamiento entre los niveles magnéticos es del orden de 4 a 7 GHz, lo que brinda múltiples posibilidades para elegir los estados del qubit. Además de su sencillez, estos sistemas ofrecen posibilidades muy atractivas para el diseño "químico" de qubits: el campo cristalino y, por tanto, la frecuencia del qubit y su respuesta a campos externos dependen de la coordinación del ion y, por tanto, de la estructura química de cada molécula [9]. Esta posibilidad resulta especialmente útil para la realización del segundo de los elementos básicos de un ordenador cuántico, que describimos a continuación.

Puertas lógicas cuánticas moleculares

Al igual que ocurre con la computación convencional, es posible descomponer cualquier algoritmo, por complejo que sea, en la aplicación sucesiva de un conjunto reducido de "puertas lógicas universales". En el caso de la computación cuántica, las posibles puertas universales no se definieron hasta mediados de los años 90 del siglo xx. Un posible conjunto incluye operaciones arbitrarias sobre un qubit (equivalentes a rotaciones arbitrarias en el caso de espines) y puertas condicionales sobre dos qubits. El arquetipo de éstas últimas lo constituye la puerta CNOT (ver la figura 2), que cambia el estado de uno de los dos qubits, llamado "diana", solamente cuando el otro qubit, o "control", se encuentra en un estado predeterminado, por ejemplo '0'. Puertas CNOT se han demostrado con iones atrapados, qubits superconductores, espines nucleares de la molécula de cloroformo y, muy recientemente, con espines de pozos cuánticos en semiconductores.

Pensando en la realización de una de estas puertas lógicas en una molécula magnética, ingredientes necesarios son la presencia de dos espines con estados '0' y '1' bien definidos (dos qubits), la existencia de un acoplamiento entre ambos, de manera que las propiedades del espín "diana" dependan del estado del espín "control", y, finalmente, una asimetría entre ambos qubits que los haga distinguibles. Esta última propiedad es la más difícil de conseguir; dado que la Naturaleza tiende a crear estructuras simétricas. Teniendo en cuenta la influencia que la coordinación de un ion ejerce sobre su respuesta magnética, una solución consiste en crear moléculas que contengan dos iones magnéticos, por ejemplo dos iones lantánidos, y que tengan dos sitios de coordinación bien diferenciados. Un ejemplo de este tipo de estructura molecular asimétrica, obtenida usando un número impar de ligandos asimétricos, se muestra en la figura 2. Esta ingeniería molecular permite obtener moléculas con dos iones iguales (Tb^{3+} , Dy^{3+} , ...) en entornos muy diferentes e incluso moléculas con iones diferentes en cada sitio, como CeEr [10,11]. La asimetría estructural se traduce entonces en una asimetría magnética: en presencia de un campo magnético los niveles de energía de los dos espines acoplados no están equidistantes entre sí. Por este motivo, un fotón de microondas puede inducir una y sólo una de las posibles transiciones, que asignamos a la operación $00 \rightarrow 01$. De este modo, la inversión del segundo espín tiene lugar tan sólo si el primero se encuentra inicialmente en el estado '0', de acuerdo con la definición de una puerta CNOT. Usando ideas similares, en los últimos años se han diseñado y sintetizado estructuras moleculares que pueden realizar otras puertas cuánticas universales, como la $\sqrt{\text{SWAP}}$, que intercambia y entrelaza ambos espines, y la C-PHASE, que induce un cambio de fase en el qubit diana dependiendo del estado el control.

Decoherencia

Conseguir sistemas físicos que posean la estructura de niveles y los estados requeridos para realizar qubits y puertas lógicas representa sólo un primer paso. Una condición crucial que estos sistemas han de cumplir está relacionada con su sensibilidad frente a perturbaciones externas, un fenómeno conocido como decoherencia. Ningún sistema físico está completamente aislado, sino que interactúa constantemente con otros elementos externos tales como vibraciones y campos eléctricos y magnéticos, así como con otros qubits, que inducen cambios en su estado cuántico. El tiempo que dura cada operación sobre un qubit o sobre una puerta lógica cuántica ha de ser mucho más corto que el tiempo característico, denominado habitualmente tiempo de decoherencia T_2 , que tarda el entorno en degradar su estado. La existencia inevitable de errores asociados con la decoherencia hizo pensar que la computación cuántica no podría ir mucho más allá del terreno teórico. Sin embargo, el desarrollo de protocolos de corrección de errores, que permiten recuperar el estado de un conjunto de qubits sometidos a una decoherencia no muy severa, abrió la puerta al desarrollo práctico de esta tecnología. Aún así, la aplicación de estos códigos requiere que T_2 sea unas 1 000 veces superior a los tiempos de operación.

El tiempo de decoherencia depende mucho del tipo de sistema que elegimos para realizar los qubits y de las condiciones de operación [12]. La necesidad de reducir el efecto de las vibraciones térmicas hace que la computación cuántica sea, en gran parte, una tecnología asociada a la física de (muy) bajas temperaturas. Pero incluso cerca del cero absoluto existen perturbaciones que limitan la coherencia cuántica. Qubits que se acoplan a campos eléctricos, como algunos circuitos superconductores y otros basados en semiconductores, presentan elevadas velocidades de operación aunque, por el mismo motivo, la interacción con ruido electromagnético limita de manera severa sus tiempos de coherencia. En el extremo opuesto se encuentran los espines nucleares que son insensibles a ruido eléctrico y, por su diminuto momento magnético, se acoplan débilmente al ruido magnético generado por otros espines de su entorno. Sin embargo, la manipulación de estos espines es relativamente lenta. Los espines electrónicos, por ejemplo en moléculas sencillas como las mencionadas antes, se encuentran entre ambos límites y pueden, por tanto, representar un buen compromiso entre ventajas e inconvenientes.

A pesar de la decoherencia, es posible inducir y observar oscilaciones coherentes entre los estados '0' y '1' de qubits moleculares (en el ejemplo de la figura 3, un cristal de GdW_{30}). Experimentos recientes muestran que es también posible manipular de manera coherente los estados de prototipos moleculares de puertas lógicas CNOT. Las fuentes de ruido más importantes en estas moléculas pro-

vienen de la presencia de espines nucleares (interacción hiperfina), por ejemplo los que presentan los átomos de hidrógeno, nitrógeno o alcalinos que forman parte de su cobertura no magnética, y del acoplamiento con otras moléculas a través de interacciones dipolares magnéticas. Ambos efectos se pueden reducir, por ejemplo realizando estructuras moleculares con isótopos que no tengan espín nuclear y diluyéndolas en disoluciones o en cristales diamagnéticos. Estas estrategias han dado lugar, sobre todo en los últimos 5 años, a un aumento espectacular de los tiempos de coherencia de estos qubits moleculares hasta alcanzar valores comparables o incluso mejores que los obtenidos con circuitos superconductores (hasta 1 ms, ver figura 3 y [13]) aunque todavía lejos de los mejores tiempos de coherencia, de hasta medio segundo, medidos en espines de impurezas de fósforo en silicio purificado isotópicamente. Recientemente, se ha visto que es posible también obtener tiempos de decoherencia largos, sin recurrir a diluciones extremas, usando transiciones de anti-cruzamiento entre dos niveles de espín que son casi insensibles a fluctuaciones del campo magnético [14].

Futuro: hacia una arquitectura computacional

Llevar a cabo un algoritmo cuántico, incluso alguno sencillo como la factorización de 15 ($= 3 \times 5$), involucra necesariamente la manipulación y comunicación de varios qubits. Esquemas basados en iones atrapados y circuitos superconductores, han permitido manipular hasta 9 y 15 qubits, respectivamente, y se prevé que este número aumentará rápidamente en unos años acercándose a 50 o incluso más, es decir, a niveles de complejidad cuántica que son ya imposibles de simular para un ordenador conven-

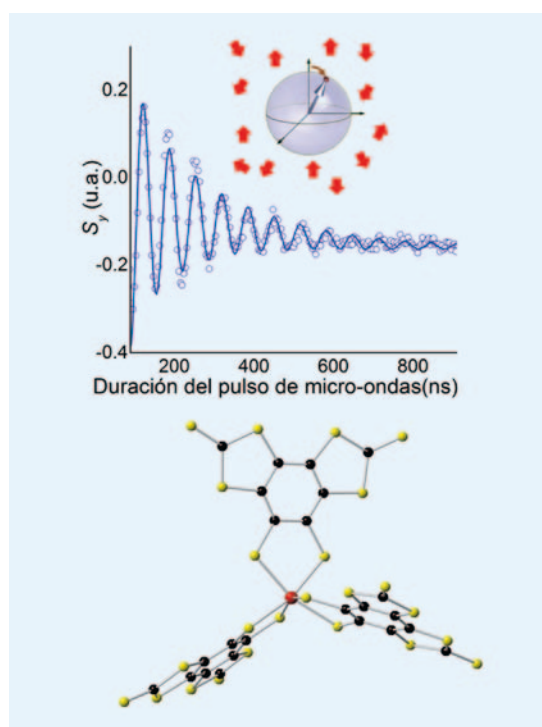


Fig. 3. Arriba: Oscilación coherente de espines de GdW_{30} entre dos orientaciones que definen los estados '0' y '1' de un qubit. El decaimiento de la oscilación se debe a la interacción del qubit con espines de su entorno. Abajo: molécula formada por un ion magnético V^{4+} (rojo) unido a una cobertura no magnética de carbono (negro) y azufre (amarillo). La ausencia de espines nucleares hace que esta molécula presente un tiempo de coherencia récord de casi 1 ms [13].

cional y que, por tanto, pueden ayudar a resolver problemas de interés práctico. El progreso futuro de estas aproximaciones se enfrenta, sin embargo, a dificultades asociadas con la reproducibilidad de los qubits, en el caso de superconductores, y con la complejidad de la interfase que une estos procesadores cuánticos con su electrónica de control en el “mundo exterior”. Qubits asociados a impurezas en semiconductores, como dopantes de P en Si o centros NV⁻ en diamante, resultan, por su parte, difíciles de acoplar entre sí, precisamente por su elevadísimo grado de aislamiento, es decir, debido a la condición que les confiere su coherencia récord.

Para superar las enormes dificultades de diseño de estructuras complejas con precisiones más allá de la nanoescala, las moléculas son la solución más natural. Además de la vía de síntesis química que ha dado lugar al actual estado de la cuestión, se están ensayando otras basadas en la aplicación de proteínas para organizar múltiples iones metálicos (por ejemplo lantánidos) de manera pre-determinada y reproducible [15]. A diferencia de lo que ocurre en otros esquemas, como los mencionados antes, en esta aproximación las interacciones entre los qubits no se encienden y apagan y la realización de puertas lógicas se reduce a aplicar pulsos de microondas de las frecuencias apropiadas. La idea es análoga a la que se empleó en los experimentos pioneros con espines nucleares en moléculas orgánicas, pero sin el problema de la definición estadística del estado inicial de la computación que es intrínseco a estos últimos. A cambio, la realización de las secuencias de pulsos plantea dificultades técnicas importantes. Los equipos experimentales más habituales, que usan cavidades resonantes, no pueden aplicar pulsos de frecuencias muy diferentes a las de su frecuencia natural. Una solución, alternativa y complementaria a la vez, se basa en la integración de estos “chips moleculares” en circuitos tales como resonadores y líneas de transmisión de microondas [16], que actualmente ya se usan en arquitecturas basadas en qubits superconductores [12]. Se trata de combinar las ventajas que las moléculas presentan para albergar múltiples qubits con la capacidad de los circuitos para “atrapar” fotones individuales con los que llevar a cabo las operaciones básicas, es decir, la lectura y manipulación de los qubits y, sobre todo, la comunicación de información cuántica entre ellos. Existen todavía importantes dificultades, sobre todo asociadas con el acoplamiento de los espines al fotón, que es mucho menor que en el caso de los qubits superconductores. La solución a esos problemas requerirá, probablemente, la aplicación de herramientas de nanotecnología para aproximar las escalas de tamaño entre ambos componentes (las moléculas y los circuitos). La recompensa esperada, sin embargo, merece extraordinariamente la pena por el potencial que estos sistemas híbridos ofrecen en términos de densidad de información y posibilidades de diseño.

Referencias

- [1] R. P. FEYNMAN, *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 467 (1982).
- [2] P. W. SHOR, *Proceedings of the Symposium on the Foundations of Computer Science, 1994, Los Alamitos, California* (IEEE Computer Society Press, Nueva York, 1994), pp. 124–134.
- [3] L. K. GROVER, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325 (1997).
- [4] E. GIBNEY, *Nature* **516**, 24 (2014).
- [5] C. MONROE y J. KIM, *Science* **339**, 1164 (2013).
- [6] M. DEVORET y R. J. SCHOELKOPF, *Science* **339**, 1169 (2013).
- [7] I. L. CHUANG, L. M. K. VANDERSYPEN, X. ZHOU, D. W. LEUNG y S. LLOYD, *Nature* **393**, 143 (1998).
- [8] J. J. PLA, K. Y. TAN, J. P. DEHOLLAIN, W. H. LIM, J. J. L. MORTON, D. N. JAMIESON, A. S. DZURAK y A. MORELLO, *Nature* **489**, 541 (2012).
- [9] M. J. MARTÍNEZ *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 247213 (2012).
- [10] F. LUIS *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 117203 (2011).
- [11] D. AGUILÀ *et al*, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 14215 (2014).
- [12] R. J. SCHOELKOPF y S. M. GIRVIN, *Nature* **451**, 664 (2008).
- [13] J. M. ZADROZNY, J. NIKLAS, O. G. POLUEKTOV y D. E. FREEDMAN, *ACS Central Science* **1**, 488 (2015).
- [14] M. SHIDDIQ, D. KOMIJANI, Y. DUAN, A. GAITA-ARIÑO, E. CORONADO y S. HILL, *Nature* **531**, 348 (2016).
- [15] L. E. ROSALENY y A. GAITA-ARIÑO, *Inorg. Chem. Front.* **3**, 61 (2016).
- [16] M. JENKINS, T. HÜMMER, M. J. MARTÍNEZ-PÉREZ, J. J. GARCÍA-RIPOLL, D. ZUECO y F. LUIS, *New J. Phys.* **15**, 095007 (2013).

Guillem Aromí
 Departament de Química
 Inorgànica, Universitat de Barcelona



Alejandro Gaita-Ariño
 Instituto de Ciencia Molecular
 (ICMol), Universidad de Valencia



Fernando Luis
 Instituto de Ciencia de Materiales
 de Aragón (ICMA),
 CSIC-Universidad de Zaragoza

