

Salamanca, Gto., a 27 de febrero del 2019.

**M. en I. HERIBERTO GUTIÉRREZ MARTIN**  
**JEFE DE LA UNIDAD DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR**

**P R E S E N T E . -**

Por medio de la presente, se otorga autorización para proceder a los trámites de impresión, empastado de tesis y titulación al alumno(a) **CARLOS ENRIQUE MONTILLA VIVAS** del **Programa de Maestría en INGENIERÍA MECÁNICA (TERMOFLUIDOS)**, y cuyo número de **NUA** es: **146280** del cual soy director. El título de la tesis es: **Modelado y Análisis de Compuertas Cuánticas en el Marco de Referencia de Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamic.**

Hago constar que he revisado dicho trabajo y he tenido comunicación con los sinodales asignados para la revisión de la tesis, por lo que no hay impedimento alguno para fijar la fecha de examen de titulación.

**A T E N T A M E N T E**



NOMBRE Y FIRMA  
**DIRECTOR DE TESIS**  
**SECRETARIO**



NOMBRE Y FIRMA  
**DIRECTOR DE TESIS**



NOMBRE Y FIRMA  
**PRESIDENTE**



NOMBRE Y FIRMA  
**VOCAL**

UNIVERSIDAD DE  
GUANAJUATO



UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO  
CAMPUS IRAPUATO-SALAMANCA  
DIVISIÓN DE INGENIERÍAS

“MODELADO Y ANÁLISIS DE COMPUERTAS CUÁNTICAS EN EL MARCO DE  
REFERENCIA DE STEEPEST-ENTROPY-ASCENT QUANTUM  
THERMODYNAMICS”

TESIS

Que para obtener el grado de:  
MAESTRO EN INGENIERÍA MECÁNICA

PRESENTA:  
ING. CARLOS ENRIQUE MONTILLA VIVAS

DIRECTORES DE TESIS:  
DR. CÉSAR EDDUARDO DAMIÁN ASCENCIO  
DR. SERGIO CANO ANDRADE

SALAMANCA, GTO.

MARZO 2019

*Dedicado a la memoria de Carmen Auxiliadora Valero.*

# **Modeling and Analysis of Quantum Gates based on the Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamic Framework**

**Carlos Enrique Montilla Vivas**

## **Summary**

In the present work, based on the Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics (SEAQT) framework, the evolution of a two qubits quantum gate CNOT is presented. The parameters and measurement mechanisms have been selected with the intention of controlling and minimizing the effects of decoherence on the system. The characteristics of quantum computing required for the development of this work, are studied to understand the phenomena involved.

The model developed shows how entropy is generated during the state evolution of the two qubits. It is also observed the generation of entropy during the process is related to fidelity and concurrency during the evolution, which are the mechanisms of control of decoherence, having as only parameter of control the intra-relaxation time.

The results show that the SEAQT is a robust framework used to predict non-equilibrium processes and their associated dissipation in quantum gates.

# Agradecimientos

Me gustaría expresar agradecimiento a Dios por haberme dado la oportunidad de realizar mi maestría fuera de mi país, y por permitirme vivir nuevas costumbres y estilos diferentes de vida, dándome la salud y entendimiento necesario para superar todas las metas y retos propuestos. En especial gracias por poner en mi camino personas trabajadoras, educadas, inteligentes y muy amables, que me ayudaron a completar este desafío.

También sinceramente gracias a mis asesores Cesar Eduardo Damián Ascencio y Sergio Cano Andrade, cuyo aliento y amable ayuda han hecho posible este trabajo. También, por su contribución con sus clases y enseñanzas durante el desarrollo de mi investigación en este interesante mundo Cuántico. Y a todos mis amigos y colegas que me acompañaron durante este tiempo, no solo en el ámbito profesional, si no también emocionalmente, en especial a mi amada esposa y amiga, Flor Andrea Díaz Fernández, por estar siempre a mi lado y empujarme a ser un mejor profesional y persona.

Por supuesto agradecimientos para el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, CONACYT, por la beca otorgada CVU, 825161 y a la División de Ingenierías del Campus Irapuato-Salamanca de la Universidad de Guanajuato, por brindarme el apoyo financiero necesario para culminar este proyecto de tesis.

Finalmente, me gustaría agradecer a toda mi familia por su aliento durante este período de tiempo en México, pronto nos veremos en Venezuela estamos construyéndola desde afuera.

# Nomenclatura

## Abreviaturas

|                |   |  |
|----------------|---|--|
| <i>CMOSFET</i> | — | Complementary Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor. |
| <i>CNOT</i>    | — | Controlled NOT gate.   |
| <i>DQD</i>     | — | Dissipative Quantum Dynamics.                                    |
| <i>EPR</i>     | — | Einstein-Podolsky-Rosen (paradox).                               |
| <i>IQT</i>     | — | Intrinsic Quantum Thermodynamics.                                |
| <i>MLEP</i>    | — | Maximum Local Entropy Production.                                |
| <i>QC</i>      | — | Quantum Computing.   |
| <i>QME</i>     | — | Markovian Quantum Master Equations.                              |
| <i>QM</i>      | — | Quantum Mechanics.   |
| <i>QT</i>      | — | Quantum Thermodynamics.  |
| <i>SEAQT</i>   | — | Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics.                  |
| <i>SOFC</i>    | — | Solid Oxide Fuel Cell.   |

# Índice general

|   |          |
|---|----------|
| <b>Summary</b> . . . . .  | I        |
| <b>Agradecimientos</b> . . . . .                                    | II       |
| <b>Nomenclatura</b> . . . . .                                       | III      |
| <b>1. Introducción</b>  | <b>1</b> |
| 1.1. Descripción general de SEAQT . . . . .                         | 1        |
| 1.2. Motivación para utilizar el marco de referencia SEAQT. . . . . | 2        |
| 1.3. Objetivos de la Tesis . . . . .                                | 3        |
| <b>2. Revisión de literatura</b>                                    | <b>5</b> |
| 2.1. Fundamentos de la Mecánica Cuántica . . . . .                  | 5        |
| 2.1.1. Grado Cuántico de Libertad . . . . .                         | 6        |
| 2.1.2. Espacio de Estados . . . . .                                 | 6        |
| 2.1.3. Operadores . . . . .   | 6        |
| 2.1.4. Observaciones . . . . .                                      | 6        |
| 2.1.5. Dinámica . . . . .   | 7        |
| 2.2. Termodinámica cuántica intrínseca (IQT) . . . . .              | 7        |
| 2.2.1. Fundamentos . . . . .  | 7        |
| 2.2.2. Notación . . . . .   | 8        |
| 2.2.2.1. Notación de Dirac en Mecánica Cuántica . . . . .           | 8        |
| 2.2.2.2. Otra notación . . . . .                                    | 9        |
| 2.3. El marco de referencia SEAQT . . . . .                         | 11       |

|  |           |
|--|-----------|
| 2.3.1. Tiempo de intra-relajación $\tau_D(\hat{\rho})$ . . . . .         | 14        |
| <b>2.4. Computación cuántica e información cuántica</b> . . . . .        | <b>14</b> |
| 2.4.1. Bits cuánticos . . . . .  | 16        |
| 2.4.2. Compuertas cuánticas. . . . .                                     | 18        |
| 2.4.2.1. Compuertas cuánticas de 1-Qubit. . . . .                        | 18        |
| 2.4.2.2. Compuertas cuánticas de 2-Qubit. . . . .                        | 19        |
| 2.4.3. Irreversibilidad y Reversibilidad . . . . .                       | 21        |
| 2.4.4. Estados entrelazados . . . . .                                    | 22        |
| 2.4.5. Decoherencia . . . . .  | 25        |
| <b>2.5. Caso de estudio: Compuerta cuántica (<i>C-NOT</i>)</b> . . . . . | <b>27</b> |
| 2.5.1. Control Bias . . . . .  | 29        |
| 2.5.2. El caso no disipativo . . . . .                                   | 30        |
| 2.5.3. El caso disipativo - Ecuación de movimiento de Beretta . . . . .  | 30        |
| <b>2.6. Anteriores aplicaciones de SEAQT</b> . . . . .                   | <b>30</b> |
| <b>3. Desarrollo del modelo matemático</b> . . . . .                     | <b>33</b> |
| 3.1. Espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ . . . . .                          | 33        |
| 3.2. Componentes del vector de Bloch . . . . .                           | 34        |
| 3.3. Concurrencia . . . . .  | 36        |
| 3.4. Fidelidad . . . . .   | 40        |
| 3.5. Factor de Coherencia . . . . .                                      | 40        |
| 3.6. Pureza . . . . .  | 41        |
| 3.7. Entropía . . . . .  | 42        |
| <b>4. Resultados</b> . . . . .   | <b>44</b> |
| 4.1. Evolución de la compuerta . . . . .                                 | 44        |
| 4.1.1. Pulso Bias y de Compuerta . . . . .                               | 46        |
| 4.2. Pruebas de entrelazamiento . . . . .                                | 47        |
| 4.2.1. Concurrencia . . . . .  | 48        |
| 4.2.2. Fidelidad . . . . .   | 49        |

---

|   |           |
|---|-----------|
| <b>4.2.3. Factor de Coherencia</b> . . . . .                        | 50        |
| <b>4.2.4. Pureza</b> . . . . .                                      | 52        |
| <b>4.2.5. Entropía</b> . . . . .                                    | 53        |
| <b>4.3. Condición Inicial para Máximo Entrelazamiento</b> . . . . . | 55        |
| <b>4.3.1. Evolución de la compuerta H-CNOT</b> . . . . .            | 55        |
| <b>4.3.2. Concurrencia de la compuerta H-CNOT</b> . . . . .         | 56        |
| <b>4.3.3. Fidelidad de la compuerta H-CNOT</b> . . . . .            | 57        |
| <b>5. Conclusiones</b>  | <b>59</b> |
| <b>Bibliografía</b>   | <b>61</b> |
| <b>A. Apéndice: Código del Modelo</b>                               | <b>67</b> |

# Índice de figuras

|   |    |
|---|----|
| 2.1. Representación esquemática de los términos de la ecuación de movimiento con un hamiltoniano independiente del tiempo.      | 13 |
| 2.2. Operación sobre qubits   | 17 |
| 2.3. Compuerta cuántica $C$ -NOT.   | 20 |
| 3.1. Representación esquemática de la esfera de Bloch.  | 35 |
| 4.1. Representación de la esfera de Bloch de la evolución del sistema (CNOT-Gate) sin disipación                                | 45 |
| 4.2. Representación de la esfera de Bloch de la evolución del sistema (CNOT-Gate)   | 46 |
| 4.3. Pulsos del Protocolo CNOT)   | 47 |
| 4.4. Concurrencia como función de $\tau_D$ 1.   | 48 |
| 4.5. Concurrencia como función de $\tau_D$ 2.   | 49 |
| 4.6. Evolución de la Fidelidad SEAQT vs vonNeumann  | 50 |
| 4.7. Evolución de la Coherencia, para el sistema compuesto de dos qubits  | 51 |
| 4.8. Evolución del funcional de la correlación de entropía.   | 51 |
| 4.9. Grado de pureza para los diferentes qubits   | 52 |
| 4.10. Evolución de la entropía para el sistema compuesto por los qubits A y B   | 53 |
| 4.11. Evolución de la entropía para los qubits A y B  | 54 |
| 4.12. Evolución de la generación de entropía para los qubits A y B  | 54 |
| 4.13. Representación de la esfera de Bloch de la evolución del sistema (H-CNOT-Gate) sin disipación para máximo entrelazamiento | 56 |

---

|   |    |
|---|----|
| 4.14. Máxima concurrencia para H-CNOT . . . . .                           | 57 |
| 4.15. Evolución de la Fidelidad SEAQT vs vonNeumann para H-CNOT . . . . . | 57 |

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Descripción general de SEAQT

La noción inicial de entropía fue establecida por Sadi Carnot en 1824 con sus estudios sobre motores térmicos. Él encontró que una máquina térmica nunca tendría una eficiencia del 100 % debido a las pérdidas causadas por la vibración, la fricción y el ruido. Otra contribución al concepto de entropía es la de Lord Kelvin, quien enunció que la energía no puede crearse ni destruirse, sin embargo la energía térmica pierde su capacidad de realizar trabajo cuando se la transfiere de un cuerpo caliente a uno frío. En 1852 William Thomson sugirió que en un proceso como la conducción del calor la energía no se pierde sino que se “*disipa*” o deja de estar disponible. Además, William Macquorn Rankine y Rudolf Clausius propusieron los conceptos que representaban la misma tendencia de la energía hacia la disipación. Llamado inicialmente “función termodinámica” por Rankine y “disgregación” por Clausius, donde cada proceso que tiene lugar en un sistema aislado aumenta la entropía del sistema; primero, se aprecia para los procesos reversibles la propiedad  $\oint \delta Q/T$ , donde  $\delta Q$  es la transferencia de calor en el proceso de un ciclo y  $T$  es la temperatura termodinámica a la que tiene lugar la transferencia de calor; segundo, es que el trabajo se puede convertir en calor y calor útil, y se expresa como el calor que se transfiere de un depósito caliente a uno frío; y tercero, la relación  $\oint \delta Q/T \leq 0$  conocida como la desigualdad de Clausius, la cual debe aplicarse cuando las irreversibilidades internas están presentes en el sistema [1]. También se

han propuesto diferentes intentos sobre cómo surge la entropía desde un punto de vista microscópico, como el teorema "H" de Boltzmann, que utiliza un funcional que en equilibrio representa la entropía de un gas diluido, algunos desarrollos recientes en los teoremas de fluctuación [2] y teoremas de fluctuación-disipación [3], o la entropía de von Neumann ( $s = -k_B \text{Tr}(\rho \ln \rho)$ , donde  $\rho$  es el operador de densidad) que es un funcional del operador de estado [4, 5] válido en estados de equilibrio y de no equilibrio.

Teniendo en cuenta la generación de entropía a nivel cuántico, el marco de Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamic (SEAQT) ha surgido de la Termodinámica Cuántica Intrínseca (IQT) que da un significado fundamental a la segunda ley de la termodinámica, complementando la Mecánica Cuántica (QM). SEAQT proporciona una definición de generación de entropía, o disipación, a nivel cuántico, y una imagen para la flecha del tiempo que permite establecer una dirección única a la evolución del estado de un sistema. SEAQT asume que la evolución del estado del sistema siempre está en la ruta de Steepest Entropy Ascent o en la ruta de producción máxima de entropía local (MLEP).

La ecuación de movimiento SEAQT presentada por primera vez por Beretta para sistemas cuánticos simples [6] y generales [7], y posteriormente modificada por von Spakovsky et al. [8-10] para tratar con sistemas a gran escala, ha mostrado buenas predicciones de datos experimentales [9, 11, 12].

## 1.2. Motivación para utilizar el marco de referencia SEAQT.

A nivel macroscópico, la descripción de un proceso termodinámico se ha desarrollado utilizando los fundamentos de la primera y la segunda ley de la termodinámica y solo para procesos cuasi estacionarios. Naturalmente, esto es una consecuencia de la falta de una ecuación de movimiento que describe el proceso de no equilibrio y su trayectoria termodinámica en el nivel macroscópico. En el nivel microscópico, tal como está expuesto actualmente por Quantum Physics, no existe una restricción para que un proceso cuántico ocurra hacia adelante o hacia atrás en el tiempo, lo que plantea la cuestión de la posible validez de la segunda ley de la termodinámica en el nivel cuántico. El problema a nivel microscópico se resuelve con la introducción de SEAQT, un marco

que proporciona una ecuación de movimiento que es capaz de predecir una trayectoria única de la evolución del estado de un sistema desde un estado de no equilibrio a un estado de equilibrio estable.

Estas características y su aplicabilidad en sistemas a gran escala hacen del SEAQT un marco prometedor para investigar una gran variedad de problemas, como se muestra en [10].

### 1.3. Objetivos de la Tesis

El objetivo de este trabajo es desarrollar un modelo numérico basado en Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamic (SEAQT), que proporcione una descripción al fenómeno de decoherencia y pérdida de correlaciones en los protocolos existentes en compuertas cuánticas generado durante la evolución de sus estados, y proponer una posible solución para mantener la coherencia de los estados en estos protocolos.

Para lograr este objetivo, se deben cumplir las siguientes tareas:

- Realizar la revisión de literatura técnica sobre el computo cuántico y decoherencia.
- Estudiar el marco matemático de SEAQT para sistemas de  $n$  sistemas indivisibles.
- Seleccionar la compuerta cuántica sobre la cual se modelará la decoherencia y pérdida de correlación, así como los parámetros y condiciones a utilizar en la simulación del modelo.
- Escribir un código fuente propio para modelar numéricamente un protocolo de compuertas cuánticas, para predecir la evolución del estado de los qubits.
- Desarrollar estrategias para controlar de ser posible, el fenómeno de decoherencia del sistema.

Se realizan algunas aportaciones originales a la literatura con este trabajo. Primero, la aplicación del marco SEAQT a un sistema acoplado de dos qubits, que aborda la generación de entropía como consecuencia de una disipación a nivel cuántico. Segundo, un estudio de funciones diferentes como la concurrencia y fidelidad que permiten conocer el estado del sistema así como la condición de

---

entrelazamiento en la cual se observa la coherencia del conjunto, misma que se puede observar en datos experimentales.

# Capítulo 2

## Revisión de literatura

En este capítulo, se presenta una revisión del trabajo desarrollado por Beretta y colaboradores en base a una serie de cuatro artículos que describen los principios axiomáticos de una teoría cuántica que abarcaba la mecánica y la termodinámica [13-16]. Además, se presentan conceptos clave sobre la mecánica cuántica para derivar la ecuación no lineal del movimiento postulado por Beretta utilizando una descripción geométrica [17]. Todo lo anterior junto con los conceptos fundamentales de la computación cuántica, de los cuales se hará uso para desarrollar el caso de estudio, y mostrar así las características principales de la ecuación de movimiento. Finalmente, se hace una descripción de algunas aplicaciones del SEAQT.

### 2.1. Fundamentos de la Mecánica Cuántica

Desde su introducción en 1900, cuando Max Planck presentó sus ideas sobre la cuantización de la radiación del cuerpo negro a un nivel real de descripción, la mecánica cuántica ha evolucionado hasta convertirse en una de las teorías más importantes y precisas de la ciencia. Esta teoría se sostiene en cinco postulados [4]: **el grado cuántico de libertad, espacio de estados, dinámica, operadores y observaciones.**

### 2.1.1. Grado Cuántico de Libertad

Se dice que una entidad cuántica como un electrón tiene diferentes características y propiedades como posición, momento o spin. En general, estas características se denominan grados de libertad de la entidad y, según los estudios, son intrínsecamente indefinidas. En otras palabras, uno no puede decir cuál es su valor antes de realizar una medición. En una perspectiva más amplia, la suposición habitual es que el grado de libertad se superpone en diferentes estados al mismo tiempo, lo que puede representarse en un espacio de grado de libertad ( $\mathcal{F}$ ).

### 2.1.2. Espacio de Estados

Cuando los experimentos se llevan a cabo sobre un grado cuántico de libertad de una entidad cuántica, las mediciones muestran una tendencia que puede describirse probabilísticamente. De modo que, un vector de estado de valor complejo se usa con la simple restricción de que la probabilidad de encontrar cada estado debe sumar uno ( $|\psi|^2 = 1$ ). Además, el vector de estado tiene las características de pertenecer a un espacio vectorial lineal normalizado, llamado, el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ , donde

$$\psi \in \mathcal{H}(\mathcal{F}) \quad (2.1)$$

### 2.1.3. Operadores

En la mecánica cuántica, un grado de libertad tiene un estado indeterminado antes de ser medido. Por lo tanto, para representar cantidades físicas, los elementos matemáticos llamados operadores  $O$  se utilizan para extraer información del vector de estado de un grado de libertad. De hecho, cuando estos operadores representan cantidades físicas como la energía y el impulso, se llaman observables.

### 2.1.4. Observaciones

El proceso de observación no es un aspecto intuitivo en la mecánica cuántica. Sin embargo, como un intento de dar una visión única de esto, una asociación de los físicos más importantes del

siglo XX dio una interpretación de lo que esto significa. Llamado la Interpretación de Copenhague, un grupo liderado por Niels Bohr dijo que el acto de medición cambia el estado vectorial de una manera que ya no es posible describir este estado con la mecánica cuántica [18]. Por ejemplo, considere que se requiere medir un observable  $\hat{O}$  de un sistema, con el rango de estados posiblemente observados como  $a_n$ ; luego, cuando se lleva a cabo el acto de medición, el estado del vector colapsa en un valor particular del conjunto de valores  $a_n$ .

### 2.1.5. Dinámica

La ecuación dinámica del movimiento de estados puros del sistema presentada por Schrödinger en 1925, marcó el comienzo de la mecánica cuántica moderna. Esta ecuación sirve para determinar la evolución del estado de un vector de estado  $\psi(t, \mathcal{F})$  basado en el hamiltoniano ( $\hat{H}$ ). En general, un hamiltoniano es un operador hermítico cuyos valores propios representan la energía de una entidad cuántica, y es la suma de las energías potencial y cinética del sistema. Con respecto a la ecuación de Schrödinger, su expresión general es

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(t, \mathcal{F})}{\partial t} = \hat{H} \psi(t, \mathcal{F}) \quad (2.2)$$

donde  $\hbar = h/(2\pi)$  y  $h$  es la constante de Planck.

La evolución representada por la ecuación de Schrödinger representa la evolución del vector de estado antes de que se realice una observación, y se dice que después de realizar una medición, el vector de estado colapsa en un estado único.

## 2.2. Termodinámica cuántica intrínseca (IQT)

### 2.2.1. Fundamentos

La respuesta fallida sobre la disipación (o generación de entropía) dada por la mecánica estadística, fue el punto de vista de la Termodinámica Cuántica Intrínseca para emerger como una teoría capaz de abarcar tanto la mecánica como la termodinámica para explicar la disipación co-

mo una consecuencia importante de la evolución cuántica. El origen de esta teoría se remonta al trabajo desarrollado por Hatsopoulos, Gyftopoulos y Beretta. Beretta después de una serie de cuatro artículos presentados por Gyftopoulos y Hatsopoulos [13-16], postuló una ecuación de movimiento que describe la evolución del estado de un sistema cuántico. Esta ecuación es una extensión no lineal de la ecuación de movimiento de von Neumann que sigue el principio de local-steepest-entropy ascent, mostrando un origen fundamental de la segunda ley de la termodinámica. La teoría y su marco matemático se denominaron Termodinámica Cuántica (QT). Sin embargo, este nombre se usó ampliamente en el campo de la Dinámica Cuántica Disipativa (DQD) y se cambió para que IQT lo diferenciara de DQD. Es aquí cuando IQT viene a describir la teoría y SEAQT para describir el marco matemático [19].

## 2.2.2. Notación

Algunas expresiones comunes a lo largo de este trabajo se basan en la notación presentada en esta sección.

### 2.2.2.1. Notación de Dirac en Mecánica Cuántica

En una perspectiva más amplia, Dirac unificó la notación de los operadores y las cantidades observables de Matrix Mechanics (matrices que actúan como observables) y la descripción de los sistemas de Wave Mechanics (operadores diferenciales como operadores) en una sola representación que se denomina “*the bra – ket notation*”.

El ket, representado por  $|\psi\rangle$ , es un vector columna, y su dual transpuesta conjugada, el bra, está representada por  $\langle\psi|$ . Por lo tanto, el vector de estado con toda la información de sus múltiples estados se representa en un solo bra-ket como

$$\psi(\vec{q}, t) = \langle\vec{q}, t|\psi\rangle \quad (2.3)$$

---

<sup>1</sup>Estos artículos consisten en: El primero explica la relación entre los operadores densidad y el trabajo máximo que se puede extraer adiabáticamente. El segundo postula que la distribución canónica y la macrocanónica solo representan estados de equilibrio. El tercero expone el significado operacional de un estado y las consecuencias del equilibrio. Finalmente, el cuarto propone una relación entre la operación del estado de densidad y la segunda ley de la termodinámica.

donde  $\vec{q} = \{q_1, q_2, \dots, q_n\}$  es el conjunto de grados de libertad ortogonales en el espacio de Hilbert. Lo que significa es que la proyección en el espacio  $\langle \vec{q}, t |$  produce el vector de estado  $\psi(\vec{q}, t)$ . Se supone que el interés es encontrar la energía de una entidad cuántica que está representada por el vector de estado.

$$|\psi(t)\rangle = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \dots + c_n\phi_n = \sum_n c_n\phi_n \quad (2.4)$$

donde  $|c_i|^2$  es la probabilidad de encontrar el sistema en el estado  $\phi_i$ , la energía media se puede obtener como

$$\langle \hat{E} \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 \varepsilon_i \quad (2.5)$$

donde  $\varepsilon_i$  es el  $i$ -ésimo valor propio del Hamiltoniano  $\hat{H}$  (uno de los posibles valores de energía en los que se puede encontrar la entidad) en el estado propio  $|\phi_i\rangle$ .

### 2.2.2.2. Otra notación

El conmutador es una expresión que describe cómo una operación, en este caso entre matrices, no conmuta. En mecánica cuántica, su importancia radica en el aspecto que describe observables incompatibles. Por ejemplo, en el principio de incertidumbre de Heisenberg, dos observables que no conmutan y no pueden medirse al mismo tiempo. La expresión del conmutador se define como

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.6)$$

y el anticommutador,

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (2.7)$$

El producto interno en el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ ,  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ , se da como

$$(\hat{A} | \hat{B}) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{B} + \hat{B}^\dagger \hat{A}) \quad (2.8)$$

Y valor medio local del estado funcional,

$$r(\hat{\rho}) = \text{Tr}(\hat{\rho}R) = (\sqrt{\hat{\rho}} | \sqrt{\hat{\rho}} R) \quad (2.9)$$

el gradiente local de  $r$  con respecto a  $\sqrt{\hat{\rho}}$ ,

$$\frac{\partial r}{\partial \sqrt{\hat{\rho}}} = \sqrt{\hat{\rho}}R + R\sqrt{\hat{\rho}} \quad (2.10)$$

y para un operador  $\hat{R}$  independiente del tiempo en  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ , la tasa de cambio del valor medio local para el estado funcional viene dada por

$$\frac{dr}{dt} = \text{Tr} \left( \frac{d\hat{\rho}}{dt} \hat{R} \right) = 2(\hat{E} | \sqrt{\hat{\rho}} \hat{R}) \quad (2.11)$$

donde  $\frac{d\hat{\rho}}{dt}$  se puede escribir como  $\sqrt{\hat{\rho}}\hat{E}(t) + \hat{E}^\dagger(t)\sqrt{\hat{\rho}}$  como se explica en la siguiente sección. Una expresión útil presentada a lo largo de este trabajo es

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})\hat{I} \quad (2.12)$$

que es la representación habitual de la desviación del operador  $\hat{A}$  respecto a un valor medio. La hermiticidad,  $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$ , es una propiedad de los observables que garantizan que los valores propios de un operador sean reales, y representa el transpuesto conjugado de un operador, como

$$\hat{Q}^\dagger \equiv \text{Conjugate}(\text{Transpose}(\hat{Q})) \quad (2.13)$$

la hermiticidad, hace que los operadores, aseguren que el producto interno sea invariante si el operador actúa sobre el espacio de bras o kets, esto es,

$$\langle \psi_A | Q \psi_B \rangle = \langle Q \psi_A | \psi_B \rangle \quad (2.14)$$

Finalmente, a partir de la representación del vector de estado en la notación de Dirac, el estado densidad de un estado puro se representa como el producto exterior de dos vectores del espacio de Hilbert

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (2.15)$$

### 2.3. El marco de referencia SEAQT

La ecuación de movimiento no lineal que describe una evolución no unitaria del operador de estado, postulada por Beretta [6], se construye geoméricamente [17-20] basándose en el principio de steepest entropy ascent. En general, Beretta propone que la ecuación de von Neumann debe modificarse agregando un término disipativo, es decir

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\rho}, \hat{H}] + \hat{D}_1(\hat{\rho}, \hat{H}, \{\hat{N}_j\}) \quad (2.16)$$

donde  $\hat{D}_1$  es un operador no lineal relacionado con la generación de entropía del sistema. Sobre la base de las propiedades del operador de densidad (hermiticidad y positividad), la ecuación se reescribe como,

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{E}(t) + \hat{E}^\dagger(t)\sqrt{\hat{\rho}} \quad (2.17)$$

De la ec. (2.11) es posible observar que para mantener constante el valor medio local para el estado funcional, el operador  $\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i$  debe ser perpendicular a  $\hat{E}$ . Este supuesto es necesario cuando se construye la ecuación de movimiento para conservar la traza de  $\hat{\rho}$  y la energía (para los hamiltonianos independientes del tiempo). Esto se logra si  $\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_0 = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{I}$  y  $\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_1 = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{H}$ .

Para recuperar el primer término en el lado derecho de la ecuación. (2.16),  $\hat{E}$  contiene el término de la forma

$$\hat{E}_H = \frac{i}{\hbar}\sqrt{\hat{\rho}}[H + c(\rho)\hat{I}] \quad (2.18)$$

donde  $c(\rho)$  es cualquier funcional real de  $\hat{\rho}$ . Para hacer compatible la ecuación de movimiento con la relación de incertidumbre tiempo-energía de Heisenberg, Beretta la desarrolló en [17], concluyendo que la única opción para este operador es  $c(\rho) = -\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H})$ , entonces

$$\hat{E}_H = \frac{i}{\hbar}\sqrt{\hat{\rho}}\Delta\hat{H} \quad (2.19)$$

Según esta definición,  $\hat{E}(t)$  puede representarse como  $\hat{E}_H + \hat{E}_D$ , donde  $\hat{E}_D$  se interpreta como una consecuencia disipativa de la evolución de un sistema. La idea principal de SEAQT es que la evolución sigue el principio de máxima generación de entropía. Esto conduce al operador  $\hat{E}_D \propto \frac{\partial s}{\partial \sqrt{\hat{\rho}}}$

pero no es igual, ya que  $\frac{\partial s}{\partial \sqrt{\rho}}$  tiene componentes en la dirección de  $\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i$  y como se menciona antes, estos términos deben permanecer constantes. En consecuencia, este argumento lleva a

$$\hat{E}_D = \frac{1}{4k_B\tau(\hat{\rho})} \left[ \frac{\partial s(\hat{\rho})}{\partial \sqrt{\hat{\rho}}} \right]_{\perp \mathcal{L}\{\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i\}} \quad (2.20)$$

donde  $\tau(\hat{\rho})$  es un tiempo de relajación interna y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Siguiendo el trabajo de Gyftopoulos y Cubukcu [21], la única relación que puede representar la entropía física de la termodinámica está dada por la entropía de von Neumann desarrollada en el siguiente capítulo

$$s(\hat{\rho}) = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \quad (2.21)$$

De esta forma, el operador  $\hat{D}$  y  $\hat{E}_D$  están relacionados por la expresión

$$\hat{E}_D = -\frac{1}{2\tau(\hat{\rho})} \hat{D} \quad (2.22)$$

$$\hat{D} = \left( \sqrt{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho} - [\sqrt{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho}]_{\perp \mathcal{L}\{\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i\}} \right) \quad (2.23)$$

donde  $[\sqrt{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho}]_{\perp \mathcal{L}\{\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i\}}$  es la proyección de  $\sqrt{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho}$  en el espacio  $\mathcal{L}\{\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i\}$ . Así, el término disipativo se representa como

$$\hat{D} = \begin{array}{c} \left| \begin{array}{cccc} \sqrt{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho} & \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o & \cdots & \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i & \cdots \\ (\sqrt{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho} | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o) & (\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o) & \cdots & (\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ (\sqrt{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho} | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i) & (\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i) & \cdots & (\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{array} \right. \\ \left| \begin{array}{cccc} \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o & \cdots & \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i & \cdots \\ (\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o) & \cdots & (\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o) & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ (\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_o | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i) & \cdots & (\sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i | \sqrt{\hat{\rho}}\hat{R}_i) & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{array} \right| \end{array} \quad (2.24)$$

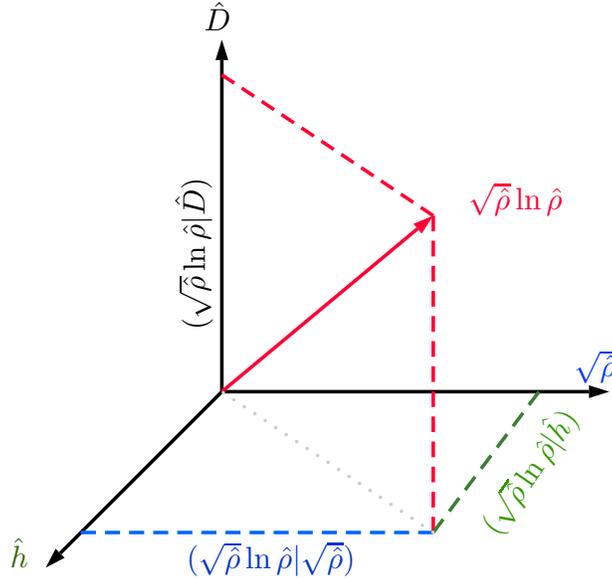


Figura 2.1. Representación esquemática de los términos de la ecuación de movimiento con un hamiltoniano independiente del tiempo.

donde  $|\cdot|$  es un determinante y  $\hat{B}$  es un operador idempotente con un valor de 0 para eigenvalores nulos de  $\hat{\rho}$  y 1 en cualquier otro caso. Para sistema indivisible, la última ecuación se puede representar como

$$\hat{D} = \sqrt{\hat{\rho}} \hat{B} \ln \hat{\rho} - \left[ (\sqrt{\hat{\rho}} \hat{B} \ln \hat{\rho} / \sqrt{\hat{\rho}}) \sqrt{\hat{\rho}} + (\sqrt{\hat{\rho}} \hat{B} \ln \hat{\rho} / \hat{h}) \hat{h} \right] \quad (2.25)$$

donde  $\hat{h} = \sqrt{\hat{\rho}} \Delta \hat{H} / (\sqrt{\hat{\rho}} \Delta \hat{H} | \sqrt{\hat{\rho}} \Delta \hat{H})$ . De la última ecuación, se observa la característica vectorial de  $\sqrt{\hat{\rho}}$ , donde son vectores unitarios, como se puede observar en la Figura [2.1](#).

Entonces, la ecuación de movimiento se puede simplificar como

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{1}{\tau_D} (\hat{\rho} \ln \hat{\rho} + \alpha \hat{\rho} + \frac{1}{2} \beta \{ \hat{H}, \hat{\rho} \}) \quad (2.26)$$

donde los términos  $\alpha$  y  $\beta$  son

$$\alpha = \frac{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{H} \ln \hat{\rho}) \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{H}) - \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{H}^2) \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})}{\Gamma} \quad (2.27)$$

$$\beta = \frac{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{H}) \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) - \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{H} \ln \hat{\rho})}{\Gamma} \quad (2.28)$$

y

$$\Gamma = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H}^2) - \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H})^2 \quad (2.29)$$

### 2.3.1. Tiempo de intra-relajación $\tau_D(\hat{\rho})$

El tiempo de relajación interna es un funcional que describe qué tan rápido es la relajación en un proceso de no equilibrio. Está limitado por el límite inferior en el que puede ocurrir un proceso cuántico. En este contexto, una de las primeras propuestas para el tiempo de relajación interna es la de Mandelstam y Tamm [22], quienes lo propusieron para que fuera un límite de tiempo debido al tiempo de aprobación<sup>2</sup> basado en el principio de incertidumbre de Heisenberg, es decir,

$$\tau \geq \frac{\pi}{2} \frac{\hbar}{(\sqrt{\hat{\rho}}\Delta\hat{H}|\sqrt{\hat{\rho}}\Delta\hat{H})^{1/2}} \quad (2.30)$$

lo cual es cierto siempre que la evolución sea descrita por un hamiltoniano hermítico. Además, Beretta introdujo un límite inferior para  $\tau_D$  basado en el principio de incertidumbre de Heisenberg del tiempo y la energía [17]. En este sentido,  $\tau_D$  debería satisfacer la relación de incertidumbre de Heisenberg

$$\tau_D(\hat{\rho}) \geq \frac{\hbar(\hat{D}|\hat{D})^{1/2}}{2(\sqrt{\hat{\rho}}\Delta\hat{H}|\sqrt{\hat{\rho}}\Delta\hat{H})^{1/2}} \quad (2.31)$$

## 2.4. Computación cuántica e información cuántica

Todas las computadoras de hoy en día, son máquinas de Turing, y todas obedecen al mismo principio, el de la Máquina Universal de Turing. En la actualidad, las computadoras más avanzadas siguen siendo máquinas que operan de manera secuencial sobre las operaciones elementales en que los programas dividen las tareas que se quieren ejecutar. Las llamadas supercomputadoras *paralelas*, al fin y al cabo, no son más que varias máquinas trabajando en conjunto de cierta manera, y cada una de manera secuencial. El problema es que ese principio de funcionamiento limita seriamente las tareas computacionales que se pueden ejecutar. No se pueden atacar, por ejemplo, problemas grandes fuera de la clase  $P$ . Un problema de la clase  $P$  es aquel para el cual el mejor

<sup>2</sup>El tiempo requerido por un vector de estado para volverse ortogonal a sí mismo.

algoritmo tiene un tiempo de ejecución polinomial en función del tamaño de la entrada. La factorización de un número entero, por ejemplo, no está en  $P$ . No se dice que una factorización es imposible de realizar, ya que una computadora cualquiera puede, en principio, emprender la tarea, sino que para factorizar un entero grande se requiere tal capacidad de cálculo que, desde el punto de vista práctico, se puede considerar la tarea irrealizable.

A esto se añade otro problema, que se va haciendo más importante con el paso del tiempo. Desde el punto de vista físico, las computadoras actuales están basadas en un tipo de transistor, el Complementary Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor (CMOSFET). Mucho del progreso en la capacidad de las computadoras se debe a la miniaturización de los componentes en un chip, gracias a los avances de la tecnología litográfica. Actualmente, por ejemplo, se pueden realizar compuertas lógicas y conexiones cuyo tamaño está por debajo del micrómetro ( $10^{-6}$  metros). En 1965, Gordon E. Moore, entonces de la compañía Fairchild Semiconductor, hizo notar que el número de transistores en los microprocesadores se estaba multiplicando por 4 cada 4 años. Sorprendentemente, la observación de Moore sigue siendo válida en la actualidad, en lo que se conoce como la *ley de Moore*. Pero esta tendencia no podrá continuar indefinidamente. Aparte de la limitación fundamental de que no se podrán hacer reducciones por debajo de la escala molecular o atómica, los problemas técnicos planteados por la miniaturización se tornan cada vez más difíciles de resolver. De acuerdo con Joel Birnbaum, Director Científico de Hewlett Packard, esto se refleja en la *segunda ley de Moore*, que indica que el costo de producción se ha estado multiplicando por 4 cada 2 años, es decir, mucho más rápido que el incremento de capacidad de las computadoras. Esto puede causar el fin de la ley de Moore, porque no se podrán justificar grandes inversiones en investigación, desarrollo y manufactura de una tecnología sólo marginalmente mejor [23].

Es por estas razones que muchos investigadores buscan construir computadoras basadas en un nuevo paradigma tecnológico y un nuevo principio computacional. Una de las corrientes más importantes es la de la computación cuántica. La idea de la computación cuántica fue introducida por primera vez en 1982, por Richard Feynman (premio Nobel de Física en 1965), cuando consideró la simulación de sistemas en mecánica cuántica por otros sistemas cuánticos [24]. Sin embargo, la computación cuántica quedaba en un plano hipotético y no fue hasta 1985 que se logró un avance fundamental en esta dirección, con la publicación de David Deutsch, del Departamento de Física

de la Universidad de Oxford, del artículo en el que describía una computadora cuántica universal [25], probablemente haciendo pasar a la historia la máquina universal descrita por Alan Turing, en Cambridge, en los años 30 [26].

Si bien las computadoras cuánticas no son aún una realidad, se han dado pasos importantes tanto en el desarrollo de bits cuánticos y compuertas lógicas cuánticas como en el desarrollo de algoritmos cuánticos.

### 2.4.1. Bits cuánticos

Las computadoras actuales, o clásicas, tienen como unidad básica el bit. Este puede estar en uno de dos estados, convencionalmente 0 ó 1. En una computadora cuántica, en cambio, un bit cuántico, o *qubit*, puede estar no sólo en uno de los estados 0 ó 1, sino que también puede estar en una superposición de ambos. En mecánica cuántica, en general, un sistema tiene acceso a un número discreto de estados  $a_i$  que puede ser infinito, y puede ser *preparado* experimentalmente en uno de esos estados o en una superposición de dos o más de entre ellos.

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (2.32)$$

donde  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ ; y  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ .

Este es el elemento fundamental en la idea de computadora cuántica de Deutsch y el origen de su enorme potencial. Suponiendo que se tiene un registro físico de ocho bits. En una computadora clásica se puede almacenar sólo uno de los 256 ( $2^8$ ) números dados por las configuraciones 00000000, 10000000, 01000000. . . , *etc.* En cambio una computadora cuántica puede almacenar los 256 números a la vez. Más aún, puede operar sobre los 256 números a la vez. Obviamente el operar sobre los 256 números en un solo paso reduce el tiempo de cálculo de manera radical respecto a una máquina clásica, que tiene que operar sobre cada número, del 0 al 255, uno después del otro. Las computadoras cuánticas poseen, pues, un paralelismo intrínseco, diferente al de las máquinas paralelas actuales que, como se mencionó anteriormente, siguen siendo máquinas secuenciales. En la Figura 2.2 se ilustra cómo se opera en paralelo sobre los cuatro números de un qubit hecho de dos bits físicos.

$$\begin{array}{ccc}
 \left[ \begin{array}{c} a_1|00\rangle \\ + \\ a_2|01\rangle \\ + \\ a_3|10\rangle \\ + \\ a_4|11\rangle \end{array} \right] & \xrightarrow{f} & \left[ \begin{array}{c} b_1|00\rangle \\ + \\ b_2|01\rangle \\ + \\ b_3|10\rangle \\ + \\ b_4|11\rangle \end{array} \right] \\
 \underbrace{\hspace{10em}} & & \underbrace{\hspace{10em}} \\
 \text{Registro} & & \text{Registro} \\
 \text{de entrada} & & \text{de salida}
 \end{array}$$

Figura 2.2. Un qubit en el registro de entrada estará dado por una combinación lineal de cuatro estados, cada uno con cierta amplitud de probabilidad  $a_i$ . Una operación  $f$  sobre el qubit lleva a un registro de salida en el que las cuatro amplitudes de probabilidad habrán cambiado, en un sólo paso.

El gran potencial de la computación cuántica fue finalmente puesto en evidencia, y de manera contundente, cuando Peter Schor, de AT&T Bell Laboratories, publicó en 1994 un algoritmo de factorización en tiempo polinomial para computadoras cuánticas [27]. El número más grande que las supercomputadoras clásicas han logrado factorizar tiene 140 dígitos. Se ha estimado que factorizar un número de 1000 dígitos tomaría alrededor de  $10^{20}$  años, lo equivalente a 10 mil millones de veces la edad del Universo<sup>3</sup>. El algoritmo de Shor, en cambio, permitiría factorizar un número de 1000 dígitos en aproximadamente media hora [27, 28]. Dicho esto, es importante hacer notar que una computadora cuántica no es más rápida que una supercomputadora en cualquier cálculo. La multiplicación de dos números, por ejemplo, no es más rápida en una computadora cuántica. La gran ventaja de la computación cuántica se pone de manifiesto en problemas *paralelizables*, es decir, aquellos problemas en los que se pueden ejecutar diferentes cálculos simultáneamente en la búsqueda de su solución. La mayor parte de los problemas de interés, sin embargo, son paralelizables en mayor o menor grado. Es por esta razón que se han desarrollado las supercomputadoras paralelas actuales y que se las considera los instrumentos computacionales más avanzados de los que se dispone en la actualidad.

Otro de los algoritmos fantásticos desarrollados para computadoras cuánticas es el algoritmo de búsqueda de Lov Grover, de Lucent Technologies, capaz de encontrar uno de los ítems de una

<sup>3</sup>La edad del universo está comprendida entre 13761 y 13835 millones de años.

base de datos desordenada de  $N$  entradas en  $\sqrt{N}$  pasos en promedio, en lugar de los  $N/2$  que se requieren en promedio en una computadora actual [29]. Es evidente que la diferencia es realmente enorme cuando se trata de bases de datos grandes.

## 2.4.2. Compuertas cuánticas.

A diferencia de las compuertas lógicas que pueden operar de  $n$ -bits en  $m$ -bits, las compuertas cuánticas deben operar de  $n$ -qubits en  $n$ -qubits. Esta es una condición necesaria pero no suficiente para satisfacer la reversibilidad. Cada compuerta cuántica de  $n$ -qubits puede ser representada por una matriz unitaria de dimensión  $2^n$ , donde la transformación realizada por la compuerta cuántica es realizada por el operador matriz asociado a ella.

Con base en la descripción de la transformación que realiza una compuerta cuántica sobre los elementos de la base del espacio, la matriz unitaria asociada a ella se obtiene a partir del siguiente procedimiento: Las filas de la matriz corresponden a los vectores base de entrada y las columnas de la matriz corresponden a los vectores base de salida.

### 2.4.2.1. Compuertas cuánticas de 1-Qubit.

Las compuertas cuánticas que operan sobre un qubit (un qubit de entrada y un qubit de salida) tienen asociadas matrices  $[2 \times 2]$ . La convención utilizada en los ejemplos siguientes para representar vectorialmente el ket  $|0\rangle$  y el ket  $|1\rangle$  es la misma que la representada por la ecuación siguiente:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.33)$$

Inicialmente se presenta la compuerta cuántica *identidad*. Aunque su comportamiento, como su nombre lo indica, no modifica el qubit sobre el que actúa, con el siguiente procedimiento se busca ilustrar la construcción de la matriz unitaria asociada a una compuerta cuántica. El comportamiento de la Compuerta Identidad  $[I]$  está dado por:  $[I] |j\rangle \rightarrow |j\rangle$ , y la transformación de los qubits que

realiza la compuerta y su representación gráfica es:

$$\begin{aligned} [I] |0\rangle &\rightarrow |0\rangle, & |x\rangle &= \boxed{\text{Identidad}} |x\rangle. \\ [I] |1\rangle &\rightarrow |1\rangle, \end{aligned} \quad (2.34)$$

Entonces, la matriz unitaria correspondiente a la compuerta cuántica identidad, esta dada por:

$$\begin{array}{c|cc} & |0\rangle & |1\rangle \\ \hline |0\rangle & 1 & 0 \\ |1\rangle & 0 & 1 \end{array}, \text{ la cual es representada por: } I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.35)$$

El comportamiento de la compuerta cuántica identidad en términos de la matriz [2.35](#) es descrito por:

$$[I] |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle, \quad (2.36)$$

$$[I] |1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |1\rangle.$$

El siguiente ejemplo ilustra el comportamiento de una compuerta cuántica conocida como *Hadamard* [ $H$ ]. Esta compuerta transforma un qubit en una superposición de los elementos de la base  $\{|0\rangle; |1\rangle\}$ .

$$\begin{aligned} [H] |0\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \\ [H] |1\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), \end{aligned} \quad \text{donde} \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad (2.37)$$

### 2.4.2.2. Compuertas cuánticas de 2-Qubit.

Se presentan ahora algunas compuertas que operan sobre dos qubits (dos qubits de entrada y dos qubits de salida) y sus matrices  $[4 \times 4]$  correspondientes. La convención utilizada para representar

vectorialmente los kets  $\{|0, 0\rangle; |0, 1\rangle; |1, 0\rangle$  y  $|1, 1\rangle\}$  es:

$$\begin{aligned}
 |0, 0\rangle &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} &
 |0, 1\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} &
 |1, 0\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} &
 |1, 1\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.38}$$

Para una compuerta que tiene el comportamiento  $U_{xor} |x, y\rangle \rightarrow |x, x \oplus y\rangle$  y le corresponde la matriz:

$$\begin{aligned}
 [U_{xor}] |0, 0\rangle &\rightarrow |0, 0 \oplus 0\rangle = |0, 0\rangle, \\
 [U_{xor}] |0, 1\rangle &\rightarrow |0, 0 \oplus 1\rangle = |0, 1\rangle, \\
 [U_{xor}] |1, 0\rangle &\rightarrow |1, 1 \oplus 0\rangle = |1, 1\rangle, \\
 [U_{xor}] |1, 1\rangle &\rightarrow |1, 1 \oplus 1\rangle = |1, 0\rangle,
 \end{aligned}
 \quad \text{donde} \quad
 U_{xor} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{2.39}$$

Esta compuerta corresponde a un *xor* cuántico, también llamada *controlled-not (C-NOT)*. Esta cambia el segundo qubit si el primer qubit es 1 y deja sin cambiar el segundo qubit si el primero es 0. Esta compuerta es representada por el circuito de la Figura 2.3.

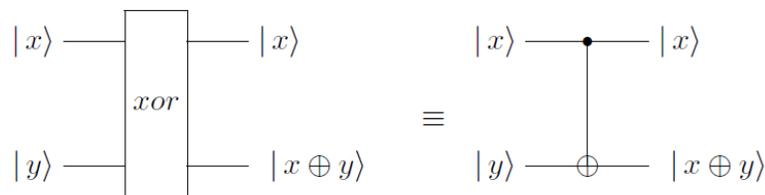


Figura 2.3. Compuerta cuántica *C-NOT*.

La compuerta *C-NOT* también puede actuar sobre un qubit formado por cualquier combinación lineal de estados y su comportamiento es similar al descrito anteriormente, el cambio o no del

segundo qubit es controlado por el primer qubit y es desarrollado de la siguiente forma:

$$[CNOT] (|0\rangle \otimes (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle)) = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

Si el primer qubit es *cero* el segundo qubit no cambia; pero si el primer qubit es *uno*, se obtiene:

$$[CNOT] (|1\rangle \otimes (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle)) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \beta \\ \alpha \end{bmatrix}, \quad (2.41)$$

Es decir, el segundo qubit intercambia sus coeficientes.

En conclusión, la compuerta controlada NOT ( $C - NOT$ ) es una compuerta cuántica que es un componente esencial en la construcción de una computadora cuántica. Se puede usar para enredar y desenredar estados EPR<sup>4</sup>. Cualquier circuito cuántico puede simularse con un grado arbitrario de precisión utilizando una combinación de puertas CNOT y rotaciones de un solo qubit .

### 2.4.3. Irreversibilidad y Reversibilidad

Se pueden clasificar los procesos de cómputo, que satisfacen las leyes fundamentales de la física, en aquellos para los que lo fundamental es una operación irreversible (disipativa), y del otro lado aquellos para los cuales eso no es fundamental. Las compuertas lógicas cuánticas, materializadas en dispositivos de algún tipo, son las encargadas de realizar las operaciones. Una compuerta lógica cuya información de salida sea menor que la de entrada es irreversible (disipativa), pues tuvo que desechar información, lo cual se traduce en última instancia en una pérdida de energía de algún tipo. Por el contrario, una compuerta lógica cuya información de salida sea igual a la in-

<sup>4</sup>Estos estados se producen cuando pares o grupos de partículas se generan, interactúan o comparten proximidad espacial, de manera que el estado cuántico de cada partícula no se puede describir independientemente del estado de la otra(s), incluso cuando las partículas están separadas por una gran distancia (entrelazamiento cuántico).

formación de entrada será reversible (no disipativa), la información permanece invariante, lo cual lleva consigo una energía manifiestamente constante. Una compuerta de este tipo, más aún, un sistema de compuertas de este estilo, conectadas de alguna forma, capaz de realizar una operación lógica, es susceptible de que en ella se invierta el proceso de cómputo y al final se recuperen las condiciones iniciales sin pérdida alguna de energía.

Los procesos termodinámicos irreversibles sobre el sistema de interés en este trabajo y su entorno, son de vital importancia para el entendimiento de la evolución de sus estados, debido a que estos nunca vuelven a sus estados originales. Hay una serie de atributos que normalmente asociamos con dichos procesos. Estos incluyen:

- Disipación: la dispersión de la energía entre muchos grados de libertad.
- Asimetría de inversión de tiempo: la evidente direccionalidad de la flecha del tiempo.
- Equilibrio roto, ya sea dentro del sistema de interés o entre éste y su entorno térmico.

Para los sistemas macroscópicos, estas manifestaciones de irreversibilidad se relacionan a través de la lógica estricta de la segunda ley de la termodinámica.

Para los sistemas microscópicos, la segunda ley debe interpretarse estadísticamente, teniendo en cuenta las fluctuaciones en torno al comportamiento medio. En los últimos años se ha encontrado que tales fluctuaciones satisfacen una serie de relaciones exactas e inesperadas [30]. Estos a su vez han agudizado nuestra comprensión de la segunda ley, ya que se aplica a escala microscópica [31]. Las relaciones cuantitativas entre la disipación y la asimetría de inversión en el tiempo, son dos de las manifestaciones de irreversibilidad mencionadas anteriormente, de relevancia específica para este trabajo [32-36].

#### **2.4.4. Estados entrelazados**

Una de las características particulares y no intuitivas de los sistemas cuánticos es la relacionada con la existencia de estados entrelazados (entanglement). La existencia de estos estados cuánticos permiten afirmar que la descripción del estado de un sistema cuántico no puede ser siempre realizada con base en la descripción de los elementos que lo componen.

Un estado cuántico de  $n$  qubits se dice enredado si este no puede ser expresado como el producto tensorial de los estados de cada uno de los  $n$  qubits que lo componen.

Sean dos qubits  $|x\rangle$  y  $|y\rangle$  dados por:

$$|x\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle; \quad |y\rangle = c|0\rangle + d|1\rangle; \quad a, b, c, d \in \mathbb{C} \quad (2.42)$$

el producto tensorial de estos dos qubits esta dado por:

$$\begin{aligned} |x\rangle \otimes |y\rangle &= |x, y\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle) \\ &= ac|0, 0\rangle + ad|0, 1\rangle + bc|1, 0\rangle + bd|1, 1\rangle \end{aligned} \quad (2.43)$$

entonces, un estado de dos qubits es un estado entrelazado si no puede ser expresado en la forma de la ecuación anterior. Con la intención de visualizar estos estados se presentan los ejemplos siguientes:

- El estado  $|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|0, 0\rangle - |0, 0\rangle + |0, 0\rangle - |0, 0\rangle)$  es un estado *no entrelazado*, porque el sistema de ecuaciones:

$$ac = \frac{1}{2}; \quad ad = -\frac{1}{2}; \quad bc = \frac{1}{2}; \quad bd = -\frac{1}{2}; \quad (2.44)$$

tiene la solución  $a = b = c = \frac{1}{\sqrt{2}}; d = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ , es decir:

$$|\psi\rangle = \left( \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) \otimes \left( \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right). \quad (2.45)$$

- El estado  $|\psi_{ent}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle + |1, 0\rangle)$  es un estado *entrelazado*, porque el sistema de ecuaciones:

$$ac = 0; \quad ad = -\frac{1}{\sqrt{2}}; \quad bc = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad bd = 0; \quad (2.46)$$

no tiene solución, por lo tanto  $|\psi_{ent}\rangle$  es indivisible.

El análisis del comportamiento de un sistema cuántico con relación a la medida del mismo, permite observar si el sistema se encuentra o no en un estado entrelazado. Un sistema se encuentra

en un estado entrelazado si la medida de uno de sus componentes afecta la medida de los otros, y el sistema se encuentra en un estado no entrelazado si esto no sucede.

En el contexto original del artículo de EPR [37, 38], el entrelazamiento se postuló como una propiedad estadística del sistema físico formado por una pareja de electrones que provienen de una fuente común y están altamente correlacionados debido a la ley de conservación del momento lineal. Según el argumento de EPR, si, transcurrido un cierto tiempo desde la formación de este estado de dos partículas, se realiza la medición simultánea del momento lineal en uno de los electrones y de la posición en el otro, se lograrían sortear las limitaciones impuestas por el principio de incertidumbre de Heisenberg a la medición de ambas variables físicas, ya que la alta correlación permitiría inferir las propiedades físicas correlativas de una partícula (posición o momento) respecto de la otra. Si esto no fuera así, se tendría que aceptar que ambas partículas transmiten instantáneamente algún tipo de perturbación que a la larga (cuando se recopilan los datos estadísticos) tendría el efecto de alterar las distribuciones estadísticas de tal forma que el principio de Heisenberg quedase salvaguardado (haciendo más indefinida la posición de una de las partículas cuando se mide el momento lineal de la otra, y viceversa).

Es importante señalar que estos términos simultáneamente o instantáneamente, no tienen en realidad significado preciso dentro del contexto de la teoría de la relatividad especial, que es el esquema universalmente aceptado para la representación de sucesos en el espacio-tiempo. Debe interpretarse por lo tanto que las mediciones antes mencionadas se hacen en un intervalo temporal tan breve que es imposible que los sistemas se comuniquen con una celeridad menor o igual que la establecida por el límite que impone la velocidad de la luz o velocidad máxima de propagación de las interacciones.

El entrelazamiento es un fenómeno cuántico, sin equivalente clásico, en el cual los estados cuánticos de dos o más objetos se deben describir mediante un estado único que involucra a todos los objetos del sistema, aún cuando los objetos estén separados espacialmente. Esto lleva a correlaciones entre las propiedades físicas observables. Por ejemplo, es posible preparar (entrelazar) dos partículas en un solo estado cuántico de espín nulo, de forma que cuando se observe que una gira hacia arriba, la otra automáticamente recibirá una *señal* y se mostrará como girando hacia abajo, pese a la imposibilidad de predecir, según los postulados de la mecánica clásica, qué estado cuán-

tico se observará. Esas fuertes correlaciones hacen que las medidas realizadas sobre un sistema parezcan estar influyendo instantáneamente otros sistemas que están enlazados con él, y sugieren que alguna influencia se tendría que estar propagando instantáneamente entre los sistemas, a pesar de la separación entre ellos.

Con el tiempo se ha acabado definiendo como uno de los aspectos más peculiares de esta teoría, especialmente desde que el físico norirlandés John S. Bell dio un nuevo impulso a este campo en los años 60 gracias a un refinado análisis de las sutilezas que involucra el entrelazamiento [39]. La propiedad matemática que subyace a la propiedad física de entrelazamiento es la llamada no separabilidad. Además, los sistemas físicos que sufren entrelazamiento cuántico son típicamente sistemas microscópicos (casi todos los que se conocen de hecho lo son), pues, según se entendía, esta propiedad se perdía en el ámbito macroscópico debido al fenómeno de la Decoherencia cuántica. Sin embargo más recientemente, un experimento [40] ha logrado el citado entrelazamiento en diamantes milimétricos, llevando así este fenómeno al nivel de lo macroscópico. El entrelazamiento es la base de tecnologías en fase de desarrollo, tales como la computación cuántica [41] o la criptografía cuántica, y se ha utilizado en experimentos de teleportación cuántica.

El ejemplo mas importante de estos estados, son los estados de Bell que forman la siguiente base ortonormal de estados entrelazados:

$$\begin{aligned} |\beta_{00}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 0\rangle + |1, 1\rangle); & |\beta_{01}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 1\rangle + |1, 0\rangle); \\ |\beta_{10}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 0\rangle - |1, 1\rangle); & |\beta_{11}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 1\rangle - |1, 0\rangle); \end{aligned} \quad (2.47)$$

### 2.4.5. Decoherencia

La decoherencia cuántica es el término aceptado y utilizado en mecánica cuántica para explicar cómo un estado cuántico entrelazado puede dar lugar a un estado físico clásico (no entrelazado). En otras palabras cómo un sistema físico, bajo ciertas condiciones específicas, deja de exhibir efectos cuánticos y pasa a exhibir un comportamiento típicamente clásico, sin los efectos contraintuitivos típicos de la mecánica cuántica [42]. El nombre procede del hecho técnico de que la decoherencia se manifiesta matemáticamente por la pérdida de coherencia de la fase compleja relativa de las

combinaciones lineales que definen el estado. Así la decoherencia cuántica explicaría por qué a grandes escalas la física clásica que ignora los efectos cuánticos constituye una buena explicación del comportamiento del mundo [43, 44]. Por ejemplo, en el caso del experimento didáctico del gato de Schrödinger la interacción de las partículas del gato con el ambiente podrían producir una decoherencia y hacer que la combinación de "gato vivo" + "gato muerto" perdiera coherencia y se transformara en un estado clásico y por tanto tras un lapso de tiempo del orden de  $\hbar^2$  ( $10^{-65}$  s) el gato estaría dentro de la caja efectivamente vivo o muerto, pero no en una superposición de ambos. La decoherencia es pues muy importante para explicar por qué muchos sistemas físicos macroscópicos tienen un comportamiento tan diferente de los sistemas que exhiben efectos cuánticos.

Para explicar el actuar más básico de este mecanismo, se tiene el siguiente ejemplo, si tenemos un estado cuántico con dos niveles, o qubit, definidos por  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ , también es lícito tener estados superpuestos:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \quad (2.48)$$

Se tiene ahora al anterior qubit interactuando con un entorno. Este entorno será también un sistema cuántico, y su estado inicial se define como  $|E_{ini}\rangle$ . La interacción entre el entorno y el qubit es tal que

$$\begin{aligned} |0\rangle |E_{ini}\rangle &\rightarrow |0\rangle |E_0\rangle \\ |1\rangle |E_{ini}\rangle &\rightarrow |1\rangle |E_1\rangle \end{aligned} \quad (2.49)$$

Entonces el estado superpuesto evoluciona en contacto con el entorno tal que:

$$|\psi\rangle |E_{ini}\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle |E_0\rangle + |1\rangle |E_1\rangle) \quad (2.50)$$

Parece que se obtiene el mismo estado que antes, pero en realidad es muy diferente. El estado sigue en superposición, pero ahora el qubit y el entorno están también entrelazados. Si se toma el sistema global será muy similar, pero observando el qubit, que es el principal interés, todo cambia. Haciendo uso de la matriz densidad de un sistema cuántico, y recordando que contiene la descripción más general del mismo. Se tienen dos utilidades principales. Primero, sirve para

describir un sistema cuando no sabemos en qué estado está, salvo con cierta probabilidad, tomando como ejemplo una moneda tiene dos estados  $|cara\rangle$  ó  $|cruz\rangle$ , si esta es lanzada al aire y no se observa el resultado, sólo se puede concluir que está en  $|cara\rangle$  ó  $|cruz\rangle$  con una probabilidad de  $1/2$ . Ese estado indeterminado se escribe en la notación de la matriz densidad como:

$$\rho = \frac{1}{2} |cara\rangle \langle cara| + \frac{1}{2} |cruz\rangle \langle cruz| \quad (2.51)$$

La segunda utilidad de la matriz densidad, también es estudiar los subsistemas de un sistema global. Gracias a esto se puede analizar el qubit inicial. Para extraer la información sobre un subsistema existe una operación llamada *traza parcial*, que permite eliminar la parte del sistema global y observar solo el qubit de interés. Sí se aplica esta operación al entorno del qubit se obtiene:

$$\rho = \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle \langle 1| \quad (2.52)$$

Este estado es claramente igual al caso de la moneda. ¿Qué significa esto? Básicamente viene a decir que como el estado del qubit depende del estado del entorno ya no está en una superposición, sino que está en un estado definido que se desconoce. Este es el mecanismo básico de la decoherencia. Al interactuar con el entorno ocurre un entrelazamiento con él, y esto hace que el estado particular no esté en un estado superpuesto, sino en uno concreto. Otros mecanismos por los cuales puede ocurrir la decoherencia son, vibraciones de latice e irreversibilidades intrínsecas al sistema. El efecto de este mecanismo y las posibles medidas se observarán en la definición del caso de estudio y en el posterior desarrollo del modelo matemático.

## 2.5. Caso de estudio: Compuerta cuántica (*C-NOT*)

Ilustrando las principales características de la ecuación de movimiento del SEAQT y el uso de los conceptos mencionados anteriormente, en esta sección se presenta el sistema que en computación cuántica se emplea para realizar operaciones unitarias en matrices de qubits <sup>5</sup>. Como se

<sup>5</sup>La información cuántica generalmente se almacena en sistemas de dos estados, y no en sistemas con tres o más estados ortogonales (llamados qudits, para  $d$  dimensiones. Por ejemplo, fotones, una partícula spin-1). Hay varias

mencionó anteriormente estas operaciones se conocen como compuertas cuánticas. Cuando se propone construir una computadora cuántica, en realidad se apunta a construir qubits, que contengan información usando propiedades físicas y las compuertas. Es decir, encontrar una buena manera de almacenar información y leerla no sería suficiente, es de gran interés el poder manipularla. Entonces, para cada tipo de implementación de qubit, se debe construir un método apropiado para realizar operaciones en él, al igual que, comprender y predecir la decoherencia, lo cual es importante en aplicaciones que involucran dispositivos nanométricos, codificación, computación cuántica y criptografía cuántica. Es la razón para presentar la evolución de la puerta cuántica C-NOT basada en el SEAQT, y los parámetros como fidelidad, factor de coherencia y entropía.

Con el objetivo de incluir los efectos de la rotación y la aplicación de la compuerta cuántica en un proceso de Computación Cuántica (QC), se utiliza el siguiente Hamiltoniano,

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_o + V(t) \quad (2.53)$$

donde  $\hat{H}_o = -(1/2)\hbar\omega_L H_z$  es un operador hermítico, para dos qubits este es una matriz  $[4 \times 4]$  el cual controla el nivel de rotación, y  $V(t) = \hbar\theta(t)\Omega$  representa los efectos de la compuerta cuántica, para el caso de estudio:

$$\Omega = [CNOT] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

la cual realiza los efectos descritos anteriormente sobre el sistema de dos qubits. A su vez, dos tipos de pulsos de compuertas  $\theta(t)$  son comúnmente usados, el Gaussiano

$$\theta_G(t) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\tau} e^{-\left(\frac{t-t_0}{\tau}\right)^2} \quad (2.55)$$

---

razones para esto: Por un lado, los sistemas de dos estados suelen ser más fáciles de implementar que los sistemas de múltiples estados, y actualmente la implementación de una computadora de muchos qubit es un gran desafío. Por otro lado, cuando se construyen computadoras cuánticas, se está interesado en obtener una aceleración exponencial sobre las computadoras clásicas, y al aumentar el número de estados solo se obtiene una aceleración polinómica

y Soft Square,

$$\theta_s(t) = N_f \frac{1}{2} \left[ \text{Erf} \left( \frac{t - t_1}{\tau} \right) - \text{Erf} \left( \frac{t - t_2}{\tau} \right) \right] \quad (2.56)$$

donde el centro del pulso está en  $t_0$ ,  $\tau$  es el ancho del pulso,  $t_1 = t_0 - \tau/2$  (comienzo del pulso) y  $t_2 = t_0 + \tau/2$  (final del pulso).

### 2.5.1. Control Bias

La aplicación de dicho pulso de compuerta no cumple el objetivo de lograr una compuerta CNOT, a menos que se inhiba la rotación de los estados al menos durante la acción del pulso. Esto corresponde a un paro temporal de la precesión. Por lo tanto, se introduce un pulso Bias (*polarización*) que está diseñado para hacer que los niveles se degeneren durante el pulso de la compuerta. La fuerza del Bias se ajusta mediante algún tipo de monitoreo no intrusivo, o por conocimiento previo del nivel fijo de rotación, para establecer temporalmente la degeneración de nivel. Durante la acción de la compuerta, los niveles deben estar completamente degenerados, de lo contrario se acumulan fases disruptivas.

El pulso Bias  $\theta_B$  se agrega al hamiltoniano:

$$V_B(t) = \frac{\hbar\omega_L}{2} \theta_B(t) H_z \quad (2.57)$$

donde  $\theta_B = \theta_s(t)/\theta_0$  para el Bias cuadrado suave y se normaliza como  $\int_{-\infty}^{\infty} \theta_B dt = 1$ . Luego, combinando la ec. (2.53) y Ec. (2.57), el hamiltoniano es

$$H_{2q}(t) = -\frac{\hbar\omega_L}{2} (1 - \theta_B(t)) H_z + \hbar \theta_G(t) \Omega + V_z \quad (2.58)$$

La potencia durante el pulso Bias esta dada por

$$\frac{d}{dt} W = \text{Tr}(\rho(t) \dot{H}(t)) \quad (2.59)$$

### 2.5.2. El caso no disipativo

En este caso, la ecuación de movimiento se usa sin el término disipativo  $\mathcal{D}$ , que es la ecuación de movimiento de von Neumann.

$$\dot{\rho} = \frac{-i}{\hbar}[H(t), \rho(t)] + \mathcal{D} \quad (2.60)$$

La Figura 4.1 muestra los resultados de CNOT-gate  $\Omega = CNOT$  usando la condición inicial de la Tabla 2.1 y los parámetros de Bias, luego de desarrollar el modelo matemático. Donde, se puede observar cómo el sistema está precesando hasta que el pulso Bias actúa durante las rotaciones. Permite que el pulso de la compuerta CNOT invierta la polarización en el momento  $t_2$ .

| $\vec{a}$ | Valor | $\vec{b}$ | Valor |
|-----------|-------|-----------|-------|
| $a_x(0)$  | 0.0   | $b_x(0)$  | 0.0   |
| $a_y(0)$  | 0.0   | $b_x(0)$  | 0.0   |
| $a_z(0)$  | -0.95 | $b_x(0)$  | -0.95 |

Tabla 2.1. Condición inicial de la matriz de estado de densidad y parámetros del pulso.

### 2.5.3. El caso disipativo - Ecuación de movimiento de Beretta

La ecuación de movimiento de Beretta se basa en la idea de que los procesos de no equilibrio siguen el camino del gradiente de entropía. En este caso el término  $\mathcal{D}$  se sustituye por

$$\mathcal{D} = -\frac{1}{\tau_D}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho} + \alpha \hat{\rho} + \frac{1}{2}\beta\{\hat{H}, \hat{\rho}\}) \quad (2.61)$$

que reducen a la ecuación de von Neumann en procesos de equilibrio, donde los términos  $\alpha$  y  $\beta$  vienen dados de las ecuaciones 2.27, 2.28 y 2.29.

## 2.6. Anteriores aplicaciones de SEAQT

El marco SEAQT permite el modelado de una gran variedad de procesos desde la escala cuántica a la escala macroscópica. En esta sección, se presenta un breve recuento de algunos de los

problemas a los que se ha aplicado SEAQT. Las aplicaciones del SEAQT incluyen el modelado del almacenamiento de hidrógeno en nanotubos de carbono [8], la predicción de dos partículas y un campo de partículas y fotones [9], el modelado de sistemas químicamente reactivos [45], y modelado de la degradación del cátodo de una Celda de Combustible de Óxido Sólido (SOFC) [10]. Estas aplicaciones muestran que SEAQT se puede aplicar para predecir el comportamiento de una variedad de sistemas que no están en equilibrio.

El modelado del comportamiento de equilibrio del almacenamiento de hidrógeno en un nanotubo de carbono es presentada por Smith *et al.* [8]. El modelo considera un nanotubo de carbono en el centro de un tanque con un volumen de  $250 \text{ nm}^3$ . Se supone que las moléculas de hidrógeno comienzan desde un estado de no equilibrio en el que las partículas se ubican cerca de la pared del recipiente y evolucionan libremente hasta que todo el sistema (nanotubos de carbono y moléculas de hidrógeno) alcanza un equilibrio estable. En este punto, las moléculas de hidrógeno se encuentran dentro del nanotubo de carbono. Los resultados presentan una cuantificación de la generación de entropía y una distribución tridimensional de las moléculas de hidrógeno con respecto al tiempo.

Cano *et al.* [9] presenta el modelado de la decoherencia en un sistema de partículas de dos spin-1/2 y un sistema de campo de partículas-fotones. Este proceso, asociado con la pérdida de información en los sistemas cuánticos, es vital en áreas como la computación cuántica, la información cuántica, la criptografía cuántica y la teletransportación cuántica. Los enfoques convencionales para modelar esta característica se basan en las Ecuaciones Cuánticas Maestras Markovianas (QME), donde una disipación (pérdida de información) del sistema explica la evolución de los sistemas. Sin embargo, las ecuaciones de QME no explican la evolución del estado de los sistemas fuertemente acoplados. Por otro lado, la ecuación de movimiento SEAQT es capaz de modelar y predecir la decoherencia de esos sistemas fuertemente acoplados y puede predecir rutas para controlar la decoherencia.

Continuando con el modelado de sistemas químicamente reactivos Guanchen *et al.* presentan la simulación por ordenador de sistemas de reacción química [45]. Este enfoque considera el espacio de estado dividido en los estados propios de los reactivos y los productos para formar la estructura propia de energía del sistema. Esta designación es capaz de determinar propiedades termodinámicas

micas cruciales, como las especies instantáneas, la concentración, la entropía, la producción de entropía, la velocidad de reacción, etc. El tiempo de cálculo requerido por este enfoque es inferior al de otros métodos comparables presentados en la literatura.

Finalmente, el estudio del comportamiento transitorio y la degradación de la microestructura de un cátodo de celda SOFC es analizado por Guanchen *et al.* utilizando el marco SEAQT [10]. Este es un problema que involucra la difusión de calor, la masa acoplada y las reacciones electroquímicas y químicas en un proceso de no equilibrio. Los resultados muestran los efectos del rendimiento de la celda de combustible con respecto al tiempo, así como el impacto de los cambios de la microestructura en el rendimiento del sistema.

# Capítulo 3

## Desarrollo del modelo matemático

El principal objetivo de este trabajo radica en describir y representar la evolución de la compuerta cuántica, al mismo tiempo de que desarrolla cada uno de los términos utilizados para resolver la ecuación de movimiento modificada por Beretta.

### 3.1. Espacio de Hilbert $\mathcal{H}$

El primer sistema compuesto considerado aquí consiste en dos qubits que interactúan. Se supone que el estado local del constituyente **A** y el de **B** están completamente representados en los espacios  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$  respectivamente. El espacio de Hilbert correspondiente al sistema compuesto se da como el producto externo de los espacios anteriores, de manera que

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \quad (3.1)$$

Cuando las partículas interactúan, sus estados se correlacionan y el operador de estado o densidad  $\rho$  para el sistema compuesto puede escribirse como

$$\rho = \rho_A \otimes \rho_B + \zeta \quad (3.2)$$

En otras palabras, al sustraer de  $\rho$  el producto externo de los operadores de estado locales, representados por los operadores de estado reducidos  $\rho_A \equiv \text{Tr}(\rho)_B$  y  $\rho_B \equiv \text{Tr}(\rho)_A$ , se obtiene un operador de correlación  $\zeta$ , que es un operador nulo solo en ausencia de correlaciones. El operador hamiltoniano en  $\mathcal{H}$ , que representa la energía total del sistema compuesto y el generador de su dinámica mecánica cuántica estándar, es

$$H_z = H_A \otimes I_B + I_A \otimes H_B + V_z \quad (3.3)$$

donde la dinámica de los qubits esta determinada por los operadores:

$$\begin{aligned} H_A &= \frac{\hbar}{2} \omega_0 \sigma_A^z \\ H_B &= \frac{\hbar}{2} \omega_0 \sigma_B^z \\ V &= -\Gamma \vec{\sigma}_A \otimes \vec{\sigma}_B \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde  $\vec{\sigma}_i (i = A, B)$  son los vectores tridimensionales de los operadores de Pauli,  $\sigma_i^z$  es su componente  $z$ ,  $\omega_0$  es la frecuencia de transición entre los niveles de energía excitada y base de cada partícula,  $\hbar$  es la constante de Planck reducida, y  $\Gamma$  es la fuerza del acoplamiento entre los subsistemas. Así, el hamiltoniano es

$$H_z = -m (\sigma_A^z \otimes I_B + \sigma_B^z \otimes I_A) - \Gamma (\vec{\sigma}_A \otimes \vec{\sigma}_B) \quad (3.5)$$

con  $m = \frac{\hbar}{2} \omega_0$ , es la fuerza unitaria de un campo magnético uniforme aplicado externamente en la dirección  $z$ . La fuerza del campo dada por  $\vec{M} = m \hat{z}$  es pequeña con respecto a los efectos de rotación de la interacción de Zeeman y  $\Gamma$  se establece en 0.02.

## 3.2. Componentes del vector de Bloch

Debido a que el hamiltoniano y el estado inicial están bien definidos, y la evolución del estado se puede describir con la ecuación de movimiento. El estado de densidad en la esfera de Bloch

para cada qubit se describe como

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{I} + u\hat{\sigma}_x + v\hat{\sigma}_y + w\hat{\sigma}_z) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+w & u-iv \\ u+iv & 1-w \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

donde,  $u$ ,  $v$ , y  $w$  son las componentes del vector de Bloch  $\vec{P}(t)$  y satisfacen la siguiente relación  $\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \leq 1$  (los estados de equilibrio son aquellos para los cuales  $\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} = 1$ , lo que significa que el estado está en la superficie de la esfera de Bloch).

Para representar la orientación del giro, es necesaria una matriz con la característica de tener valores propios de  $\pm 1$ . Las matrices de Pauli tienen esta cualidad, y están dadas por

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

El hecho de que existan tres matrices que puedan describir la orientación del spin no es una coincidencia, ya que el estado vectorial del spin en una esfera de Bloch (Figura 3.1) se puede definir completamente por tres componentes.

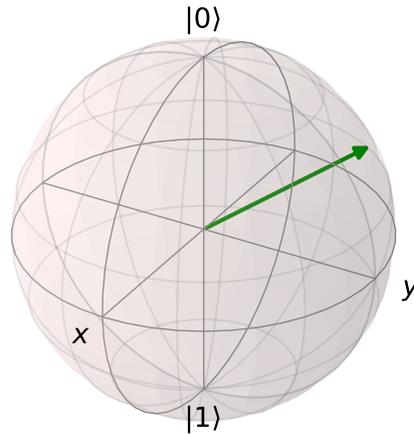


Figura 3.1. Representación esquemática de la esfera de Bloch. La orientación del spin en cada dirección se describe con las matrices de Pauli.

Una vez que el vector de estado representa el qubit, el siguiente paso es describir la evolución cuando la partícula de spin está contenida en un campo. En este caso, el hamiltoniano definido

anteriormente será el encargado de generar dicha evolución en la condiciones del caso de estudio mencionado.

Python se usa como lenguaje de programación (apéndice [A](#)) para resolver la ecuación diferencial no lineal de la ec. [\(2.26\)](#). La Figura [4.1](#) muestra la evolución del estado del sistema CNOT-gate, donde se observa que la trayectoria de evolución, está en rotación hasta la activación del pulso Bias el cual detiene la precesión que comienza en los componentes del vector Bloch  $u = 0$ ,  $v = 0$  y  $w$  que dependen de la condición inicial.

### 3.3. Concurrencia

El *entrelazamiento de formación* de un estado mixto  $\rho$  se define como el promedio mínimo del enredo de un conjunto de estados puros que representa  $\rho$ , es por esto que recordando lo mencionado anteriormente sobre la decoherencia, si se tiene un mecanismo que garantice la preservación de las correlaciones durante la evolución del sistema se pueden evitar los efectos de la decoherencia, para esto se usa el concepto de “entrelazamiento de formación” de un sistema cuántico bipartito el cual puede definirse en términos del número de singlets puros necesarios para crear el estado sin transferencia de información cuántica. En el trabajo de [\[46, 47\]](#) se encontró una fórmula exacta para el entrelazamiento de la formación en todos los estados mixtos de dos qubits que no tienen más de dos valores propios distintos de cero, y presentan evidencia que sugiere que la fórmula es válida para todos los estados de este sistema. A continuación se estudia la obtención de dicha cuantización:

El tipo más simple de sistema entrelazado es un par de qubits en un estado puro pero no factorizable. Un par de partículas de spin-1/2 en el estado de singlet  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$  es quizás el ejemplo más familiar, pero también se pueden considerar estados más generales como  $\alpha|\uparrow\downarrow\rangle + \beta|\downarrow\uparrow\rangle$ , que pueden estar menos entrelazados. Para cualquier sistema de dos partículas en estado puro, Bennett et al. [\[48\]](#) han demostrado que es razonable definir el entrelazamiento del sistema como la entropía de von Neumann de cualquiera de sus dos partes. Es decir, si  $|\psi\rangle$  es el estado de todo el sistema, el entrelazamiento se puede definir como  $E(\psi) = -\text{Tr}(\rho_{A,B} \text{Ln } \rho_{A,B})$ , donde  $\rho_{A,B}$  puede ser la traza parcial de  $|\psi\rangle\langle\psi|$  sobre cualquiera de los dos subsistemas, es decir,  $\rho_A = \text{Tr}(\rho)_B$

y  $\rho_B = \text{Tr}(\rho)_A$ . (No importa a qué subsistema se rastree, el resultado es el mismo de cualquier manera).

Es algo más difícil definir el entrelazamiento de estados mixtos [49], aunque nuevamente se puede usar el singlet como la unidad básica de enredo y relacionar el estado mixto dado con los singlets. La nueva característica en el caso de estados mixtos es que el número de singlets necesarios para *crear* el estado no es necesariamente el mismo que el número de singlets que se pueden *extraer* del estado [50-54]. Si se estudia la primera cantidad, esta conduce al concepto de “entrelazamiento de formación”. En términos matemáticos, este se define de la siguiente manera como en [51], dado un estado mixto  $\rho$  de dos sistemas cuánticos A y B, se cuantifican todas las formas posibles de expresar  $\rho$  como un conjunto de estados puros. Es decir, se consideran los estados  $|\psi_i\rangle$  y las probabilidades asociadas  $p_i$  tal que

$$\rho = \sum_i p_i |\psi\rangle \langle\psi|. \quad (3.8)$$

Para cada estado puro, el entrelazamiento  $E$  se define como la entropía de cualquiera de los dos subsistemas A y B [48, 55]:

$$E(\psi) = -\text{Tr}(\rho_A \text{Ln } \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \text{Ln } \rho_B) \quad (3.9)$$

El entrelazamiento de formación de  $\rho$ ,  $E(\rho)$ , se define como el mínimo, sobre todos estos conjuntos, del entrelazamiento medio de los estados puros que forman el conjunto:

$$E = \min \sum_i p_i E(\psi) \quad (3.10)$$

El entrelazamiento de formación tiene la propiedad satisfactoria de que es cero solo si el estado en cuestión se puede expresar como una mezcla de estados de productos. Para facilitar la expresión, en adelante el entrelazamiento de formación se escribirá simplemente como *entrelazamiento*.

La ecuación básica 3.9 está justificada por la interconvertibilidad física de una colección de pares en un estado puro arbitrario  $|\psi\rangle$  y una colección de pares en el estado de singlet estándar, siendo la relación de conversión asintótica dada por  $E(\psi)$  [48, 55]. El principal objetivo en este

momento es que para un par de qubits, el valor mínimo especificado en la ecuación. [3.10](#) se puede expresar como una función explícita de  $\rho$ , que se desarrolla a continuación.

La fórmula para el entrelazamiento hace uso de lo que se puede llamar la transformación de “spin flip”, que es una función aplicable tanto a los vectores de estado como a las matrices de densidad de un número arbitrario de qubits. Para un estado puro de un solo qubit, el *spin flip*, que se denota por una tilde, se define como

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sigma_y |\psi^*\rangle \quad (3.11)$$

donde  $|\psi^*\rangle$  es el complejo conjugado de  $|\psi\rangle$ . Cuando se expresa en una base fija tal como  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  un estado puro  $|\psi\rangle$  estará escrito en esta base particular, como  $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle$ , y  $\sigma_y$  expresado en esa misma base es la matriz  $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ . Para una partícula de spin 1/2, esta es la operación de inversión de tiempo estándar y, de hecho, invierte la dirección del spin [\[56\]](#). Para realizar un *spin flip* en  $n$  qubits, se aplica la transformación anterior a cada qubit individual. Si el sistema se describe mediante una matriz de densidad en lugar de un vector de estado, cada  $\sigma_y$  se aplica tanto a la derecha como a la izquierda. Por ejemplo, para un estado general de  $\rho$  de dos qubits, el objeto de interés en este punto, el estado del *spin flip* es

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y) \quad (3.12)$$

donde nuevamente se toma el complejo conjugado en la base anterior, que para un par de partículas de spin-1/2 es  $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ . En este caso, el *spin flip* es equivalente [\[57\]](#) al “complejo conjugado en la base mágica”, que aparece en [\[46\]](#). Aunque se ha introducido la transformación *spin flip* principalmente para tratar con estados mixtos, el concepto también es conveniente para expresar el entrelazamiento de un estado puro de dos qubits, y se puede escribir este enredo, definido en la ec. [3.9](#), como

$$E(\psi) = \mathcal{E}(C(\psi)), \quad (3.13)$$

donde la *Concurrencia*  $C$  se define como

$$C = \left| \sum_i \alpha_i^2 \right|, \quad C = |\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle| \quad (3.14)$$

y la función  $\mathcal{E}$  está dada por

$$\mathcal{E}(C) = -\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \text{Ln} \left( \frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \right) - \frac{1 - \sqrt{1 - C^2}}{2} \text{Ln} \left( \frac{1 - \sqrt{1 - C^2}}{2} \right) \quad (3.15)$$

La función  $\mathcal{E}(C)$  aumenta monótonamente y varía de 0 a 1 a medida que  $C$  va de 0 a 1, de modo que se puede tomar la concurrencia como una medida de entrelazamiento por derecho propio. Por ejemplo, el estado singlet  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$  no se modifica por un *spin flip* (excepto por un signo negativo general), de modo que su concurrencia  $C = |\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle|$  es igual a 1. Por otro lado, un estado puro no entrelazado o factorizable, como  $|\uparrow\downarrow\rangle$  siempre se asigna mediante la transformación *spin flip* a un estado ortogonal, de modo que su concurrencia es cero. Habiendo definido el *spin flip* y la función  $\mathcal{E}(C)$ , ahora se puede presentar la fórmula para el entrelazamiento de la formación de un estado mixto  $\rho$  de dos qubits:

$$C(\rho) = \max \{0, \lambda_4 - \lambda_3 - \lambda_2 - \lambda_1\} \quad (3.16)$$

y,  $\lambda_i$  son los valores propios, ordenados de menor a mayor, de la matriz hermítica  $R = \sqrt{\sqrt{\rho}\tilde{\rho}\sqrt{\rho}}$  la cual expresa convenientemente a  $E$  en términos de una matriz, que es una función de  $\rho$ . Para tener una idea del significado de  $R$ , se tiene en cuenta que  $\text{Tr}(R)$ , que va de 0 a 1, es una medida del "grado de igualdad" [58] entre  $\rho$  y  $\rho^*$ , que a su vez mide cuán cerca  $\rho$  se aproxima a una mezcla de Estados de Bell generalizados. Teniendo en cuenta también que los valores propios de  $R$  son invariantes en las transformaciones unitarias locales de los qubits separados, este hecho hace que, estos valores propios sean particularmente elegibles para ser parte de una fórmula para el entrelazamiento, ya que este también debe ser invariante en tales transformaciones.

### 3.4. Fidelidad

La fidelidad mide la cercanía de dos estados. En su forma más simple, esta cantidad se puede definir como  $\mathcal{F}^2 = \text{Tr}(\rho_A \rho_B)$  para el caso especial de  $\rho_A = |\psi_A\rangle \langle \psi_A|$  y  $\rho_B = |\psi_B\rangle \langle \psi_B|$ , se tiene  $\mathcal{F} \equiv |\langle \psi_A | \psi_B \rangle|$ , que es claramente la magnitud de la amplitud de probabilidad de superposición. Para alinear la definición cuántica de fidelidad con la teoría de probabilidad clásica, se utiliza una definición más general:

$$\mathcal{F}(\rho_A, \rho_B) \equiv \text{Tr} \left( \sqrt{\sqrt{\rho_A} \rho_B \sqrt{\rho_A}} \right) \quad (3.17)$$

Cuando  $\rho_A$  y  $\rho_B$  conmutan, ambos pueden ser diagonalizados por la misma matriz unitaria, pero con valores propios diferentes. En ese límite, se tiene  $\rho_A = \sum_i \lambda_i^A |i\rangle \langle i|$  y  $\rho_B = \sum_i \lambda_i^B |i\rangle \langle i|$  con lo cual

$$\mathcal{F}(\rho_A, \rho_B) \equiv \text{Tr}(\sqrt{\rho_A \rho_B}) \equiv \sum_{i,j} \sqrt{\lambda_i^A \lambda_j^B} \delta_{ij} \quad (3.18)$$

Se usará la fidelidad para monitorear la eficacia o estabilidad de cualquier proceso y controlar su calidad, donde se toma  $\rho_A(t)$  como el resultado exacto o deseado, y  $\rho_B(t)$  es el resultado, que incluye la decoherencia, la fricción de la compuerta y los efectos de disipación.

### 3.5. Factor de Coherencia

Dado que el alcance en este trabajo es modelar la decoherencia y la pérdida de correlaciones, deben adoptarse medidas para el entrelazamiento de un estado puro o la correlación de un estado mixto, así como una medida de coherencia. Por ejemplo, la siguiente función de correlación se definió en [7] según la propiedad de subaditividad de la función de entropía de von Neumann:

$$\sigma_{AB} = \text{Tr}(\rho \text{Ln } \rho) - \text{Tr}(\rho_A \text{Ln } \rho_A) - \text{Tr}(\rho_B \text{Ln } \rho_B) \quad (3.19)$$

La tasa de cambio de esta correlación funcional se expresa como

$$\frac{d[\sigma_{AB}(\rho)]}{dt} = \dot{\sigma}_{AB|H} - \dot{\sigma}_{AB|D} \quad (3.20)$$

donde el primer término en el lado derecho representa la contribución del término hamiltoniano de la ec. 2.26, mientras que el segundo término representa la contribución del término disipativo de la misma ecuación. Basado en las características de la ec. 2.26, se conjetura en [7] que el término disipativo solo puede destruir las correlaciones entre los subsistemas, por lo que  $\dot{\sigma}_{AB|D}$  no debe ser negativo en todo momento. La validez de esta conjetura, se confirma con los resultados numéricos actuales [9].

Una medida de la coherencia y la correlación del sistema es la norma de la traza del operador conmutador

$$\|\mathcal{C}\| = \text{Tr}(\mathcal{C}\mathcal{C}^\dagger) \quad (3.21)$$

donde  $\mathcal{C} = i[H, \rho]$ . La norma puede usarse como un indicador de cómo los elementos fuera de la diagonal de la matriz que representan al operador de estado del sistema compuesto evolucionan hacia cero. Su evolución temporal puede, por lo tanto, considerarse como una medida de la evolución de la pérdida de correlación entre los constituyentes. La ecuación 3.21 también puede medir la evolución temporal de la pérdida de coherencia de los constituyentes cuando se aplica a los operadores reducidos.

### 3.6. Pureza

La pureza  $\mathcal{P}(t)$  se define como  $\mathcal{P}(t) = \langle \rho(t) \rangle = \text{Tr}(\rho(t)\rho(t))$ . Se llama pureza ya que para una matriz de densidad de estado puro  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ,  $\rho^2 = \text{Tr}(\rho^2) = \text{Tr}(\rho) = 1$ , pero en general  $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$ . Para un estado puro, vemos que  $\rho^2 = \rho$ , implica que cada valor propio satisface  $\lambda_i(\lambda_i - 1) = 0$ , entonces  $\lambda_i = 0$  o  $1$ . Como los valores propios se suman hasta  $1$ , si un estado puro tiene un valor propio igual a uno, todos los demás serán cero. Un estado mixto o impuro tiene  $\sum_{i=1,2^{n_q}} \lambda_i^2 < 1$ , lo que indica que los valores propios distintos de  $0$  son menores que  $1$ . Para un qubit, la pureza está simplemente relacionada con el vector de polarización (Vector de Bloch).

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(t) &= \text{Tr}(\rho^2(t)) = \frac{1 + \mathbf{P}^2(t)}{2}, \\ \frac{d\mathcal{P}(t)}{dt} &= 2\text{Tr}\left(\rho(t)\frac{d\rho(t)}{dt}\right) = \vec{P}(t) \cdot \frac{d}{dt}\vec{P}(t) \end{aligned} \quad (3.22)$$

donde  $\mathbf{P}(t)$  es la longitud del vector de polarización  $\vec{P}(t)$ . Así, un estado puro tiene un vector de polarización que está sobre la superficie de una esfera de Bloch unitaria, mientras que el vector de polarización de un estado impuro está dentro de la esfera de Bloch. La pureza varía desde un mínimo de 0,5 a un máximo de 1. Adelante se verá cómo los cambios en la disipación y entropía pueden traer la polarización dentro de la esfera de Bloch y, por lo tanto, generar impureza.

### 3.7. Entropía

La entropía de Von Neumann [20] en el tiempo  $t$  se define similarmente como se mencionó en el capítulo anterior, como sigue

$$s(\rho) = -k_B \text{Tr}(\rho \log_2 \rho) \quad (3.23)$$

La matriz de densidad de hermítica puede diagonalizarse mediante una matriz unitaria  $U_\rho(t)$  en el tiempo  $t$ ,

$$\rho(t) = U_\rho(t) \rho^D(t) U_\rho^\dagger(t), \quad (3.24)$$

donde  $\rho^D(t)$  es la matriz diagonal  $\rho^D(t)_{i,j} = \delta_{i,j} \lambda_i$  de los valores propios. Entonces

$$S(t) = -(\lambda_1 \log_2 \lambda_1 + \lambda_2 \log_2 \lambda_2). \quad (3.25)$$

Con un logaritmo de base 2, la entropía máxima para cada qubit es  $S_{max} \equiv 1$  que ocurre cuando los dos valores propios son todos iguales a  $1/2$ . Esa es la situación más caótica, o menos informativa. La entropía mínima de cero se obtiene cuando un valor propio es uno, todos los demás son cero; Esa es la situación más organizada, máxima información. Para cada qubit, la entropía cero coloca el vector de polarización en la esfera de Bloch, donde la longitud del vector de polarización es uno. Si el vector de polarización se mueve dentro de la esfera de Bloch, la entropía aumenta. Para  $n_q$  qubits, la entropía oscila entre cero y  $n_q$ .

También se considera la derivada en el tiempo de la entropía,

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= - \sum_{i=1,2} \left( \frac{d\lambda_i}{dt} \log_2(\lambda_i) + \frac{d\lambda_i}{dt} \right) \\ &= -\text{Tr} \left( \frac{d\rho}{dt} \log_2(\rho(t)) \right). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Ya que  $\text{Tr}(\rho) = \sum_{i=1,2} \lambda_i \equiv 1$ , el segundo término del lado derecho desaparece. Tenga en cuenta que el resultado anterior se deriva asumiendo que para todos los valores propios  $\lambda_i/\lambda_i \rightarrow 1$ , lo que es ambiguo para valores propios cero. Sin duda, esto está relacionado con las divergencias que podrían surgir cuando, por ejemplo  $\lambda_1$  y  $\frac{d\lambda_1}{dt}$  no es cero. Más adelante, se analiza este problema en el desarrollo del modelo.

Se toma en cuenta que los valores propios, la pureza, la fidelidad y la entropía dependen de la longitud del vector de polarización  $\vec{P}(t)$  para el análisis de estas herramientas en el entendimiento de la evolución del sistema.

# Capítulo 4

## Resultados

En este capítulo, se presenta un análisis de las predicciones numéricas obtenidas con el marco SEAQT utilizando diferentes enfoques para entender los efectos de la decoherencia. Primero, se presentan los resultados de la evolución de la compuerta haciendo uso de la ecuación de Von Neumann y comparando estos con los resultados de SEAQT; segundo, se presentan los resultados donde se reconoce el estado del sistema durante la evolución y la posible pérdida de correlaciones donde la *conurrencia*, *factor de coherencia*, *fidelidad* y *entropía* se tienen como principales resultados; y tercero, se comparan resultados que utilizan tiempos de intra-relajación  $\tau_D(\hat{\rho})$  diferentes, con la intención de mostrar cómo la evolución se puede modificar utilizando el parámetro como primer mecanismo de control de la *decoherencia*.

### 4.1. Evolución de la compuerta

La Figura 4.1a muestra la representación de la evolución del operador densidad en la esfera de Bloch para el constituyente B del sistema CNOT-gate, correspondiente a 500 resultados obtenidos de la ec. (2.60) (*caso no disipativo*). Dichos operadores se obtienen mediante la evolución temporal de las probabilidades de ocupación de los niveles propios de energía, que muestran una distribución dentro de los niveles de energía del sistema.

Apreciando la distribución de los operadores se observa que la trayectoria de evolución comienza en el estado  $\rho_B = |1\rangle \otimes \langle 1|$  hasta la activación del pulso Bias, el cual inhibe los efectos

controlados por el hamiltoniano  $H_z$  ec. (3.3), dando paso a la activación del pulso de compuerta que realiza una transformación unitaria (*rotación*) sobre los estados del sistema colocándolos en la dirección  $|0\rangle$ . Finalmente estos dos pulsos dejan de actuar, permitiendo así, que el hamiltoniano dirija los efectos en la compuerta hasta el tiempo  $t_f$ . En este caso no disipativo los operadores permanecen girando al rededor del eje  $z$ , debido a la acción del campo magnético aplicado en esta dirección hasta el llegar a  $t_f$ .

Por último en la Figura 4.1b se observan los componentes del vector Bloch, que comienzan en  $b_x = 0, b_y = 0$  y  $b_z$  el cual depende de la condición inicial ( $b_z \approx -1$ ). Se observa además que, luego de ser aplicado el protocolo de la compuerta dichos componentes experimentan una evolución, que genera un estado representado por la superposición de las tres componentes, donde se aprecia que  $b_z$  indica la dirección del spin y por su parte  $b_x$  y  $b_y$  se mantienen oscilando, lo que genera en la esfera la rotación mencionada.

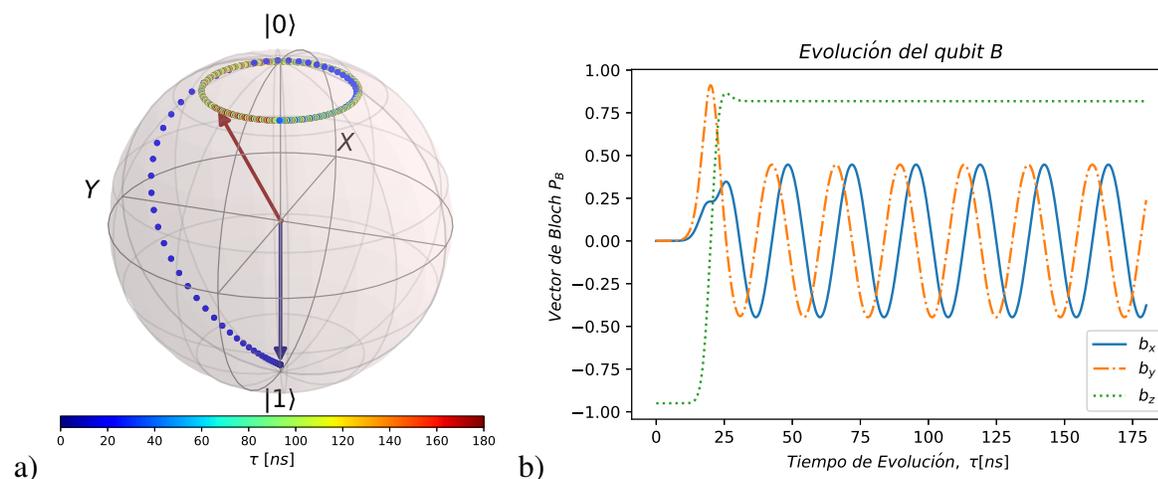


Figura 4.1. Representación de la esfera de Bloch de la evolución del sistema (CNOT-Gate) sin disipación: a) trayectoria del vector de estado del qubit B, y b) comportamiento de las componentes del vector de estado.

En adición al resultado anterior, la Figura 4.2 muestra para el *caso disipativo*, el comportamiento de los operadores densidad en la esfera de Bloch y de sus componentes, los cuales son obtenidos de la solución de la ec. (2.61), donde se incluye el término termodinámico asociado a la entropía desarrollado en las secciones anteriores.

Como primera observación, en la Figura 4.2.a se aprecia de manera similar al caso anterior

que el sistema inicia en  $\rho_B = |1\rangle \otimes \langle 1|$ , y el protocolo de la compuerta se activa en las mismas condiciones, generando así un cambio en la dirección de los estados del sistema. Adicionalmente se observa que en este punto los operadores de estado comienzan a precesar sobre el eje  $z$ , lo que genera que los componentes se degeneren hasta caer al nivel de equilibrio estable, esto se puede observar con mayor detalle en la Figura 4.2.b.

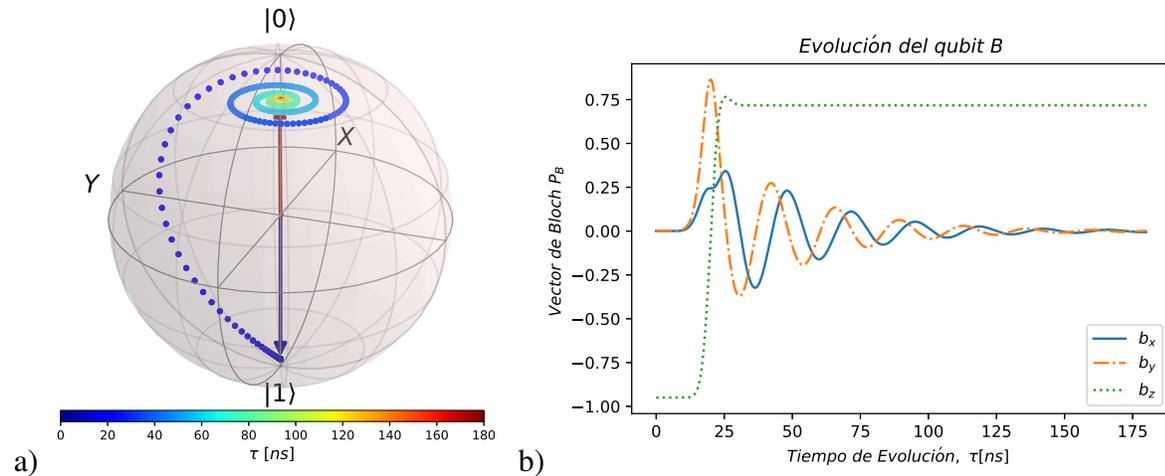


Figura 4.2. Representación de la esfera de Bloch de la evolución del sistema (CNOT-Gate): a) trayectoria del vector de estado del qubit B, y b) comportamiento de las componentes de el vector de estado.

Dichos componentes son obtenidos sobre el único camino de evolución de los estados del sistema, el cual es predicho por el marco SEAQT que proporciona un mecanismo con la ec. (2.61)) de movimiento, el cual es capaz de predecir esta trayectoria.

### 4.1.1. Pulso Bias y de Compuerta

En la Figura 4.3 se observa el comportamiento de los pulsos controladores del protocolo de la compuerta. Primero en la Figura 4.3.a se observa al pulso Bias encargado de controlar los efectos del hamiltoniano, dicho pulso está relacionado con el pulso de compuerta (*efectos de la compuerta sobre el sistema*) directamente y posee características similares provenientes de la ec. (2.57). Debido a lo anterior se aprecia que en la Figura 4.3.b el pulso de compuerta (*soft ec. (2.56)*) presenta algunas semejanzas con el pulso Bias en la Figura 4.3.a .

Para ambas figuras se aprecian los parámetros que controlan el protocolo de la compuerta, los cuales provienen de las ec. (2.56), (2.57) y son presentados en la Tabla 4.1:

| Nombre   | Valor           |
|--|-----------------|
| Centro del pulso ( $t_0$ )                       | 20 [ns]         |
| Inicio del pulso ( $t_1$ )                       | $t_0 - \tau/2$  |
| Final del pulso ( $t_2$ )                        | $t_0 + \tau/2$  |
| Ancho del pulso ( $\tau$ )                       | 5 [ns]          |
| Frecuencia angular de Larmor ( $\hbar\omega_L$ ) | 0.1761 $\mu eV$ |
| Inicio de la Evolución ( $t_o$ )                 | 0 [ns]          |
| Final de la Evolución ( $t_f$ )                  | 180 [ns]        |
| Número de iteraciones ( $n$ )                    | 500             |

Tabla 4.1. Parámetros del pulso Bias y de Compuerta.

Dichos parámetros fueron incluidos en el modelo numérico en la solución de la compuerta y se pueden consultar con mayor detalle en el apéndice (A)

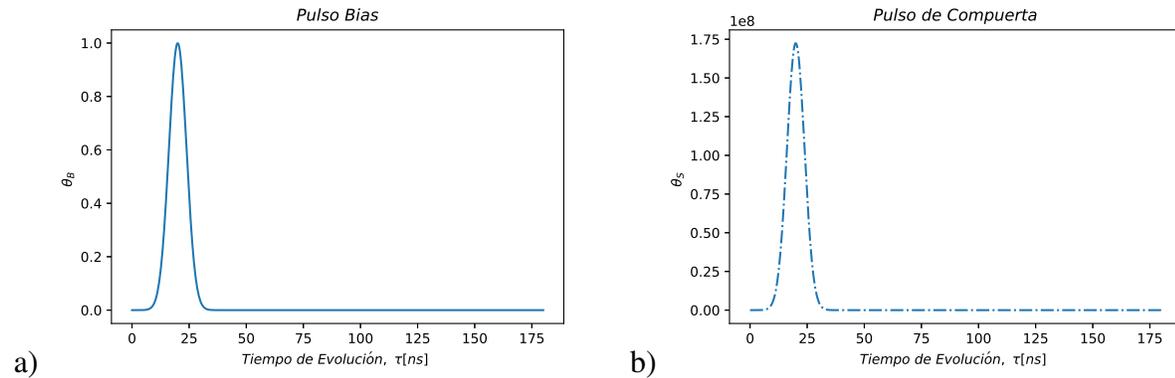


Figura 4.3. Pulsos del Protocolo CNOT: a) Comportamiento de pulso Bias, y b) Comportamiento del pulso de Compuerta

## 4.2. Pruebas de entrelazamiento

En la presente sección se analizan diversos resultados, los cuales demuestran la existencia de entrelazamiento entre los dos constituyentes del sistema, hecho que indica a su vez que, en el estudio de la evolución de la compuerta tras ser aplicado el protocolo y tomado lectura de los operadores de estado en el tiempo final, siguen existiendo las correlaciones y niveles de energía

asociados a la lectura esperada. Lo anterior se traduce en tener resultados confiables y acordes con la intención en la aplicación del protocolo de la compuerta.

### 4.2.1. Concurrencia

En la Figura 4.4 se evaluó la concurrencia ec. (3.16),  $C(\rho) = \max\{0, \lambda_4 - \lambda_3 - \lambda_2 - \lambda_1\}$  para diferentes  $\tau_D(A, B)$ , donde  $\rho$  es la matriz de densidad medida numéricamente y  $\lambda_i$  son los eigenvalores, de la matriz  $R = \sqrt{\sqrt{\rho}\tilde{\rho}\sqrt{\rho}}$ , y  $\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$  y  $\rho^*$  es el complejo conjugado de  $\rho$ . **Un valor positivo de la concurrencia es una condición necesaria y suficiente para la demostración del entrelazamiento.** Para  $t_0 = 10$  ns (activación del pulso Bias), no se logra extraer una concurrencia positiva ( $C(\rho)(t_f) > 0$ ). Por otro lado, se aprecia que el comportamiento de la concurrencia tiende a acercarse a valores positivos a medida que el tiempo de intra-relajación aumenta.

De la observación anterior se puede relacionar a  $\tau_D(A, B)$  con  $C(\rho)$  y por lo tanto con el entrelazamiento, lo que permite tener un herramienta para controlar la decoherencia.

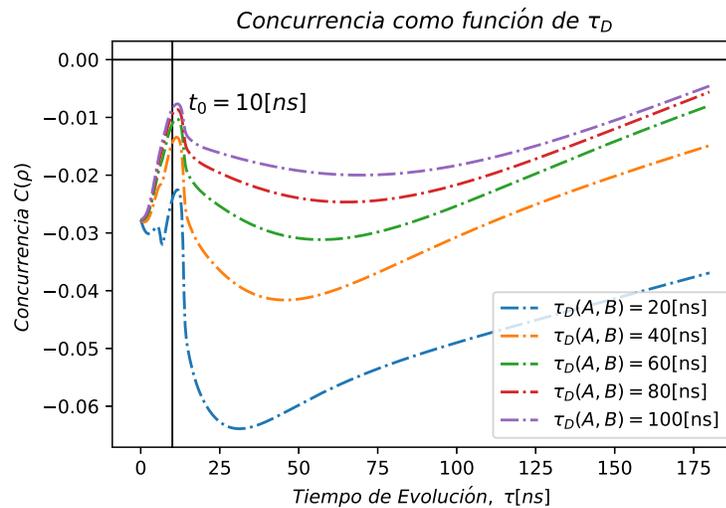


Figura 4.4. Concurrencia CNOT-gate ( $t_0 = 10$  ns).

Por último en la Figura 4.5 se observan los resultados de  $C(\rho)$  para diferentes tiempos de intra-relajación, en la cual se aprecia que luego de ser aplicado el protocolo de la compuerta en  $t_0 = 20$  ns hasta  $t_f$  los valores de la concurrencia tienden a convertirse en positivos y de manera similar

al caso anterior conforme que crece  $\tau_D(A, B)$  lo hacen también los valores de lectura final de la concurrencia.

Para la obtención de todos los resultados previos y posteriores a esta sección se utilizaron los parámetros de la Tabla 4.1 y  $\tau_D(A, B) = 40$  ns.

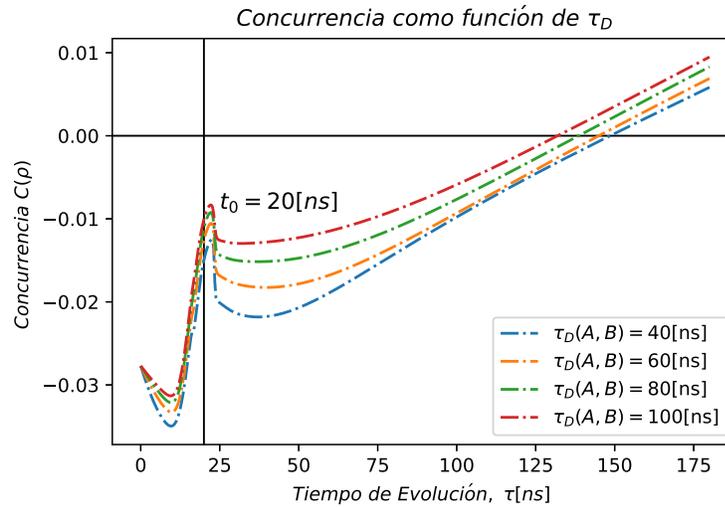


Figura 4.5. Concurrencia CNOT-gate ( $t_0 = 20$  ns).

Un valor positivo de la concurrencia es una prueba definitiva de entrelazamiento; sin embargo, esta no verifica que la operación de dos qubits produzca el estado entrelazado deseado. Para caracterizar mejor el estado cuántico generado, se evalúan otras medidas de entrelazamiento.

### 4.2.2. Fidelidad

La fidelidad representada en la Figura 4.6, indica la “cercanía” en la medición llevada a cabo tras la evolución del sistema y la esperada originalmente, para este caso, dicha cercanía se presenta entre  $\rho_{Numerico}$  y  $\rho_{Deseado}$ , y es interpretada, como la probabilidad de medir el estado de dos qubits en  $\rho_{Deseado}$ .

Todos los estados no entrelazados poseen  $\mathcal{F} \leq 0.5$  [59, 60], debido a esto los resultados obtenidos ( $\mathcal{F}_{SEAQT} = 0.9256$ ) no solo son prueba de que existe entrelazamiento luego de ser aplicado el protocolo de la compuerta, sino que también el estado resultante se aproxima favorablemente a lo esperado. Por otro lado, en la Figura 4.6 se puede apreciar una comparación entre los resultados

obtenidos con el marco SEAQT (*caso disipativo*) y los provenientes de la ecuación modificada por *von Neumann* para sistemas cuánticos (*no disipativo*).

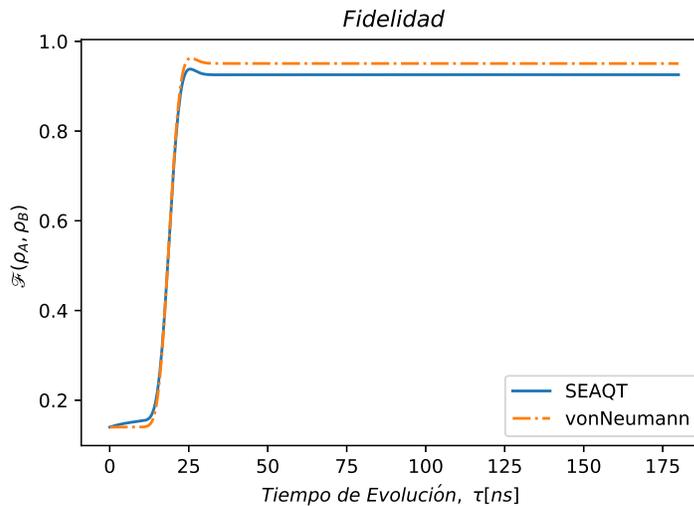


Figura 4.6. Evolución de la Fidelidad SEAQT vs vonNeumann

Se observa entonces que la fidelidad conseguida con SEAQT es menor que la obtenida en el caso no disipativo, cabe resaltar que esta diferencia es el resultado de la acción del término entrópico de la ec. (2.61) desarrollado en los capítulos previos, y se ajusta a lo esperado ya que en el caso disipativo el operador de estado recorre el camino durante la evolución guiado por el término disipativo alejándose de una evolución unitaria.

### 4.2.3. Factor de Coherencia

La Figura 4.7 muestra la norma del operador conmutador definido por la ec. 3.21. La evolución de la norma se toma como un indicador de cómo los elementos fuera de la diagonal de la matriz representan la caída del operador de densidad; como resultado, también es un indicador de cómo la coherencia del sistema desaparece a medida que el estado del sistema evoluciona hacia un estado de equilibrio estable.

Se observa un descenso drástico al comienzo de la evolución porque la coherencia del sistema está siendo aniquilada por el término disipativo de la ecuación de movimiento SEAQT. Este descenso drástico está de acuerdo con el análisis de SEA percibido localmente sobre el cual se

construye el modelo dinámico, consiguiendo de esta manera otra herramienta de control y visualización de la decoherencia.

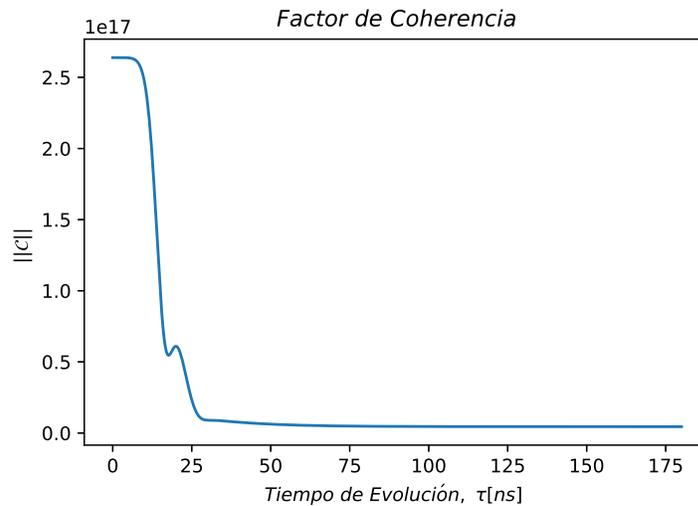


Figura 4.7. Evolución de  $\|\mathcal{C}\|$ , que es la norma del término conmutador  $\mathcal{C} = i[H, \rho]$  para el sistema compuesto de dos qubits.

La Figura 4.8 representa la evolución en el tiempo de la función de correlación de entropía definida en la ec. (3.19), que es una medida de cómo desaparecen las correlaciones entre los constituyentes cuando el sistema compuesto evoluciona hacia un estado de equilibrio estable.

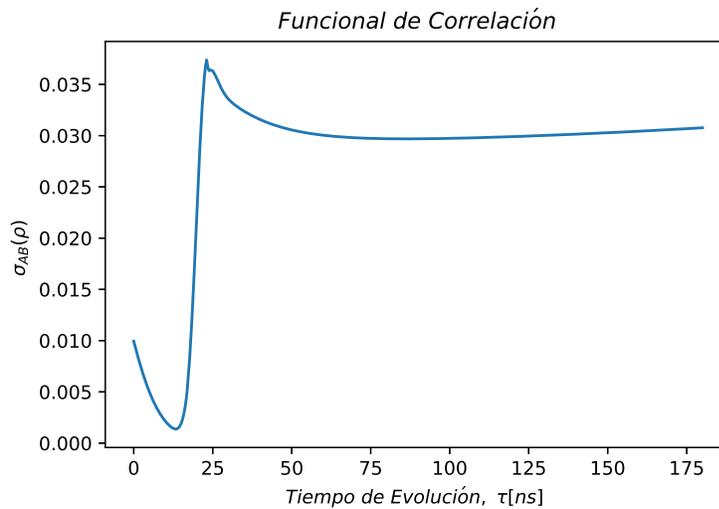


Figura 4.8. Evolución del funcional de la correlación de entropía.

La función de correlación alcanza un valor constante cuando el sistema se aproxima al equili-

brío estable, que se produce al final de la evolución y en el que el valor de la función de correlación es  $\sigma_{AB} = 0.0307$ . El hecho de que la correlación funcional no alcance un valor de cero en el equilibrio estable se debe a que el término de interacción  $\Gamma(\vec{\sigma}_A \otimes \vec{\sigma}_B)$  del operador hamiltoniano de la ec. (3.5) está creando continuamente correlaciones. Esta creación de correlaciones se describe por la contribución del término hamiltoniano de la ecuación de movimiento a la tasa de cambio de la correlación funcional representada en la ec. (3.20).

#### 4.2.4. Pureza

La Figura 4.9 muestra el grado de pureza ( $\mathcal{P} = \text{Tr}(\rho^2)$ ) de los operadores densidad para el sistema compuesto  $(\rho_A, \rho_B)$  para el caso analizado. En la figura, un valor de  $\mathcal{P} = 1$  define un estado que es un estado puro (es decir, uno de entropía cero) y un valor de  $\mathcal{P} = 0$  define un estado que es un estado de equilibrio estable para el cual la entropía es máxima. Los puntos intermedios representan estados de equilibrio con entropía diferente de cero, con diversos grados de pureza. Se observa que para este caso particular, el operador de estado  $\rho_A$  está ubicado cerca de una zona de pureza de aproximadamente 0.96, y se debe a que este operador representa al qubit de control en el protocolo CNOT el cual no varía significativamente durante la evolución, sino que es el encargo de dirigir al qubit target.

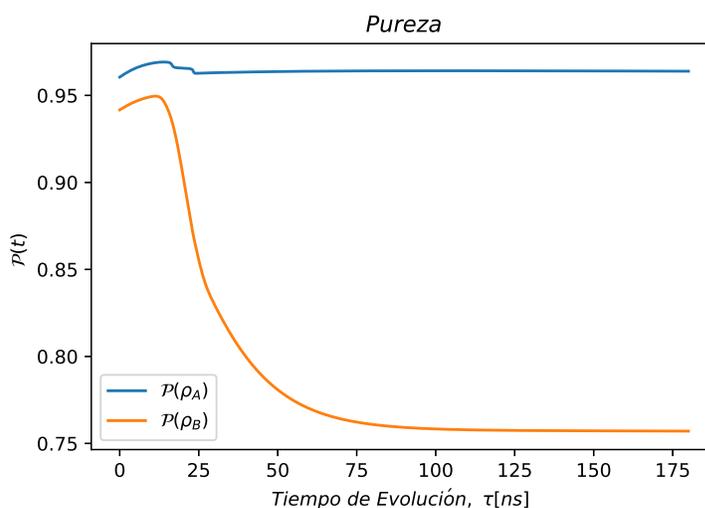


Figura 4.9. Evolución del grado de pureza para los qubits A y B

El operador de estado más cercano al equilibrio estable corresponde a  $\rho_B$  con un grado de pureza al final de la evolución de 0.757.

Para el sistema, tanto la entropía como la pureza son funciones de la longitud del vector de Bloch de cada qubit, si la entropía es cero (0), la pureza será uno (1). Para los vectores de polarización dentro de la esfera de Bloch, la entropía aumenta y la pureza disminuye. Concluyendo así, que la pureza desempeña un papel paralelo a la entropía.

### 4.2.5. Entropía

Como se ve en la Figura 4.10 donde se aprecia la evolución de la entropía del sistema compuesto, la entropía aumenta rápidamente al comienzo de la evolución y luego disminuye su aumento, acercándose asintóticamente a su valor de equilibrio estable. La Figura 4.11 muestra la evolución de la entropía para los qubits A y B por separado, donde se observa que el comportamiento para  $S(\rho_A)$  mantiene un comportamiento en su evolución constante luego de ser aplicado el pulso Bias, esto se debe nuevamente a que este constituyente en el sistema es el encargado de controlar al qubit representado por  $S(\rho_B)$ , el cual posee el comportamiento dominante en la evolución general del sistema, debido a que este constituyente debe modificar sus operadores de estado para cumplir con lo requerido ( $[U_{xor}] |1, 1\rangle \rightarrow |1, 1 \oplus 1\rangle = |1, 0\rangle$ ) por el protocolo de la compuerta.

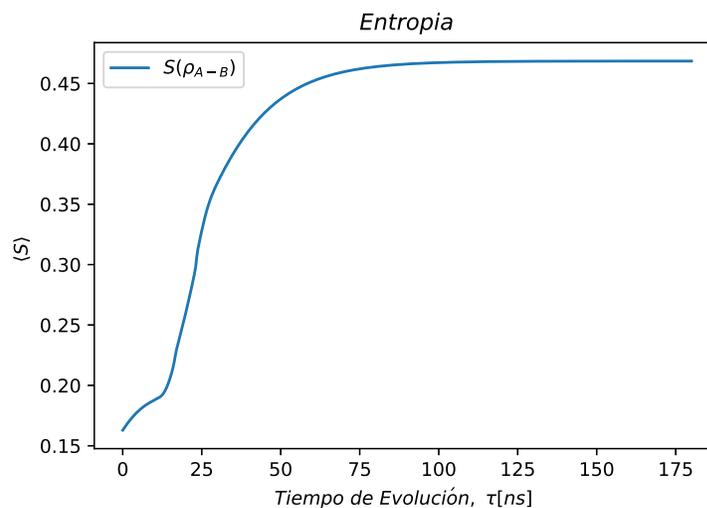


Figura 4.10. Evolución de la entropía para el sistema compuesto por los qubits A y B

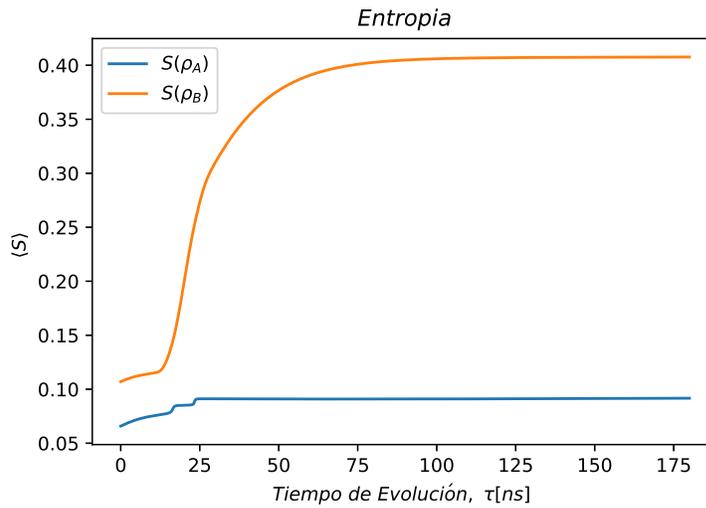


Figura 4.11. Evolución de la entropía para los qubits A y B

Finalmente en la Figura 4.12 se aprecia la tasa de generación de entropía del sistema compuesto, donde se puede observar que  $\frac{d\langle S \rangle}{dt}$  presenta en  $t_1$  un pico de generación de entropía debido a la energía aportada al sistema por el hamiltoniano al aplicar la compuerta y otro pico que llega a un máximo el cual se alcanza cuando la entropía comienza a acercarse al equilibrio estable, posterior a esto se presenta un comportamiento rápidamente decreciente durante el camino hacia el equilibrio estable en  $t_f$ .

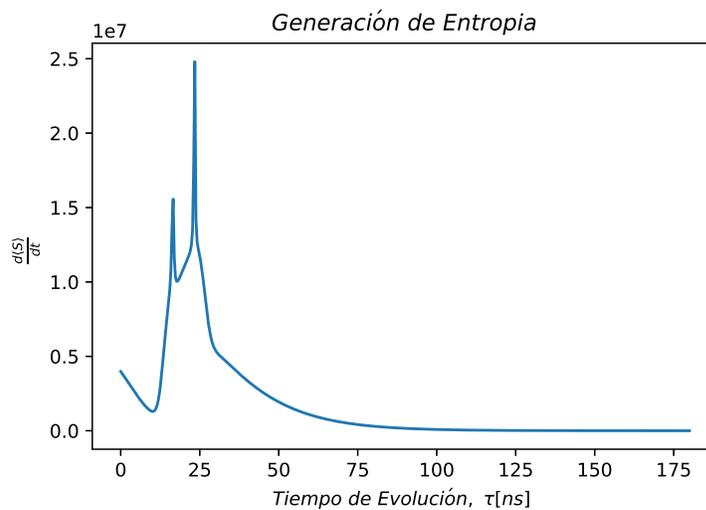


Figura 4.12. Evolución de la generación de entropía para los qubits A y B

### 4.3. Condición Inicial para Máximo Entrelazamiento

Una aplicación común de la compuerta C-NOT es entrelazar al máximo dos qubits en el Estado de Bell  $|\beta_{00}\rangle$  ec. (2.47); esto forma parte de la configuración de la codificación superdense, la teletransportación cuántica y los algoritmos de criptografía cuántica entrelazados. La principal intención de esta aplicación es lograr un estado resultante con una medición de concurrencia máxima, lo que confirma efectivamente un máximo entrelazamiento.

Para construir  $|\beta_{00}\rangle$ , las entradas  $A$  (*control*) y  $B$  (*target*) en la compuerta C-NOT deben ser:

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle); \quad |\psi_B\rangle = |0\rangle. \quad (4.1)$$

lo cual se consigue aplicando una compuerta Hadamard [H] ec. (2.37) sobre el qubit  $A$  de control<sup>6</sup>.

Después de aplicar C-NOT, el Estado de Bell resultante  $|\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,0\rangle + |1,1\rangle)$  tiene la propiedad de que los qubits individuales se pueden medir utilizando cualquier base y siempre presentarán una probabilidad de 50/50 de resolverse en cada estado. En efecto, los qubits individuales están en un estado indefinido. La correlación entre los dos qubits representa la descripción completa del estado de los dos qubits; Si se elige la misma base para medir ambos qubits y comparar notas, las mediciones se correlacionarán perfectamente. El comportamiento de esta aplicación se analiza a continuación:

#### 4.3.1. Evolución de la compuerta H-CNOT

En la Figura 4.13 se aprecia la distribución de los operadores de estado y la trayectoria de evolución que comienza en el estado  $\rho_B = |0\rangle \otimes \langle 0|$  hasta la activación del pulso Bias, donde nuevamente se observa, que este inhibe los efectos controlados por el hamiltoniano  $H_z$ , dando paso a la activación del pulso de compuerta que realiza una transformación unitaria sobre los estados del sistema colocándolos en una superposición de  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  debido a la condición inicial del qubit de control. Finalmente estos dos pulsos dejan de actuar, permitiendo así, que el hamiltoniano dirija los efectos en la compuerta hasta el tiempo  $t_f$ .

<sup>6</sup>El protocolo resultante después de la aplicación de Hadamard-gate se escribe como H-CNOT

Anteriormente se observó el protocolo CNOT, en el cual el qubit  $A$  afectaba al qubit  $B$ . En esta sección, al pasar la compuerta Hadamard por el qubit de control  $A$  se aprecia que luego del protocolo, de manera simétrica, ambos qubits se afectan mutuamente.

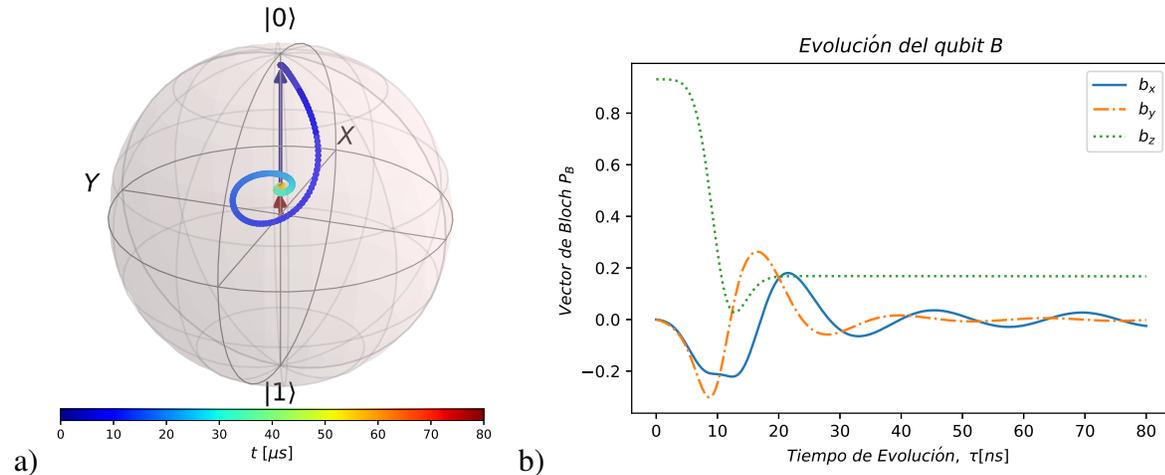


Figura 4.13. Representación de la esfera de Bloch de la evolución del sistema (H-CNOT-Gate) sin disipación para máximo entrelazamiento: a) trayectoria del vector de estado del qubit B, y b) comportamiento de las componentes del vector de estado.

### 4.3.2. Concurrencia de la compuerta H-CNOT

En la Figura 4.14 se observa la concurrencia ec. (3.16), obtenida para el sistema máximamente entrelazado, donde se aprecia en esta, un comportamiento siempre positivo durante la evolución al igual que un valor de  $C(\rho)$  significativamente mayor en comparación con los resultados de la Sección 4.2.1. De acuerdo a lo esperado, se obtiene un valor positivo de la concurrencia, lo cual demuestra la existencia de entrelazamiento en el sistema, pero en adición a los resultados anteriores, para estas condiciones iniciales se prepara y mantiene durante la evolución, los máximos valores posibles de concurrencia y por lo tanto se obtiene el mayor entrelazamiento.

Por lo tanto, la anterior observación se puede utilizar, como herramienta para mejorar el entrelazamiento obtenible por el sistema, y a su vez para controlar la decoherencia. Por último, es necesario estudiar la fidelidad obtenida con este nuevo protocolo para verificar si se obtienen los estados deseados.

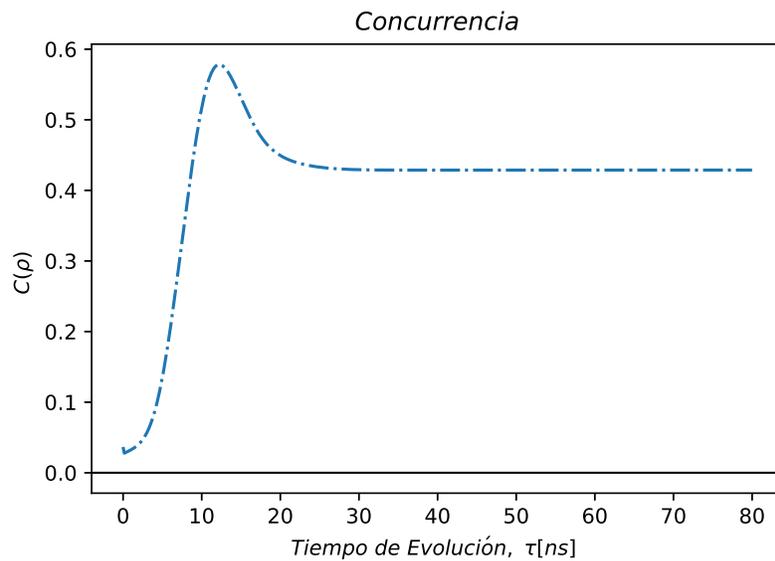
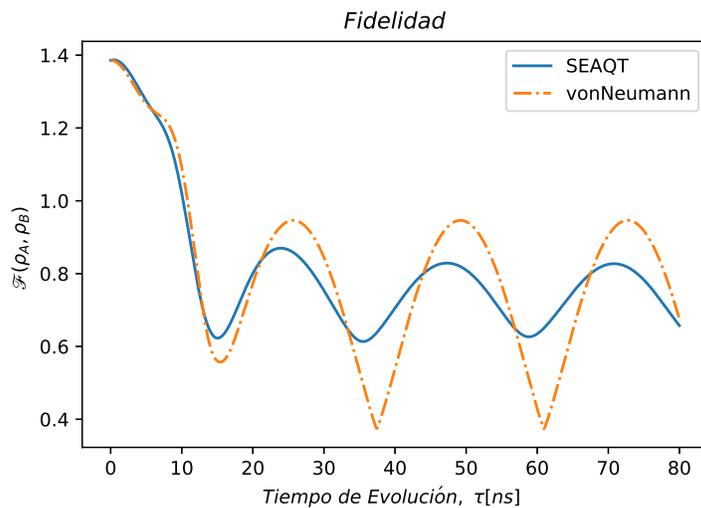


Figura 4.14. Máxima concurrencia para H-CNOT.

### 4.3.3. Fidelidad de la compuerta H-CNOT

La fidelidad representada en la Figura 4.15, indica que efectivamente se obtienen estados efectivamente entrelazados y lo suficientemente próximos a los deseados, la particularidad para esta evolución es que los resultados de fidelidad se encuentran oscilando entre la franja de  $0.8699 < \mathcal{F}_{SEAQT} < 0.6264$ , con lo cual se aprecia que se obtienen valores bajos en comparación con los resultados anteriores (Sección 4.2.2,  $\mathcal{F}_{SEAQT} = 0.9256$ ).



3

Figura 4.15. Evolución de la Fidelidad SEAQT vs vonNeumann para H-CNOT

Todos los resultados obtenidos, siguen cumpliendo con los requerimientos necesarios para que exista entrelazamiento entre los dos constituyentes, debido a que el valor más bajo de fidelidad, es mayor al valor mínimo requerido de  $\mathcal{F} \geq 0.5$  mencionado anteriormente.

Finalmente cabe resaltar que estos resultados están asociados al protocolo H-CNOT, con el cual se busca obtener un máximo entrelazamiento, que es verificado con la combinación de concurrencia  $C(\rho)$  y fidelidad  $\mathcal{F}$  en el sistema.

# Capítulo 5

## Conclusiones

El resultado principal de este estudio es el diseño de un modelo dinámico para obtener el operador densidad  $\rho$  que incorpora las características esenciales de una computadora cuántica con compuertas de 2 qubits. Aquí se muestra cómo implementar pulsos de compuertas, para replicar las compuertas cuánticas habituales. El pulso aplicado puede ser controlado para obtener los efectos necesarios para observar los efectos perjudiciales debido a la degeneración de qubit durante el protocolo.

El modelo también incluye efectos disipativos, decoherentes y termodinámicos. La adición de SEAQT a la dinámica del sistema tiene la característica esencial de proveer una ecuación de movimiento que es capaz de predecir un camino único de la evolución del estado de un sistema desde un estado de no equilibrio a un estado de equilibrio estable, y encontrar luego de la aplicación de la compuerta lecturas que faciliten el entendimiento del estado final del sistema como lo son: concurrencia, fidelidad, coherencia, pureza y entropía, definidas en el capítulo 3

La forma de sistema cerrado desarrollada por Beretta basada en el estudio general de la termodinámica de no equilibrio, permite examinar interacciones en el sistema, como se estudió previamente, y con esto poder tener ventajas físicas, en cuanto al control del resultado obtenido.

La fidelidad y concurrencia se utilizan para medir la estabilidad en la configuración del protocolo de control deseado. Esto ilustra cómo se puede usar el modelo como una herramienta para examinar y diseñar experimentos válidos para lograr una computación cuántica estable.

Las zonas con generación de entropía cero están relacionados con las zonas de máxima fi-

delidad. De la misma manera, las regiones en las gráficas de entropía coinciden con la fidelidad máxima obtenida. Estos resultados indican que existe una conexión entre la entropía y la fidelidad.

Los resultados permiten predecir la fidelidad del protocolo de CNOT, donde el único parámetro libre requerido es el tiempo de intra-relajación (*disipación*) que nos indica qué tan rápido se está moviendo el sistema hacia el equilibrio. Con esto se aprecia que el tiempo de entrelazamiento es proporcional al tiempo de disipación, es decir, a medida que se avanza más rápido hacia el estado de equilibrio estable, se espera que se pierda más fidelidad. Estos resultados sugieren que las irreversibilidades están directamente relacionadas con el tiempo de entrelazamiento.

Una forma de mejorar el valor máximo de fidelidad está relacionada con la preparación inicial de los qubits. De hecho, el modelo desarrollado es capaz de predecir, de acuerdo con los resultados esperados, esta conclusión. Esto es, los valores más bajos de la generación de entropía se logran aumentando la fidelidad inicial para cada qubit. Este comportamiento está relacionado con el hecho de que cuanto mayor sea la fidelidad inicial, mayor será la magnitud del vector de Bloch para un qubit individual. Así, la dinámica para cada qubit con SEAQT evoluciona desde la superficie de la esfera de Bloch hacia el centro. En otras palabras, de un estado de entropía cero a un estado de entropía máxima, y como el estado está más alejado de los estados de equilibrio, lleva más tiempo evolucionar al estado de equilibrio estable durante un tiempo disipativo fijo.

# Bibliografía

- [1] R. M. Velasco, L. Scherer García-Colín, and F. J. Uribe, “Entropy production: Its role in non-equilibrium thermodynamics,” *Entropy*, vol. 13, no. 1, pp. 82–116, 2011.
- [2] B. Leggio, A. Napoli, A. Messina, and H.-P. Breuer, “Entropy production and information fluctuations along quantum trajectories,” *Physical Review A*, vol. 88, no. 4, p. 042111, 2013.
- [3] Z. Zhang, W. Wu, and J. Wang, “Fluctuation-dissipation theorem for nonequilibrium quantum systems,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 115, no. 2, p. 20004, 2016.
- [4] B. E. Baaquie, *The theoretical foundations of quantum mechanics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [5] M. von Spakovsky and E. J. Gemmer, “Some trends in quantum thermodynamics,” *Entropy*, vol. 16, p. 3434, 2014.
- [6] G. P. Beretta, E. P. Gyftopoulos, J. L. Park, and G. N. Hatsopoulos, “Quantum thermodynamics. a new equation of motion for a single constituent of matter,” *Il Nuovo Cimento B (1971-1996)*, vol. 82, no. 2, pp. 169–191, 1984.
- [7] G. P. Beretta, E. P. Gyftopoulos, and J. L. Park, “Quantum thermodynamics. a new equation of motion for a general quantum system,” *Il Nuovo Cimento B (1971-1996)*, vol. 87, no. 1, pp. 77–97, 1985.
- [8] C. Smith, A. Sciacovelli, M. von Spakovsky, and V. Verda, “3d quantum thermodynamic description of the non-equilibrium behavior of an unbounded system at an atomistic level,” in *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 237, p. 012022, IOP Publishing, 2010.
- [9] S. Cano-Andrade, G. P. Beretta, and M. R. von Spakovsky, “Steepest-entropy-ascent quantum thermodynamic modeling of decoherence in two different microscopic composite systems,” *Physical Review A*, vol. 91, no. 1, p. 013848, 2015.

- [10] G. Li and M. R. von Spakovsky, “Study of the transient behavior and microstructure degradation of a sofc cathode using an oxygen reduction model based on steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics,” in *ASME 2015 International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, pp. V06BT07A016–V06BT07A016, American Society of Mechanical Engineers, 2015.
- [11] G. P. Beretta, “Effect of irreversible atomic relaxation on resonance fluorescence, absorption, and stimulated emission,” *International journal of theoretical physics*, vol. 24, no. 12, pp. 1233–1258, 1985.
- [12] C. E. Smith and M. R. von Spakovsky, “Comparison of the non-equilibrium predictions of intrinsic quantum thermodynamics at the atomistic level with experimental evidence,” in *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 380, p. 012015, IOP Publishing, 2012.
- [13] G. N. Hatsopoulos and E. P. Gyftopoulos, “A unified quantum theory of mechanics and thermodynamics. part i. postulates,” *Foundations of Physics*, vol. 6, no. 1, pp. 15–31, 1976.
- [14] G. N. Hatsopoulos and E. P. Gyftopoulos, “A unified quantum theory of mechanics and thermodynamics. part iia. available energy,” *Foundations of Physics*, vol. 6, no. 2, pp. 127–141, 1976.
- [15] G. N. Hatsopoulos and E. P. Gyftopoulos, “A unified quantum theory of mechanics and thermodynamics. part iib. stable equilibrium states,” *Foundations of Physics*, vol. 6, no. 4, pp. 439–455, 1976.
- [16] G. N. Hatsopoulos and E. P. Gyftopoulos, “A unified quantum theory of mechanics and thermodynamics. part iii. irreducible quantal dispersions,” *Foundations of Physics*, vol. 6, no. 5, pp. 561–570, 1976.
- [17] G. P. Beretta, “Maximum entropy production rate in quantum thermodynamics,” in *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 237, p. 012004, IOP Publishing, 2010.
- [18] S. Weinberg, *Lectures on quantum mechanics*. Cambridge University Press, 2015.
- [19] S. Cano-Andrade, *Thermodynamic Based Framework for Determining Sustainable Electric Infrastructures as well as Modeling of Decoherence in Quantum Composite Systems*. PhD thesis, Virginia Tech, 2014.
- [20] G. P. Beretta, “Nonlinear quantum evolution equations to model irreversible adiabatic re-

- laxation with maximal entropy production and other nonunitary processes,” *arXiv preprint arXiv:0907.1977*, 2009.
- [21] E. P. Gyftopoulos *et al.*, “Entropy: Thermodynamic definition and quantum expression,” *Physical Review E*, vol. 55, no. 4, p. 3851, 1997.
- [22] L. Mandelstam and I. Tamm, “The uncertainty relation between energy and time in non-relativistic quantum mechanics,” in *Selected Papers*, pp. 115–123, Springer, 1991.
- [23] J. Shalf and R. Leland, “Computing beyond moore’s law,” *Computer*, vol. 48, pp. 14–23, 12 2015.
- [24] R. P. Feynman, “Simulating physics with computers,” *International journal of theoretical physics*, vol. 21, no. 6-7, pp. 467–488, 1982.
- [25] D. Deutsch, “Quantum theory, the church–turing principle and the universal quantum computer,” *Proc. R. Soc. Lond. A*, vol. 400, no. 1818, pp. 97–117, 1985.
- [26] A. M. Turing, “On computable numbers, with an application to the entscheidungsproblem,” *Proceedings of the London mathematical society*, vol. 2, no. 1, pp. 230–265, 1937.
- [27] P. W. Shor, “Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring,” in *Foundations of Computer Science, 1994 Proceedings., 35th Annual Symposium on*, pp. 124–134, Ieee, 1994.
- [28] P. W. Shor, “Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer,” *SIAM review*, vol. 41, no. 2, pp. 303–332, 1999.
- [29] L. K. Grover, “A fast quantum mechanical algorithm for database search,” in *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 212–219, ACM, 1996.
- [30] C. Bustamante, J. Liphardt, and F. Ritort, “The nonequilibrium thermodynamics of small systems,” *arXiv preprint cond-mat/0511629*, 2005.
- [31] C. Jarzynski, “Equalities and inequalities: Irreversibility and the second law of thermodynamics at the nanoscale,” *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, vol. 2, no. 1, pp. 329–351, 2011.
- [32] C. Maes, “The fluctuation theorem as a gibbs property,” *Journal of statistical physics*, vol. 95, no. 1-2, pp. 367–392, 1999.

- [33] C. Maes and K. Netočný, “Time-reversal and entropy,” *Journal of statistical physics*, vol. 110, no. 1-2, pp. 269–310, 2003.
- [34] P. Gaspard, “Time-reversed dynamical entropy and irreversibility in markovian random processes,” *Journal of statistical physics*, vol. 117, no. 3-4, pp. 599–615, 2004.
- [35] C. Jarzynski, “Rare events and the convergence of exponentially averaged work values,” *Physical Review E*, vol. 73, no. 4, p. 046105, 2006.
- [36] R. Kawai, J. Parrondo, and C. Van den Broeck, “Dissipation: The phase-space perspective,” *Physical review letters*, vol. 98, no. 8, p. 080602, 2007.
- [37] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?,” *Physical review*, vol. 47, no. 10, p. 777, 1935.
- [38] M. B. Plenio and S. Virmani, “An introduction to entanglement measures,” *arXiv preprint quant-ph/0504163*, 2005.
- [39] J. S. Bell, “On the einstein podolsky rosen paradox,” *Physics Physique Fizika*, vol. 1, no. 3, p. 195, 1964.
- [40] K. C. Lee, M. R. Sprague, B. J. Sussman, J. Nunn, N. K. Langford, X.-M. Jin, T. Champion, P. Michelberger, K. F. Reim, D. England, *et al.*, “Entangling macroscopic diamonds at room temperature,” *Science*, vol. 334, no. 6060, pp. 1253–1256, 2011.
- [41] G. Tosi, F. A. Mohiyaddin, V. Schmitt, S. Tenberg, R. Rahman, G. Klimeck, and A. Morello, “Silicon quantum processor with robust long-distance qubit couplings,” *Nature communications*, vol. 8, no. 1, p. 450, 2017.
- [42] K. Hornberger, “Introduction to decoherence theory,” in *Entanglement and Decoherence*, pp. 221–276, Springer, 2009.
- [43] H.-K. Lo, T. Spiller, and S. Popescu, *Introduction to quantum computation and information*. World Scientific, 1998.
- [44] F. Marquardt and A. Püttmann, “Introduction to dissipation and decoherence in quantum systems,” *arXiv preprint arXiv:0809.4403*, 2008.
- [45] G. Li, O. Al-Abbasi, and M. R. Von Spakovsky, “Atomistic-level non-equilibrium model for chemically reactive systems based on steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics,” in *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 538, p. 012013, IOP Publishing, 2014.

- [46] S. Hill and W. K. Wootters, “Entanglement of a pair of quantum bits,” *Physical review letters*, vol. 78, no. 26, p. 5022, 1997.
- [47] W. K. Wootters, “Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits,” *Physical Review Letters*, vol. 80, no. 10, p. 2245, 1998.
- [48] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu, and B. Schumacher, “Concentrating partial entanglement by local operations,” *Physical Review A*, vol. 53, no. 4, p. 2046, 1996.
- [49] V. Vedral, M. B. Plenio, M. A. Rippin, and P. L. Knight, “Quantifying entanglement,” *Physical Review Letters*, vol. 78, no. 12, p. 2275, 1997.
- [50] C. H. Bennett, G. Brassard, S. Popescu, B. Schumacher, J. A. Smolin, and W. K. Wootters, “Purification of noisy entanglement and faithful teleportation via noisy channels,” *Physical review letters*, vol. 76, no. 5, p. 722, 1996.
- [51] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters, “Mixed-state entanglement and quantum error correction,” *Physical Review A*, vol. 54, no. 5, p. 3824, 1996.
- [52] A. Peres, “Collective tests for quantum nonlocality,” *Physical Review A*, vol. 54, no. 4, p. 2685, 1996.
- [53] D. Deutsch, A. Ekert, R. Jozsa, C. Macchiavello, S. Popescu, and A. Sanpera, “Quantum privacy amplification and the security of quantum cryptography over noisy channels,” *Physical review letters*, vol. 77, no. 13, p. 2818, 1996.
- [54] M. Horodecki, P. Horodecki, and R. Horodecki, “Inseparable two spin-1/2 density matrices can be distilled to a singlet form,” *Physical Review Letters*, vol. 78, no. 4, p. 574, 1997.
- [55] S. Popescu and D. Rohrlich, “On the measure of entanglement for pure states,” *Phys. Rev. A*, vol. 56, no. quant-ph/9610044, pp. 3319–3321, 1996.
- [56] J. J. Sakurai and E. D. Commins, “Modern quantum mechanics, revised edition,” 1995.
- [57] V. Coffman, J. Kundu, and W. K. Wootters, “Distributed entanglement,” *Physical Review A*, vol. 61, no. 5, p. 052306, 2000.
- [58] R. Jozsa, “Fidelity for mixed quantum states,” *Journal of modern optics*, vol. 41, no. 12, pp. 2315–2323, 1994.
- [59] C. H. Bennett, G. Brassard, S. Popescu, B. Schumacher, J. A. Smolin, and W. K. Wootters,

“Purification of noisy entanglement and faithful teleportation via noisy channels,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, pp. 722–725, Jan 1996.

- [60] C. A. Sackett, D. Kielpinski, B. E. King, C. Langer, V. Meyer, C. J. Myatt, M. Rowe, Q. Turchette, W. M. Itano, D. J. Wineland, *et al.*, “Experimental entanglement of four particles,” *Nature*, vol. 404, no. 6775, p. 256, 2000.

# Apéndice A

## Apéndice: Código del Modelo

El siguiente código fue desarrollado en python, específicamente con el programa de código abierto anaconda. Este programa tiene un compilador llamado spyder que tiene casi todos los paquetes utilizados aquí, excepto el que se usa en las figuras de la esfera de Bloch. Para ello es necesario instalar el paquete qutip.

```
1 # -*- coding: utf-8 -*-
2 """ Created on Mon Sep  3 04:06:36 2018
3 @author: Carlos(IKe) """
4
5 import numpy as np
6 from numpy import pi, dot, sqrt, exp
7 import scipy.linalg as matrix
8 import scipy.integrate as sol
9 from scipy.constants import hbar
10 import matplotlib.pyplot as plt
11 import qutip as qt
12 import matplotlib as mpl
13 from matplotlib import cm
14 from scipy.integrate import quad
15 from math import erf
16
17
```

```
18 #—GUARDAR IMAGENES—
19 LocationData=' ./ DatosPython / '
20 SaveIMG=' ./ ImgPython / '
21 GateName='CNOT'
22 #Dis='-SEAQT'
23 #Disipacion=True
24 Dis='-vonNeumann'
25 Disipacion=False
26 ControlSave=False
27 ControlDraw=True
28 ControlTWO=False
29 #—MATRICES DE PAULI—
30 sigmaX=np.array([[0.0,1.0],
31                  [1.0,0.0]])
32 sigmaY=np.array([[0.0,-1.0j],
33                  [1.0j,0.0]])
34 sigmaZ=np.array([[1.0,0.0],
35                  [0.0,-1.0]])
36 #—PARAMETROS DE ENTRADA—
37 Tau = 5e-9 #[ns] Ancho del pulso-Tabakin
38 t0 = 20e-9 #[ns] Tiempo central del pulso-Tabakin
39 t1=t0-Tau/2.0 #[ns] Tiempo al inicio del pulso-Tabakin
40 t2=t0+Tau/2.0 #[ns] Tiempo al final del pulso.-Tabakin
41 OmegaL=0.2675e9# Hz-Tabakin
42 Omega0=1.0# Hz-Cano
43 Gamma=0.0002*hbar*OmegaL#Fuerza de acoplamiento entre subsistemas-Cano
44 #—————Controlled-NOT gate—————
45 OmegaGate=np.array([[1.0,0.0,0.0,0.0],
46                     [0.0,1.0,0.0,0.0],
47                     [0.0,0.0,0.0,1.0],
48                     [0.0,0.0,1.0,0.0]])
49
50 #OmegaGate=np.array([[1.0,0.0,0.0,0.0],
51 #                    [0.0,0.0,1.0,0.0],
52 #                    [0.0,1.0,0.0,0.0],
```

```

53 # [0.0,0.0,0.0,1.0]])#SWAP
54
55 #-----Creando el estado inicial-----
56 rhoAo=np.array([[0.01,0.0],
57                [0.0,0.98]])
58 rhoBo=np.array([[0.02,0.0],
59                [0.0,0.98]])
60 rho_0=np.kron(rhoAo,rhoBo)#[4x4]
61 #(BEGIN)---NORMALIZACION COMPUERTA---
62 #Funcion Nf para normalizar ThetaS
63 Theta=lambda t:(1/2)*(erf((t-t1)/Tau)-erf((t-t2)/Tau))
64 Area=np.array(quad(Theta,t1-t1/4.,t2+t2/4.))
65 Nf=(pi/2)/Area[0]
66
67 #---Hamiltoniano como funcion---
68 def ThetaG(t):##---Activador de la Compuerta-Gaussiano
69     ThetaG=(sqrt(pi)/2*Tau)*exp(((t-t0)/Tau)**2)
70     return ThetaG
71 def ThetaS(t):##---Activador de la Compuerta-Soft Square
72     ThetaS=float((Nf)*(1/2)*(erf((t-t1)/Tau)-erf((t-t2)/Tau)))
73     return ThetaS
74 def ThetaB(t):##---Inhibidor del Hamiltoniano Inicial
75     ThetaB=ThetaS(t)/ThetaS(t0)
76     return ThetaB
77 #-----Operadores-----#
78 def Conm(A,B):
79     conm=dot(A,B)-dot(B,A)
80     return conm
81 def AntiConm(A,B):
82     return dot(A,B)+dot(B,A)
83 def TrDot(A,B):#pro
84     TrDot=np.matrix.trace(dot(A,B))
85     return TrDot
86 def ODaga(vector):
87     ODaga=np.conjugate(np.transpose(vector))

```

```

88     return ODaga
89 def Ham(t): #Hamiltoniano como funcion
90     #H2q=-m.(1-ThetaB).Hz + hbar.ThetaS.[CNOT] + Vz
91     #Hz=HAxIB+IAxHB
92     m=(1/2)*hbar*OmegaL
93     Ha=-m*sigmaZ
94     Ia=np.eye(2)
95     Hb=-m*sigmaZ
96     Ib=np.eye(2)
97     Hz=np.kron(Ha, Ib) + np.kron(Ia, Hb)
98     Vz=-Gamma*(np.kron(sigmaX, sigmaX)+np.kron(sigmaY, sigmaY)+np.kron(sigmaZ,
99     sigmaZ))
100    Ham=(1-ThetaB(t))*Hz + hbar*ThetaS(t)*OmegaGate + Vz
101    return Ham
102 # (END)—NORMALIZACION COMPUERTA—
103 #—Trazas Parciales —
104 def TrA(rho):
105     TrA=np.matrix([[rho[0,0]+rho[2,2], rho[0,1]+rho[2,3]],
106                    [rho[1,0]+rho[3,2], rho[1,1]+rho[3,3]]])
107     return TrA
108 #—————
109 def TrB(rho):
110     TrB=np.matrix([[rho[0,0]+rho[1,1], rho[0,2]+rho[1,3]],
111                    [rho[2,0]+rho[3,1], rho[2,2]+rho[3,3]]])
112     return TrB
113 #—————
114 def Pcoord(rho):
115     x=2*rho[0,1].real
116     y=2*rho[1,0].imag
117     z=rho[0,0].real - rho[1,1].real
118     return x,y,z
119 #—Ec. de Movimiento SEAQT—Ec. con disipacion
120 def SEAQT(t, rho):
121     rho=np.reshape(rho,[4,4]) #se recibe como [16] se transforma en matriz[4x4]
122     LNrho=matrix.logm(rho)

```

```

122 rhoA=TrB ( rho )
123 rhoB=TrA ( rho )
124 #—A—
125 IA=np . eye ( 2 )
126
127 LNrhoA=TrB ( dot ( np . kron ( IA , rhoB ) , LNrho ) )
128 SEAQT . cA=np . array ( [ 2 * rhoA [ 0 , 1 ] . real , 2 . 0 * rhoA [ 1 , 0 ] . imag , rhoA [ 0 , 0 ] - rhoA
[ 1 , 1 ] ] ) #Componetes vector bloch A
129
130 HA=TrB ( dot ( np . kron ( IA , rhoB ) , Ham ( t ) ) )
131 TRrhoLNrhoA=dot ( rhoA , dot ( IA , LNrhoA ) ) . trace ( ) [ 0 , 0 ]
132 TRrhoHLNrhoA=( 0 . 5 ) * dot ( rhoA , AntiConm ( HA , LNrhoA ) ) . trace ( ) [ 0 , 0 ]
133 TRrhoHA=dot ( rhoA , HA ) . trace ( ) [ 0 , 0 ]
134 TRrhoAHA2=dot ( rhoA , dot ( HA , HA ) ) . trace ( ) [ 0 , 0 ]
135
136 GammaA=TRrhoAHA2 - TRrhoHA ** 2 . 0
137 betaA=( TRrhoHA * TRrhoLNrhoA - TRrhoHLNrhoA ) / GammaA
138 alphaA=( TRrhoHLNrhoA * TRrhoHA - TRrhoLNrhoA * TRrhoAHA2 ) / GammaA
139 antiCA= dot ( rhoA , HA ) + dot ( HA , rhoA )
140
141 rhoLNrhoA=dot ( rhoA , LNrhoA )
142 DA= rhoLNrhoA+alphaA*rhoA + 0.5*betaA*antiCA
143 SEAQT . TauA=40e-9#Tiempo Disipativo A
144
145 #—B—
146 IB=np . eye ( 2 )
147
148 LNrhoB=TrA ( dot ( np . kron ( rhoA , IB ) , LNrho ) )
149 SEAQT . cB=np . array ( [ 2 * rhoB [ 0 , 1 ] . real , 2 . 0 * rhoB [ 1 , 0 ] . imag , rhoB [ 0 , 0 ] - rhoB
[ 1 , 1 ] ] ) #Componetes vector bloch B
150 HB=TrA ( dot ( np . kron ( rhoA , IB ) , Ham ( t ) ) )
151 TRrhoLNrhoB=dot ( rhoB , dot ( IB , LNrhoB ) ) . trace ( ) [ 0 , 0 ]
152 TRrhoHLNrhoB=( 0 . 5 ) * dot ( rhoB , AntiConm ( HB , LNrhoB ) ) . trace ( ) [ 0 , 0 ]
153 TRrhoHB=dot ( rhoB , HB ) . trace ( ) [ 0 , 0 ]
154 TRrhoBHB2=dot ( rhoB , dot ( HB , HB ) ) . trace ( ) [ 0 , 0 ]

```

```

155
156   GammaB=TRrhoBHB2 - TRrhoHB**2.0
157   betaB=(TRrhoHB*TRrhoLNrhoB - TRrhoHLNrhoB)/GammaB
158   alphaB=(TRrhoHLNrhoB*TRrhoHB - TRrhoLNrhoB*TRrhoBHB2)/GammaB
159   antiCB= dot(rhoB,HB) + dot(HB,rhoB)
160
161   rhoLNrhoB=dot(rhoB, LNrhoB)
162   DB= rhoLNrhoB + alphaB*rhoB + 0.5*betaB*antiCB
163   SEAQT.TauB=40e-9#Tiempo Disipativo B
164
165   DrhoDt=(-1j/hbar)*Conm(Ham(t),rho)-(np.kron(DA,rhoB))/SEAQT.TauA-(np.kron(
rhoA,DB))/SEAQT.TauB
166   DrhoDt=np.reshape(DrhoDt,16)#REGRESA COMO VECTOR
167   return DrhoDt
168
169 #—Ec. Schrodinger/vonNeuman—Ec. sin disipacion—
170 def vonNeumann(t,rho):
171     rho=np.reshape(rho,[4,4])
172     rhoA=TrB(rho)
173     rhoB=TrA(rho)
174     vonNeumann.cA=np.array([2*rhoA[0,1].real,2.0*rhoA[1,0].imag,rhoA[0,0]-rhoA
[1,1]])#Componetes vector bloch A
175     vonNeumann.cB=np.array([2*rhoB[0,1].real,2.0*rhoB[1,0].imag,rhoB[0,0]-rhoB
[1,1]])#Componetes vector bloch B
176     Hamm=Ham(t)
177     DrhoDt= (-1.0j/hbar)*Conm(Hamm,rho)
178     DrhoDt=np.reshape(DrhoDt,16)
179     return DrhoDt
180 #—————
181 #—Solucion—
182 global tf, n
183 #Parametros de Solucion
184 n= 500 #Numero de iteraciones
185 rho=np.zeros((n,16),dtype=np.complex)
186 DrhoDt=np.zeros((n,16),dtype=np.complex)

```

```
187 cA= np.zeros((n,3))
188 cB= np.zeros((n,3))
189 SA= np.zeros(n)
190 SB= np.zeros(n)
191 #Estado deseado para Fidelidad
192 pa = np.array([[0,0],[0,1]])
193 pb = np.array([[1,0],[0,0]])
194 rhoTarget= np.kron(pa,pb)
195 #-----
196 #EDO Inicial
197 rho[0,:]=np.reshape(rho_0,16)
198 to=0.0
199 tf=180e-9#70
200 dt=(tf-to)/n
201 #---CON o SIN Disipacion---
202 if Disipacion:
203     rhoST=sol.complex_ode(SEAQT) #---solucionador de ecuaciones diferenciales
204     DrhoDt[0,:]=SEAQT(to,rho[0,:])
205     cA[0,:]= SEAQT.cA
206     cB[0,:]= SEAQT.cB
207     print('Solucion con SEAQT')
208 else:
209     rhoST=sol.complex_ode(vonNeumann) #---solucionador de ecuaciones
diferenciales
210     DrhoDt[0,:]=vonNeumann(to,rho[0,:])
211     cA[0,:]= vonNeumann.cA
212     cB[0,:]= vonNeumann.cB
213     print('Solucion con vonNeumann')
214
215 rhoST.set_initial_value(rho[0,:],to)
216 for i in range(1,n):
217     if Disipacion:
218         rho[i,:]= rhoST.integrate(rhoST.t+dt)
219         DrhoDt[i,:]=SEAQT(to+dt,rho[i,:])
220         cA[i,:]= SEAQT.cA
```

```

221     cB[i,:] = SEAQT.cB
222     else :
223         rho[i,:] = rhoST.integrate(rhoST.t+dt)
224         DrhoDt[i,:] = vonNeumann(to+dt, rho[i,:])
225         cA[i,:] = vonNeumann.cA
226         cB[i,:] = vonNeumann.cB
227     to += dt
228 #- Graficas -
229 SvN = np.zeros(n)
230 dsdt = np.zeros(n)
231 E = np.zeros(n)
232 C = np.zeros(n)
233 F = np.zeros(n)
234 SigmaAB = np.zeros(n)
235 Pa = np.zeros(n)
236 Pb = np.zeros(n)
237 Concurrencia = np.zeros(n)
238 tF = np.linspace(0, tf, n)
239 u = np.zeros(n)
240 v = np.zeros(n)
241 w = np.zeros(n)
242 for x in range(0, n):
243     rhoM = np.reshape(rho[x], [4, 4]) # Matriz densidad medida
244     DrhoDtM = np.reshape(DrhoDt[x], [4, 4]) # Variacion de la matriz densidad medida
245     rhoA = TrB(rhoM)
246     rhoB = TrA(rhoM)
247     # Concurrence
248     rhoHAT = np.dot(np.dot(np.kron(sigmaY, sigmaY), np.conjugate(rhoM)), np.kron(
sigmaY, sigmaY)) # Eq. paper
249     RAIZrho = matrix.sqrtm(rhoM) # Eq. paper
250     R = matrix.sqrtm(np.dot(np.dot(RAIZrho, rhoHAT), RAIZrho))
251     Lamdas = sorted(np.linalg.eigh(R)[0]) # ordenar ascendentemente, "eigh"
eigenvalores de R hermitica
252     Concurrencia[x] = Lamdas[3] - Lamdas[2] - Lamdas[1] - Lamdas[0] # concurrencia FIG
.2A paper

```

```

253 #-----
254 #Norm Coherence
255 CM=1.0j*AntiConm(Ham(tF[x]),rhoM)/hbar
256 C[x,]=dot(CM,ODaga(CM)).trace().real
257 #-----
258 #Correcction Functional SigmaAB
259 SigmaAB[x,]=np.trace(dot(rhoM,matrix.logm(rhoM)))-np.trace(dot(rhoA,matrix
.logm(rhoA)))-np.trace(dot(rhoB,matrix.logm(rhoB)))
260 #-----
261 #Entropia de vonNeumann/ Generacion de Entropia
262 SvN[x,]=-(dot(rhoM,matrix.logm(rhoM))).trace().real#Entropia de von
Neumann
263 dsdt[x,]=-np.matrix.trace(np.dot(DrhoDtM,matrix.logm(rhoM)))-np.matrix.
trace(DrhoDtM)
264 SA[x,]=-dot(rhoA,matrix.logm(rhoA)).trace().real
265 SB[x,]=-dot(rhoB,matrix.logm(rhoB)).trace().real
266 #-----
267 E[x,]=np.matrix.trace(np.dot(rhoM,Ham(x*dt))).real
268 F[x]=np.sqrt(dot(rhoM,rhoTarget)).trace().real
269 #F[x,]=(matrix.sqrtm(dot(rhoM,rhoTarget))).trace().real
270 Pa[x]=dot(rhoA,rhoA).trace().real
271 Pb[x]=dot(rhoB,rhoB).trace().real
272 #Vector de Bloch "B"
273 if x==0 or x==n-1:
274     u[x],v[x],w[x]=Pcoord(rhoB)
275 #-----
276 print('-----',str(x))
277 ConcEncontrada=Concurrencia[n-1]
278 #-----
279 THETA_B=np.zeros(n)
280 THETA_S=np.zeros(n)
281 to=0.0
282 tf=180e-9#70
283 dt=(tf-to)/n
284 f=1

```

```
285 for x in range(0,n):
286     THETA_B[x]=ThetaB(tF[x])
287     THETA_S[x]=ThetaS(tF[x])
288 plt.figure(f)
289 plt.plot(tF[:]*1e9,THETA_B[:],label= r'$\theta_B$')
290 plt.ylabel(r'$\theta_B$ ')
291 plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$\ ')
292 plt.title (r'$Pulso\ Bias$')
293 plt.savefig(SaveIMG + 'Pulso-Bias-' + GateName + '-' + str(n) + '.pdf')
294 f+=1
295 plt.figure(f)
296 plt.plot(tF[:]*1e9,THETA_S[:], '-.',label= r'$\theta_S$')
297 plt.ylabel(r'$\theta_S$ ')
298 plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$\ ')
299 plt.title (r'$Pulso\ de\ Compuerta$')
300 plt.savefig(SaveIMG + 'Pulso-Compuerta-' + GateName + '-' + str(n) + '.pdf')
301
302 #—ESFERA DE BLOCH—A—
303 #Para graficar la esfera de Bloch es necesario instalar qutip (libreria de
304     python).
305 b=qt.Bloch()
306 #Estos comandos dan color en la evolucion del tiempo
307 time = np.linspace(0,tf*1e9,n)
308 nrm=mpl.colors.Normalize(0, tf*1e9)
309 tlist=time
310 colors=cm.jet(nrm(tlist))
311 colorF=cm.OrRd(nrm(tlist))
312 colorB=cm.GnBu(nrm(tlist))
313 #Se cargan Ax, Ay, Az a la esfera
314 for x in range(0,n-1):
315     b.add_points(cA[x,:])
316 #Imagen de la esfera de Bloch
317 b.point_color = list(colors)
318 b.vector_color = list(colors[:,1])
319 b.point_marker=['o']
```

```
319 b.markerfacecolor='none'
320 b.point_size=[25]
321 b.xlabel=[r'$X$', '' ]
322 b.ylabel=[r'$Y$', '' ]
323 b.view= [110,25] # rotacion en x, rotacion en z
324 b.show()
325 ax1= b.fig.add_axes([0.02,0.05,0.95,0.025])
326 cmap=mpl.cm.jet
327 cb1=mpl.colorbar.ColorbarBase(ax1,cmap = cmap,norm=nrm,orientation='horizontal
    ')
328 cb1.set_label(r'$t\ [\mu s]$', fontsize = 13)
329 if ControlSave:
330     b.fig.savefig(SaveIMG + 'BlochSphereA-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.
    pdf', bbox_inches='tight')
331
332 #—ESFERA DE BLOCH—B—
333 #Para graficar la esfera de Bloch es necesario instalar qutip (libreria de
    python).
334 b=qt.Bloch()
335 #Estos comandos dan color en la evolucion del tiempo
336 time = np.linspace(0,tf*1e9,n)
337 nrm=mpl.colors.Normalize(0, tf*1e9)
338 tlist=time
339 colors=cm.jet(nrm(tlist))
340 colorF=cm.OrRd(nrm(tlist))
341 colorB=cm.GnBu(nrm(tlist))
342 #Se cargan Ax, Ay, Az a la esfera
343 for x in range(n):
344     b.add_points([cB[x,0],cB[x,1],cB[x,2]])
345     b.add_vectors([u[x], v[x], w[x]])
346 #Imagen de la esfera de Bloch
347 b.point_color = list(colors)
348 b.vector_color = list(colors[:,1])
349 b.point_marker=['o']
350 b.markerfacecolor='none'
```

```

351 b.point_size=[25]
352 b.xlabel=[r'$X$', '']
353 b.ylabel=[r'$Y$', '']
354 b.view= [110,25] # rotacion en x, rotacion en z
355 b.show()
356 ax1= b.fig.add_axes([0.02,0.05,0.95,0.025])
357 cmap=matplotlib.cm.jet
358 cb1=matplotlib.colorbar.ColorbarBase(ax1,cmap = cmap,norm=norm,orientation='horizontal
    ')
359 cb1.set_label(r'$t \ [\mu s]$', fontsize = 13)
360 if ControlSave:
361     b.fig.savefig(SaveIMG + 'BlochSphereB-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.
    pdf', bbox_inches='tight')
362 f=1 #numero de la figura
363 #---COMP. VECTOR DE BLOCH "A"---
364 # Evolucion del Bloch Vector "A"
365 plt.figure(f)
366 plt.plot(tF[:]*1e9,cA[:,0],label= r'$a_x$')
367 plt.plot(tF[:]*1e9,cA[:,1], '-.',label= r'$a_y$')
368 plt.plot(tF[:]*1e9,cA[:,2], ':',label= r'$a_z$')
369 plt.ylabel(r'$Vector \ de \ Bloch \ P_A$ ')
370 plt.xlabel(r'$Tiempo \ de \ Evolucion, \ \tau[ns] $ ')
371 plt.title (r'$Evolucion \ del \ qubit \ A$')
372 plt.legend()
373 if ControlSave:
374     plt.savefig(SaveIMG + 'VECTOR.BLOCH.A-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.
    pdf')
375 f+=1
376 #---COMP. VECTOR DE BLOCH "B"---
377 # Evolucion del Bloch Vector "B"
378 plt.figure(f)
379 plt.plot(tF[:]*1e9,cB[:,0],label= r'$b_x$')
380 plt.plot(tF[:]*1e9,cB[:,1], '-.',label= r'$b_y$')
381 plt.plot(tF[:]*1e9,cB[:,2], ':',label= r'$b_z$')
382 plt.ylabel(r'$Vector \ de \ Bloch \ P_B$ ')

```

```

383 plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$\ ')
384 plt.title (r'$Evolucion\ del\ qubit\ B$')
385 plt.legend()
386 if ControlSave:
387     plt.savefig(SaveIMG + 'VECTOR.BLOCH.B-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.
        pdf')
388 f+=1
389 #—CONCURRENCIA—
390 if ControlDraw:
391     plt.figure(f)
392     plt.axhline(y=0.0, color='black', linestyle='-',linewidth=1)
393     plt.plot(tF*1e9, Concurrencia, '-.')
394     plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$\ ')
395     plt.ylabel(r'$C(\rho)$ ')
396     plt.title (r'$Concurrencia$')
397 if ControlSave:
398     plt.savefig(SaveIMG + 'CONCURRENCIA-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.
        pdf', bbox_inches='tight')
399 f+=1
400 #—COHERENCIA—
401 if ControlDraw:
402     plt.figure(f)
403     plt.plot(tF*1e9,C)
404     plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$\ ')
405     plt.ylabel(r'$\mathcal{C}$ ')
406     plt.title (r'$Factor\ de\ Coherencia$')
407 if ControlSave:
408     plt.savefig(SaveIMG + 'COHERENCIA-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.pdf'
        )
409 f+=1
410 #—CORRECCION FUNCIONAL SIGMA_AB—
411 if ControlDraw:
412     plt.figure(f)
413     plt.plot(tF*1e9, SigmaAB)
414     plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$\ ')

```

```

415     plt.ylabel(r'$\sigma_{AB}(\rho)$ ')
416     plt.title (r'$Funcional\ de\ Correccion$')
417 if ControlSave:
418     plt.savefig(SaveIMG + 'FUNCIONAL-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.pdf')
419 f+=1
420 #—ENTROPIA DE vonNEUMANN—
421 if ControlDraw:
422     plt.figure(f)
423     plt.plot(tF*1e9, SvN, label= r'$S(\rho_{A-B})$')
424     plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$ ')
425     plt.ylabel(r'$\langle S \rangle$ ')
426     plt.plot(tF*1e9, SA, label= r'$S(\rho_A)$')
427     plt.plot(tF*1e9, SB, label= r'$S(\rho_B)$')
428     plt.legend()
429     plt.title (r'$Entropia$')
430 if ControlSave:
431     plt.savefig(SaveIMG + 'ENTROPIA-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.pdf')
432 f+=1
433 #—VARIACION DE LA ENTROPIA—
434 if ControlDraw:
435     plt.figure(f)
436     plt.plot(tF*1e9, dsdt)
437     plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$ ')
438     plt.ylabel(r'$\frac{d\langle S \rangle}{dt}$ ')
439     plt.title (r'$Generacion\ de\ Entropia$')
440 if ControlSave:
441     plt.savefig(SaveIMG + 'sGENERACION-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.pdf'
442                ')
442 f+=1
443 #—FIDELIDAD—
444 if ControlDraw:
445     plt.figure(f)
446     plt.plot(tF*1e9, F)
447     plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$ ')
448     plt.ylabel(r'$\mathscr{F}(\rho_A, \rho_B)$ ')

```

```

449     plt.title (r'$Fidelidad$')
450 if ControlSave:
451     plt.savefig(SaveIMG + 'FIDELIDAD-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.pdf')
452     filename=LocationData + 'FIDELIDAD-' + GateName + '-' + str(n) + Dis+'.npy'
453     np.save(filename ,F)
454 f+=1
455 if ControlTWO:
456     filename=LocationData + 'FIDELIDAD-' + GateName + '-' + str(n) + '-SEAQT'+
457     '.npy'
458     Fs=np.load(filename)
459     filename=LocationData + 'FIDELIDAD-' + GateName + '-' + str(n) + '-
460     vonNeumann'+'.npy'
461     Fv=np.load(filename)
462     plt.figure(f)
463     plt.plot(tF*1e9,Fs,label = 'SEAQT')
464     plt.plot(tF*1e9,Fv,'-.',label = 'vonNeumann')
465     plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$\ ')
466     plt.ylabel(r'$\mathscr{F}(\rho_A,\rho_B)$ ')
467     plt.title (r'$Fidelidad$')
468     plt.legend()
469     f+=1
470     if ControlSave:
471         plt.savefig(SaveIMG + 'FIDELIDAD-TWO-' + GateName + '-' + str(n) + '.pdf
472         ')
473 #---PUREZA---
474 if ControlDraw:
475     plt.figure(f)
476     plt.plot(tF*1e9,Pa,label= r'$\mathcal{P}(\rho_A)$')
477     plt.plot(tF*1e9,Pb,label= r'$\mathcal{P}(\rho_B)$')
478     plt.xlabel(r'$Tiempo\ de\ Evolucion,\ \tau[ns]$\ ')
479     plt.ylabel(r'$\mathcal{P}(t)$ ')
480     plt.title (r'$Pureza$')
481     plt.legend()
482 if ControlSave:

```

```
481 plt.savefig(SaveIMG + 'PUREZA-' + GateName + '-' + str(n) + Dis + '.pdf')
482 f+=1
483 #—ENERGIA VS ENTROPIA—
484 #plt.figure(f)
485 #rho1=np.linspace(0.001,0.999,n);
486 ##Seq=np.zeros(n)
487 ##E_eq=np.zeros(n)
488 #Seq=2*(-rho1*np.log(rho1)-(1-rho1)*(np.log(1-rho1)))
489 #E_eq=2*(rho1-(1-rho1));
490 #plt.plot(Seq,E_eq)
491 #plt.plot(SvN,E)
492 ##plt.xlabel('\langle S \rangle')
493 ##plt.ylabel('\langle E \rangle')
```