

TESIS DEFENDIDA POR
Roberto Javier Guerrero Moreno
Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ

Dr. Fernando Rojas Iñiguez
Director del Comité

Dr. Francisco Míreles Higuera
Miembro del Comité

Dra. Catalina López Bastida
Miembro del Comité

Dr. Pedro Negrete Regagnón
Miembro del Comité

Dra. Laura Viana Castrillón
*Coordinador del programa de posgrado en
Física de materiales*

Dr. David Hilario Covarrubias Rosales
Director de Estudios de Posgrado

23 de septiembre de 2008

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE EDUCACIÓN SUPERIOR
DE ENSENADA**



**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS
EN FÍSICA DE MATERIALES**

**ESTUDIO DE ANISOTROPIA DE INTERCAMBIO EN PUNTOS CUANTICOS
ACOPLADOS**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de
DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

ROBERTO JAVIER GUERRERO MORENO

Ensenada, Baja California, México, agosto 2008.

RESUMEN de la tesis de **Roberto Javier Guerrero Moreno**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de DOCTOR EN CIENCIAS en Física de Materiales. Ensenada, Baja California. Agosto, 2008.

ESTUDIO DE ANISOTROPIA DE INTERCAMBIO EN PUNTOS CUANTICOS ACOPLADOS

Resumen aprobado por:

Dr. Fernando Rojas Iñiguez
Director de Tesis

La computación cuántica ha generado gran interés, debido a la promesa de superar a la computación clásica. Así como en la computación clásica, existe un conjunto de compuertas lógicas que son capaces de producir cualquier operación, también existen en la computación cuántica, y se ha demostrado que una compuerta de dos qubits más operaciones de un solo qubit son capaces de generar un conjunto de compuertas universales.

Loss y DiVincenzo propusieron que utilizando un par de espines electrónicos acoplados y considerando al término de intercambio como una variable dinámica de control, es posible generar a la compuerta $(\text{swap})^{1/2}$ o “square root swap” de dos qubits y con operaciones de un solo qubit, producir un circuito que genere a la compuerta CNOT. En estos sistemas, la interacción de intercambio se ve afectada por el acoplamiento espín – órbita, a través del término Dzyaloshinski – Moriya (DM), y del campo magnético nuclear, por medio de la interacción hiperfina, producido por los iones positivos de la red que forma los puntos cuánticos

En este trabajo estudiamos dos modelos de espines electrónicos acoplados: (i) modelo dinámico con interacción de intercambio dependiente del tiempo que incluye, el efecto del término DM a lo largo del eje z , y la interacción hiperfina con el baño de espines nucleares, en la operación de la compuerta $(\text{swap})^\alpha$ de dos qubits, así como sus propiedades de entrelazamiento y consideramos también (ii) el modelo estacionario en contacto con un baño térmico a temperatura T donde calculamos propiedades de entrelazamiento, magnetización y la temperatura crítica, que es aquel valor donde el sistema pierde la capacidad de producir estados entrelazados, para diferentes condiciones del campo nuclear y del campo magnético externo.

Para (i) resolvimos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el Hamiltoniano de Heisenberg, y hemos incluido la componente z del término DM. Encontramos expresiones analíticas para la evolución dinámica de las probabilidades de los estados, magnetización, concurrencia y fidelidad de la compuerta.

Presentamos una relación analítica, valida en el subespacio $S_z = 0$, para la concurrencia en función de la magnetización en sitio.

En ausencia del campo hiperfino, obtuvimos expresiones analíticas que muestran el efecto del término DM en la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$, y en base a las propiedades mencionadas se encontró una condición para modificar el pulso de intercambio de tal manera que el error causado por el término DM en la concurrencia, magnetización y probabilidad de estado es eliminado. Sin

embargo se encontró que para la fidelidad el término DM agrega un error intrínseco a la operación de compuerta proporcional al cuadrado de este y la concurrencia del estado α .

Para el modelo con campo hiperfino, consideráramos la aproximación cuasi-estática para los espines nucleares como campo estocástico. Para esta parte presentamos resultados numéricos de los promedios de las propiedades mencionadas.

Demostramos que la interacción hiperfina agrega un error a las probabilidades de estado, concurrencia y magnetización para la operación de compuerta, y que podría ser corregida modificando la variable de intercambio y/o con la elección adecuada del término DM y del campo nuclear, si esto fuese posible. La fidelidad por otro lado muestra que la operación de compuerta es seriamente afectada e inclusive en escalas de tiempo lo suficientemente grandes podría ser destruida completamente por este acoplamiento. Además encontramos que el error a la operación de compuerta en las propiedades de probabilidad de estados, concurrencia y magnetización aumenta de cuadráticamente con la varianza del campo magnético nuclear.

Par el modelo (ii) estudiamos propiedades de concurrencia, magnetización y de la temperatura crítica como función de la temperatura donde incluimos el término DM y la interacción hiperfina. Estas propiedades se estudiaron para diferentes condiciones del campo nuclear y del campo magnético. En general encontramos que la concurrencia aumenta y la magnetización disminuye como función de la temperatura. En particular para una temperatura fija se determino que la concurrencia aumenta para valores mayores del término DM mientras que la magnetización disminuye.

Las propiedades presentan comportamiento diferentes para valores pequeños y grandes del campo magnético externo. Para valores grandes del campo magnético externo encontramos que la concurrencia presenta un máximo local el cual varía cuadráticamente como función de la varianza y del campo magnético. Mientras que la magnetización presenta un máximo local para valores grandes del campo magnético externo.

Se encontró que la temperatura crítica no depende del valor del campo externo, mientras que aumenta cuadráticamente con el término DM y con la varianza del campo nuclear.

Palabras Clave: entrelazamiento, concurrencia, interacción hiperfina, computación cuántica.

ABSTRACT of the thesis presented by **Roberto Javier Guerrero Moreno** as a partial requirement to obtain the DOCTOR OF SCIENCE degree in Materials Physics. Ensenada, Baja California, México august, 2008.

ANISOTROPIC EXCHANGE STUDIES IN COUPLED QUANTUM DOTS

Great interest has been generated around quantum computing due to the promise that this new technology will separate the efficiency of the actual computer technology. Just like in a classic computation there is a set of logic gates able to produce any operation, they also exist in quantum computation. It has been demonstrated that a two-qubit gate and one-qubit operations are enough to generate a universal set of quantum gates.

Loss and DiVincenzo have proposed that by considering the exchange interaction between two coupled electronic spins, as a control dynamical variable, it is possible to generate the two-qubit quantum gate (*swap*)^{1/2} or "square root swap" and with one-qubit operations generate the circuit to generate the CNOT quantum gate, that it has been demonstrated forms a universal set with one bit rotations.

In these systems the exchange interaction can be affected by the spin - orbit coupling, through the form Dzyaloshinski – Moriya term (DM) and by the nuclear magnetic field, through the hyperfine interaction; which is produced by the nuclear ions of the surrounding lattice that forms the quantum dot.

In this work we study two models for two coupled electronic spins: (i) the dynamical model with time dependent exchange interaction, $J(t)$. We include the DM term along the z direction and the hyperfine interaction, where we determine how much influence these terms have in the quantum gate operation (*swap*) ^{α} , (ii) for a stationary model in contact with a thermal reservoir at temperature T , we calculate properties of entanglement and magnetization and critical temperature, which is defined as the value of the temperature where the system losses the ability to create entangled states, for various conditions of the nuclear and the external magnetic fields.

For (i) we solved the time dependet Schrödinger equation for the time dependent Hamiltonian considering the z component of the DM term. With the obtain time dependent amplitudes we where able to obtain analytical expressions for the dynamical evolutions of the probabilities of states, in site magnetization, concurrence and gate fidelity

We present an analytical expression, for the concurrence as a function of the in site magnetization valid in the $S_z = 0$ subspace. In the absence of the hyperfine field, we found analytical expression as a function of the DM term for the mentioned properties, and with those we determine the effect of this field in the (*swap*) ^{α} gate operation, besides we found that all the properties except the fidelity where the DM terms adds an uncorrectable error, however the error is correctable by modifying the dynamical exchange term.

If we consider the hyperfine interaction we must contemplate the quasi-static approximation in the nuclear spins, which allows to give a static description through the stochastic field.

We show that the hyperfine interaction adds an error to the occupation probabilities, concurrence and magnetization in the gate operation and we propose that it can be corrected by modifying, if possible, the exchange variable and/or by a careful choice of the DM term and the nuclear field. The gate fidelity shows that the hyperfine field affects the gate operation and a scheme like this would not correct it, and that by long exposure to the nuclear field the gate operation would be destroyed. It was also found that the gate error presents a quadratic grow with the variance of the magnetic nuclear field.

For the model (ii) we study for time independent Hamiltonian the concurrence, in site magnetization and critical temperature as a function of the temperature, where we have included the DM term and the hyperfine interaction. These properties were studied under different conditions of the DM term, external magnetic field, and the hyperfine interaction.

We found that the general behavior of the concurrence and the magnetization is to decrease as a function of the temperature. And for a fixed temperature the concurrence will increase as the DM term does while the magnetization will decrease.

It was determined that these properties have different behavior for small and large external magnetic fields. For larger values of the external field the concurrence will have a local maximum, while the magnetization will present one for lower external fields.

We found that the critical temperature does not depend on the value of the external field, and has a quadratic dependency with the DM term and with the variance of the hyperfine interaction.

Key words: Entanglement, concurrence, hyperfine interaction, quantum computation

Dedicatorias

A mis papás...

Agradecimientos.

Quiero agradecer sinceramente al Dr. Fernando Rojas por su apoyo y dirección del trabajo aquí presentado.

También quiero agradecer a los que han sido integrantes de mi comité, Dr. Francisco Míreles, Dr. Pedro Negrete, Dra. Catalina López y al Dr. Ernesto Cota, por su continua ayuda y dirección en el transcurso de mi doctorado.

Al departamento de Física de teórica del centro antes de la materia condensada ahora nanoestructura y nanotecnología, y al CICESE por su apoyo económico en diversos congresos y cursos en los que tuve el placer en participar.

Mis compañeros estudiantes deseo agradecer su apoyo y discusiones.

A los trabajadores del centro por hacer mi estancia placentera.

Agradezco al CONACYT por su apoyo económico el cual permitió la realización de mi tesis.

Por ultimo, pero mas importante a mis papás, hermanos, y novia.

CONTENIDO

	Página
Lista de Figuras	iii
Lista de Tablas	xi
Capítulo I. Introducción	1
I.1. Computación cuántica	1
I.2. Objetivos	10
I.3. Estructura de la tesis	11
Capítulo II. Conceptos básicos	13
II.1. Computación cuántica	14
II.2. El bit cuántico o qubit	15
II.3. Compuertas cuánticas	18
II.3.1. Compuertas de un qubit	20
II.3.1. Compuertas de dos qubits	22
II.4. Matriz de densidad	26
II.4.1. Propiedades básicas	26
II.4.2. Ecuación de evolución de la matriz de densidad	28
II.4.3. Propiedades termodinámicas a partir de la matriz de densidad	30
II.5. Entrelazamiento	31
II.5.1. Concurrencia: caracterización del entrelazamiento	33
II.5.2. Estados de entrelazamiento máximo	35
II.5.3. Entrelazamiento térmico	36
II.6. Fidelidad	37
II.7. Magnetización	39
Capítulo III. Espines electrónicos acoplados	41
III.1. Modelo de súper intercambio para espines acoplados	42
III.2. Interacción del espín con el medio ambiente	44
III.2.1. Interacción espín - órbita	45
III.2.2. Interacción hiperfina	48
III.3. Modelo de Loss y Divincenzo	53
III.3.1. La compuerta (<i>swap</i>) ^a	55
Capítulo IV. Efecto del término DM en la compuerta (<i>swap</i>)^a	58
IV.1. Resultados	59
IV.1.1. El hamiltoniano dinámico de intercambio con correcciones DM	60
IV.2. Resultados numéricos	68
IV.3. Comentarios finales	79

CONTENIDO (continuación)

	Página
Capítulo V. Efecto de la interacción hiperfina en la compuerta (<i>swap</i>)^a	81
V.1. Modelo básico para espines acoplados	82
V.1.1 Propiedades del estado base con J constante.	83
V.2. Efecto del campo hiperfino en la operación compuerta (<i>swap</i>) ^a en el modelo de intercambio dinámico $J(t)$.	88
V.2.1. Resultados	89
V.2.1.1. Probabilidades de ocupación	90
V.2.1.1.1 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$	90
V.2.1.1.2 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0.4$	95
V.2.1.1.3 Valores del pulso corregido $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, con $\beta_0 = 0.4$	100
V.2.1.2. Magnetización	102
V.2.1.2.1 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$	102
V.2.1.2.2 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0.4$	106
V.2.1.2.3 Valores del pulso corregido $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, con $\beta_0 = 0.4$	109
V.2.1.3. Concurrencia	110
V.2.1.3.1 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$	110
V.2.1.3.2 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0.4$	113
V.2.1.3.3 Valores del pulso corregido $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, con $\beta_0 = 0.4$	115
V.2.1.4. Efecto de la interacción hiperfina en la relación $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$	117
V.2.1.5. Fidelidad	119
V.2.1.4.1 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$	119
V.2.1.4.2 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0.4$	122
V.2.1.4.3 Valores del pulso corregido $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, con $\beta_0 = 0.4$	123
V.3. Comentarios Finales	124
Capítulo VI. Acoplamiento térmico	126
VI.1. Entrelazamiento y magnetización térmico	127
VI.2. Propiedades térmicas en ausencia de campo hiperfino	130

CONTENIDO (continuación)

VI.2.1. Propiedades térmicas en función del campo magnético	131
VI.2.2. Propiedades térmicas en función del término DM	137
VI.3. Propiedades térmicas en presencia del campo hiperfino	141
VI.4. Comentarios Finales	147
Capítulo VII. Conclusiones y trabajo futuro	150
Referencias	154
Apéndice A: Hamiltoniano de intercambio: formalismo de intercambio	167
Apéndice B: El Hamiltoniano de súper intercambio	171

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura</i>		Página
1	Estado de un qubit en la esfera de Bloch.	16
2	Expresión de circuitos para la compuerta X de la ecuación (II.12).	21
3	Expresión para la compuerta $CNOT$.	24
4	El espín de un electrón interactúa con (a) un solo espín nuclear y (b) con muchos espines nucleares en un punto cuántico semiconductor.	48
5	Un doble punto cuántico. (a) Esquema de la función de onda de dos electrones en el régimen desacoplado, los cuales interactúan con una red de espines. (b) Espines electrónicos interactuando con sus respectivos campos nucleares en la aproximación cuasi estática.	53
6	Esquema de un par de espines electrónicos localizados por medio de compuertas externas en dos puntos cuánticos laterales.	54
7	La variable intercambio $J(t)$, como función del tiempo y de la variable λ , que es el inverso del ancho del pulso.	68
8	Probabilidad de los estados $ \uparrow, \downarrow\rangle$ y $ \downarrow, \uparrow\rangle$ como función del tiempo, para $\alpha = 1/2, 1/4$, y 1. Para los mismos valores de α con $\beta_0 = 0$ los valores λ_r para la curva de referencia dada en la tabla I e incluidos en la figura. El error a la compuerta ocurre al considerar una amplitud de DM distinta a cero, $\beta_0 = 0.4$ y con el mismo valor de referencia, λ_r . Utilizamos el esquema (161) para corregir el ancho del pulso con el valor λ_c , también en la tabla I y producir curvas con las probabilidades correctas.	73
9	La evolución temporal para magnetización en el sitio 1, $\sigma_z(t)$, para valores de $\alpha = 1/2, 1/4$, y 1. La figura tiene parámetros y condiciones definidas en la figura 7: (a) para cada caso se presenta una curva de referencia, λ_r y $\beta_0 = 0$, (b) al “encender” el término DM, $\beta_0 = 0.4$, con el mismo valor $\beta_0 = 0.4$, aparece	75

LISTA DE FIGURAS (continuación)

<i>Figura</i>		Página
	un error en la operación, y (c) se calcula la curva corregida con λ_c y $\beta_0 = 0.4$.	
10	La evolución temporal de la concurrencia $C(t)$, para $\alpha = 1/2, 1/4$, y 1. La figura tiene parámetros y condiciones definidas en la figura 7: (a) para cada caso se presenta una curva de referencia, λ_r y $\beta_0 = 0$, (b) al “encender” el término DM, $\beta_0 = 0.4$, con el mismo valor $\beta_0 = 0.4$, aparece un error en la operación, y (c) se calcula la curva corregida con λ_c y $\beta_0 = 0.4$.	77
11	La evolución temporal de la fidelidad $F(t)$, para $\alpha = 1/2, 1/4$, y 1. La figura tiene parámetros y condiciones definidas en la figura 7: (a) para cada caso se presenta una curva de referencia, λ_r y $\beta_0 = 0$, (b) al “encender” el término DM, $\beta_0 = 0.4$, con el mismo valor $\beta_0 = 0.4$, aparece un error en la operación, y (c) se calcula la curva corregida con λ_c y $\beta_0 = 0.4$.	78
12	El parámetro de control, λ_c , el inverso de la amplitud del pulso, como función de la amplitud β_0 , bajo la condición del pulso (IV.40), para $\alpha = 1/2, 1/4$, y 1. El parámetro λ_c puede ser ajustado a un comportamiento cuadrático con la amplitud β_0 .	79
13	Promedio estadístico de la concurrencia y magnetización de espín 1. En (a) y (b) se muestran dichas propiedades respectivamente como función del término DM, β_0 , para valores de varianza, $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2, 18.4$. En (c) y (d) se muestran las mismas propiedades como función de la varianza para varios valores del término DM, $\beta_0 = 0, 0.1, 0.4$ y 1.0.	87
14	Probabilidad de los estados $ \uparrow, \downarrow\rangle$ y $ \downarrow, \uparrow\rangle$ como función del tiempo. Se presentan tres series de curvas para tres valores de $\alpha = 1/4, 1/2$ y 1. El valor del término DM es igual a $\beta_0 = 0$. Se asegura que los valores de λ , para el pulso $J(t)$, para los tres valores son	91

LISTA DE FIGURAS (continuación)

<i>Figura</i>		Página
	los ideales para producir la operación de compuerta ($swap$) ^{α} , es decir, $x(t_{max}) = \alpha\pi$, Grupo A. Se muestran curvas del efecto del campo hiperfino a través de cuatro valores de la varianza del campo nuclear $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	
15	Probabilidades asintóticas. (a) Para $\alpha = 1/2$ de los estados $ \uparrow, \downarrow\rangle$ y $ \downarrow, \uparrow\rangle$ con $\lambda = 0.6366$. (b) Para $\alpha = 1/4$ el estados $ \uparrow, \downarrow\rangle$ con $\lambda = 1.2731$. (c) Para $\alpha = 1$ para el estado $ \uparrow, \downarrow\rangle$ con $\lambda = 0.3172$. Para las figuras (b) y (c) las probabilidades finales del estado $ \downarrow, \uparrow\rangle$ no se presentan aquí ya presentan variaciones iguales a las mostradas.	92
16	Curvas de error, $\Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0}$ de las probabilidades como función de σ para los valores presentados en la tabla III. Los valores del error $ \Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} $ pueden ajustarse adecuadamente con una curva de la forma $\Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^4$, en la figura (a) se presenta la curva para $\alpha = 1/4$, en (b) para $\alpha = 1/2$ y en (c) para $\alpha = 1$. Los parámetros de ajuste se incluyen en cada figura.	94
17	Probabilidades de los estados $ \uparrow, \downarrow\rangle$ y $ \downarrow, \uparrow\rangle$ en las mismas condiciones del pulso y σ que la figura 13, pero con la interacción DM $\beta_0 = 0.4$, grupo B.	95
18	Las probabilidad asintóticas de los estados $ \uparrow, \downarrow\rangle$ y $ \downarrow, \uparrow\rangle$ de la figura 13 en el intervalo de tiempo 4 a 6.5 ps. (a) Para $\alpha = 1/4$ y para (c) $\alpha = 1$ se muestra solo la probabilidad del estado $ \uparrow, \downarrow\rangle$ y (b) Para $\alpha = 1/2$ se muestran ambos estados.	96
19	Curvas de error, $\Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0}$ para los valores de este presentados en la tabla IV. Las figuras se presentan para tres valores de $\alpha = 1/4$ (a), $1/2$ (b) y 1 (c). Las condiciones del pulso, $x(t_{max}) = \alpha\pi$, aseguran una	99

LISTA DE FIGURAS (continuación)

<i>Figura</i>		Página
	operación exitosa para en la ausencia de campo hiperfino, $\sigma = 0$ y $\beta_0 = 0.4$. Se observa que los valores del error $\left \Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} \right $ pueden ajustarse adecuadamente con una curva de la $\Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^4$. Los parámetros de ajuste se muestran en las figuras.	
20	Probabilidad de los estados $ \uparrow, \downarrow\rangle$ y $ \downarrow, \uparrow\rangle$ como función del tiempo. Se presentan curvas para aquellas condiciones de pulso que satisfacen $x(t_{max}) = \alpha\pi / \sqrt{1 + \beta_0^2}$, $\lambda = 1.3712$ para $\alpha = 1/4$, $\lambda = 0.6957$ para $\alpha = 1/2$ y $\lambda = 0.3421$ para $\alpha = 1$, grupo C. Para $\sigma = 0$ se presenta una curva de referencia (negra sólida) en donde se asegura que las probabilidades de los estados sean los adecuados para compuerta $(swap)^{\alpha}$. Las curvas consecuentes son para valores de la varianza $\sigma = 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	100
21	Evolución dinámica de la magnetización del espín 1 en la operación de compuerta $(swap)^{\alpha}$, con la condición del pulso tal que $x(t_{max}) = \alpha\pi$, que corresponde a $\lambda = 1.2731$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = 1/4$ (curvas azules), $\lambda = 0.6366$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = 1/2$ (curvas negras) y $\lambda = 0.3172$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = 1$, para $\beta_0 = 0$ y la condición de pulso que asegura una operación de compuerta exitosa para la curva de referencia $\sigma = 0$ (curva sólida), grupo A. Se presentan, además, $\sigma = 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	103
22	Valores finales en la región asintótica para la magnetización del espín 1 para $\alpha = 1/4$ bajo las mismas condiciones de la figura 17.	104
23	Curvas de error, $\left \Delta \sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0} \right $ para los valores de este presentados en la tabla VI. Las figuras se presentan para tres valores de $\alpha = 1/4$ (a), $1/2$ (b) y 1 (c). Las condiciones del pulso aseguran una operación exitosa para en la ausencia de campo hiperfino, $\sigma = 0$ y para $\beta_0 = 0$. Se observa que los valores del error $\left \Delta \sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0} \right $ pueden ajustarse adecuadamente con una curva de la	106

LISTA DE FIGURAS (continuación)

<i>Figura</i>		Página
	$\Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0}\sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0}\sigma^4$, donde los parámetros de ajuste están expresados en cada figura.	
24	Evolución dinámica de la magnetización del espín 1 para las mismas condiciones de la figura 21 excepto que el término DM aquí tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$, grupo B.	107
25	Evolución dinámica de la magnetización del espín 1 en la operación de compuerta $(swap)^{\alpha}$, para aquellos valores λ que satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, grupo C, $\lambda = 1.3712$ para $\alpha = \frac{1}{4}$ (curvas azules), $\lambda = 0.6857$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ (curvas negras) y $\lambda = 0.3421$ para $\alpha = 1$, para $\beta_0 = 0.4$ y la condición de pulso, después del esquema de corrección, aseguran una operación de compuerta exitosa para la curva de referencia $\sigma = 0$ (curva sólida). Se presentan, además, $\sigma = 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	109
26	Concurrencia como función del tiempo. Se presentan tres series de curvas para tres valores del grupo A, $\lambda = 1.2731$ para $\alpha = \frac{1}{4}$ (curvas azules), $\lambda = 0.6366$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ (curvas negras) y $\lambda = 0.3172$ para $\alpha = 1$, los cuales satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi$. El valor del término DM es constante e igual. Se asegura que los valores de λ son los ideales para producir la operación de compuerta $(swap)^{\alpha}$. Se muestran curvas para diferentes valores de la varianza del campo nuclear $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	110
27	Concurrencia como función del tiempo, para los mismos valores de la figura 26 excepto que aquí $\beta_0 = 0.4$.	113
28	Concurrencia como función del tiempo en la operación de compuerta $(swap)^{\alpha}$. Las condiciones satisfacen el grupo C y son $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$ para valores de $\lambda = 1.3712$ para $\alpha = \frac{1}{4}$ (curvas azules), $\lambda = 0.6857$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ (curvas negras) y $\lambda = 0.3421$ para $\alpha = 1$ (curvas negras), para $\beta_0 = 0.4$ y la condición de pulso, después del esquema de corrección, aseguran	115

LISTA DE FIGURAS (continuación)

<i>Figura</i>		Página
	una operación de compuerta exitosa para la curva de referencia $\sigma = 0$ (curva sólida). Se presentan, además, $\sigma = 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	
29	Curvas de la relación $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$ para $\sigma = 4.6$ mT y $\sigma = 9.2$ mT (a) para los valores del grupo A de la tabla III (b) para los valores del grupo B de la tabla III. Las figuras (c) y (d) presentan respectivamente los valores finales de las figuras (a) y (b) en los rangos de 3 a 6.5 ps y de 0.994 a 1.0001.	118
30	Fidelidad de compuerta como función del tiempo, para $\beta_0 = 0$, y con condición de pulso λ que garantiza una operación exitosa, $x(t_{max}) = \alpha\pi$, para $\sigma = 0$, $\alpha = \frac{1}{4}$, figura (a), $\lambda = 0.6366$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = \frac{1}{2}$, figura (b), y $\lambda = 0.3172$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = 1$, figura (c). Se muestran curvas para $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	120
31	Fidelidad de compuerta como función del tiempo. La condición son las mismas que las presentas para la figura 29, excepto con $\beta_0 = 0.4$. Se muestra el error agregado debido a la operación debido al campo hiperfino Las curvas consecuentes son para (a) $\alpha = \frac{1}{4}$, (b) $\alpha = \frac{1}{2}$ y (c) $\alpha = 1$ para valores de la varianza de $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	122
32	Fidelidad de compuerta como función del tiempo, para $\beta_0 = 0.4$, y con para valores que satisfacen $x(t_{max}) = \frac{\alpha\pi}{\sqrt{1 + \beta_0^2}}$, $\lambda = 1.3712$ para $\alpha = \frac{1}{4}$ (a), $\lambda = 0.6857$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ (b) y $\lambda = 0.3421$ para $\alpha = 1$ (c). Se muestra el error agregado debido a la operación debido al campo hiperfino Las curvas consecuentes son para valores de la varianza de $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.	124
33	Concurrencia (a) y magnetización (b) como función de la temperatura en ausencia de campo hiperfino ($\sigma = 0$) e interacción DM ($\beta_0 = 0$). Se muestran curvas para valores del campo magnético externo desde 0 mT hasta 50 mT en paso de 10 mT.	131

LISTA DE FIGURAS (continuación)

<i>Figura</i>		Página
34	La concurrencia (a) y magnetización (b), en ausencia de campo hiperfino ($\sigma = 0$) e interacción DM ($\beta_0 = 0$). Se incluye como referencia la curva con $B_{ext} = 0$. Para la concurrencia variamos el campo magnético externo desde 39 mT hasta 50 mT en pasos de 2 mT, para la magnetización se varia desde 30 mT hasta 50 mT	132
35	En la curva (a) se muestra la amplitud del máximo local de la concurrencia, $C_{Max}^{B_{ext}}$, como función del campo magnético externo. La curva (b) muestra la posición del máximo, kT_1 , como función del campo magnético externo.	133
36	Probabilidad de los estados de la base computacional, $P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$ para y con una amplitud del término DM, $\beta_0 = 0.4$. La figura (a) muestra las probabilidades y la curva de la concurrencia para un campo magnético externo $B_{ext} = 50$ mT. La figura (b) muestra las probabilidades y la curva de la concurrencia para un campo magnético externo $B_{ext} = 10$ mT.	135
37	Curvas para la condición $C^2 + 4\sigma_{1z}^2$, como función de la temperatura, para valores del campo magnético de 0 mT hasta 50 mT, en pasos de 10 mT.	137
38	Concurrencia y magnetización como función de la temperatura, para diferentes valores de la amplitud del término DM, β_0 , desde 0 hasta 1 en paso de 0.2. Las figuras (a) y d) muestran estas propiedades para campo magnético $B_{ext} = 10$ mT y las figuras (b) y (c) para $B_{ext} = 50$ mT	138
39	(a) Valor del máximo local de la concurrencia, $C_{Max}^{\beta_0}$ como función del término DM, β_0 . (b) Posición del máximo, $kT_{max}^{\beta_0}$, como función del término DM, β_0 .	139
40	Temperatura critica, T_c , como función del término DM, β_0 . La curva puede ajustarse utilizando una curva del tipo	140

LISTA DE FIGURAS (continuación)

$$T_c^{\beta_0} = A_{\beta_0} + B_{\beta_0,2}(\beta_0)^2 + C_{\beta_0,3}(\beta_0)^4.$$

- 41 Presentamos curvas para la relación $C^2 + 4(\sigma_{1z})^2$ como función de la temperatura. Las curvas se presentan para (a) $B_{\text{ext}} = 10$ mT y para (b) $B_{\text{ext}} = 50$ mT. 141
- 42 Concurrencia térmica, para $\beta_0 = 0.4$. Se presentan curvas para los valores de la varianza del campo hiperfino, $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT. Se presenta una curva de referencia, para los valores $\sigma = 0$ y $B_{\text{ext}} = 0$ mT. Concurrencia para el campo externo de:
(a) $B_{\text{ext}} = 20$ mT. (b) $B_{\text{ext}} = 30$ mT. (c) $B_{\text{ext}} = 35$ mT. (d) $B_{\text{ext}} = 36$ mT. (e) $B_{\text{ext}} = 37$ mT. (f) $B_{\text{ext}} = 38$ mT. (g) $B_{\text{ext}} = 39$ mT. 142
- 43 Concurrencia térmica para las mismas condiciones que las presentadas en la figura 39, excepto a los valores del campo magnético externo. (a) $B_{\text{ext}} = 40$ mT. (b) $B_{\text{ext}} = 41$ mT. (c) $B_{\text{ext}} = 42$ mT. (d) $B_{\text{ext}} = 43$ mT. (e) $B_{\text{ext}} = 44$ mT. (f) $B_{\text{ext}} = 45$ mT. (g) $B_{\text{ext}} = 50$ mT. 143
- 44 (a) amplitud del máximo de la concurrencia, C_{max}^σ , (b) posición, kT_{max}^σ , como función del campo magnético externo B_{ext} . Las curvas se presentan para valores de la varianza $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT y para un valor de $\beta_0 = 0.4$ para la interacción DM. 144
- 45 Temperatura crítica, T_c , como función de (a) la varianza, σ , con valores del término DM de $\beta_0 = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ y 0.5 y como función (b) el término DM, β_0 con valores de la varianza igual a $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 . 145
- 46 Magnetización del espín 1 como función de la temperatura en donde el valor del término DM, tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$. Se presentan curvas para la varianza del campo hiperfino iguales a $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 . El valor del campo magnético externo se mantiene constante en cada figura y se muestra la variación de 147

LISTA DE FIGURAS (continuación)

este de figura a figura. (a) $B_{ext} = 20$ mT, (b) $B_{ext} = 30$ mT, (c) $B_{ext} = 40$ mT, (d) $B_{ext} = 50$ mT. En cada figura se incluye una curva de referencia con $\sigma = 0$ y $B_{ext} = 0$ mT.

- 47 Dos electrones localizados con \vec{R}_1 y \vec{R}_2 , con espines posiblemente distintos, rodean al núcleo. El traslape de sus funciones de onda inducen correlaciones entre los espines. 167

LISTA DE TABLAS

Tabla		Página
I	<p>Parámetros de pulso utilizado en los cálculos numéricos. Para cada α se presenta un valor de referencia que reproduce $x(t_{\max}) = \alpha\pi$ con un valor de λ_r y $\beta_0 = 0$ necesarios para producir la compuerta cuántica $(\text{swap})^\alpha$. Después para el mismo valor de λ_r y una amplitud de DM diferente de cero, $\beta_0 \neq 0$, se evalúa el error introducido a la operación de compuerta. Finalmente para los mismos valores de la amplitud de DM se utiliza el esquema de corrección del pulso, $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$ para calcular el nuevo valor de λ_c que produzca los valores asintóticos adecuados para las amplitudes $b_0(t)$ y $c_0(t)$.</p>	69
II	<p>Valores asintóticos para diferentes condiciones de área de pulso $x(t)$ para tres valores de α y β_0 para la magnetización en sitio, concurrencia C, fidelidad F, y probabilidad de ocupación de los estados $\uparrow, \downarrow\rangle$ y $\downarrow, \uparrow\rangle$, $P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}$ y $P_{ \downarrow, \uparrow\rangle}$ respectivamente. Los valores del parámetro λ están dados en la tabla I.</p>	70
III	<p>Parámetros de pulso utilizado en los cálculos numéricos. Para el grupo A, se presentan para cada α, valores de λ_r que satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi$ con $\beta_0 = 0$. Mientras que para el grupo B se presenta para cada valor de α el mismo valor de λ_r que en el grupo A pero ahora con $\beta_0 = 0.4$. En el grupo C se presenta, para cada valor α, la corrección de λ_c utilizando el esquema de pulsos de tal forma que $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$ con $\beta_0 = 0.4$.</p>	90
IV	<p>Valores asintóticos de las probabilidades de los estados $\uparrow, \downarrow\rangle$ y $\downarrow, \uparrow\rangle$ en la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$, para $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT del campo nuclear. Los resultados se presentan para: $\lambda = 1.2731$ para $\alpha = 1/4$, $\lambda = 0.6366$ para $\alpha = 1/2$ y $\lambda = 0.3172$ para $\alpha = 1$ con $\beta_0 = 0$, que corresponden al grupo A. Las condiciones del pulso dadas aseguran una operación exitosa con $\sigma = 0$.</p>	93

LISTA DE TABLAS (continuación)

Tabla		Página
V	Valores asintóticos de las probabilidades para las mismas condiciones de la Tabla IV excepto que el valor del término DM es aquí de $\beta_0 = 0.4$. En gris se muestran los valores correctos de las probabilidades para una operación de compuerta, $(swap)^\alpha$ exitosa, $x(t_{\max}) = \alpha\pi$.	97
VI	Valores asintóticos de las probabilidades de los estados $ \uparrow, \downarrow\rangle$ y $ \downarrow, \uparrow\rangle$ en la operación de compuerta $(swap)^\alpha$, para los valores de la figura 20.	101
VII	Valores asintóticos de la magnetización para las mismas condiciones de valores α, β_0 y de σ de la figura 21. El error de operación, $ \Delta\sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0} $, se calcula con respecto la curva de referencia $\sigma = 0$.	105
VIII	Valores asintóticos de la magnetización para las mismas condiciones de la tabla VII excepto que aquí $\beta_0 = 0.4$. Se agrega, en gris, el valor correcto de la magnetización para valor de α .	108
IX	Valores asintóticos de la concurrencia para las mismas condiciones de los valores α, β_0 y de σ de la figura 20. El error de operación, $ \Delta\sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0} $, se calcula con respecto la curva de referencia $\sigma = 0$.	112
X	Valores asintóticos de la concurrencia y el error asociado. Los parámetros son iguales a aquellos presentados en la tabla VIII pero aquí el termino DM tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$.	114
XI	Valores asintóticos de la concurrencia y el error asociado. Los parámetros para σ y α son iguales a los presentados en la figura 27 pero aquí el termino DM tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$.	117
XII	Valores asintóticos de la Fidelidad para $\alpha = 1/4, 1/2$ y 1 , y para $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT. Las condiciones del pulso son iguales alas presentadas en la figura 29. El valor ideal de la	121

LISTA DE TABLAS (continuación)

Tabla

fidelidad debe ser igual a $F = I$.**Página**

Introducción

La computación cuántica ha generado mucho interés en la comunidad científica ya que presenta ventajas definitivas sobre la computación clásica, y es esta promesa lo que motiva al desarrollo de esta nueva tecnología. En general, la computación cuántica se define como aquellos procesos computacionales que utilizan las propiedades cuánticas de algún sistema físico, tal como paralelismo y entrelazamiento, para realizar procesos de computación y se ha evaluado en varios órdenes de magnitud más rápida que la computación clásica. Es la promesa de una computación más rápida la que ha llevado al mundo científico a estudiar sistemas que puedan servir como base para este nuevo paradigma computacional. Sin embargo, es más importante para los objetivos de nuestro trabajo contestar, ¿Es el espín electrónico suficiente para definir un bit cuántico?, ¿Qué efecto tiene el acoplamiento espín – órbita y el campo magnético nuclear en la construcción de compuertas de dos qubits?, y ¿Cómo afecta el medio ambiente en las propiedades de entrelazamiento del sistema?, las respuestas a estas preguntas forman la base de nuestro trabajo. Iniciamos dando una breve introducción sobre los elementos fundamentales de la computación cuántica.

I.1 Computación cuántica

La idea de computación cuántica no es nueva, existe desde hace más de 25 años [Feynman, 1982; Deutsch, 1985; Wiesner, 1983; Brassard y Bennett, 1984]. Sin embargo es hasta hace poco que la idea teórica ha tenido una base tecnológica lo suficiente firme para ser considerada como una realidad posible. En gran parte, el continuo desarrollo de las técnicas de epitaxia y litografía de las últimas décadas, ha permitido la construcción

de estructuras en la escala de nanómetros. La continua disminución de la escala de los microprocesadores y la duplicación del número de transistores en un microprocesador, cada de 12 a 18 meses ha hecho claro que el límite clásico es inminente y es necesario encontrar una tecnología nueva, esto fue anunciado por Moore hace más de 40 años y se conoce como la “ley de Moore” [Moore, 1965]. Es decir, llegará un momento en donde la escala de las estructuras electrónicas, sea tan pequeña que los efectos cuánticos serán notorios en el sistema, y por lo tanto interferirán en el proceso de computación. Este razonamiento hace considerar a las propiedades cuánticas como un posible sustituto a la tecnología de semiconductores que rige a la computación actual.

La computación cuántica, es aquel conjunto de operaciones que dejan atrás al paradigma de bits clásicos como la base de la computación y que utilizan a sistemas cuánticos de dos estados que formen a un *bit cuántico* (*qubit*). En la computación clásica el bit se define por sistemas que existen en una de dos configuraciones a las cuales se les asignan valores de 0 y 1, por ejemplo la presencia o la ausencia de una corriente eléctrica (transistor). Un qubit se define por un sistema de dos estados cuánticos a los cuales podemos etiquetar con $|0\rangle$ y $|1\rangle$, y a diferencia de los sistemas clásicos los estados de un qubit pueden existir en superposición. Esta propiedad permite realizar un conjunto de operaciones simultáneamente (paralelismo). Sin embargo, los sistemas cuánticos presentan dificultades únicas en el momento de medir el estado. Solo es posible obtener información de una de las variables del sistema ya que al medir el estado la función onda se proyecta sobre la variable de medición y se obtiene la probabilidad de esa variable. Por esta misma razón un estado cuántico no puede ser copiado, ya que el copiar exigiría medir cada una de las amplitudes de la función de onda.

Estas propiedades hacen necesario encontrar una forma diferente de desarrollar y escribir algoritmos cuánticos con respecto a los clásicos. En algoritmos cuánticos es necesario explotar los beneficios del paralelismo, que puede traducirse en aumento de la velocidad de cómputo, y encontrar la manera de superar las dificultades presentadas por el colapso de la función de onda y la propiedad de no clonación de los estados cuánticos.

El principal interés en la computación cuántica está basado en la promesa de superar la eficiencia de la computación clásica mediante un aumento en la densidad de estructuras debido a la disminución de tamaño de las estructuras básicas y el desarrollo de

algoritmos nuevos, basados en la propiedad intrínseca de los estados cuánticos de existir en una superposición de los estados binarios de la base de estados. Esta propiedad es utilizada en la generación de los algoritmos de búsqueda de Grover [Grover, 1996] y el de factorización de Shor [Shor, 94; Shor, 97], donde que muestran una ventaja significativa sobre cualquier algoritmo clásico. El algoritmo de Grover es utilizado para buscar un elemento en una base de datos con N elementos en donde estos están desordenados. En general cualquier algoritmo clásico ocupa tiempo lineal $O(N)$, es decir, realiza la búsqueda término a término hasta localizar el elemento buscado, sin embargo, el algoritmo cuántico de Grover permite realizar la búsqueda en tiempo $O(\sqrt{N})$ [Grover, 1996], que es el tiempo más corto en que un algoritmo cuántico puede realizar la búsqueda. El algoritmo de Grover, por ejemplo, es un algoritmo probabilístico, que funciona amplificando la probabilidad del elemento buscado aplicando un operador adecuado. El algoritmo de Shor, por otro lado, es utilizado para factorizar números grandes en sus elementos primos y muestra una ventaja significativa, ya que cualquier algoritmo clásico muestra un incremento exponencial en el número de operaciones con respecto al número de factores, mientras que dicho algoritmo solo presenta un aumento polinomial [Shor, 1994], esto es una mejora exponencial, $O(e^N)$ con respecto al algoritmo clásico. El algoritmo de Shor es de interés, ya que muchas de las llaves criptográficas utilizadas en comunicaciones “seguras” usan una llave basada en la factorización en componentes primos de números muy grandes. Una computadora cuántica utilizando el algoritmo de Shor podría romper la llave criptográfica en tiempo real, algo no realizable con una computadora clásica y la tecnología actual.

Por lo tanto el encontrar sistemas cuánticos de dos estados capaces de funcionar como *qubit* ha sido un área de gran interés [Bennett, 1995; Nielsen y Chuang, 2000, Rieffel y Polar, 2000; Schumacher, 1995]. En general cualquier sistema cuántico de dos estados es suficiente para generar un *qubit* [Bennett, 1995; Nielsen y Chuang, 2000, Rieffel y Polar, 2000; Schumacher, 1995]. Algunos de los sistemas propuestos y estudiados en este contexto son iones atrapados [Cirac y Zoller, 1995], resonancia magnética [Cory et al., 2000; Gershenfeld y Chiang, 1997], cavidad cuántica [Rauschenbeutel et al., 1999, Turcehte et al., 1999], sistemas de estado sólido [Kane, 1998; Vrijen et al., 2000; Barnes

et al., 2000; Averin, 1998; Pashkin et al., 2003; Schinirman et al., 1997; Nakamura, 1999; Makhlin et al., 1998; Yamamoto et al., 1997; Loss y DiVincenzo, 1998].

En general cualquier qubit puede ser utilizado para definir un conjunto de compuertas cuánticas elementales las cuales se conocen como compuertas de un qubit. Para qubits definidos por espines podemos asociar a estas compuertas con rotaciones de espín que son asociadas con las matrices de Pauli. El acoplamiento entre qubits permite el definir compuertas de mayor dimensión, las cuales tiene propiedades particulares, por ejemplo, la capacidad de generar entrelazamiento en estados. En particular se sabe que cualquier conjunto de operaciones de un qubit mas una compuerta de dos qubits, capaz de generar entrelazamiento en los estados, forman un conjunto universal para la computación cuántica, ya que cualquier compuerta de N qubits puede ser descompuesta en los elementos del conjunto universal [Nielsen, y Chuang, 2000; Kaye et al., 2007].

Estamos interesados en aquellos sistemas basados en estado sólido ya que la tecnología necesaria en la construcción de las heteroestructuras es bien conocida y caracterizada. Además los sistemas de estado sólido abren la posibilidad de fabricar redes integradas de estructuras necesarias para aplicaciones realistas de computación cuántica.

Algunas de las propuestas mas comunes en sistemas de estado sólido son: sistemas superconductores [Chiorescu et al., 2004; Nakamura, 1999; Makhlin et al., 1998; Yamamoto et al., 1997], y puntos cuánticos en gases de electrones bidimensionales formadas en heteroestructuras semiconductoras [Loss y DiVincenzo, 1998], en donde el qubit esta expresado por los dos estados del espín electrónico, $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$.

Para propósito de nuestro trabajo estudiamos a los espines electrónicos como qubits. Utilizar al espín electrónico presenta algunas ventajas inmediatas, es un sistema de dos estados y por lo tanto es un sistema con un *qubit* bien definido. Experimentos recientes han observado tiempos largos de coherencia para el espín electrónico [Fujisawa, et al., 2002; Petta et al., 2005; Johnson, et al., 2005], que exceden los 100 μ s [Kikkawa y Awschalom, 2001; Golovach et al., 2004], que los hace excelentes candidatos para ser utilizados como qubits.

Es posible controlar los estados del qubit y generar operaciones de uno y dos qubits si se logra control de los espines mediante campos externos [Awshalom et al., 2002; Kikkawa y Awshalom, 2001; Golovach et al., 2004]. Esta manipulación de los estados

del qubit se le conoce como operación de un qubit, rotaciones del qubit y para algunas operaciones en particular compuertas cuánticas de un qubit. El acoplamiento controlado de dos qubits permite generar compuertas cuánticas de dos qubits, necesarias en la mayoría de los protocolos existentes en la computación e información cuántica.

Estos conceptos han motivado la idea de una computadora cuántica basada en espines electrónicos en puntos cuánticos [Loss y DiVincenzo, 1998; Burkard et. al., 1999; DiVincenzo et al., 2000]. Para espines electrónicos Loss y DiVincenzo proponen que el control sobre dos espines acoplados se logra manipulando del término intercambio mediante parámetros controlables, como campos externos [Loss y DiVincenzo, 1998; Burkard et. al., 1999; DiVincenzo et al., 2000]. El origen microscópico de la interacción de intercambio se basa en el tuneo virtual de electrones de un punto cuántico al otro [Awshalom et al., 2002; Loss y DiVincenzo, 1998; Burkard et. al., 1999; Marder, 2000], y puede ser controlado mediante diversos parámetros físicos, voltajes de compuerta, campos magnéticos, campos eléctricos, distancia entre puntos, etc [Awshalom et al., 2002; Loss y DiVincenzo, 1998; Burkard et. al., 1999; Marder, 2000].

Loss y DiVincenzo [Loss y DiVincenzo, 1998; Burkard et. al., 1999] proponen que el control dinámico de los parámetros externos hacen posible considerar a la interacción de intercambio como un parámetro dinámico.

Se ha demostrado con la propuesta de Loss y DiVincenzo [Loss y DiVincenzo, 1998; Burkard et. al., 1999] que un par de espines electrónicos acoplados es suficiente para definir la compuerta cuántica CNOT, que es parte fundamental de la mayoría de los protocolos de información cuántica. En particular con esta compuerta más operaciones de un *qubit*, es decir, las operaciones de un qubit sobre un espín electrónico, σ_x , σ_y y σ_z (rotaciones de Pauli) [Nielsen, y Chiang, 2000] es posible definir un conjunto universal de compuertas, como se menciono anteriormente.

La compuerta CNOT sobre un estado del sistema de dos qubits tiene como efecto el mantener igual al estado si el primero de los dos qubits (el qubit de control) esta en una configuración específica y si este qubit se encuentra en la otra configuración obtendremos un estado que ha sido negado [Nielsen, y Chiang, 2000]. Loss y DiVincenzo han presentado un circuito para generar la compuerta CNOT [Loss y DiVincenzo, 1998], en base de operaciones de un qubit y de la compuerta de dos qubits “*half swap*” o

$(\text{swap})^{1/2}$, que genera superposiciones de los estados del sistema y es un caso particular de la compuerta $(\text{swap})^\alpha$, la cual genera estados entrelazados que son controlados con el parámetro α , que es el parametro de ajuste, que puede relacionarse con el grado de entrelazamiento que produce la compuerta. Donde α se controla ajustando la amplitud y la duración del parámetro de intercambio y $\alpha\pi$ es el área total del pulso requerido para producir dicha compuerta.

Los casos mas comunes de dicha compuerta son, las compuertas swap y $(\text{swap})^{1/2}$. La compuerta swap intercambia los estados del sistema generando una rotación de π en los espines del estado, $(\text{swap})^{1/2}$ genera la máxima superposición de los estados, dejándolos a la “mitad del camino” entre el estado inicial y el estado resultado de la compuerta swap de ahí el nombre de “*half swap*”.

Por otro lado experimentos recientes con espines acoplados en puntos cuánticos dobles en GaAs han demostrado control sobre el término de intercambio [Petta et al., 2005; Jonson et al., 2005]. En dichos experimentos se define el qubit como los estados singlete $|S\rangle$ y triplete $|T_0\rangle$ [Coish y Loss, 2005; Petta et al., 2005; Jonson et al., 2005], estados naturales del sistema de dos espines acoplados. A través de este control los autores logran suficiente control sobre el sistema para realizar la compuerta swap y la compuerta *half swap* (180 ps) [Petta et al., 2005; Jonson et al., 2005]. Estos resultados experimentales en conjunto con resultados teóricos previos abren la posibilidad del desarrollo experimental de la compuerta $(\text{swap})^\alpha$ [Fan et al., 2005].

Se demostró que esta compuerta mas operaciones de un qubit forma un conjunto universal, es decir un conjunto de operaciones capaz de generar cualquier operación cuántica, además se demostró ser igual de eficiente, que la compuerta CNOT, en la construcción de circuitos cuánticos [Fan et al., 2005].

Cualquier sistema, no puede ser considerado experimentalmente aislado de reservorios externos, siempre existe acoplamiento con algún sistema externo, el cual en muchos casos genera pérdida de coherencia en el sistema, por lo tanto es importante en el estudio de sistemas con uso en la computación cuántica que se pueda evaluar el efecto del acoplamiento de sistemas con su entorno.

Al considerar a un sistema cuántico en contacto con medio ambiente se presentara un decaimiento en los estados del sistema que puede ser de dos tipos: decoherencia y disipación. Decoherencia se refiere a la pérdida de coherencia de la superposición de estados, es decir el decaimiento de los elementos fuera de la diagonal en la matriz de densidad. La disipación describe el flujo de energía fuera del sistema, y se caracteriza por el decaimiento de los elementos diagonales de la matriz de densidad. Ambos mecanismos destruyen la naturaleza cuántica del sistema. Por lo tanto el sistema solo será viable para la computación cuántica si los tiempos de decoherencia y de disipación son mucho mayores que los tiempos de típicos de computación, en particular para espines electronicos estos tendran que ser menores que el tiempo de relajación del electrón que es del orden de 100 μ s en puntos cuánticos laterales de AsGa [Nielsen, y Chiang, 2000].

En particular se ha demostrado que las causas de disipación en un sistema de espines acoplados en puntos cuánticos laterales se debe al acoplamiento espín – órbita y a la interacción de los espines electrónicos con los espines nucleares de la red cristalina vecina, entre otros [Taylor, et al. 2007; Merkulov, et al. 2002; Khaetskii et al., 2002; Cosí y Loss, 2004; Bracker et al., 2005; Jonson et al., 2005; Petta et al., 2005].

El acoplamiento espín – órbita tiene su origen al considerar el efecto del potencial creado por la falta de simetría de inversion en estructuras cristalinas [Kavokin, 2001]. La presencia en el sistema del acoplamiento espín – órbita introduce anisotropía a la variable de intercambio entre los espines electrónicos de la forma llamada interacción Dzyaloshinskii-Moriya (DM) [Shekhtman et al., 1992; Moriya, 1960; Dzialoshinski, 1958]. Kavokin [Kavokin, 2001]. La interacción DM en puntos cuánticos se presenta en gran parte como consecuencia del tunelaje entre ellos. Y en particular para aquellas estructuras semiconductoras del tipo Wurtzita y Zinblend, el valor de esta interacción podría ser del 1% de término de intercambio en heteroestructuras bidimensionales y del 10% para el bulto. Bonesteel et al. mediante rotaciones de los espines electrónicos y con la elección adecuada del término de intercambio dinámico parametrizan el efecto neto del término DM y presentan un esquema para eliminarlo hasta primer orden en el acoplamiento espín – orbita [Bonesteel et. al, 2001]. Sin embargo, de mayor importancia, debido al esquema presentado por Loss y DiVincenzo [Loss y DiVincenzo, 1998], debe ser el efecto neto del término DM en el circuito generador de CNOT, que se ha

demostrado que por consideraciones de simetría este efecto espín – órbita básicamente se elimina de la secuencia de operaciones [Burkard y Loss, 2002]. También se ha propuesto utilizar este acoplamiento DM para generar operaciones básicas para la computación cuántica [Stepanenko y Bonesteel, 2004] ya que mediante variaciones en el acoplamiento espín – órbita es posible modificar los estados del sistema, y realizar operaciones. Para la compuerta (*swap*)^α es necesario estudiar el efecto del término DM y es uno de los objetivos de nuestro trabajo.

Recientemente, se ha determinado que el espín electrónico, en puntos cuánticos interactúa con los espines nucleares de la heteroestructura vecina mediante la interacción hiperfina, esta es la fuente principal de decoherencia para sistemas de espines electrónicos acoplados [Schliemann et al., 2002; Khaetskii et al., 2002; Merkulov et al., 2002; de Sousa, y. Das Sarma, 2003; de Sousa, y. Das Sarma, 2003; Coish y Loss, 2004; Coish y Loss, 2005; Cerletti et al, 2005; Chutia, et al., 2006].

Debe ser claro que para una configuración particular de los espines nucleares el espín electrónico evolucionara de forma diferente cuando se encuentre en presencia de una configuración alterna del baño nuclear, por lo tanto una descripción estadística describe eficientemente la evolución de los estados del sistema. Esto en gran medida se debe a los tiempos de relajación asociados a los espines electrónicos y nucleares [Khaetskii et al., 2002; Merkulov et al., 2002; Coish y Loss, 2004]. El tiempo de relajación de los electrones [Kikkawa y Awschalom, 2001; Golovach et al., 2004], es mucho menor que el de los núcleos [Merkulov et al., 2002]. Esta diferencia en los tiempos de relajacion permiten considerar a los espines nucleares como estacionarios con respecto a los electrones [Burkard et al., 1999; Khaetskii et al., 2002; Coish y Loss, 2004; Coish y Loss, 2005; Witzel et al., 2005; Yao et al., 2006; Deng y. Hu, 2006; Taylor et al., 2006]. Por lo que cálculos estadísticos son suficientes para describir la evolución del sistema [Merkulov et al., 2002; Taylor et al., 2006].

Se han propuesto varias formas de superar el problema de la decoherencia causada por la interacción hiperfina, tales como, técnicas de espín eco [Coish y Loss, 2004], o polarización de los espines nucleares [Burkard et et., 1999; Coish y Loss, 2004]. Sin embargo, para extender el tiempo de decaimiento del espín un orden de magnitud es

necesario polarizar los espines nucleares de mas allá de 99%, comparado con el 60% hasta ahora logrado [Cerletti et al., 2005; Bracker et al., 2005].

Para sistemas cuánticos la superposición de los estados que se ha mencionado repetidas veces durante el texto se refleja en una propiedad cuántica, sin analogía en sistemas clásicos, que recibe el nombre de entrelazamiento. El entrelazamiento es una de las propiedades más fascinantes de la mecánica cuántica y juega un papel central en la mayoría de los protocolos en la computación cuántica [Brooks, 1999; Messina, 2002; Mintert, 2004; Einstein et al., 1935; Wothers, 1998]. Cualquier algoritmo cuántico que use propiedades cuánticas, por ejemplo la superposición de estados, pero no el entrelazamiento podrá ser reproducido por algun sistema clásico que permita superposición de estados, por ejemplo sistemas de óptica lineal. En cualquier propuesta que emplé *qubits* es importante investigar las propiedades de entrelazamiento del sistema.

Como hemos mencionado el desarrollo de compuertas de uno y dos qubits juega un papel fundamental en el desarrollo de la computación cuántica, y este proceso es la evolución dinámica de los estados del sistema, lo cual convierte al estudio dinámico de los espines electrónicos en parte fundamental de muchos de los trabajos publicados [Loss y Divincenzo, 1998; Burkard et al., 1999; Taylor et al., 2005].

Ya que la decoherencia por el medio ambiente impacta a las propiedades de entrelazamiento del sistema es difícil preparar sistemas con entrelazamiento máximo en experimentos. Por consiguiente el entrelazamiento térmico, es aquel causado por el acoplamiento a un baño térmico en equilibrio termodinámico, debe ser estudiado para comprender las propiedades del sistema [Osenda y Raggio. 2005; Asoudeh y Karimipour. 2005; Zhang, 2007]. En trabajos previos se ha estudiado el sistema de dos espines electrónicos acoplados y se ha agregado una interacción no-homogénea entre ambos espines [Asoudeh y Karimipour, 2005]. Posteriormente se estudia el efecto de el término DM sobre el sistema de espines acoplados [Zhang, 2007]. Ambos trabajos llegan a la conclusión de ambos términos, compiten con el baño térmico para destruir la propiedad de entrelazamiento del sistema. Se demostró que las propiedades de entrelazamiento del sistema dependen directamente de las variables del sistema, pero en particular de la temperatura, en donde para valores mayores una temperatura crítica el sistema pierde su capacidad de generar estados entrelazados, y depende directamente de

las magnitudes del campo magnético externo, de campo hiperfino, del término DM entre otras. El estudio de dicha propiedad y su dependencia con dichas propiedades es su tema de interés para la computación cuántica.

1.2. Objetivos

En este trabajo se propone un arreglo de dos *qubits* de espines electrónicos, formando un espacio de dos qubits para la generación de compuertas de dos qubits. Cada espín se localiza en un punto cuántico lateral de GaAs, el acoplamiento entre los espines se permite a través de tuneo, con el cual es posible obtener control mediante parámetros externos de los estados electrónicos. En la descripción del sistema incluimos términos relativistas causados por el acoplamiento espín – órbita, en particular estamos interesados en el término Dzyaloshinskii-Moriya (DM), el cual agrega anisotropía al sistema.

Estamos interesados en evaluar el efecto del término DM sobre la dinámica del sistema, en particular queremos evaluar la operación de la compuerta (*swap*)^α. Consideramos, bajo la propuesta de Loss y DiVicenzo, a la variable de intercambio como un parámetro dinámico, el cual, se evoluciona como un pulso, con el propósito de manipulación dinámica de los estados del sistema.

Por lo tanto, resolvemos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y para diferentes condiciones del término DM, observamos la evolución temporal de las probabilidades de estado, magnetización del espín 1, concurrencia y fidelidad de la compuerta.

Calculamos y evaluamos la evolución de la propiedad de entrelazamiento del sistema. A partir del resultado de la solución de ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo determinamos la evolución del entrelazamiento, la magnetización, probabilidad de los estados y la fidelidad de la operación de compuerta. De las propiedades de magnetización, entrelazamiento y probabilidad de estados se determinan condiciones para que estas probabilidades obtengan los valores asintóticos necesarios para la compuerta (*swap*)^α. Cálculos dinámicos en la fidelidad de la operación de compuerta muestra que el término DM agrega un error intrínseco a la operación de compuerta el cual no puede ser corregido. Además, se demuestra que bajo ciertas condiciones el entrelazamiento y la

magnetización son propiedades relacionadas, es decir, es posible expresar una propiedad enteramente cuántica: el entrelazamiento mediante la magnetización que es una observable. Este es uno de los resultados más interesantes de nuestro trabajo.

Analizamos el efecto del acoplamiento hiperfino en la aproximación cuasi estática, en la dinámica del sistema y de la operación de la compuerta (*swap*)^α. Por lo que es necesario realizar un muestreo estadístico sobre varias realizaciones del campo hiperfino y de esta forma obtener una descripción promedio de la dinámica del sistema y de las propiedades de entrelazamiento, concurrencia, probabilidades de estado y fidelidad de la compuerta. Para este propósito se resuelve numéricamente la ecuación de Schrödinger en presencia de un campo nuclear estocástico en donde el campo está caracterizada por una distribución Gaussiana con fluctuaciones σ .

Queremos también analizar las propiedades de entrelazamiento en un sistema de un par de espines electrónicos, con término DM, y campo hiperfino en presencia de un baño térmico tiene sobre las propiedades de entrelazamiento. Para analizar estos efectos se calcula la concurrencia y evaluamos su dependencia con la temperatura, la varianza de la distribución Gaussiana del campo hiperfino, la amplitud DM y caracterizamos el valor de la temperatura crítica como función de las mismas.

I.3. Estructura de la tesis.

Para proporcionar una descripción detallada de la base analítica, de la metodología utilizada y de los resultados encontrados, hemos estructurado la tesis de la siguiente manera.

En el capítulo 2 presentamos una descripción de los elementos básicos de la computación cuántica, como qubits, compuertas de uno y dos qubits. Incluimos en este capítulo los conceptos básicos de la matriz densidad para sistemas puros y mixtos. También presentamos definiciones de entrelazamiento, fidelidad y magnetización.

En el capítulo 3 se presenta el modelo de dos espines acoplados y algunas de sus propiedades. Iniciamos desarrollando una descripción del modelo de dos espines electrónicos utilizando el modelo de súper intercambio para espines electrónicos.

Continuamos agregando correcciones espín – órbita y después el acoplamiento con el baño de espines nucleares para obtener el Hamiltoniano efectivo completo, el cual incluye los términos de acoplamiento, espín – órbita e interacción hiperfino, así como las eigenenergías y eigenvectores de los sistemas. Para el caso dinámico también presentamos el modelo de intercambio dinámico de Loss – DiVincenzo y vemos las propiedades para la compuerta $(\text{swap})^\alpha$.

En el capítulo 4 presentamos resultados dinámicos para el sistema de espines electrónicos acoplados e interacción espín – orbita (término DM) en la compuerta $(\text{swap})^\alpha$. Se describen resultados de la magnetización, entrelazamiento, probabilidades de estados y fidelidad como función del tiempo. Estas propiedades son utilizadas para evaluar el sistema como generador de la compuerta $(\text{swap})^\alpha$ utilizando al término de intercambio como variable de control.

En el capítulo 5 presentamos resultados para el sistema descrito en el capítulo 4, que incluye la interacción hiperfina para la compuerta $(\text{swap})^\alpha$. Observamos el efecto de ambas correcciones en el estado base del sistema y en la dinámica del Hamiltoniano dependiente del tiempo.

Los resultados para el entrelazamiento, magnetización térmica y temperatura crítica para el Hamiltoniano independiente del tiempo se presentan en el capítulo 6, en donde estudiamos la dependencia de estas propiedad con respecto al campo magnético externo al campo magnético nuclear y la variable DM.

Finalmente en el capítulo 7 discutimos de manera sencilla los resultados y presentamos conclusiones finales y posible trabajo futuro.

Capítulo II

Conceptos Básicos

En nuestra vida cotidiana tenemos contacto con aplicaciones tecnológicas basadas las leyes de la mecánica cuántica. Por lo tanto no debe de sorprendernos la idea de computadoras en donde el paradigma esté basado en la mecánica cuántica y no en la mecánica clásica. La idea de la construcción de una computadora cuántica no es una idea nueva, ha circulado en la comunidad científica desde hace 25 años [Feynman, 1982; Deutsch, 1985; Wiesner, 1983; Brassard y Bennett, 1984]. Sin embargo, en los últimos años que se ha generado interés global en ésta área. En base a varios elementos particulares: Primero, se ha demostrado que tecnológicamente sistemas cuánticos de dos estados podrían ser capaces de generar la base de una computadora cuántica, por ejemplo iones atrapados [Cirac y Zoller, 1995], resonancia magnética [Cory et al., 2000; Gershenfeld y Chiang, 1997; Vandersypen et al., 2001], cavidad cuántica [Rauschenbeutel et al., 1999, Turcehte et al., 1999], sistemas de estado sólido [Kane, 1998; Vrijen et al., 2000; Barnes et al., 2000; Averin, 1998; Pashkin et al., 2003; Schinirman et al., 1997, Chiorescu et al., 2004; Nakamura, 1999; Makhlin et al., 1998; Yamamoto et al., 1997; Loss y DiVincenzo, 1998], y recientemente se ha encontrado que la transición singulete – triplete de dos espines en estructuras de estado sólido puede ser utilizada para definir un qubit [Hanson y Burkard, 2007; Coish y Loss, 2005]. Gran parte su implementación depende en gran medida en los requisitos para la construcción de una computadora cuántica establecidos por DiVincenzo [DiVincenzo, 2000]. Los cuales se enumeran a continuación: 1) Un sistema de *qubits* debe ser escalables, es decir, el sistema permita el incrementar el numero de unidades fundamentales de un dispositivo, ya que se requieren aproximadamente 10^6 *qubits* para la construcción de una computadora [Burkard y Loss, 2002; Koiller et al., 2005; Nielsen y Chuang, 2000]; 2) Que el sistema sea

fácilmente inicializable en un estado arbitrario; 3) Largos tiempos de coherencia, y 4) Un conjunto universal de compuertas y que al sistema se le permita hacer lecturas individuales.

Segundo, se ha demostrado que la naturaleza básica de la computadora cuántica promete resolver problemas irresolubles por la computación clásica [Glover, 1996; Shor, 94 Shor, 97]. Tercero, la tecnología de semiconductores utilizada en la industria computacional actual se encuentra muy cerca de su límite físico y tecnológico [Moore, 1965].

En este capítulo presentamos las definiciones de los conceptos básicos de computación cuántica, qubits compuertas cuánticas entre otros, que dan el marco teórico – conceptual de nuestro trabajo.

II.1 Computación cuántica

La rápida miniaturización de los circuitos electrónicos en las últimas décadas ha validado la predicción de G. Moore, hecha hace más de 40 años [Moore, 1965]. Moore escribió que los circuitos integrados se reducirían su tamaño a la mitad cada 1.5 años, hasta llegar el límite donde los fenómenos cuánticos del sistema interferirían con el funcionamiento de los componentes lo que provocaría buscar una nueva tecnología.

El siguiente paso lógico es considerar las propiedades cuánticas y utilizarlas para generar procesos lógicos capaces de generar computación [Feynman, 1982; Deutsch, 1985; Wiesner, 1983; Brassard y Bennett, 1984].

Se puede definir a una computadora cuántica como aquel sistema de computación que utiliza el paradigma cuántico como base de sus operaciones lógicas.

La naturaleza básica de la computadora cuántica promete ser más rápida que la clásica. Una suposición basada en el paralelismo de las operaciones [Nielsen, y Chuang, 2000]. El paralelismo se refiere a la propiedad básica de los estados cuánticos de existir como una superposición de todos los estados involucrados [Nielsen, y Chuang, 2000]. Esta propiedad permite el realizar varias operaciones simultáneas y es explotada en el diseño de los algoritmos cuánticos.

II.2 El bit cuántico ó qubit

Para entender el paralelismo cuántico y la base de la computación, es necesario primero entender el concepto del bit (de **binary digit**) cuántico o *qubit* (de **quantum bit**) [Nielsen, y Chuang, 2000].

La base fundamental de la computación clásica es el *bit*. Que es un sistema discreto con dos posibles configuraciones 0 o 1. El análogo cuántico, es el *qubit*. En donde las dos posibles configuraciones, $|0\rangle$ y $|1\rangle$ son estados cuánticos, y por lo tanto ambos estados pueden existir como una superposición coherente $|\psi\rangle$,

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle. \quad (\text{II.1})$$

Es decir un sistema cuántico de dos niveles es suficiente para definir un *qubit*, en donde a cada uno de los estados se les asigna uno de dos valores $|0\rangle$ y $|1\rangle$. De manera análoga al *bit* en donde a cada uno de los estados del sistema se le asignan 0 o 1 respectivamente. Cada punto en la superficie de la esfera de Bloch, en la figura 1, representa un estado del qubit o como un vector unitario con origen en el centro de la esfera.

Los coeficientes α y β son cantidades complejas cuyas magnitudes cuadradas, $|\alpha|^2$ y $|\beta|^2$ denotan posibilidad de encontrar al sistema en dicho estado al realizar una medición. Al medir el sistema, la combinación lineal de los estados, se colapsa a uno de los valores. Esta medición es un valor clásico. Sin embargo antes de medir, el sistema no se encuentra en $|0\rangle$ o $|1\rangle$, si no en una superposición de estados y la medición puede resultar en $|0\rangle$ o $|1\rangle$ con probabilidad $|\alpha|^2$ y $|\beta|^2$, respectivamente. Estos coeficientes satisfacen la condición de normalización,

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (\text{II.2})$$

que sugiere que es posible represent aun estado por un vector, centrado en el origen y de longitud de unitaria. Esta representacion geometris se le conoce como representación de Bloch. El vector que describe a este estado se le nombra vector de Bloch, y la esfera que

es descrita por este se le llama esfera de Bloch. Es importante notar que un solo *qubit* en el estado $a|0\rangle + b|1\rangle$ puede ser visualizado como un punto (θ, φ) en la esfera de unitaria, donde $a = \cos(\theta/2)$, $b = e^{i\varphi} \sin(\theta/2)$. El vector $(\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta)$ es el vector de Bloch (ver figura 1).

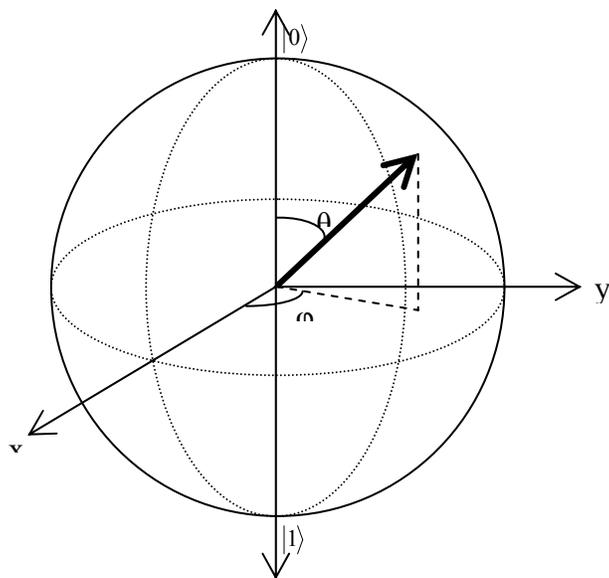


Figura 1: Estado de un qubit en la esfera de Bloch

La coherencia está relacionada con las fases entre α y β (al ser complejas tiene una amplitud y una fase). Podría parecer que la fase no es importante ya que las amplitudes son las que determinan las probabilidades. Las coherencias o transiciones de fase son aquellas que permiten transiciones entre estados del sistema en evolución dinámica por ejemplo.

Entre las propuestas mas sobresalientes para el qubit físico se encuentran sistemas de espines nucleares donde las mediciones del sistema se realizan mediante resonancia magnética (NMR, de *Nuclear Magnetic Resonance*) [Cory et al., 2000; Gershenfeld y Chuang, 1997; Vandersypen et al., 2001]. El *qubit* esta definido por el espín nuclear promedio de moléculas complejas, y las operaciones son realizadas mediante campos magnéticos y pulsos de radio frecuencias. Las mediciones de los estados de qubit del sistema se realizan con técnicas de NMR muy similares a las que se han utilizado en el sector de salud (diagnóstico de enfermedades) por varios años. Otra gran ventaja es el

hecho que los espines nucleares se encuentran débilmente acoplados con el medio ambiente lo cual permite largos tiempos de coherencia [Chuang et al., 1996]. Y más importante se han realizado operaciones de 7 qubits con alto grado de fidelidades a temperatura ambiente [Chuang et al., 1996; Gershenfeld y Chuang, 1997; Vandersypen et al., 2001]. Sin embargo el principal problema con esta clase de sistemas es escalabilidad, es decir, debido a la tecnología utilizada, es difícil reducir el tamaño del aparato experimental para generar dispositivos prácticos.

Otra propuesta son los sistemas de iones atrapados que han demostrado promesa [Cirac y Zoller. 1995]. Este sistema fue propuesto teóricamente por Cirac y Zoller [Cirac y Zoller. 1995]. En este sistema los *qubits* están definidos por los estados energéticos de los iones atrapados en una “trampa” electromagnética. Los iones se manipulan mediante luz láser y se procesan mediante los modos de oscilación de la cadena de iones. En este sistema se ha logrado la implementación de compuertas de operaciones cuánticas y se ha logrado manipular hasta 8 *qubits* [Häffner et al., 2001]. Sin embargo esta clase de sistemas están limitados por restricciones físicas, alto vacío, velocidad de oscilación, campos externos y de escalabilidad.

Los esquemas basados en óptica cuántica son atractivos ya que es relativamente fácil observar varios fenómenos cuánticos, por ejemplo entrelazamiento entre fotones [Rauschenbeutel et al., 1999; Turcehte et al., 1999]. Utilizando esquemas ópticos electrónicos se han implementado llaves criptográficas y se han transmitido a distancias de 18 km [Hughes et al., G. 2000], sin embargo esta clase de sistemas no han sido eficientes en la construcción de computadoras cuánticas ya que es problemático generar operaciones cuánticas de más de una compuerta.

Los sistemas de estado sólido presentan diversas estructuras que pueden ser utilizadas como el qubit de la computación cuántica. Algunos de estos sistemas son espines nucleares de átomos donadores de silicio [Kane, 1998], transistores de resonancia de electrón [Vrijen et al, 2000] y espín (ESP, de sus siglas en inglés), electrones atrapados en ondas acústicas de superficie [Barnes et al., 2000], estados de carga o de flujo en uniones de Josephson acopladas [Averin, 1998; Pashkin et al., 2003; Schnirman et al., 1997], y el empleo de los grados de libertad de espín de los electrones en puntos cuánticos semiconductores [Loss y DiVincenzo, 1998].

Estos últimos son excelentes candidatos para la construcción física de un *qubit* ya que su construcción está relacionada con los métodos actuales utilizados en la industria de semiconductores. El control y lectura de estos sistemas se realiza mediante parámetros externos, por ejemplo, campos magnéticos y eléctricos, distancia entre puntos, entre otros [Johnson et al. 2005; Petta, et.al., 2005].

Los *qubits* basados en el espín electrónico en nanoestructuras semiconductoras presentan altos tiempos de decoherencia, que pueden ser incluso de milisegundos en silicio a bajas temperaturas [Burkard et al., 1999; Engel et al., 2004; Koiller et al., 2005], y presentan un acoplamiento débil con *qubits* vecinos permitiendo control individual de cada compuerta desarrollada [Koiller et al., 2005; Tanamoto, 2000]. Sin embargo es difícil medir de forma rápida y eficiente los estados del espín.

Paralelismo en el mundo de la computación clásica se refiere a procesos simultáneos en diferentes procesadores. Sin embargo paralelismo cuántico se refiere a procesos simultáneos de realizados en el mismo procesador [Nielsen, y Chuang, 2000]. La idea básica es evaluar una función, que se encuentra en superposición de todos los posibles estados para obtener una función resultado que también se encuentre en superposición de todos los posibles estados. Por lo que todos los posibles resultados se obtienen al mismo tiempo mientras que clásicamente solo se obtiene uno. Sin embargo, no todos los resultados son accesibles ya que al medir unos de ellos los demás se colapsarán. Sin embargo, es posible obtener resultados de ciertas propiedades conjuntas.

II.3 Compuertas Cuánticas

Así como la computación clásica está constituida de compuertas lógicas que realizan las operaciones necesarias para manipular la información, la computación cuántica a su vez esta definida en base a compuertas lógicas, llamadas compuertas cuánticas, las cuales son las encargadas en manipular la información de los estados cuánticos [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002].

En general podemos definir a una compuerta cuántica como aquel recurso computacional que permite generar cambios sobre los estados de uno o más qubits.

Las compuertas son operadores unitarios, $U(t)$, de evolución temporal que describen el efecto que tiene el sistema físico, descrito mediante un Hamiltoniano, sobre el estado inicial [Nielsen, y Chuang, 2000].

Uno de los postulados de la mecánica cuántica afirma que la evolución dinámica de cualquier sistema puede ser resuelta mediante la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT) [Schwabl, 1995; Sakurai, 2001],

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{II.3})$$

o mediante una representación alterna, derivada de la solución de ESDT. La solución de (II.3) puede expresarse por

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(t_0)\rangle. \quad (\text{II.4})$$

La evolución de la función de onda $|\psi(t_0)\rangle$ estará determinada por el operador de evolución de evolución temporal $U(t)$. Sustituyendo en la ecuación (II.3) se obtiene,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H(t) U(t). \quad (\text{II.5})$$

La cual debe resolverse en base a la condición inicial,

$$U(t_0) = 1. \quad (\text{II.6})$$

Para diferencias de tiempo infinitesimales la ecuación de Schrödinger implica,

$$|\psi(t + dt)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H(t) dt \right) |\psi(t)\rangle \quad (\text{II.7})$$

y en general,

$$U(t + dt) = 1 - \frac{i}{\hbar} H(t) dt. \quad (\text{II.8})$$

$U(t)$ puede representarse como un productor de operadores temporales infinitesimales:

$$U(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H(t_0 + \Delta(n-1))\Delta\right\} \dots \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H(t_0)\Delta\right\}, \quad (\text{II.9})$$

donde el intervalo de tiempo $(t-t_0)$ se descompone en n intervalos infinitesimales donde $\Delta = (t-t_0)/n$, $n \rightarrow \infty$. Podemos verificar fácilmente de la ecuación (II.9) que el operador $U(t)$ es unitario,

$$U^\dagger(t)U(t) = U(t)U^\dagger(t) = 1. \quad (II.10)$$

Notemos que la ecuación (II.9) puede expresarse en forma reducida como,

$$U(t) = T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right\}, \quad (II.11)$$

donde T es el operador de orden de Dyson [Schwabl, 1995; Sakurai, 2001], que ordena a los factores subsecuentes en el tiempo de la derecha a la izquierda.

Esta última ecuación describe el operador de evolución unitario del sistema el cual describe la evolución de un estado cuántico. Es precisamente esta evolución la que describe una compuerta cuántica.

A continuación presentamos una descripción de las principales compuertas de un *qubit*.

II.3.1 Compuertas de un Qubit

La compuerta de un qubit puede definirse como aquel operador unitario U que actúa sobre el espacio de un qubit (II.1). Estos operadores pueden ser representados en el espacio de Hilbert bidimensional como matrices unitarias de 2×2 . La compuerta de un qubit U , transforma un estado cuántico $|\psi\rangle$ en otro estado cuántico $U|\psi\rangle$. En término de la esfera de Bloch, el efecto de U sobre $|\psi\rangle$ puede ser visto como una rotación del vector de Bloch $|\psi\rangle$ a $U|\psi\rangle$.

Ejemplifiquemos algún proceso cuántico que lleve al estado $|0\rangle$ al estado $|1\rangle$, y viceversa. Dicha operación sería un buen candidato para el análogo cuántico de la compuerta clásica NOT. Pero, el especificar la acción que tiene dicha compuerta sobre los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ no revela información sobre la superposición de estos estados. Es necesario tener más información sobre las propiedades de la compuerta cuántica. Podemos representar a la compuerta NOT en forma matricial de la forma [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Preskill, 2004],

$$X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (II.12)$$

La notación X para la compuerta cuántica NOT se utiliza por razones que durante el texto se convertirán evidentes.

Otra forma de expresar esta operación es mediante circuitos cuánticos reversibles que es una representación gráfica de la compuerta cuántica. En la figura 2 expresamos la compuerta X . En donde las líneas son “alambres” que llevan qubits a una compuerta que realizan operaciones básicas sobre ellos.

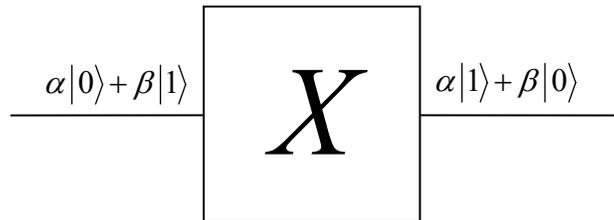


Figura 2: Expresión de circuitos para la compuerta X de la ecuación (II.12).

Si el qubit está representado por la superposición $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ se escribe en notación vectorial como

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}, \quad (\text{II.13})$$

donde el término superior se refiere al estado $|0\rangle$ el inferior al $|1\rangle$. Al aplicar la compuerta NOT a este vector obtenemos,

$$X \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}. \quad (\text{II.14})$$

Nótese que la compuerta NOT tiene como resultado el intercambiar las amplitudes de probabilidad de los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$.

Podemos concluir que las compuertas cuánticas de 1 *qubit* pueden ser descritas como matrices unitarias de 2×2 . Es necesario que matrices con estas características satisfagan la condición de normalización, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, antes y después del proceso de compuerta. Como resultado la matriz U , que represente una compuerta cuántica, como mencionamos debe ser unitaria, $U^\dagger U = I$ [Schwabl, 1995; Sakurai, 2001]. Cualquier matriz unitaria

representa a una compuerta cuántica [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002].

Otras matrices de un *qubit* son la matriz Y y Z [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Preskill, 2004],

$$Y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.15})$$

en donde la compuerta Y intercambia las amplitudes de normalización y agrega una fase a estas. X , Y y Z son las matrices de Pauli. La compuerta Z deja al estado $|0\rangle$ tal cual e invierte el signo del estado $|1\rangle$. La compuerta *Hadamard* [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Preskill, 2004] esta definida por,

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (\text{II.16})$$

Esta compuerta también se le conoce como “la raíz cuadrada de NOT” ya que, $H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, convierte al estado $|0\rangle$ en la superposición y $H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ es decir convierte a $|1\rangle$ a $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ que también esta a la mitad del camino entre $|0\rangle$ y $|1\rangle$. Nótese que H^2 no es la compuerta NOT ya que $H^2 = I$.

II.3.2 Compuertas de dos Qubits

En general podemos definir una compuerta de dos qubit de manera similar a como definimos a la compuerta de un qubit. Es un operador unitario U pero actúa sobre los estados de los dos qubits, los cuales están representados en el espacio de Hilbert de 4×4 , y de la misma manera dicha compuerta transforma un estado cuántico $|\psi\rangle$ en otro estado cuántico $U|\psi\rangle$.

Las compuertas de dos *qubits* se describen mediante el operador de evolución temporal, $U(t)$ ecuación (II.11). Sin embargo, estas se describen mediante Hamiltonianos que necesariamente presentan un acoplamiento entre ambos sistemas [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002], y se escriben como

$$H(t) = H_1^{qubit} + H_2^{qubit} + H_{Acop}. \quad (\text{II.17})$$

Estados descritos por (II.17) de *qubits* pertenece al espacio de Hilbert de $H = H_1 \otimes H_2$, y los estados del sistema se expresan como $|v\rangle = |v_1\rangle \otimes |v_2\rangle$. En particular para los estados de la base computacional se describen por,

$$\begin{aligned} |0,0\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle \\ |0,1\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle \\ |1,0\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle \\ |1,1\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

Podemos definir un estado general de dos qubits como una superposición de esta base, $|\psi\rangle = \alpha_{00}|0,0\rangle + \alpha_{01}|0,1\rangle + \alpha_{10}|1,0\rangle + \alpha_{11}|1,1\rangle$.

Algunas de las compuertas clásicas más significativas son AND, OR, CNOT (OR controlada), NAND (AND negada) y NOR (OR negada) [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Preskill, 2004].

La compuerta prototípica de múltiples *qubits* es la compuerta CNOT, o NOT controlada [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Preskill, 2004], que tiene como resultado generar una combinación lineal de los estados del sistema y como veremos en secciones posteriores el resultado es entrelazar los estados del sistema. Esta compuerta es de dos *qubits*, donde uno de los qubits es de control y el otro el *qubit* controlado. En términos de ecuaciones el efecto sobre elementos de la base computación se lee:

$$U_{CNOT}|00\rangle = |00\rangle; \quad U_{CNOT}|01\rangle = |01\rangle; \quad U_{CNOT}|10\rangle = |11\rangle; \quad U_{CNOT}|11\rangle = |10\rangle. \quad (\text{II.19})$$

La matriz que describe a CNOT en la base computacional es [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Preskill, 2004],

$$U_{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{II.20})$$

Es fácilmente verificable que la primera columna de U_{CNOT} describe la transformación del estado $|00\rangle$, y similarmente para los demás estados, $|01\rangle$, $|10\rangle$ y $|11\rangle$. Así como para

las compuertas de un *qubit*, la condición de conservación de probabilidad para la compuerta U_{CNOT} es validada ya que la compuerta es una matriz unitaria.

En la figura 3 se presenta el circuito de la compuerta (II.20).

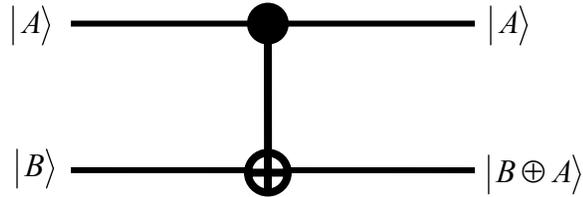


Figura 3: Expresión para la compuerta *CNOT*.

En donde el qubit $|A\rangle$ es el qubit de control y $|B\rangle$, si el qubit de control es 0 el qubit $|B\rangle$ no sufre cambio, sin embargo si $|A\rangle$ es 1 entonces $|B\rangle$ es negado.

Existen muchas otras compuertas cuánticas de dos qubits aparte de CNOT. Sin embargo CNOT y operaciones de un solo *qubit* forman un conjunto universal [Nielsen, y Chiang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Preskill, 2004]: cualquier compuerta lógica de n *qubits* puede ser realizada a partir de CNOT y de operaciones de un *qubit*. Este resultado es paralelo a la compuerta universal NAND [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Preskill, 2004].

Otra compuerta de dos qubits de particular interés en la computación cuántica y en nuestro trabajo es la compuerta $(\text{swap})^\alpha$ [Fan et al., 2005] definida por,

$$U_{(\text{swap})^\alpha} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+e^{i\pi\alpha}}{2} & \frac{1-e^{i\pi\alpha}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-e^{i\pi\alpha}}{2} & \frac{1+e^{i\pi\alpha}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.21})$$

descrita en la base computacional (II.20) y en donde se tiene un parámetro α . Al aplicar esta compuerta a los estados de la base computacional $|1,0\rangle$ y $|0,1\rangle$ obtenemos la superposición,

$$U_{(swap)^\alpha} |1,0\rangle = \frac{1}{2} \left[(1 + e^{i\pi\alpha}) |1,0\rangle + (1 - e^{i\pi\alpha}) |0,1\rangle \right] \quad (\text{II.22})$$

y

$$U_{(swap)^\alpha} |0,1\rangle = \frac{1}{2} \left[(1 - e^{i\pi\alpha}) |1,0\rangle + (1 + e^{i\pi\alpha}) |0,1\rangle \right]. \quad (\text{II.23})$$

Donde es claro que el resultado de aplicar esta compuerta es generar combinaciones lineales de los estados $|1,0\rangle$ y $|0,1\rangle$.

Es fácil demostrar que para $\alpha = 1$ la compuerta que se obtiene es la compuerta *swap* que tiene como resultado

$$U_{swap} |1,0\rangle = |0,1\rangle \quad (\text{II.24})$$

y

$$U_{swap} |0,1\rangle = |1,0\rangle, \quad (\text{II.25})$$

es decir intercambia los estados $|1,0\rangle$ y $|0,1\rangle$. Sin embargo, si $\alpha = 1/2$ se obtiene la compuerta \sqrt{swap} que deja a los estados $|1,0\rangle$ y $|0,1\rangle$ a la mitad de *swap*,

$$U_{(swap)^{1/2}} |1,0\rangle = \frac{1}{2} \left[(1 + i) |1,0\rangle + (1 - i) |0,1\rangle \right] \quad (\text{II.26})$$

y

$$U_{(swap)^{1/2}} |0,1\rangle = \frac{1}{2} \left[(1 - i) |1,0\rangle + (1 + i) |0,1\rangle \right] \quad (\text{II.27})$$

Es precisamente esta compuerta más operaciones de un qubit con la que Loss y DiVincenzo utilizan para escribir la compuerta CNOT, a través del siguiente circuito cuántico

$$U_{CNOT} = e^{i(\pi/2)S_1^z} e^{i(\pi/2)S_2^z} U_{\sqrt{swap}} e^{i(\pi/2)S_1^z} U_{\sqrt{swap}}, \quad (\text{II.28})$$

donde $S_1^z = S_z \otimes I$ y $S_2^z = I \otimes S_z$ [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Loss y DiVincenzo, 1998].

En la computación cuántica se desea poder realizar cualquier circuito a partir de una serie de operaciones sencillas tomadas de un conjunto finito de compuertas elementales. El objetivo es escoger dicho conjunto de operaciones elementales. Este conjunto de operaciones recibe el nombre de conjunto universal. En particular se demuestra que cualquier conjunto de operaciones de un qubit más una compuerta de dos qubits capaz de

generar entrelazamiento en los estados es un conjunto universal [Nielsen, y Chuang, 2000; Kaye et al., 2007].

Se ha demostrado que la compuerta $U_{(swap)^\alpha}$ unida a operaciones de un qubit forman también un conjunto universal de operaciones y con respecto al número de compuertas utilizadas en un circuito es igual de eficiente que la compuerta U_{CNOT} [Nielsen, y Chuang, 2000; Galindo y Martín-Delgado, 2002; Loss y DiVincenzo, 1998]

II.4 Matriz de densidad

Una descripción alternativa al ecuación de evolución temporal de Schrödinger es el formalismo de la matriz de densidad. En particular este formalismo es muy práctico en la descripción de la coherencia y del entrelazamiento de los estados del sistema.

La naturaleza probabilística de la mecánica cuántica ha llevado a que se desarrollen varios formalismos de la misma, en particular en esta sección discutiremos a la matriz de densidad, la cual permite una descripción de estados puros y de mezclas estadísticas de estados. La matriz de densidad contiene toda la información física disponible sobre el sistema del mismo modo en que la función de onda permite caracterizar a un estado cuántico.

El formalismo de la matriz de densidad, introducido en 1927 por John von Neumann, determina que el operador de densidad es hermitiano y da lugar a una matriz con traza unitaria. Las situaciones en las que es empleado incluyen sistemas en equilibrio térmico (a temperaturas finitas), la evolución temporal de sistemas mixtos, el análisis de decoherencia y el estudio de entrelazamiento entre dos subsistemas [Blum, 1981; de Llano, 1996; Moura, 2005].

II.4.1 Propiedades básicas

Cuando un sistema cuántico se encuentra en un estado perfectamente determinado, se dice que está en un estado puro. El operador de densidad para un estado puro, $|\psi\rangle$, está definido como

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (\text{II.29})$$

Si la función de onda se escribe como una combinación lineal de estados $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$, donde $\{|\phi_n\rangle\}$ forman una base completa ortonormal siendo c_n los coeficientes de la expansión,

$$\rho_{mn} = \langle\phi_m|\rho|\phi_n\rangle = c_m^* c_n \quad (\text{II.30})$$

con la cual podemos expresar al operador de densidad como,

$$\rho = \sum_{n,m} c_m^* c_n |\phi_m\rangle\langle\phi_n| \quad (\text{II.31})$$

por lo tanto la proyección del operador de densidad en dicha base permite obtener los elementos de la matriz de densidad para estados puros: Los elementos diagonales $\rho_{nn} = |c_n|^2$, representan la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|\phi_n\rangle$, por lo que ρ_{nn} se le conoce como población de estado; los elementos fuera de la diagonal, ρ_{mn} , representan los efectos de interferencia entre los estados $|\phi_m\rangle$ y $|\phi_n\rangle$, por lo que reciben el nombre de coherencias.

En términos del operador de densidad es posible expresar la conservación de la probabilidad,

$$\sum_n |c_n|^2 = \sum_n \rho_{nn} = 1. \quad (\text{II.32})$$

El valor esperado de un operador A se determina mediante,

$$\langle A \rangle = \sum_{m,n} \langle\phi_m|\rho|\phi_n\rangle \langle\phi_n|A|\phi_m\rangle = \sum_m \langle\phi_m|\rho A|\phi_m\rangle = \text{Tr}\{\rho A\}. \quad (\text{II.33})$$

A partir de las propiedades presentadas y de la ecuación de evolución del operador de densidad se puede demostrar que el formalismo de la matriz de densidad es suficiente para describir un sistema cuántico [Cohen-Tannoudji, 1977; Schwabl, 2001].

Para sistemas que se encuentran en mezclas estadísticas de estados (o estados mixtos), el operador de densidad esta dado por

$$\rho = \sum_{m'} W_{m'} |\psi_{m'}\rangle\langle\psi_{m'}| = \sum_{nm'm} W_m c_m^{m'} c_m^{m'*} |\phi_m\rangle\langle\phi_n|, \quad (\text{II.34})$$

donde $W_{m'}$ representa el peso estadístico para cada estado [Blum, 1981; Sakurai, 1994; Cohen-Tannoudji, 1977]. En este caso los elementos de la matriz de densidad son

$$\rho_{mn} = \sum_{m'} W_{m'} c_m^{m'} c_n^{m'*} . \quad (\text{II.35})$$

Para estados mixtos, las poblaciones toman la forma $\rho = \sum_{m'} W_{m'} |c_n^{m'}|^2$ representando el promedio de la probabilidad de encontrar el sistema en el estado $|\phi_n\rangle$. Por otra parte, los elementos no diagonales, corresponden al promedio de los efectos de interferencia entre los estados $|\phi_n\rangle$ y $|\phi_m\rangle$ tomado sobre todos los posibles estados de la mezcla. Estos términos pueden ser cero incluso si ninguno de los productos $c_m^{m'} c_m^{m'*}$ lo es. Por lo tanto, para mezclas estadísticas de estados es posible que se cancele todo efecto de interferencia entre estados accesibles del sistema [Cohen-Tannoudji, 1977].

Es evidente que el operador ρ es hermitiano, por lo que sus elementos de matriz satisfacen la condición

$$\rho_{nm} = \rho_{mn}^* . \quad (\text{II.36})$$

Debido a que los elementos de la diagonal representan las probabilidades de ocupación es necesario que se satisfaga:

$$\text{Tr}\{\rho\} = 1 . \quad (\text{II.37})$$

Mas aún las probabilidades son numero reales positivos, por lo que

$$\rho_{mn} \geq 0 . \quad (\text{II.38})$$

Por otra parte, el operador de densidad para estados puros cumple con,

$$\rho^2 = \rho . \quad (\text{II.39})$$

Pero para estados mixtos el operador no cumple esta propiedad y,

$$\rho^2 \neq \rho , \quad (\text{II.40})$$

y $\text{Tr}\{\rho^2\} \leq 1$. Esta propiedad permite identificar si un sistema cuántico es un estado puro o se encuentra en una mezcla estadística de estados.

II.4.2 Ecuación de evolución de la matriz de densidad

Tanto para estados puros como para mezclas estadísticas de estados, la evolución temporal del operador de densidad esta gobernada por la ecuación de Schrödinger [Blue, 1991; Fano, 1957]. Consideremos la evolución temporal de la ecuación (II.29),

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (|\psi\rangle\langle\psi|) = \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t}\langle\psi| + |\psi\rangle\frac{\partial\langle\psi|}{\partial t}, \quad (\text{II.41})$$

utilizando la ecuación de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = H|\psi\rangle$, encontramos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar} H|\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\frac{1}{i\hbar} H\langle\psi| \\ &= \frac{1}{i\hbar} (H|\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi|H) \\ &= \frac{1}{i\hbar} (H\rho - \rho H) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H, \rho]. \end{aligned} \quad (\text{II.42})$$

Esta es la ecuación de von Neumann, que describe la evolución temporal del operador de densidad en la representación de Schrödinger. En donde la expresión para la evolución del operador de densidad dependiente del tiempo, y obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)]. \quad (\text{II.43})$$

Esta ecuación es válida para estados puros y mixtos [Blum, 1981; Cohen-Tannoudji, 1977; Fano, 1957; Mahler y Weberruß, 1995; Schwabl, 2001].

El valor promedio de cualquier operador es calculado de la misma manera que (II.33) para estados por,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle \\ &= \sum_i \langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | A | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi_i | \psi \rangle \langle \psi | A | \psi_i \rangle = \sum_i \langle \psi_i | \rho A | \psi_i \rangle. \\ &= \text{Tr} \{ \rho A \} \end{aligned} \quad (\text{II.44})$$

Para finalizar, queremos hacer notar el hecho que en la eigenbase de un Hamiltoniano H independiente del tiempo con eigenvalores $\{E_n\}$, la ecuación de von Neumann permite obtener soluciones de la forma,

$$\rho_{mn}(t) = e^{-i(E_m - E_n)(t - t_0)/\hbar} \rho_{mn}(t_0). \quad (\text{II.45})$$

donde $\rho_{mn}(t_0)$ expresa condiciones iniciales de la matriz de densidad.

Lo cual nos indica que las poblaciones son constantes de movimientos y que las coherencias oscilan a la frecuencia del sistema [Cohen-Tannoudji, 1977; Fano, 1957].

II.4.3 Propiedades termodinámicas a partir de la matriz de densidad

Hemos presentado la descripción de sistemas que no se encuentran en contacto con reservorios externos, por lo que una descripción de esta interacción es necesaria, para un entendimiento completo del sistema como posible candidato de computación cuántica.

El estado de un sistema que se encuentra en contacto con un reservorio a una temperatura T puede ser representado por el operador de densidad [Blum, 1981; Cohen-Tannoudji, 1977; Fano, 1957; Mahler y Weberruß, 1995; Schwabl, 2001],

$$\rho = \exp(-\beta H) / Z, \quad (\text{II.46})$$

donde $\beta = 1/kT$ y k es la constante de Boltzmann. La función de partición,

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta H)], \quad (\text{II.47})$$

asegura la condición de normalización (II.37) sea satisfecha. La ecuación (II.47) se satisface para un ensamble canónico, es decir, un sistema con volumen constante, número constante de partículas y valor dado del promedio del Hamiltoniano, $\langle H \rangle$.

En general la ecuación (II.46) puede expresarse en una base arbitraria, $|\psi\rangle = \sum_m c_m |\phi_m\rangle$,

$$\langle \psi | \rho | \psi \rangle = \sum_{m', m} c_{m'}^* c_m \langle \phi_{m'} | \frac{e^{-\beta H}}{Z} | \phi_m \rangle, \quad (\text{II.48})$$

El operador de densidad (II.41) tiene el mismo rol en la estadística cuántica que el ensamble canónico tiene en mecánica estadística clásica [Cohen-Tannoudji, Schwabl, 2001]. Esta equivalencia puede demostrarse al considerar la representación energética $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$, en donde los elementos de la matriz de densidad están dados por,

$$\langle n' | \rho | n \rangle = [\exp(-\beta E_n) / Z] \delta_{n'n}. \quad (\text{II.49})$$

La probabilidad de encontrar al sistema en el estado con energía E_n está dada por los elementos diagonales $\langle n | \rho | n \rangle$. La representación de un sistema en equilibrio está dada

por la suma no coherente de las eigenestados n con pesos estadísticos proporcionales al factor de Boltzmann $\exp(-\beta E_n)$, la cual además puede expresarse en la eigenbase $|\phi_n\rangle$,

$$\langle \psi | \rho | \psi \rangle = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \delta_{n'n}. \quad (\text{II.50})$$

Para un operador Q actuando sobre el sistema, el valor esperado $\langle Q \rangle$, esta dado por [Blum, 1981; Cohen-Tannoudji, 1977; Fano, 1957; Mahler y Weberruß, 1995; Schwabl, 2001],

$$Q = \frac{1}{Z} \text{Tr}[\rho Q]. \quad (\text{II.51})$$

Con la cual podemos determinar propiedades físicas de interés como magnetización, el entrelazamiento, probabilidad de ocupación como función de la temperatura T .

II.5 Entrelazamiento

El entrelazamiento de estados es la propiedad más significativa de la computación cuántica, ya que no existe un análogo en la mecánica clásica, es un fenómeno que se refiere al estado conjunto de dos o más sistemas cuánticos y describe correlaciones entre éstos [Brooks, 1999; Nielsen y Chuang, 2000; Zeilinger, 1998].

Para ejemplificar consideremos el estado de dos *qubits* descrito por $|\varphi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle$. Puede verificarse fácilmente que este estado puede descomponerse en los estados $|\varphi_1\rangle = |0\rangle$ y $|\varphi_2\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ en donde $|\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle$, se dice que son estados separables.

De la misma manera, consideremos al estado $|\varphi\rangle = a|00\rangle + b|11\rangle$ es evidente que este estado no puede ser descompuesto como se hizo previamente [Mintert et al., 2005; Popescu y Rohrlich, 1998; Messina, 2002]. Al medir el primer *qubit* se obtendrá de manera aleatoria $|0\rangle$ o $|1\rangle$ con probabilidades $|a|^2$ o $|b|^2$ respectivamente. Sin embargo si al medir el primer *qubit* obtenemos 0 siempre obtendremos 0 al medir el segundo *qubit*. De manera similar al obtener 1 en el primer *qubit* inmediatamente asegura 1 en el segundo. Esta conexión misteriosa entre los *qubits* se ha demostrado que permanece aún

al encontrarse separados distancias grandes. Denotemos a los estados que pueden ser descompuestos como un producto de estados de un solo *qubit* como estados separables mientras que los estados cuyos estados no cumplen esta propiedad reciben el nombre de estados entrelazados [Brooks, 1999; Nielsen y Chunag, 2000; Zeilinger, 1998].

Estos estados entrelazados son importantes para la computación cuántica ya que se explota la propiedad de no localidad inherente a ellos y permite transporte de qubits.

Generalizando el ejemplo expuesto, supongamos un sistema cuántico formado de dos subsistemas, donde cada uno de ellos esta asociado a un espacio de Hilbert H dado por el producto directo de los espacios de Hilbert correspondientes a cada subsistema $H_1 \otimes H_2$. Un estado del sistema total será dado por cualquier combinación lineal de los estados base de cada subsistema, $|\phi_k\rangle$ y $|\phi_l\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k,l} c_{kl} |\phi_k\rangle |\phi_l\rangle, \quad (\text{II.52})$$

en donde c_{kl} son las amplitudes de probabilidad, por lo que $\sum_{kl} |c_{kl}|^2 = 1$. Un caso especial de esta ecuación corresponde a un estado separable [Mintert et al., 2005; Popescu y Rohrlich, 1998], el cual tiene la forma,

$$|\Psi\rangle = |\phi_k\rangle \otimes |\phi_l\rangle = \left(\sum_k c_k |\phi_k\rangle \right) \otimes \left(\sum_l c_l |\phi_l\rangle \right), \quad (\text{II.53})$$

con $\sum_k |c_k|^2 = 1$ y $\sum_l |c_l|^2 = 1$, implicando que $c_{kl} = c_k c_l$, en (14).

Un estado entrelazado no puede escribirse como producto directo de los estados de los subsistemas, ecuación (II.53), [Mintert et al., 2005; Popescu y Rohrlich, 1998] corresponden a una superposición no factorizable.

En los estados separables, los resultados de las mediciones realizadas sobre cada subsistema no están correlacionados y por lo tanto son independientes. En un estado entrelazado una medición local ocasiona cambios en los resultados que se obtienen de los subsistemas [Mintert et al., 2005; Brooks, 1999; Rieffel y Polar, 2000].

Si cada subsistema se asocia a un *qubit*, al conocer el estado o la información contenida en uno de ellos es posible determinar el estado del otro, aunque se encuentre separado espacialmente. Esta propiedad se le da el nombre de “interconexión efectiva”

entre los *qubits* que da origen a la capacidad potencial de las computadoras cuánticas [Nielsen y Chiang, 2000].

De hecho es un recurso físico muy útil en la computación cuántica para el procesamiento de información y su cuantificación es muy importante y hay mecanismos de pérdida de coherencia.

II.5.1 Concurrencia: Caracterización del entrelazamiento

Debido al amplio uso del entrelazamiento en algoritmos cuánticos, es importante no solo conocer si el sistema físico empleado es capaz de generar entrelazamiento, también es importante caracterizar el nivel de entrelazamiento entre ellos [Keyl, 2002; Mintern, 2005; Mintern et al., 2005; Vendral et al., 1997; Vendral y Werner, 2002]. Sin embargo el cuantificar el entrelazamiento es una tarea difícil. Una gran cantidad de estudios teóricos se han enfocado en determinar las “medidas de entrelazamiento” [Keyl, 2002; Mintern, 2005; Mintern et al., 2005; Vendral et al., 1997; Vendral y Werner, 2002], que son cantidades escalares que cuantifican las correlaciones cuánticas distinguiéndolas de las clásicas. En particular estamos interesados en la medida de grado de entrelazamiento de sistema compuestos por dos subsistemas [Wooters, 1998].

El entrelazamiento en estados puros de dos qubits ha sido estudiado ampliamente y existen varias técnicas teóricas para cuantificarlo [Keyl, 2002; Mintern, 2005; Mintern et al., 2005; Vendral et al., 1997; Vendral y Werner, 2002]. Entre algunas de estas podemos enumerar, la entropía de von Neumann o entropía de entrelazamiento, que es relativamente sencilla de evaluar y se basa en el empleo de la matriz de densidad reducida de cualquiera de los dos subsistemas; si el sistema esta formado por estados separables esta medida es cero, mientras que para estados con entrelazamiento máximo es $\ln 2$.

La concurrencia fue introducida originalmente como una cantidad auxiliar en el cálculo de entrelazamiento de formación de sistemas constituidos por dos subsistemas [Mintert et al., 2005; Wooters, 1998]. Sin embargo, puede considerarse como una medida independiente del entrelazamiento que se basa en una transformación de espín y que es aplicable a estados con un número arbitrario de *qubits*.

Para un estado puro de un *qubit*, se define la transformación

$$Q = \frac{1}{Z} \text{Tr}[\rho Q]. \quad (\text{II.54})$$

en donde $|\varphi^*\rangle$ es el complejo conjugado de un estado puro $|\varphi\rangle$. Esta operación corresponde al operador de inversión temporal para una partícula con espín $\frac{1}{2}$ [Sakurai, 1994].

Para estudiar a un sistema formado por dos *qubit*, la inversión del estado de dos *qubits* está dada por

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sigma_y \otimes \sigma_y |\psi^*\rangle \quad (\text{II.55})$$

en donde $|\psi\rangle$ esta descrito en la base computacional, σ_y es la matriz de Pauli y

$\sigma_y \otimes \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. En particular para un sistema de donde el qubit esta

definido por los dos estados de espín podemos escribir a la base computacional como

$$\{|0,0\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle, |0,1\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle, |1,0\rangle = |\downarrow, \uparrow\rangle, |1,1\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle\}. \quad (\text{II.56})$$

Para el caso de un estado puro $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, con

$$|\psi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle. \quad (\text{II.57})$$

La relación $E(\rho) = -\text{Tr}(\rho_A \log_2 \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \log_2 \rho_B)$ [Wooters, 1998], donde ρ_A es la traza parcial de $|\psi\rangle\langle\psi|$ sobre el subsistema B , y ρ_B tiene un significado similar, nos permite determinar la entropía de entrelazamiento:

$$E(\rho) = -\frac{1+\sqrt{1-C^2}}{2} \log_2 \frac{1+\sqrt{1-C^2}}{2} - \frac{1-\sqrt{1-C^2}}{2} \log_2 \frac{1-\sqrt{1-C^2}}{2} \quad (\text{II.58})$$

donde C es la concurrencia y es una medida del entrelazamiento [Asoudeh y Karimipour, 2005]. Como E es una función creciente de C , que también varia de 0 a 1, es usual tomar a C como una medida del entrelazamiento.

La concurrencia para un estado puro de dos *qubits* se define a partir de la invariancia a la transformación,

$$C(\psi) = |\langle\psi|\tilde{\psi}\rangle| \quad (\text{II.59})$$

y toma valores desde 0 hasta 1 para estados separables y estados con entrelazamiento máximo respectivamente [Hill y Wothers, 1997; Wothers, 1998].

Donde la formula de la concurrencia para el estado (II.57) se reduce a,

$$C(\psi) = 2|a^* d^* - b^* c^*|. \quad (\text{II.60})$$

Para el estado general caracterizada por la matriz de densidad ρ de dos *qubits* el correspondiente estado transformado tiene la forma,

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y) \quad (\text{II.61})$$

y para este caso la concurrencia está dada por la expresión [Wooters, 1998],

$$C(\rho) = \max\{0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}\} \quad (\text{II.62})$$

siendo $\lambda_{i,s}$ los eigenvalores, en orden descendente, de la matriz Hermitiana $\rho\tilde{\rho}$ [Wooters, 1998]. Debe tenerse en cuenta que cada λ_i es un número real no negativo.

Esta forma de determinar la concurrencia también es valida para estados mixtos o mezclas, que será utilizada en el estudio de entrelazamiento térmico.

II.5.2 Estados de entrelazamiento máximo

El sistema más simple que puede exhibir entrelazamiento es el formado por dos subsistemas. Los estados cuánticos de dos *qubits* que presentan el máximo entrelazamiento reciben el nombre de estados de Bell, en honor a John S. Bell [Bell, 1964; Blatter, 2003].

Los estados de Bell son cuatro y forma una base en el espacio de dos *qubits*. Expresados en la base computacional tenemos [Blatter, 2003; Bouwmeester et al., 2000; Brooks, 1999; Nielsen y Chiang, 2000; Preskill, 2004; Zeilinger, 1998; Hill y Wothers, 1997]:

$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \quad (\text{II.63})$$

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \quad (\text{II.64})$$

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (\text{II.65})$$

$$|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) \quad (\text{II.66})$$

También reciben el nombre de pares EPR o estados EPR debido a que Einstein, Podolsky y Rosen fueron los primeros en señalar y tratar de explicar las propiedades peculiares de los estados entrelazados [Brooks, 1999; Nielsen y Chiang, 2000; Preskill, 2004]. Se puede verificar fácilmente con la ecuación (II.59) que estos estados tienen concurrencia de 1, el máximo, y que los estados de la base computacional tienen concurrencia de 0, el mínimo. Los protocolos de criptología [Deutsch, 1985; Ekert, 1991; Lo, 1998] y teleportación cuántica [Bennett et al., 1993], así como el código súper denso [Bennett y Wiesner, 1992; Bose et al., 1998; Bouwmeester et al., 2000], fueron pensados originalmente en sistemas de dos partículas con entrelazamiento máximo.

Se ha propuesto que los estados de Bell pueden generarse a partir de sistemas de dos *qubits* no entrelazados. Las compuertas Hadamard y CNOT realizan esta acción a partir de la base computacional [Nielsen y Chiang, 2000; Preskill, 2004; Rieffel y Polar, 2000].

La implementación física de estados de Bell se ha conseguido principalmente en sistemas de iones atrapados [Häffner et al., 2005; Riebe et al., 2004; Roos et al., 2004] y en sistemas de óptica cuántica, incluyendo estados de polarización de dos fotones [Aspect et al., 1982; Barret et al., 2004; Fattal et al., 2004; Kim et al., 2003; Walther y Zeilinger, 2005] así como la interacción entre átomos y fotones en cavidades electrodinámicas [Blinov et al., 2004; Davidovich et al., 1994; García-Maraver et al., 2004; Messina, 2002].

II.5.3 Entrelazamiento térmico

El entrelazamiento térmico en sistemas cuánticos abiertos al medio ambiente ha recibido atención en los últimos años. [Asoudeh y Karimipour, 2004; Asoudeh y Karimipour, 2005; Bose y Tribedi, 2005; Zhang y Li, 2005; Asoudeh y Karimipour, 2006; Zhang, 2007; Souza et al., 2008; Sun et al., 2008]

Esta propiedad se utiliza para describir la cantidad de entrelazamiento que existe entre los qubits del sistema cuando el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico con un reservorio de temperatura T .

Un sistema que se encuentra a una temperatura T descrito por un Hamiltoniano H se caracteriza por la matriz de densidad $\rho = (1/Z)e^{-\beta H}$, estado mixto.

El valor de entrelazamiento de esta matriz de densidad, se le conoce como entrelazamiento térmico [Asoudeh y Karimipour, 2005; Osenda y Raggio, 2005; Zhang, 2007]. No solo las propiedades del sistema son capaces de generar entrelazamiento en los estados del sistema, la temperatura, puede generar o destruir entrelazamiento en un sistema de 4 estados.

En particular si la matriz de densidad ρ tiene la forma general,

$$\rho = \begin{pmatrix} u^+ & & & \\ & w & z & \\ & z^* & w & \\ & & & u^- \end{pmatrix}, \quad (\text{II.67})$$

que es precisamente la forma que tiene la matriz de densidad para sistemas de espines $\frac{1}{2}$ acoplados, como veremos mas adelante,

A partir de la cual a partir de (II.62) y (II.63) [Hill y Wootters., 1999] se obtiene

$$C = 2 \max\left(0, |z| - \sqrt{u^+ u^-}\right) \quad (\text{II.68})$$

Los valores exactos de los elementos de ρ se obtienen al conocer el espectro y eigenfunciones de H .

II.6 Fidelidad

El proceso de evolución de una estado cuántico es descrito mediante un operador de evolución $U(t)$ que tiene como resultado un nuevo estado, si el operador de evolución puede ser asociado a una compuerta cuántica entonces el estado final es un estado esperado. Sin embargo en sistemas reales siempre se presenta algún mecanismo de disipación por lo cual se espera una desviación del estado final con el estado esperado, que de aquí en adelante llamaremos ideal. La similitud entre estos estados puede ser calculada mediante la fidelidad y nos proporciona una medida de que tan cerca estamos al estado que queremos obtener con una compuerta cuántica deseada.

La fidelidad de compuerta es una medida eficiente y relativamente sencilla de calcular, analíticamente y numéricamente. Es una propiedad que no solo nos compara la

información de las probabilidades de los estados, si no también nos presenta información sobre las coherencias del sistema.

La fidelidad de compuerta se define como [Jalezko, et. al, 130501; Poyatos, et. al, 390],

$$F = \text{Tr}[\rho_p(t)\rho_I(t)] \quad (\text{II.69})$$

en donde $\rho_I(t) = |\psi_I(t)\rangle\langle\psi_I(t)|$ y $\rho_p(t) = |\psi_p(t)\rangle\langle\psi_p(t)|$, donde $|\psi_I(t)\rangle$ es la función de onda ideal, es decir es aquella función de onda a la cual queremos llevar el sistema y $|\psi_p(t)\rangle$ es la función de onda producida por la evolución del sistema. De la misma manera las matrices de densidad $\rho_I(t)$ y $\rho_p(t)$ son respectivamente la matriz de densidad ideal y la matriz de densidad de la evolución del sistema.

El valor de la Fidelidad varía de 0 a 1, donde una compuerta ideal tendría el valor máximo.

Al escribir (II.69) en término de las funciones de onda tenemos,

$$\begin{aligned} F &= \text{Tr} \left[|\psi_p(t)\rangle\langle\psi_p(t)| |\psi_I(t)\rangle\langle\psi_I(t)| \right] \\ &= \text{Tr} \left[U_p(t) |\psi\rangle\langle\psi| U_p^\dagger(t) U_I(t) |\psi\rangle\langle\psi| U_I^\dagger(t) \right] \\ &= \text{Tr} \left[\langle\psi| U_p^\dagger(t) U_I(t) |\psi\rangle \langle\psi_I(t)| U_I^\dagger(t) U_p(t) |\psi\rangle \right] \\ &= \text{Tr} \left[\left| \langle\psi| U_p^\dagger(t) U_I(t) |\psi\rangle \right|^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{II.70})$$

Por lo tanto la fidelidad también se puede expresar como,

$$F = \overline{\left| \langle\psi| U_p^\dagger(t) U_I(t) |\psi\rangle \right|^2}. \quad (\text{II.71})$$

Donde la línea superior indica promedio sobre todos los posibles valores de la función de onda $|\psi\rangle$, U_I es el operador de evolución unitario ideal y U_p es el operador de evolución unitario que describe la evolución del sistema.

Además, de las ecuaciones (II.70) y (II.71) se observa que la fidelidad puede asociarse con la proyección del estado $|\psi_p(t)\rangle$ en el estado $|\psi_I\rangle$ de esta forma obteniendo la posibilidad que el estado final sea el estado ideal. El estado ideal, $|\psi_I\rangle$, para alguna compuerta cuántica es estacionario, ya que es la condición final a la que

queremos evolucionar el estado $|\psi_p(t)\rangle$, y por consiguiente la matriz de densidad ideal $\rho_I = |\psi_I\rangle\langle\psi_I|$ es a su vez independiente del tiempo.

II.7 Magnetización

En el contexto de la computación cuántica es necesario estudiar ciertas observables que tienen información sobre la evolución del sistema. Estas deben ser propiedades que puedan ser medidas experimentalmente y que evalúen la operación del sistema cuántico.

Con este propósito hemos visto que el valor promedio de una observable esta dado por la ecuación (II.44)

Para sistemas de dos qubits acoplados y para aquellas propiedades que puedan ser medidas en uno o en ambos qubits es necesarios distinguir entre ellos,

$$A^{(1)} = A \otimes I, \quad (\text{II.72})$$

$$A^{(2)} = I \otimes A, \quad (\text{II.73})$$

$$A^{(12)} = A_i \otimes A_j, \quad (\text{II.74})$$

donde I es el operador de identidad y A_i son operadores de una partícula en el espacio de Hilbert de dos partículas.

En particular la magnetización o polarización es útil en la evaluación de operaciones de compuerta [Kaplan y Piermarocchi, 2004]. Para sistemas bipartitos es más conveniente considerar la magnetización o polarización de una de las partículas en lugar de la magnetización de todo el sistema. Utilizando las ecuaciones (II.72) – (II.73) y como la observable A_i al operador de magnetización $S_i = \frac{1}{2}\sigma_i$ obtenemos,

$$\sigma_i^{(1)}(t) \equiv \langle \Psi(t) | \frac{1}{2}(\sigma_i \otimes I) | \Psi(t) \rangle, \quad (\text{II.75})$$

$$\sigma_i^{(2)}(t) \equiv \langle \Psi(t) | \frac{1}{2}(I \otimes \sigma_i) | \Psi(t) \rangle, \quad (\text{II.76})$$

donde las σ_i son las matrices de Pauli y σ es el valor promedio de la componente i de las σ en particular para la componente z este valor promedio es la magnetización o polarización. La ecuación (II.75) expresa el valor promedio de la magnetización (polarización) del espín 1 ($\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$) en un sistema de espines electrónicos acoplados. De

manera análoga la ecuación (II.76) expresa la magnetización del espín 2. La magnetización en ambos casos varían de $-\frac{1}{2}$ a $\frac{1}{2}$.

Por completes incluiremos a la siguiente ecuación para operadores de dos partículas,

$$\sigma_{ij}^{(12)}(t) \equiv \langle \Psi(t) | \frac{1}{2} (\sigma_i \otimes \sigma_j) | \Psi(t) \rangle. \quad (\text{II.77})$$

En particular, ya que su uso será evidente en lo siguientes capítulos escribimos explícitamente el grado de la magnetización de la partícula 1.

$$\sigma_z \otimes I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (\text{II.78})$$

Capítulo III

Espines electrónicos acoplados

Hemos mencionado que cualquier sistema cuántico de dos niveles aislado puede servir para definir a un qubit, en donde cada uno de los estados del sistema define uno de los estados del qubit [Nielsen y Chiang, 2000]. El acoplamiento entre sistemas de este tipo permite generar un sistema de qubits acoplados, capaz de generar compuertas lógicas de 2 qubits y entrelazamiento entre estados del sistema [Nielsen y Chiang, 2000].

En particular estamos interesados en estudiar un par de espines electrónicos acoplados [Auerback, 1994; Awschalom, et al., 2002; Burkard et al., 1999; DiVincenzo et al., 2000; Hanson et al., 2007; Loss y DiVincenzo. 1998; Marder, 2000] en donde se agregan términos debido al acoplamiento espín – órbita [Bonesteel et al., 2001; Burkard y Loss, 2002; Dzialoshinski, 1958; Hanson et al., 2007; Kavokin, 2001; Moriya, 1960] y también consideramos el acoplamiento del sistema con los espines nucleares de los átomos vecinos [Hanson et al., 2007;]. Consideramos a los espines electrónicos localizados en puntos cuánticos laterales formados en la heteroestructura de GaAs/GaAsAl en donde se forma un mar bidimensional de electrones [Coish y Loss, 2004; Coish y Loss, 2005; Lampel, 1968; Erlingsson, et al.,. 2001; Khaetskii y. Grazman. 2002; Khaetskii y. Grazman. 2003; Klauser et al., 2007; Coish y D. Loss. 2006 Meier y Zakharchenia, 1984; Merkulov et al.,. 2002; Taylor et al., 2007]. El número de electrones en cada punto se controla mediante compuertas electrónicas controladas por potenciales externos [Johnson et al., 2005; Petta et al., 2005].

En el resto del capítulo presentaremos el Hamiltoniano que describe a este sistema así como los demás términos estudiados en nuestro trabajo.

III.1. Modelo de súper intercambio para espines acoplados.

El Hamiltoniano que describe a un par de espines electrónicos acoplados puede ser descrito de varias maneras. Una de ellas es mediante la descripción del traslape de la funciones de onda (apéndice I) y la interacción Coulombiana. Otra forma, es mediante una descripción de súper intercambio en donde la mediación de los espines es mediante un átomo neutral entre ellos. Cualquiera que sea la fuente de la interacción entre espines al parte principal del hamiltoniano es generalmente del tipo Heisenberg [Auerbach, 1994; Marder, 2000]. Consideremos al Hamiltoniano para dos espines acoplados como,

$$H = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - t \sum_s (d_{1s}^\dagger d_{2s} + d_{2s}^\dagger d_{1s}), \quad (\text{III.1})$$

en donde U es la energía de Hubbard y t es la amplitud de tuneleo, d_{is}^\dagger y d_{is} son operadores de creación y aniquilación de espín, en los orbitales ortogonales localizados en los puntos cuánticos $i=1,2$, y $\hat{n}_{i\uparrow} = d_{i\uparrow}^\dagger d_{i\uparrow}$ y $\hat{n}_{i\downarrow} = d_{i\downarrow}^\dagger d_{i\downarrow}$, son los operadores de número en el sitio i y espín para arriba y abajo respectivamente.

Para valores grandes de U/t , consideramos a \mathcal{U} como el Hamiltoniano de orden cero, el cual tiene como estado base el conjunto de 4 vectores degenerados:

$$\{|0\rangle = |s_1, s_2\rangle, \quad s_i = \uparrow, \downarrow, \quad i=1,2. \quad (\text{III.2})$$

Las energías de los estados de doble ocupación están muy por arriba que la energía de los estados (III.2).

El formalismo de Feshbach es útil para reducir la dimensión para aquellos Hamiltonianos que presentan dos subespacios claramente definidos y separados en energía [Auerbach, 1994; Landau y Lifshitz, 1977; Feshbach, 1962]. Dado un subespacio finito \mathbf{P} de el espacio de Hilbert del Hamiltoniano H y donde \mathbf{Q} es el complemento tal que $\mathbf{P} + \mathbf{Q} = \mathbf{H}$, la proyección de estos subespacio son respectivamente $P \equiv \sum_{i \in \mathbf{P}} |i\rangle \langle i|$ y

$Q \equiv \sum_{k \notin \mathbf{P}} |k\rangle \langle k| = 1 - P$. Al proyectar la ecuación de Schrödinger en los subespacios \mathbf{P} y \mathbf{Q} obtenemos

$$\begin{pmatrix} H_{PP} & H_{PQ} \\ H_{QP} & H_{QQ} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_P\rangle \\ |\psi_Q\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\psi_P\rangle \\ |\psi_Q\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{III.3})$$

en donde las proyecciones se definen como $H_{PQ} = PHQ$, $|\psi_P\rangle \equiv P|\psi\rangle$, y similarmente para los restantes. En particular para el sistema de dos espines electrónicos acoplados el subespacio \mathbf{P} es de dimensión finita, por lo tanto H_{PP} también será finito. Es posible eliminar $|\psi_Q\rangle$ de la ecuación (81) y obtener $H_{eff}^P |\psi_Q\rangle = E |\psi_Q\rangle$ mediante

$$H_{eff}^P = H_{PP} + \underbrace{H_{PQ} \frac{1}{E - H_{QQ}} H_{QP}}_{\equiv \Sigma_{QQ}(E)}, \quad (\text{III.4})$$

donde H_{eff}^P describe el Hamiltoniano efectivo en el espacio \mathbf{P} . Por lo tanto H_{eff}^P es la suma de los elementos de matriz no perturbados y de la contribución de la energía propia Σ_{QQ} . Nótese que la ecuación (III.4) es exacta y por lo tanto debe ser no lineal en E para poder representar todo el eigenespectro del sistema. La no linealidad se manifiesta con la dependencia de Σ_{QQ} con E .

Si el Hamiltoniano total H no acoplara a los espacios \mathbf{P} y a \mathbf{Q} , entonces $H_{PQ} = 0$, y el segundo término de (III.3), Σ_{QQ} , desaparecerá. Al eliminar $|\psi_Q\rangle$ de (III.3) también elimina los coeficientes de $|\psi_Q\rangle$ de tal manera que el procedimiento elimina sistemáticamente variables a gran escala.

Cada término de los elementos del hamiltoniano efectivo puede ser representado por un “trayectoria de intercambio.” Por ejemplo.

$$\begin{array}{l} H_i \quad \frac{1}{U} \quad H_i \\ |\uparrow, \downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\downarrow, 0\rangle \rightarrow |\downarrow, \uparrow\rangle \\ \rightarrow |0, \uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow, \uparrow\rangle \end{array} \quad (\text{III.5})$$

Cada uno de las dos trayectorias en (III.5) contribuyen con $-t^2/U$. Sin embargo, existen caminos que son bloqueados por el principio de exclusión de Pauli [Sakurai, 2001; Schwabl, 1995], tal como

$$H_t |\uparrow, \uparrow\rangle \rightarrow 0 \quad (\text{III.6})$$

Por lo tanto, los estados triplete no ganan energía a segundo orden debido a doble ocupación virtual. Los operadores que conectan a los estados iniciales y finales pueden ser escritos como productos de los operadores $S_1^- S_2^+$ de espín $S = 1/2$. Al incluir las trayectorias que describen a los elementos de matriz $S_2^- S_1^+$ y $S_1^z S_2^z$, se encuentra un Hamiltoniano efectivo que escrito en el subespacio (III.2) es del tipo (III.4):

$$H_{eff} = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad J = \frac{4t^2}{U}. \quad (\text{III.7})$$

El proceso de doble ocupación virtual recibe el nombre de “super intercambio” [Anderson, 1959]. Un análisis detallado para espines electrónicos utilizando el proceso de intercambio se presenta en el apéndice A.

III.2. Interacción del espín con el medio ambiente

La principal fuente de decoherencia en sistemas de espines electrónicos acoplados en puntos cuánticos semiconductores laterales, se debe principalmente al acoplamiento espín – órbita, al acoplamiento con los espines nucleares del material vecino.

El efecto sobre el eigensistema, dinámica y decoherencia en el sistema del acoplamiento espín – órbita y de la interacción hiperfina puede ser observada de varias maneras. Primero, los eigenestados de espín son redefinidos. Un buen ejemplo es el hecho que el factor g para electrones en bulto semiconductor puede variar de 2 debido al espín – órbita. En el bulto de GaAs, $g = -0.44$. Segundo, fluctuaciones en el medio ambiente pueden llevar a fases aleatorias para el espín electrónico, el cual por convención se caracteriza en la escala de tiempo T_2 . Finalmente, los espines electrónicos pueden ser invertidos por fluctuaciones en el medio ambiente, intercambiando energía con los grados de libertad en el medio ambiente. Este proceso es caracterizado por una escala de tiempo T_1 .

III.2.1 Interacción espín – órbita

Estamos interesados en estudiar el efecto de la interacción espín – órbita en sistemas de electrones acoplados y por lo que es de interés la descripción de dicho término en el Hamiltoniano, sin embargo no es necesario una descripción detallada de la deducción de este término, así que presentaremos las ideas básicas y dejamos los detalles para las referencias presentadas.

El término espín – órbita tiene su origen en la ecuación de Dirac [Dirac, 1982], la cual incluye el espín electrónico y su comportamiento relativista y el término espín – órbita aparece de forma inmediata. Una deducción más detallada de este proceso se puede encontrar en las siguientes referencias [Dirac, 1982; Hanson et al., 2007; Schwabl, 2005].

El Hamiltoniano que describe esta interacción está dada por, $H_{so} = \frac{\hbar}{2m^2c^2} \vec{s} \cdot [\vec{\nabla}V(\vec{r}_i) \times \vec{p}_i]$, en donde $\vec{\nabla}V(\vec{r}_i)$ es el gradiente del potencial de confinamiento del electrón, el cual define el tipo de acoplamiento espín – órbita presente en el sistema [Hanson et al., 2007], \vec{s} y \vec{p}_i son el espín y el momento del electrón respectivamente. La ecuación muestra que en presencia de un campo magnético dado por $\vec{\nabla}V(\vec{r}_i)$, un espín electrónico se acopla al movimiento orbital generando un cambio de espín al cambiar la órbita.

La relación H_{so} se encuentra al considerar en la ecuación de Dirac, que las energías cinéticas y potenciales del sistema son mucho menores que la energía relativista mc^2 [Dirac, 1982; Schwabl, 2005], la expansión resultante presenta un término que representa un electrón moviéndose en un campo eléctrico \vec{E} , que experimenta un campo magnético interno, proporcional a $\vec{E} \times \vec{p}$ [Dirac, 1982], donde \vec{p} es el momento del electrón.

La interacción espín – órbita es un fenómeno bien conocido que se manifiesta al destruir la degeneración de las energías de un electrón en átomos, moléculas y sólidos. En física de estado sólido la ecuación de Schrödinger no relativista es utilizada frecuentemente como una primera aproximación. La interacción espín – órbita puede ser incluida al considerar correcciones relativistas a la ecuación de Schrödinger.

El Hamiltoniano para un par de electrones puede escribirse como, $H = H_0 + H_{so} + H_C$, en donde $H_0 = \sum_i \left[\frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 + V(\vec{r}_i) \right]$ que incluye la energía cinética, $\frac{1}{2m} \vec{p}_i^2$ y el potencial de confinamiento, $V(\vec{r}_i)$, $H_C = \sum_{ij} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ describe la energía de Coulomb del sistema y H_{so} ya fue descrito, por lo tanto,

$$H = \sum_i \left[\frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 + V(\vec{r}_i) \right] + \frac{\hbar}{2m^2 c^2} \sum_i \vec{s} \cdot (\vec{\nabla} V(\vec{r}_i) \times \vec{p}_i) + \sum_{ij} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j). \quad (\text{III.8})$$

Estamos interesados en estudiar el sistema de dos espines electrónicos acoplados en el esquema de súper intercambio [Moriya, 1960; Dzialoshinski, 1958. Shekhtman, et al., 1992], para este propósito escribimos el Hamiltoniano (III.8) en segunda cuantización. tenemos,

$$\hat{H}_0 = \sum_{i,j} \sum_{s,s'} t_{ij} d_{is}^\dagger d_{js} \approx -t \sum_s d_{1s}^\dagger d_{2s} + d_{2s}^\dagger d_{1s} \quad (\text{III.9})$$

en donde d_{is}^\dagger y d_{is} son operadores de creación y aniquilación de espín, en los orbitales ortogonales $i=1,2$, con espín s . La amplitud de tuneleo tiene la forma $t_{ij} = \int \phi_i^*(\vec{r}) H_0 \phi_j(\vec{r}) d\vec{r}$, donde $\phi_k(\vec{r})$ son las funciones de onda orbital, para (III.9) se considero a $t_{ij} = -t$ constante. El Hamiltoniano (III.9) tiene como efecto generar un tuneleo entre los orbitales 1 y 2 con una amplitud t , sin modificar el espín s . Consideramos la energía de referencia a los términos diagonales y realizamos una renormalización en donde estos términos a cero. El término espín – órbita se expresa como,

$$\hat{H}_{so} = \sum_{i,j} \sum_{s,s'} d_{is}^\dagger [\vec{C} \cdot \vec{\sigma}]_{s,s'}^{i,j} d_{js} \approx \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{s,s'} d_{is}^\dagger [\vec{C} \cdot \vec{\sigma}]_{s,s'}^{i,j} d_{js}, \quad (\text{III.10})$$

en la cual $\vec{C} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\vec{\nabla} V \times \vec{p})$ y $[\vec{C} \cdot \vec{\sigma}]_{s,s'}^{i,j} = \vec{C}^{i,j} \cdot \vec{\sigma}_{s,s'} = \int \phi_i^*(\vec{r}) \vec{C} \phi_j(\vec{r}) d\vec{r} \cdot \sum_{s,s'} \vec{\sigma}_{s,s'}$ que es la amplitud del acoplamiento espín – órbita, además se desprecia el efecto espín – orbita en el mismo orbital. Este término, así como (III.9), produce un cambio en el orbital del electrón, aquí con amplitud $\vec{C}^{i,j}$, que en particular la hemos considerado constante

$\vec{C}^{i,j} = C_0$ pero mientras que en \hat{H}_0 no produce cambio en el estado del espín la relación (III.10) si produce un cambio y lo hace con la amplitud $\vec{\sigma}_{s,s'}$. Por lo tanto se tiene,

$$\hat{H}_{so} = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{s,s'} d_{is}^\dagger \left[\vec{C}_0 \cdot \vec{\sigma} \right]_{s,s'}^{i,j} d_{js'} \quad (III.11)$$

Para la interacción electrón – electrón consideremos el término de Hubbard,

$$\hat{H}_C = \sum_{i,j} \hat{V}_{ij} d_{is} d_{js'}^\dagger d_{js} d_{is} \approx \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (III.12)$$

y consideramos a $\hat{V}_{ii} = U_i$ es la amplitud de la energía de Hubbard y tiene la forma general $\hat{V}_{ij} = \sum_{s,s'} \int \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_j^*(\vec{r}_2) H_c \phi_i(\vec{r}_1) \phi_j(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$, además $\hat{n}_{i\uparrow} = d_{i\uparrow}^\dagger d_{i\uparrow}$ y $\hat{n}_{i\downarrow} = d_{i\downarrow}^\dagger d_{i\downarrow}$ son los operadores de numero para el orbital i con espín \uparrow o \downarrow y despreciamos la interacción electrostática de electrones vecinos. Este Hamiltoniano de doble ocupación registra el número de electrones con un espín específico y en cada orbital, en donde debido al principio de exclusión de Pauli no pueden existir dos espines con el mismo espín.

Por lo tanto expresar al Hamiltoniano (III.8) en operadores de creación y aniquilación obtenemos una ecuación en segunda cuantización que tiene la forma,

$$H = \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - t \sum_s \left(d_{1s}^\dagger d_{2s} + d_{2s}^\dagger d_{1s} \right) + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{s,s'} d_{is}^\dagger \left(\vec{C}_0 \cdot \vec{\sigma}_{s,s'} \right) d_{js'} \quad (III.13)$$

Con esta ecuación describimos dos espines electrónicos acoplados y por lo tanto será mucho más útil expresar la ecuación (III.9) como una ecuación de súperintercambio que exprese solamente los grados de libertad espinoricos del sistema y el acoplamiento entre los electrones como una variable de intercambio tal como se presenta en el Hamiltoniano de Heisenberg.

Aplicando el formalismo de Feshbach al Hamiltoniano (III.9) se obtiene un Hamiltoniano efectivo para dos espines electrónicos, S_i , una descripción detallada de este proceso se presenta en el apéndice 3,

$$H_{eff} = J \left(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 \cdot \vec{S}_1 \times \vec{S}_2 + \vec{S}_1 \cdot \vec{\Gamma} \cdot \vec{S}_2 \right), \quad (III.14)$$

en donde los coeficientes, $J = 4t^2/U$, $\vec{\beta}_0 = 4t\vec{C}_0/U$ y $\vec{\Gamma} = 4\vec{C}_0 \cdot \vec{C}_0/U$ son variables de súper intercambio [Moriya, 1960; Dzialoshinski, 1958. Shekhtman, et al., 1992], la variable β_0 es el vector de Moriya – Dzialoshinski y $\vec{\Gamma}$ es un tensor de segundo orden.

III.2.2. Interacción hiperfina

El espín de un electrón puede interactuar con el espín de su núcleo a través de acoplamiento hiperfino [Coish y Loss, 2004; Coish y Loss, 2005; Lampel, 1968; Erlingsson, et al., 2001; Khaetskii y. Grazman. 2002; Khaetskii y. Grazman. 2003; Klauser et al., 2007; Coish y D. Loss. 2006 Meier y Zakharchenia, 1984; Merkulov et al., 2002; Taylor et al., 2007]. Control sobre el número de electrones en cada punto se logra mediante compuertas electrónicas controladas por potenciales externos [Johnson et al., 2005; Petta et al., 2005]. En contraste el espín de un electrón en un punto cuántico puede interactuar con los múltiples espines nucleares del material.

El hamiltoniano para interacción hiperfina para Fermiones esta dado por:

$$H_{HF} = \sum_k^N A_k \vec{I}_k \vec{S}, \quad (\text{III.15})$$

donde \vec{I}_k y \vec{S}_k son operadores de espín para el núcleo y para el electrón respectivamente [Abragam, 1961; Meier y Zakharchenia, 1984; Abragam y Bleaney, 1986; Slichter, 1990]. La intensidad de acoplamiento, A_k varía ya que la función de onda del electrón es no homogénea, y el acoplamiento es proporcional al traslape cuadrado entre las funciones de onda electrónicas y nucleares.

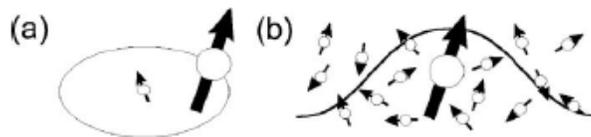


Figura 4: El espín de un electrón interactúa con (a) un solo espín nuclear y (b) con muchos espines nucleares en un punto cuántico semiconductor.

Esta situación asimétrica combinada con la dinámica rápida del espín electrónico y con la dinámica lenta del espín nuclear da origen a una mecánica sutil y compleja de comportamiento cuántico de muchos cuerpos, donde los espines nucleares afectan la evolución dinámica del espín electrónico, y el espín electrón afecta a su vez la dinámica de cada espín nuclear. Ya que el espín nuclear y el espín del electrón localizado son descritos como objetos cuánticos, el acoplamiento hiperfino debería en principio modificar el entrelazamiento entre ellos [Braunstein et al., 1999]. Para el espín electrónico, esta interacción con grados de libertad no controlables lleva a decoherencia de los estados del sistema [Kaetskii et al., 2002; Kaetskii et al., 2003; Merkulov et al., 2002; Coish y Loss, 2004]. Esto implica que un electrón que al iniciar se encontraba en un estado puro evolucionara a una mezcla estadística de varios estados [Nielsen y Chuang, 2000].

Una descripción alternativa de este efecto de los núcleos sobre el espín electrónico es considerar al conjunto de espines nucleares como un campo magnético efectivo B_N . Este campo nuclear conocido como campo Overhauser [Khaetskii et al., 2002; Mervulov et al., 2002; Schulten y Wolynes, 1978; Erlingsson, 2005; Erlingsson y Nazarov, 2004; Bracker et al., 2005; Braun, 2005; Dutt, 2005; Taylor et al., 2005; Petta et al., 2005; Koppens, 2005], actúa sobre el espín electrónico de forma muy similar que lo haría un campo magnético externo:

$$\left(\sum_k^N A_k \vec{I}_k \right) \vec{S} = g \mu_B \vec{B}_N \vec{S}, \quad (\text{III.16})$$

donde g es el factor-g del núcleos y μ_B es magneton nuclear.

Si el campo nuclear asume un valor no conocido y aleatorio el espín electrónico evolucionara de manera aleatoria y terminara en una muestra estadística de estados [Taylor et al., 2007; Burkard et al, 1999; Khaetskii, 2002; Coish y Loss, 2004; Yao et al., 2006; Deng y Hu, 2006; Coish y Loss, 2005].

El describir de manera semiclásica los espines nucleares permite una descripción intuitiva de la dinámica electrón – núcleo y de las observaciones experimentales [Taylor et al., 2007; Petta et al., 2005; Taylor et al., 2005]. Sin embargo, para analizar las correlaciones entre estados de espín nucleares y los estados de espín electrónicos es necesaria una descripción cuántica completa.

La magnitud del campo nuclear $B_N = \sum_k^N A_k \vec{I}_k / g \mu_B$ es máxima cuando todos los espines nucleares están polarizados. En GaAs, $B_{N,\max}$ este valor es de alrededor de 5 mT [Peget et al., 1977]. Para cualquier material, este valor es independiente del número de núcleos N con que el electrón se traslape, para mayor cantidad de núcleos, la contribución de cada espín nuclear a B_N será menor, el valor típico de A_k es proporcional a $1/N$ [Coish y Loss, 2004].

Esto es diferente para el caso de espines nucleares no polarizados, como el caso de espines nucleares en equilibrio termodinámico bajo condiciones experimentales [Coish y Loss, 2004]. Primero existe un porcentaje de núcleos orientados a lo largo de un campo magnético externo con una amplitud dada por la distribución de Boltzmann. Más aún, existe una fluctuación estadística alrededor de la media. Esta cantidad ha sido medida recientemente para varios puntos cuánticos semiconductores tanto ópticamente como electrónicamente, estos experimentos han dado valores en el rango de unos cuantos mT, tal como era esperado ya que $N \approx 10^6$ en este tipo de puntos cuánticos. Valores similares fueron obtenidos para electrones en GaAs.

En general podemos escribir el Hamiltoniano de espín para un solo punto cuántico como [Taylor et al., 2007],

$$H = \gamma_e \vec{B}_{ext} \cdot \vec{S} + \gamma_e \sum_{i,j} b_{i,j} \alpha_j \vec{S} \cdot \vec{I}^{i,j} \quad (\text{III.17})$$

donde $\gamma_e = g^* \mu_B / \hbar$ es la razón giromagnética para el espín electrónico \vec{S} ; la suma es sobre las especies nucleares (i) y de celdas unitarias (j) y b_i es el campo magnético efectivo debido a las especies i dentro de la celda unitaria (referencia). El coeficiente $\alpha_j = v_0 |\psi(\vec{r}_j)|^2$ es la probabilidad del electrón de estar en la celda unitaria j , v_0 es el volumen de la celda unitaria, y $\psi(r)$ es la función de onda del electrón localizado [Taylor et al., 2007].

Es conveniente reescribir el Hamiltoniano utilizando un operador colectivo para los espines nucleares, $\vec{B}_N = \sum_i b_i \sum_j \alpha_j \vec{I}^{i,j}$. Este operador permite escribir el Hamiltoniano

como el espín de un electrón interactúa con un campo magnético, \vec{B}_0 y un campo magnético intrínseco, \vec{B}_N [Taylor et al., 2007]:

$$H_{eff} = \gamma_e \left(\vec{B}_0 + \hat{\vec{B}}_N \right) \cdot \vec{S}. \quad (\text{III.18})$$

Al escribir este Hamiltoniano se ha pensado que es posible considerar al campo nuclear como un campo efectivo y se considera comparable al campo externo, es decir, el operador $\hat{\vec{B}}_N$ puede ser remplazado por el vector clásico \vec{B}_N [Taylor et al., 2007]. Si este es la situación, los valores de expectación son sustituidos por promedios sobre diferentes condiciones iniciales de los campos. Esta aproximación es apropiada si $\hat{\vec{B}}_N$ para periodos de tiempo cortos es una constante de movimiento para el sistema. Esta aproximación es conocida como la aproximación cuasi-estática (QSA, por sus siglas en inglés): se asume que el campo nuclear no varía en escalas de tiempo correspondientes a la evolución del espín electrónico [Taylor et al., 2007; Burkard et al, 1999; Khaetskii, 2002; Coish y Loss, 2004; Yao et al., 2006; Deng y Hu, 2006; Coish y Loss, 2005].

La QSA es válida si existe una separación en las escalas de tiempo entre la dinámica electrónica y nuclear. Mientras el espín electrónico precesa en el campo magnético externo y nuclear en escalas de tiempo que se encuentran en el orden de nanosegundos, mientras que para espines nucleares estos tiempos son substancialmente más grandes.

Es aparente que la evolución del núcleo puede ser despreciada para escalas de tiempo pequeñas $t \ll t_K$, $t_{nL} \ll t_{dd}$, en donde t_K es el tiempo de la precesión nuclear para un espín nuclear, t_{nL} el periodo de Larmor y t_{dd} es el tiempo de relajación de la interacción dipolo – dipolo. Por lo que es posible considerar a B_N una constante en la evolución del espín electrónico. Esto es precisamente la base de la aproximación cuasi-estática (QSA, de sus siglas en inglés). En la QSA, el campo nuclear se asume fijo en escalas de tiempo relevantes a la realización de un solo experimento, tal como la manipulación de un qubit incluyendo el tiempo necesario la preparación el sistema y la medición proyectiva. Sin embargo, durante el proceso de muchas mediciones, el campo nuclear varía lo suficiente, debido a interacción dipolo – dipolo e intercambio de espines nucleares mediado por

electrones, de tal forma que los espines electrónicos están bajo presencia de un campo nuclear “diferente.”

Consideremos un experimento después de un tiempo largo de relajamiento: los núcleos iniciarían en una configuración aleatoria. Si cada medición ocurre en la escala de tiempo donde la QSA sea valida entonces, el resultado neto será equivalente a una sola medición hecha sobre un ensemble de sistemas, en donde el campo nuclear de cada uno de ellos es fijo y preparado de forma aleatoria. El valor de cada campo nuclear será tomado aleatoriamente de la distribución [Taylor et al., 2007],

$$P(\vec{B}) = \frac{1}{(2\pi B_N^2)^{3/2}} \exp\left[-(\vec{B} \cdot \vec{B})/2B_N^2\right]. \quad (\text{III.19})$$

Para evaluar los valores de expectación en la QSA, es necesario primero determinar la evolución del sistema para un \vec{B}_N fijo, y determinar la dependencia de una alguna función $f(\vec{B}_N)$. Después, la señal asignada debe ser promediada sobre la distribución de \vec{B}_N dada por la ecuación (III.19),

$$\bar{F} = \int_{-\infty}^{\infty} F(\vec{B}_1, \vec{B}_2) P(\vec{B}_1, \vec{B}_2) d(\vec{B}_1) d(\vec{B}_2). \quad (\text{III.20})$$

Para campos magnéticos pequeños la QSA es valida hasta tiempos t_K , para campos magnéticos grandes, la escala de tiempo donde de la QSA es valida es extensa. En particular, es posible eliminar la evolución debido a aquellos términos que no conmuten con la interacción de Zeeman, con lo que se obtiene un Hamiltoniano efectivo,

$$H_{eff} = \gamma_e (B_0 + B_{z,nuc}) \hat{S}_z. \quad (\text{III.21})$$

El eje z se considera paralelo al campo magnético externo, B_0 .

Ahora al considerar la interacción hiperfina al hamiltoniano efectivo (III.14) obtenemos,

$$H = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{\beta}_0 \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2) + \vec{S}_1 \cdot \vec{\Gamma} \cdot \vec{S}_2 \right] + \gamma_e \left[(\vec{B}_0 + \vec{B}_{1,nuc}) \cdot \hat{S}_1 + (\vec{B}_0 + \vec{B}_{2,nuc}) \cdot \hat{S}_2 \right] \quad (\text{III.22})$$

donde l y r se refieren al punto izquierdo y derecho y los campos nucleares se determinan por la función de onda envolvente para un solo punto cuántico [Figura 5].

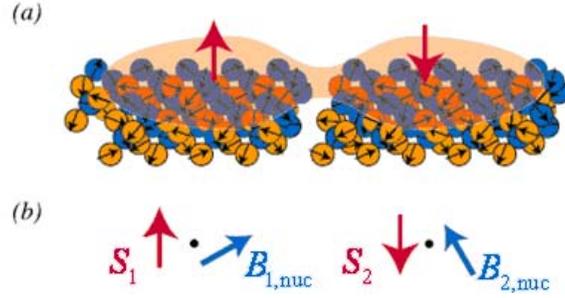


Figura 5: Un doble punto cuántico. (a) Esquema de la función de onda de dos electrones en el régimen desacoplado, los cuales interactúan con una red de espines. (b) Espines electrónicos interactuando con sus respectivos campos nucleares en la aproximación cuasi estática.

Podemos escribir el Hamiltoniano (III.22) reacomodando términos para escribir de forma explícita el campo promedio $\vec{B} = \vec{B}_0 + (\vec{B}_{1,nuc} + \vec{B}_{2,nuc})/2$ y la diferencia de campos $d\vec{B} = (\vec{B}_{1,nuc} - \vec{B}_{2,nuc})/2$,

$$H = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{\beta}_0 \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2) + \vec{S}_1 \cdot \vec{\Gamma} \cdot \vec{S}_2 \right] + \gamma_e \left[\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) + d\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 - \hat{S}_2) \right]. \quad (\text{III.23})$$

En particular si separamos al Hamiltoniano (III.23) como $H = H_0 + H_{so} + H_{hf}$ en donde

$$H_0 = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (\text{III.24})$$

$$H_{so} = J \left[\vec{\beta}_0 \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2) + \vec{S}_1 \cdot \vec{\Gamma} \cdot \vec{S}_2 \right] \quad (\text{III.25})$$

$$H_{hf} = \hbar \gamma_e \left[\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) + d\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 - \hat{S}_2) \right] \quad (\text{III.26})$$

III.3. Modelo de Loss y Divincenzo

En las secciones previas hemos descrito el Hamiltoniano para un par de espines electrónicos acoplados, hemos observado que es necesario considerar correcciones debido al acoplamiento espín – órbita y al acoplamiento al baño de espines nucleares mediante la interacción hiperfina. También hemos visto que las compuertas cuánticas tienen como resultado el modificar los estados cuánticos y mas aún la ecuación (II.11) muestra que las compuertas cuánticas son operadores de evolución temporal, bajo esta observación Loss y Divincenzo en 1998, propusieron que al considerar al término de intercambio como una variable dinámica, en la ecuación (III.7) y demostraron que esta

suposición permitiría suficiente control sobre los estados del sistema de dos qubits para generar compuertas cuánticas, y por lo tanto podemos escribir al Hamiltoniano estacionario (III.7) como un hamiltoniano dinámico,

$$H(t) = J(t)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (\text{III.27})$$

en donde $J(t)$ puede ser controlado experimentalmente por parámetros externos como campos y voltajes de control [Bonesteel et al., 2001; Burkard y Loss, 2002; Dzialoshinski, 1958; Hanson et al., 2007; Kavokin, 2001; Moriya, 1960]. En general la deducción de este Hamiltoniano es completamente análoga a la del Hamiltoniano (III.7), que se presenta en el apéndice C.

En la figura 6 presentamos un esquema de los dos espines electronicos localizados en puntos cuánticos laterales, donde control sobre el sistema se obtiene por medio de las compuertas externas.

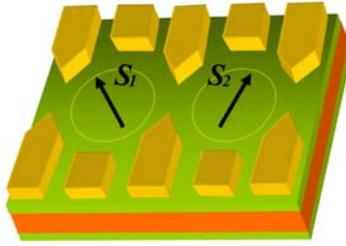


Figura 6: Esquema de un par de espines electronicos localizados por medio de compuertas externas en dos puntos cuánticos laterales.

Loss y Divincenzo [Loss y Divincenzo], además proponen un circuito para generar la compuerta CNOT,

$$U_{CNOT} = e^{i(\pi/2)S_1^z} e^{-i(\pi/2)S_2^z} U_{(swap)^{1/2}} e^{i(\pi/2)S_2^z} U_{(swap)^{1/2}}, \quad (\text{III.28})$$

en donde S_1^z y S_2^z son rotación de espín en la componente Z y $(swap)^{1/2}$ es la compuerta de dos qubits dada por la ecuación (II.23) con $\alpha = 1/2$

De la misma manera similar podemos deducir Hamiltonianos que incluyan el acoplamiento espín – órbita tal como el Hamiltoniano (III.14) y la interacción hiperfina tal como (II.24). En general,

$$H = J(t) \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{\beta}_0 \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2) + \vec{S}_1 \cdot \vec{\Gamma} \cdot \vec{S}_2 \right] + \gamma_e \left[\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) + d\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 - \hat{S}_2) \right]. \quad (\text{III.29})$$

En las siguientes secciones estudiaremos estos tres Hamiltonianos y sus contribuciones al proceso de construcción de la compuerta cuántica (*swap*)^α y al entrelazamiento térmico.

III.3.1 La compuerta (*swap*)^α

En general el Hamiltoniano (III.7) se le conoce como Hamiltoniano de Heisenberg, que describe el sistema de dos espines electrónicos acoplados. Al expresar dicho Hamiltoniano en la base computacional,

$$|1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle, \quad |2\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle, \quad |3\rangle = |\downarrow, \uparrow\rangle, \quad |4\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle \quad (\text{III.30})$$

obtenemos el siguiente sistema matricial,

$$H = J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{J}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{III.31})$$

En donde consideramos el caso a $J > 0$ para considerar el caso antiferromagnético, ya que experimentalmente se han utilizado esta situación [Petta et al., 2005]

La solución del eigensistema tiene como resultado los siguientes vectores y energías

$$\begin{aligned} |v_1\rangle &= |\uparrow, \uparrow\rangle, & |v_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle), \\ |v_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle), & |v_4\rangle &= |\downarrow, \downarrow\rangle \end{aligned} \quad (\text{III.32})$$

$$E_{1,2,4} = E_T = \frac{1}{4}J, \quad E_3 = E_S = -\frac{3}{4}J, \quad (\text{III.33})$$

en donde los vectores $|v_i\rangle$ $i=1, 2$ y 4 , forman el triplete con energía E_T y son los estados excitados del sistema, el singulete $|v_3\rangle$ con energía E_S es el estado base del sistema.

Es verificable que concurrencia de los elementos de la eigenbase (III.32) se puede calcular utilizando (II.59),

$$C(|V_1\rangle) = 0, \quad C(|V_2\rangle) = 1, \quad C(|V_3\rangle) = 1, \quad C(|V_4\rangle) = 0 \quad (\text{III.34})$$

La magnetización para el espín 1 es calculada con (II.75) y (II.78),

$$\sigma_z^{(1)}(|V_1\rangle) = \frac{1}{2}, \quad \sigma_z^{(1)}(|V_2\rangle) = 0, \quad \sigma_z^{(1)}(|V_3\rangle) = 0, \quad \sigma_z^{(1)}(|V_4\rangle) = \frac{1}{2}. \quad (\text{III.35})$$

Si consideramos el efecto de la compuerta (*swap*) $^\alpha$ (II.21), en los elementos $|2\rangle$ y $|3\rangle$ de la base computacional (II.56), ya que son los elementos del subespacio $S_z = 0$, en el subespacio del Hamiltoniano del sistema, que es el subespacio que rige la evolución del sistema y por lo tanto será este subespacio el que controla a la compuerta (II.11).

Al aplicar la compuerta II.(21) a los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ se obtiene

$$|2\rangle^\alpha = \frac{1}{2} \left[(1 + e^{i\pi\alpha}) |\uparrow, \downarrow\rangle + (1 - e^{i\pi\alpha}) |\downarrow, \uparrow\rangle \right], \quad (\text{III.36})$$

$$|3\rangle^\alpha = \frac{1}{2} \left[(1 - e^{i\pi\alpha}) |\uparrow, \downarrow\rangle + (1 + e^{i\pi\alpha}) |\downarrow, \uparrow\rangle \right], \quad (\text{III.37})$$

los cuales tienen, respectivamente, los siguientes valores de concurrencia

$$C(|\uparrow, \downarrow\rangle^\alpha) = |\sin(\alpha\pi)|, \quad (\text{III.38})$$

$$C(|\downarrow, \uparrow\rangle^\alpha) = |\cos(\alpha\pi)|. \quad (\text{III.39})$$

La magnetización para el espín 1 para los estados (III.39) es

$$\sigma_{1z}^\alpha = \frac{1}{2} \cos(\alpha\pi). \quad (\text{III.40})$$

Sin embargo, si observamos el proceso dinámico (II.11) es necesario compararlo con la compuerta (II.21), esta comparación es precisamente la fidelidad definida en (II.69). Si consideramos que la condición inicial es $|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$ tenemos que la evolución dada por (II.21) sobre este estado será precisamente la ecuación (III.36), que rescribimos como

$$|\psi_I\rangle = \frac{1}{2} \left[(1 + e^{i\pi\alpha}) |\uparrow, \downarrow\rangle + (1 - e^{i\pi\alpha}) |\downarrow, \uparrow\rangle \right] \quad (\text{III.41})$$

que es la función de onda ideal del proceso, por lo que podemos encontrar

$$\rho_I = |\psi_I\rangle\langle\psi_I| = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} [1 + \cos(\alpha\pi)] |\uparrow, \downarrow\rangle\langle\uparrow, \downarrow| + i\sin(\alpha\pi) |\uparrow, \downarrow\rangle\langle\downarrow, \uparrow| \\ -i\sin(\alpha\pi) |\downarrow, \uparrow\rangle\langle\uparrow, \downarrow| + [1 - \cos(\alpha\pi)] |\downarrow, \uparrow\rangle\langle\downarrow, \uparrow| \end{array} \right\}. \quad (\text{III.42})$$

Además de (III.41) y (III.42) es fácilmente verificable que para esta condición inicial, $|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$, los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ tendrán una probabilidad de ocupación igual a,

$$P_{|2\rangle}^\alpha = \cos^2\left(\frac{1}{2}\alpha\pi\right) \quad (\text{III.43})$$

$$P_{|3\rangle}^\alpha = \sin^2\left(\frac{1}{2}\alpha\pi\right). \quad (\text{III.44})$$

Si la condición inicial fuera $|\Psi(t=0)\rangle = |\downarrow, \uparrow\rangle$, en lugar de $|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$ los resultados (III.40) – (III.44) son intercambiables.

Si consideramos correcciones espín – orbita al Hamiltoniano de intercambio obtenemos el Hamiltoniano efectivo (III.15) (apéndice C).

Se ha demostrado que la magnitud de $\vec{\beta}_0$ es de $0.01J$ para estructuras bidimensionales en GaAs de 0.1 de $J(t)$ en bulto de GaAs. El término $\vec{\Gamma}$ es de orden superior en el acoplamiento espín – orbita y por lo tanto no lo consideramos. En particular al trabajar en el subespacio $S^z = 0$ nos restringimos a la componente z y consideramos al vector anisotrópico constante $\vec{\beta}_0 = \beta_0 \hat{k}$ a lo largo de z . Por lo que el hamiltoniano bajo estudio esta dado por,

$$H = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)_z \right]. \quad (\text{III.45})$$

En la base computacional podemos expresar este hamiltoniano como

$$H = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)_z \right] = \frac{J}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2(1+i\beta_0) & 0 \\ 0 & 2(1-i\beta_0) & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{III.46})$$

Para el cual los eigenestados y las eigenenergías del sistema son

$$\begin{aligned} |V_1\rangle &= |\uparrow, \uparrow\rangle, & |V_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\sqrt{1+\beta_0^2}}{1-i\beta_0} |\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right), \\ |V_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{\sqrt{1+\beta_0^2}}{1-i\beta_0} |\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right), & |V_4\rangle &= |\downarrow, \downarrow\rangle \end{aligned} \quad (\text{III.47})$$

$$E_{1,4} = \frac{1}{4}J, \quad E_3 = -\frac{1}{4}J \left(1 + 2\sqrt{1+\beta_0^2} \right), \quad E_2 = -\frac{1}{4}J \left(1 - 2\sqrt{1+\beta_0^2} \right), \quad (\text{III.48})$$

de las cuales podemos observar que a causa del término DM la degeneración del triplete se rompe. Se identifica al estado base como $|V_2\rangle$ con energía E_3 .

Efecto del término DM en la compuerta (*swap*)^a

Como se he descrito en capítulos anteriores, los puntos cuánticos son excelentes candidato para la construcción de circuitos cuánticos. En particular estamos interesados en estructuras definidas por compuertas electrónicas en el mar bidimensional creado en interfases de heteroestructuras de GaAs/GaAsAl. Es posible en estas estructuras controlar el tamaño de dichas estructuras en el orden de decenas de nanómetros, y controlar la cantidad de electrones confinados hasta uno. Además, técnicas de medición, como la presentada en la referencia [Hanson et al., 2005], permiten detectar el espín de un solo electrón.

Si consideramos correcciones espín – orbita al Hamiltoniano de intercambio se obtiene, con el formalismo de Feshbach, el Hamiltoniano efectivo de súperintercambio (III.15), cuya deducción se presenta en el apéndice B.

Se ha demostrado que la magnitud de $\vec{\beta}_0$ es de $0.01J$ para estructuras bidimensionales en GaAs de $\vec{\beta}_0 = 0.1J$ en bulto de GaAs [Kavokin, 2001]. El término $\vec{\Gamma}$ es de orden superior en el acoplamiento espín – orbita y por lo tanto no lo consideramos. En particular al trabajar en el subespacio $S^z = 0$ nos restringimos a la componente z y consideramos al vector anisotrópico constante $\vec{\beta}_0 = \beta_0 \hat{k}$ a lo largo de z ,

$$H = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)_z \right]. \quad (\text{IV.1})$$

En la base computacional podemos expresar este hamiltoniano como

$$H = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)_z \right] = \frac{J}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2(1+i\beta_0) & 0 \\ 0 & 2(1-i\beta_0) & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.2})$$

Los eigenestados $|V_i\rangle$ y las eigenenergías E_i del sistema son,

$$\begin{aligned} |V_1\rangle &= |\uparrow, \uparrow\rangle, & |V_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\sqrt{1+\beta_0^2}}{1-i\beta_0} |\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right), \\ |V_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{\sqrt{1+\beta_0^2}}{1-i\beta_0} |\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right), & |V_4\rangle &= |\downarrow, \downarrow\rangle, \end{aligned} \quad (\text{IV.3})$$

$$E_{1,4} = \frac{1}{4}J, \quad E_3 = -\frac{1}{4}J \left(1 + 2\sqrt{1+\beta_0^2} \right), \quad E_2 = -\frac{1}{4}J \left(1 - 2\sqrt{1+\beta_0^2} \right), \quad (\text{IV.4})$$

de las cuales podemos observar que a causa del término DM la degeneración del triplete se rompe. Se identifica al estado base como $|V_3\rangle$ con energía E_3 . Es fácil demostrar, con ayuda de las relaciones (II.75) y (II.78) que la magnetización del espín 1 es igual a 0 para los estados $|V_2\rangle$ y $|V_3\rangle$ y será de $\frac{1}{2}$ para $|V_1\rangle$ y $-\frac{1}{2}$ para $|V_4\rangle$.

Al considerar la propuesta de Loss y DiVincenzo para espines electrónicos acoplados es posible la construcción de compuertas cuánticas de 2 qubits. Considerar a la variable de intercambio como una variable dinámica tiene como resultado obtener control sobre los estados del sistema y logran producir compuertas.

En este capítulo presentamos, al considerar al término de intercambio como una variable dinámica, resultados analíticos y numéricos del efecto del término DM en la compuerta (*swap*)^α. Para este propósito se presentan cálculos para las propiedades: probabilidad de estado, magnetización, entrelazamiento y fidelidad de la operación.

Específicamente trabajaremos en el subespacio $S^Z = 0$, en donde el espín total del sistema es igual a cero, esto base a los experimentos de Johnson y Petta [Petta et al., 2005: Jonson et al., 2005]

IV.1 RESULTADOS

A continuación presentaremos la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el Hamiltoniano de intercambio dependiente del tiempo, $J(t)$, en donde se incluye el término DM. En particular consideremos, como se ha mencionado. al vector

anisotrópico en la componente z , $\vec{\beta}(t) = \beta_0 \hat{k}$, que asegura que la interacción de espín – órbita se localiza en el subespacio $S_z = 0$.

IV.1.1 El Hamiltoniano dinámico de intercambio con correcciones DM

Bajo la propuesta de Loss y DiVincenzo la variable de intercambio se convierte en una variable dinámica la cual convierte al Hamiltoniano de intercambio (III.7) en uno dinámico (III.27). La base de la propuesta es utilizar a la variable de intercambio para controlar los estados del sistema y de esta forma generar compuertas lógicas, tal como la presentada en (III.28).

Sin embargo antes de poder definir un esquema como el presentado en (III.29) es necesario analizar el proceso de evolución dado por

$$H = J(t) \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)_z \right] = \frac{J(t)}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2(1+i\beta_0) & 0 \\ 0 & 2(1-i\beta_0) & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.5})$$

Podemos describir la evolución temporal del sistema mediante la función de onda, la cual representada en la base computacional es de la forma:

$$|\Psi(t)\rangle = a_0(t)|\uparrow, \uparrow\rangle + b_0(t)|\uparrow, \downarrow\rangle + c_0(t)|\downarrow, \uparrow\rangle + d_0(t)|\downarrow, \downarrow\rangle \quad (\text{IV.6})$$

donde las amplitudes evoluciona de acuerdo a la ecuación dependiente del tiempo de Schrödinger (TDSE, de sus siglas en ingles),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle. \quad (\text{IV.7})$$

Por simplicidad, utilizaremos la condición inicial, $|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$, lo cual implica que $a_0(t) = d_0(t) = 0$. Por simple inspección del Hamiltoniano (IV.4) la dinámica del sistema esta restringida al subespacio $S^z = 0$, que esta compuesta por los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$. Que conducen a las siguientes amplitudes,

$$b_0(t) = \frac{\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{2}(1-i\beta_0)} [b(t) - c(t)], \quad (\text{IV.8})$$

$$c_0(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [b(t) + c(t)], \quad (\text{IV.9})$$

donde

$$b(t) = \frac{1 - i\beta_0}{\sqrt{2 + 2\beta_0^2}} e^{\left[\frac{i}{4}(1 - 2\sqrt{1 + \beta_0^2})x(t)\right]}, \quad (\text{IV.10})$$

$$c(t) = \frac{-(1 - i\beta_0)}{\sqrt{2 + 2\beta_0^2}} e^{\left[\frac{i}{4}(1 + 2\sqrt{1 + \beta_0^2})x(t)\right]}, \quad (\text{IV.11})$$

donde los valores de $|b_0(t)|^2$ y de $|c_0(t)|^2$ son respectivamente las probabilidades de la ocupación de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ y $x(t)$ es el parametro de control en estas amplitudes y se asigna al área total de la variable de intercambio con la relación,

$$x(t_{\max}) = \int_{-\infty}^{t_{\max}} J(\tau) d\tau \quad (\text{IV.12})$$

Al considerar a la variable de intercambio como una variable dinámico, $J(t)$, como la de un pulso se obtiene suficiente control sobre los estados para producir compuertas de dos qubits. En particular para la ecuación (IV.4) con $\beta_0 = 0$ y con la ecuación (III.11) tenemos,

$$U(t) = T \exp\left[-\frac{i}{\hbar} x(t_{\max}) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2\right]. \quad (\text{IV.13})$$

Específicamente la compuerta $(\text{swap})^{1/2}$ utilizada en el circuito para producir CNOT, presentado en la relación (III.28), es el resultado de imponer la condición, $x(t_{\max}) = \pi/2$ en el área del pulso en la ecuación (IV.13). Sin embargo, si $x(t_{\max}) = \pi$, se obtiene la compuerta swap . De forma más general se puede obtener la compuerta $(\text{swap})^{1/2}$, ecuación (II.23), al imponer la condición $x(t_{\max}) = \alpha\pi$. Esto se estudia en las ecuaciones (II.22) y (II.23) podemos definir el efecto de la compuerta $(\text{swap})^\alpha$ sobre elementos $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ de la base computacional (108) (excluyendo los estados de doble ocupación) como,

$$\left| \Psi_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^\alpha \right\rangle = U_{(\text{swap})^\alpha} |\uparrow, \downarrow\rangle = \frac{1}{2} \left[(1 + e^{i\pi\alpha}) |\uparrow, \downarrow\rangle + (1 - e^{i\pi\alpha}) |\downarrow, \uparrow\rangle \right] \quad (\text{IV.14})$$

y

$$\left| \Psi_{|\downarrow, \uparrow\rangle}^{\alpha} \right\rangle = U_{(swap)^{\alpha}} \left| \uparrow, \downarrow \right\rangle = \frac{1}{2} \left[(1 - e^{i\pi\alpha}) \left| \uparrow, \downarrow \right\rangle + (1 + e^{i\pi\alpha}) \left| \downarrow, \uparrow \right\rangle \right]. \quad (IV.5)$$

Al considerar al término DM ($\beta_0 \neq 0$) en la operación de compuerta, de la ecuaciones (IV.12) y (IV.13) que un término adicional debe ser agregado, por lo que, al conservar la misma condición del pulso $J(t)$ aparecerá un error en la operación de compuerta.

Se ha reportado [Kaplan y Piermatocchi, 2004] que para un sistema isotrópico de dos espines acoplados, la magnetización, en el subespacio $S_z = 0$, de uno de los dos espines es condición suficiente para evaluar la operación de la compuerta $(swap)^{1/2}$. Por lo tanto realizamos cálculos de la magnetización del espín 1, \vec{S}_1 , que son análogos para el espín 2, \vec{S}_2 , se determina con la ecuación (II.75). Para tiempos largos se requiere que la magnetización resultante tenga el valor de la magnetización del estado- α , dada por la ecuación (III.40).

Por otro lado el entrelazamiento del sistema es una propiedad necesaria, ya que de las ecuaciones (III.40) se observa que la compuerta $(swap)^{\alpha}$ genera combinaciones lineales de los estados de la base computacional, en el subespacio $S_z = 0$, y por consecuencia debe generar entrelazamiento entre ellos, por lo que consideramos que el entrelazamiento (medido por la concurrencia) puede ser utilizada como una herramienta de evaluación para la operación de compuerta. Para el estado- α , dado en las ecuaciones (III.38) y (III.39)

Específicamente, la compuerta $(swap)^{1/2}$,

$$U_{(swap)^{1/2}} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 1-i & 0 \\ 0 & 1-i & 1+i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (IV.16)$$

produce estados en la superposición,

$$\left| \Psi_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{1/2} \right\rangle = U_{(SWAP)^{1/2}} \left| \uparrow, \downarrow \right\rangle = \frac{1}{2} \left[(1+i) \left| \uparrow, \downarrow \right\rangle + (1-i) \left| \downarrow, \uparrow \right\rangle \right], \quad (IV.17)$$

los cuales tienen concurrencia máxima de $C=1$,

$$C(\psi) = \left| \left\langle \Psi_{|\uparrow,\downarrow\rangle}^{1/2} \left| \tilde{\Psi}_{|\uparrow,\downarrow\rangle}^{1/2} \right\rangle \right|, \quad \left| \tilde{\Psi}_{|\uparrow,\downarrow\rangle}^{1/2} \right\rangle = (\sigma_y \otimes \sigma_y)^{\frac{1}{2}} \left[(1-i)|\uparrow,\downarrow\rangle + (1+i)|\downarrow,\uparrow\rangle \right]. \quad (\text{IV.18})$$

Mientras que la compuerta *swap*, $\alpha=1$,

$$U_{\text{swap}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{IV.19})$$

produce un estado de la forma,

$$\left| \Psi_{|\uparrow,\downarrow\rangle}^1 \right\rangle = U_{\text{SWAP}} |\uparrow,\downarrow\rangle = |\downarrow,\uparrow\rangle, \quad (\text{IV.20})$$

que es un estado separable con concurrencia nula, $C=0$,

$$C(\psi) = \left| \left\langle \Psi_{|\uparrow,\downarrow\rangle}^1 \left| \tilde{\Psi}_{|\uparrow,\downarrow\rangle}^1 \right\rangle \right|, \quad \left| \tilde{\Psi}_{|\uparrow,\downarrow\rangle}^1 \right\rangle = (\sigma_y \otimes \sigma_y) |\downarrow,\uparrow\rangle. \quad (\text{IV.21})$$

Es posible determinar tanto la magnetización como la concurrencia como función del tiempo para diferentes condiciones anisotrópicas (DM) en la compuerta (*swap*) $^\alpha$. Las expresiones generales, para la magnetización y la concurrencia, se obtienen en función de las amplitudes dinámicas $b_0(t)$ (para el estado $|\uparrow,\downarrow\rangle$) y $c_0(t)$ (para el estado $|\downarrow,\uparrow\rangle$). Utilizando la función de onda (IV.6) en (I.75) en donde se ha considerado el hecho que $a_0(t) = d_0(t) = 0$. La magnetización esta dada por,

$$\sigma_z(t) = \frac{1}{2} \left(b_0^*(t) \langle \uparrow,\downarrow | + c_0^*(t) \langle \downarrow,\uparrow | \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \left(b_0(t) |\uparrow,\downarrow\rangle + c_0(t) |\downarrow,\uparrow\rangle \right) \quad (\text{IV.22})$$

de donde encontramos la siguiente expresión general para la magnetización,

$$\sigma_z(t) = \frac{1}{2} \left[|b_0(t)|^2 - |c_0(t)|^2 \right]. \quad (\text{IV.23})$$

Con las ecuaciones (IV.5) y (II.59) se obtiene una expresión para la concurrencia

$$C(\psi) = \left| \left(b_0^*(t) \langle \uparrow,\downarrow | + c_0^*(t) \langle \downarrow,\uparrow | \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left(b_0(t) |\uparrow,\downarrow\rangle + c_0(t) |\downarrow,\uparrow\rangle \right) \right| \quad (\text{IV.24})$$

que tiene como resultado,

$$C(t) = \sqrt{4|b_0(t)|^2 |c_0(t)|^2}. \quad (\text{IV.25})$$

De las cuales podemos encontrar una relación interesante. Consideremos el cuadrado de (143)

$$\begin{aligned} (\sigma_z(t))^2 &= \frac{1}{4} \left[|b_0(t)|^4 - 2|b_0(t)|^2 |c_0(t)|^2 + |c_0(t)|^4 \right] \\ &= \frac{1}{4} \left[\left(|b_0(t)|^2 - |c_0(t)|^2 \right)^2 - 4|b_0(t)|^2 |c_0(t)|^2 \right], \\ &= \frac{1}{4} \left[1 - 4|b_0(t)|^2 |c_0(t)|^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{IV.26})$$

comparando este resultado con la ecuación (4.24) podemos observar que,

$$C(t) = \sqrt{1 - 4\sigma_z^2(t)}. \quad (\text{IV.27})$$

La ecuación (IV.27) presenta una relación entre una observable, la magnetización en sitio, y una propiedad cuántica abstracta que caracteriza el grado de entrelazamiento, la concurrencia. Esta ecuación es válida solo en el subespacio $S^Z = 0$.

Ambas propiedades tienen información de las probabilidades de los estados. Sin embargo hasta ahora no se ha presentado ninguna propiedad que exprese la información dada por las coherencias agregadas al introducir el término DM a la operación de compuerta.

Es necesario determinar una propiedad que incluya tanto las probabilidades de estados como las coherencias de la operación de compuerta. Por lo que es indispensable incluir en nuestros cálculos de la fidelidad de la operación de compuerta, tal como es presentada en la ecuación (II.69).

La matriz de densidad $\rho_p(t)$ esta dada por la ecuación (II.29) y se obtiene,

$$\rho_p(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|, \quad (\text{IV.28})$$

$$\begin{aligned} \rho_p(t) &= |b_0(t)|^2 |\uparrow, \downarrow\rangle\langle\uparrow, \downarrow| + |c_0(t)|^2 |\downarrow, \uparrow\rangle\langle\downarrow, \uparrow| \\ &\quad + b_0(t)c_0^*(t) |\uparrow, \downarrow\rangle\langle\downarrow, \uparrow| + c_0(t)b_0^*(t) |\downarrow, \uparrow\rangle\langle\uparrow, \downarrow|, \end{aligned} \quad (\text{IV.29})$$

donde la forma exacta de las amplitudes es dada por la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo dados por las ecuación (IV.7) – (IV.10).

Para la compuerta (*swap*)^α, la matriz de densidad ideal, $\rho_I(t) = \rho_I^\alpha = \left| \Psi_{|\uparrow,\downarrow}^\alpha \right\rangle \left\langle \Psi_{|\uparrow,\downarrow}^\alpha \right|$

esta dada por la ecuación (III.42) escrita aquí nuevamente,

$$\rho_I^\alpha = \frac{1}{2} \begin{Bmatrix} 1 + \cos(\pi\alpha) |\uparrow,\downarrow\rangle \langle \uparrow,\downarrow| + i \sin(\pi\alpha) |\uparrow,\downarrow\rangle \langle \downarrow,\uparrow| \\ -i \sin(\pi\alpha) |\downarrow,\uparrow\rangle \langle \uparrow,\downarrow| + [1 - \cos(\pi\alpha)] |\downarrow,\uparrow\rangle \langle \downarrow,\uparrow| \end{Bmatrix}, \quad (\text{IV.30})$$

en donde se observa que los elementos diagonales tienen el término $\cos(\pi\alpha)$ y las coherencias tienen el término $\sin(\pi\alpha)$ que adquieren su valor máximo cuando $\alpha = \frac{1}{2}$ y serán cero para $\alpha = 1$.

La dependencia temporal en nuestro modelo se expresa en términos de la función $x(t)$, ecuación (IV.13), el área al tiempo t de la variable de intercambio $J(t)$. Utilizando las ecuaciones (IV.23) y (IV.25) y con las amplitudes (IV.8) – (IV.11) se calcula la magnetización y la concurrencia dependiente de tiempo. Al sustituir (IV.10) y (IV.11) en (IV.8) y (IV.9),

$$b_0(t) = e^{i\frac{x(t)}{4}} \cos \left[\frac{1}{2} \sqrt{1 + \beta_0^2} x(t) \right], \quad (\text{IV.31})$$

$$c_0(t) = -\frac{1 - i\beta_0}{\sqrt{1 + \beta_0^2}} e^{i\frac{x(t)}{4}} i \text{sen} \left[\frac{1}{2} \sqrt{1 + \beta_0^2} x(t) \right], \quad (\text{IV.32})$$

La magnetización se obtiene al sustituir (IV.31) y (IV.32) en (IV.22),

$$\sigma_z(t) = \frac{1}{2} \left[\left(\cos \left[\frac{1}{2} \sqrt{1 + \beta_0^2} x(t) \right] \right)^2 - \left(\text{sen} \left[\frac{1}{2} \sqrt{1 + \beta_0^2} x(t) \right] \right)^2 \right], \quad (\text{IV.33})$$

después de simplificar tenemos,

$$\sigma_z(t) = \frac{1}{2} \cos \left[\sqrt{1 + \beta_0^2} x(t) \right]. \quad (\text{IV.34})$$

En donde, el valor asintótico que esta función debe alcanzar en un tiempo máximo de la interacción, t_{\max} , para producir la operación de compuerta (*swap*)^α deseada estará dado por la ecuación (IV.34) y el valor de la magnetización del estado-α. Esto es σ_z^α ,

$$\sigma_z(t = t_{\max}) = \frac{1}{2} \cos(\pi\alpha) \quad (\text{IV.35})$$

de la cual es posible extraer una condición para el área del acoplamiento de intercambio, $x(t)$. Las ecuaciones (IV.34) y (IV.35) deben ser iguales para producir la operación de compuerta deseada, por lo que la función $x(t)$ debe satisfacer ,

$$x(t = t_{\max}) = \frac{\alpha\pi}{\sqrt{1 + \beta_0^2}}, \quad (\text{IV.36})$$

para el tiempo t_{\max} .

Con respecto a la condición general de la compuerta $(\text{swap})^\alpha$, $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, la corrección anisotrópica, reduce en un factor de $\frac{1}{\sqrt{1 + \beta_0^2}}$ al área total del pulso, $x(t)$, debido al término DM.

De manera similar se obtiene una relación para la evolución temporal de la concurrencia, sustituyendo las ecuaciones (IV.34) y (IV.5) en (IV.25),

$$C(t) = \left| \text{sen} \left[\sqrt{1 + \beta_0^2} x(t) \right] \right|. \quad (\text{IV.37})$$

Al considerar en esta expresión la condición del área del pulso (IV.36), se recupera el valor asintótico de la concurrencia del estado- α ,

$$C(t = t_{\max}) = |\text{Sen}(\alpha\pi)| = C\left(U_{(\text{SWAP})^\alpha} \left| \uparrow, \downarrow \right\rangle\right), \quad (\text{IV.38})$$

que es la concurrencia del estado- α dada por la ecuación (IV.14). Esta propiedad es un indicador, que la compuerta $(\text{swap})^\alpha$ es un entrelazador dinámico de estados, y que el grado de entrelazamiento esta controlado por el parámetro α . También es fácilmente verificable que las relaciones específicas para la concurrencia (IV.37) y magnetización (IV.34) satisfacen a la ecuación general (IV.27).

La magnetización y concurrencia son propiedades necesarias y requeridas para evaluar la operación de compuerta ya que producen las probabilidades de estado correctas. Sin embargo aun cuando la magnetización, y la concurrencia, presentan condiciones necesarias para evaluar la operación de compuerta, no son suficientes, debido a que dichas propiedades solo presentan información sobre las probabilidades de los estados (en el subespacio $S^z = 0$), $|b_0(t)|^2$ y $|c_0(t)|^2$ y no de las coherencias del sistema.

Al incluir la fidelidad, (II.69), en la evaluación de la operación de compuerta se obtiene información de las fases agregadas por las coherencias en la matriz de densidad, ρ_I^α . Dicha información es necesaria para producir y obtener una operación de compuerta

exitosa y completa. A partir de las ecuaciones (II.69), (IV.29) y (IV.30) y de la forma explícita de las amplitudes (IV.34) y (IV.35), obtenemos el valor de la fidelidad al tiempo t ,

$$F = \text{Tr}[\rho_P(t)\rho_I^\alpha(t)] = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \cos(\alpha\pi) \cos\left[\sqrt{1+\beta_0^2}x(t)\right] + \frac{1}{\sqrt{1+\beta_0^2}} \sin(\alpha\pi) \sin\left[\sqrt{1+\beta_0^2}x(t)\right] \right\}. \quad (\text{IV.39})$$

El valor asintótico de la fidelidad se encuentra al considerar la corrección de pulso dado por la condición (IV.36),

$$F = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \cos^2(\alpha\pi) + \frac{1}{\sqrt{1+\beta_0^2}} \sin^2(\alpha\pi) \right\}. \quad (\text{IV.40})$$

Es claro que al considerar, $\beta_0 = 0$ la fidelidad siempre tendrá el valor máximo de $F = 1$ para cualquier valor de α , de tal forma que es posible producir la compuerta $(\text{swap})^\alpha$. Sin embargo, para valores $\beta_0 \neq 0$ la fidelidad solo tendrá el valor de $F = 1$ solo para aquellos casos donde $\alpha = 1$ y $F = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+\beta_0^2}} \right)$ donde $\alpha = \frac{1}{2}$, que siempre será menor a 1. Como se menciona previamente, la amplitud del término DM, β_0 varia del 1% al 10% del término de intercambio, J , en heteroestructuras de GaAs. Por lo tanto podemos expandir la fidelidad para β_0 pequeños,

$$F = \frac{1}{2} \left[1 + \cos^2(\alpha\pi) + \sin^2(\alpha\pi) \left(1 - \frac{1}{2}\beta_0^2 + \frac{3}{8}\beta_0^4 - \dots \right) \right] = 1 - \sin^2(\alpha\pi) \left(\frac{1}{4}\beta_0^2 + \dots \right). \quad (\text{IV.41})$$

Por lo tanto, la fidelidad muestra un error intrínscico que aparentemente no puede ser corregido en la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$ con el esquema de modificación del pulso del término de intercambio. Los valores de la fidelidad presentado en la ecuación (IV.41) se observa que no son igual a 1, disminuyen de manera cuadrática con β_0 y son modulados con el parámetro α mediante la función $\sin^2(\alpha\pi)$, que tiene la forma del cuadrado de la concurrencia dada en (IV.10).

Es importante resaltar que los resultados presentados en esta sección son generales y no dependen explícitamente de la forma del modelo de parámetro de acoplamiento $J(t)$. Los resultados escritos están dados en función del área total del pulso, $x(t)$, por lo que los resultados son bastante generales y pueden ser aplicados a cualquier forma arbitraria del pulso o dependencia temporal de $J(t)$.

4.2 RESULTADOS NUMÉRICOS

En particular, para los cálculos numéricos realizados utilizamos la siguiente forma del pulso de la variable de intercambio, $J(t)$ [Bonesteel, et al., 2001],

$$J(t) = J_0 \operatorname{sech} [2\lambda(t - t_0)], \quad (\text{IV.42})$$

donde J_0 , λ y t_0 son respectivamente la altura del pulso, el inverso del ancho del pulso y un desplazamiento del tiempo. Utilizamos unidades de energía y tiempo determinadas por $J_0 = 1.52 \times 10^{-3}$ meV y $\hbar = 1$. El parámetro λ se utiliza para controlar el área del pulso, $x(t)$ y consecuentemente la dinámica del sistema para obtener la operación de compuerta deseada. En la figura 7 presentamos una familia de pulsos para diferentes valores de la variable de control λ . Se observa una relación inversa de la amplitud del pulso con el valor de λ . A un pulso mas estrecho lo consideramos un pulso “más rápido”.

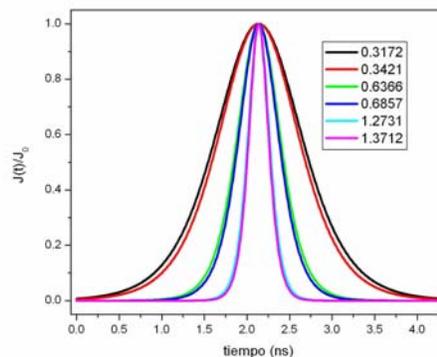


Figura 7: La variable intercambio $J(t)$, como función del tiempo y de la variable λ , que es el inverso del ancho del pulso.

Específicamente, para la forma de pulso (IV.42), encontramos los valores de λ , para cada valor de α dado por la condición (IV.36),

$$x(t_{\max}) = \int_0^{t_{\max}} J_0 \operatorname{sech}^2 [2\lambda(t' - t_0)] dt' = \frac{\alpha\pi}{\sqrt{1 + \beta_0^2}}, \quad (\text{IV.43})$$

Que al ser una ecuación trascendental, esta debe ser resuelta numéricamente para el par de valores (α, β_0) .

Los resultados numéricos que se presentarán a se encontraron resolviendo la ecuación de Von Neumann (IV.43) para $\rho_p(t)$ en (149), con la condición inicial,

$$\rho_p(t=0) = |\uparrow, \downarrow\rangle\langle\uparrow, \downarrow|. \quad (\text{IV.44})$$

Los resultados numéricos están en total de acuerdo con los resultados analíticos presentados en la sección anterior.

Tabla I. Parámetros de pulso utilizado en los cálculos numéricos. Para cada α se presenta un valor de referencia que reproduce $x(t_{\max}) = \alpha\pi$ con un valor de λ_r y $\beta_0 = 0$ necesarios para producir la compuerta cuántica $(\text{swap})^\alpha$. Después para el mismo valor de λ_r y una amplitud de DM diferente de cero, $\beta_0 \neq 0$, se evalúa el error introducido a la operación de compuerta. Finalmente para los mismos valores de la amplitud de DM se utiliza el esquema de corrección del pulso, $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1 + \beta_0^2}$ para calcular el nuevo valor de λ_c que produzca los valores asintóticos adecuados para las amplitudes $b_0(t)$ y $c_0(t)$.

α	λ	β_0
$\frac{1}{4}$	$\lambda_r = 1.2731$	0
	$\lambda_r = 1.2731$	0.4
	$\lambda_c = 1.3712$	0.4
$\frac{1}{2}$	$\lambda_r = 0.6366$	0
	$\lambda_r = 0.6366$	0.4
	$\lambda_c = 0.6857$	0.4
1	$\lambda_r = 0.3172$	0
	$\lambda_r = 0.3172$	0.4
	$\lambda_c = 0.3421$	0.4

La tabla I muestra 3 valores distintos de α que han sido utilizados para obtener resultados numéricos. Para cada valor de α se establece una curva de control con un valor del inverso de pulso $\lambda = \lambda_r$, con la amplitud DM de $\beta_0 = 0$ que corresponde a la condición del área del pulso, $x(t_{\max}) = \alpha\pi$. Este valor de λ_r garantiza que los estados cuánticos resultantes producirán la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$ deseada. Así mismo, para el mismo valor de λ_r y un valor de DM distinto de cero, $\beta_0 \neq 0$, evaluamos el error introducido en la operación de compuerta. Finalmente para $\beta_0 \neq 0$ y con la condición (IV.43) encontramos el valor de λ_c modificamos y cambiamos el área total del pulso $x(t)$ con lo que se corrigen los valores finales de las probabilidades de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$, concurrencia, magnetización en sitio y fidelidad.

En la tabla II, para la compuerta $(\text{swap})^\alpha$ se presentan los valores asintóticos calculados de dichas propiedades para valores de $\alpha = 1/2, 1/4$, y 1. La primera columna muestra los valores asintóticos para el pulso que satisface $x(t_{\max}) = \alpha\pi$ y $\beta_0 = 0$, que son caracterizados con λ_r . En la segunda columna se presentan la misma condición del pulso pero con el término DM con $\beta_0 = 0.4$. Desde el punto de vista de compuertas cuánticas, el término DM genera un desplazamiento en cada una de las propiedades, es decir, un “error” en la operación de compuerta. Este desplazamiento puede ser visto como una manifestación de la presencia del campo espín – orbita (término DM) para sistemas de espines acoplados. En la tercer columna se incluye el porcentaje del error relativo agregado por el término DM. Después del esquema de corrección del pulso presentado en las ecuaciones (IV.36) y (IV.43) se calculan nuevamente las propiedades y después el error. Se nota que todas las propiedades regresan a su valor de referencia, excepto la fidelidad la cual sigue el patrón de comportamiento presentado por la expansión de la ecuación (IV.43).

Tabla II. Valores asintóticos para diferentes condiciones de área de pulso $x(t)$ para tres valores de α y β_0 para la magnetización en sitio, concurrencia C , fidelidad F , y probabilidad de ocupación de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$, $P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}$ y $P_{|\downarrow, \uparrow\rangle}$ respectivamente. Los valores del parámetro λ están dados en la tabla I.

α	$x(t_{\max}) = \alpha\pi$	$x(t_{\max}) = \alpha\pi$	% de error	$x(t_{\max}) = \frac{\alpha\pi}{\sqrt{1+\beta_0^2}}$	% de error
	$\beta_0 = 0$	$\beta_0 = 0.4$		$\beta_0 = 0.4$	
$\frac{1}{4}$	$\sigma_z = 0.35355$	$\sigma_z = 0.33153$	6.23 %	$\sigma_z = 0.35355$	0 %
	$C = 0.70711$	$C = 0.74857$	5.86 %	$C = 0.70711$	0 %
	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0.85355$	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0.83153$	2.58 %	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0.85355$	0 %
	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 0.146447$	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 0.16847$	13.07 %	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 0.146447$	0 %
	$F = 1$	$F = 0.98016$	1.98 %	$F = 0.98212$	1.79 %
$\frac{1}{2}$	$\sigma_z = 0$	$\sigma_z = -0.06035$	12.07 %	$\sigma_z = 0$	0 %
	$C = 1$	$C = 0.99269$	7.3 %	$C = 1$	0 %
	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0.5$	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0.43965$	12.07 %	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0.5$	0 %
	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 0.5$	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 0.56035$	12.07 %	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 0.5$	0 %
	$F = 1$	$F = 0.96084$	3.92 %	$F = 0.96424$	3.58 %
1	$\sigma_z = -0.5$	$\sigma_z = -0.48543$	2.91 %	$\sigma_z = -0.5$	0 %
	$C = 0$	$C = 0.23965$	23.965 %	$C = 0$	0 %
	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0$	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0.01457$	1.457 %	$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle} = 0$	0 %
	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 1$	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 0.98543$	1.457 %	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle} = 1$	0 %
	$F = 1$	$F = 0.98543$	1.457 %	$F = 1$	0 %

El esquema de pulso mostrado presenta la posibilidad de determinar la presencia del término DM en un sistema de espines acoplados. Para una condición particular del pulso conocemos el valor de expectación de la magnetización con $\beta_0 = 0$ y experimentalmente podemos medir la magnetización asintótica, estos valores pueden ser comparados y de esta extraer la manifestación de la amplitud DM. Otra metodología podría ser utilizando la diferencia entre la magnetización entre dos condiciones arbitrarias del área del pulso x_1 y x_2 , dadas de acuerdo a (150),

$$\sigma_z^{(1)} - \sigma_z^{(2)} = \frac{1}{2} \left[\cos\left(\sqrt{1 + \beta_0^2} x_1\right) - \cos\left(\sqrt{1 + \beta_0^2} x_2\right) \right], \quad (\text{IV.45})$$

y de esta, podemos calcular el valor del término DM. Es posible medir la magnetización de estos sistemas, por ejemplo, utilizando la técnica de resolución temporal de rotación de Faraday (FR) [Chutia, et al., 2006; Meier et al., 2007; Crooker et al., 1997].

El esquema de pulsos quizás no sea la forma mas eficiente de determinar la amplitud del término DM, β_0 , por lo cual proponemos una enfoque alternativo basado la frecuencia de oscilación inducida por la presencia del término DM. Se ha mostrado en experimentos recientes para sistemas no interactuantes [Meier et al., 2007], que al medir la frecuencia de oscilación del campo magnético inducido, es posible medir la magnitud del campo espín – orbita. Si consideramos a la variable de acoplamiento J , constante (un pulso cuadrado) en un intervalo de tiempo $[0, t_{\max}]$, este método puede ser aplicado también a nuestro modelo de compuertas cuánticas, y medir, con la técnica FR, las oscilaciones de la magnetización (IV.30), que tendrán una frecuencia $\omega_{\beta_0} = J\sqrt{1 + \beta_0^2}$, inducida por el término DM, y de análisis espectral es posible determinar el valor del término β_0 conociendo el valor de J

En la figura 8, se presentan resultados para la evolución temporal de la probabilidad de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$, para los casos $\alpha = 1/2, 1/4$, y 1 y sus correspondientes condiciones de pulso λ_r y λ_c tal como se presentan en la tabla I. En particular para la operación de compuerta con $\alpha = 1/2$ y 1 los valores finales de probabilidad son muy intuitivos. El sistema, para con $\alpha = 1/2$, después de la operación de compuerta se encontrara en un superposición simétrica de estados, en donde las probabilidades de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ están dados por la ecuación (IV.14) y (IV.15) respectivamente, específicamente el estado,

$$\Psi_{\alpha=1/2} = \frac{1}{2} \left[(1+i) |\uparrow, \downarrow\rangle + (1-i) |\downarrow, \uparrow\rangle \right], \quad (\text{IV.46})$$

por lo tanto las probabilidades de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ serán $1/2$ cada una,

$$P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha=1/2} = P_{|\downarrow, \uparrow\rangle}^{\alpha=1/2} = \frac{1}{2}. \quad (\text{IV.47})$$

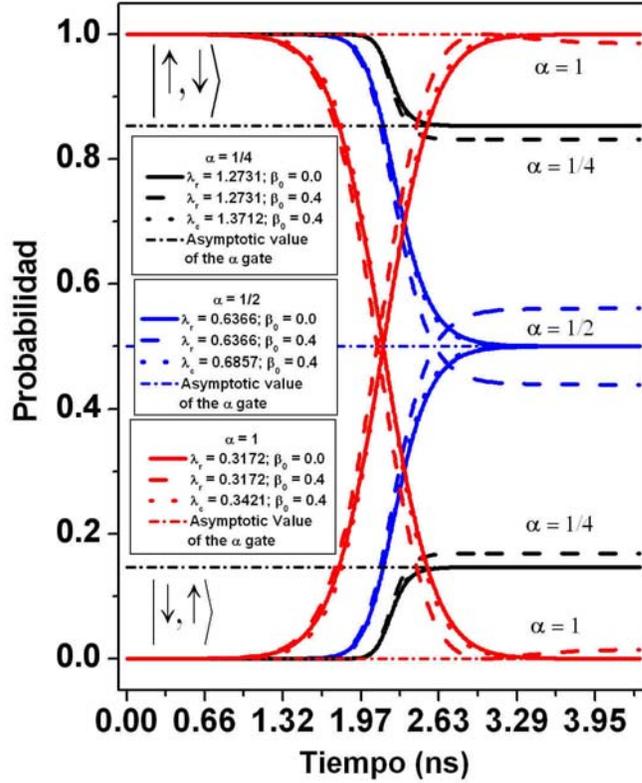


Figura 8: Probabilidad de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ como función del tiempo, para $\alpha = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, y 1. Para los mismos valores de α con $\beta_0 = 0$ los valores λ_r para la curva de referencia dada en la tabla I e incluidos en la figura. El error a la compuerta ocurre al considerar una amplitud de DM distinta a cero, $\beta_0 = 0.4$ y con el mismo valor de referencia, λ_r . Utilizamos el esquema (IV.41) para corregir el ancho del pulso con el valor λ_r , también en la tabla I y producir curvas con las probabilidades correctas.

La operación de compuerta cuántica resultante sería la compuerta “*half - swap*” o “Raíz cuadrada de la compuerta *swap*”. Para $\alpha = 1$, la compuerta resultante será la compuerta *swap*, por ejemplo para la condición inicial $|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$ la operación sería $|\uparrow, \downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow, \uparrow\rangle$, las probabilidades resultantes serían,

$$P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha=1} = 0, \quad P_{|\downarrow, \uparrow\rangle}^{\alpha=1} = 1. \quad (\text{IV.48})$$

La curva de referencia muestra que la probabilidad del estado $|\uparrow, \downarrow\rangle$ se invierte de 1 a 0 y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ de 0 a 1. Para $\alpha = \frac{1}{4}$ las probabilidades finales pueden ser calculadas de (134) y (IV.15) y están dadas por,

$$\Psi_{\alpha=1/4} = \frac{1}{2} \left\{ \left[1 + \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i) \right] |\uparrow, \downarrow\rangle + \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}}(1-i) \right] |\downarrow, \uparrow\rangle \right\}, \quad (\text{IV.49})$$

con probabilidades

$$P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha=1/4} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \right), \quad P_{|\downarrow, \uparrow\rangle}^{\alpha=1/4} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{IV.50})$$

Se observa que después de “encender” el término DM, el valor final de cada probabilidad cambia y un error en la operación aparece (como se muestra en la tabla II). Utilizando el esquema de corrección presentado en la ecuación (II.63) y el valor del término DM $\beta_0 = 0.4$, modifica el parámetro de λ_r a λ_c para cada valor de $\alpha = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$, y 1. Esto tiene la probabilidad de corregir las propiedades de los estados- α . La tendencia general es utilizar pulsos mas cortos cuando se encuentra presente el término DM. Los resultados numéricos de la Figura 8 están de acuerdo con los resultados presentados en la tabla II.

En la figura 9 se muestran resultados numéricos, bajo las mismas condiciones de la figura 8, para la magnetización del sitio 1, $\sigma_z(t)$. Para la condición inicial $|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$, es fácil observar que la magnetización inicial es de $\frac{1}{2}$. Para la curva de referencia λ_r y $\beta_0 = 0$, después de la operación de compuerta, la magnetización cambia de este valor a $\frac{1}{2\sqrt{2}}$, 0 y $-\frac{1}{2}$ para $\alpha = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$, y 1 respectivamente. El error inducido por el término DM, con amplitud $\beta_0 = 0.4$, cambia esta propiedad a los valores finales de 0.3315 para $\alpha = \frac{1}{4}$, -0.060 para $\alpha = \frac{1}{2}$, y -0.4854 para $\alpha = 1$. El error en esta propiedad también se corrige a los valores correctos, si se cambia el valor del inverso de la amplitud a λ_c .

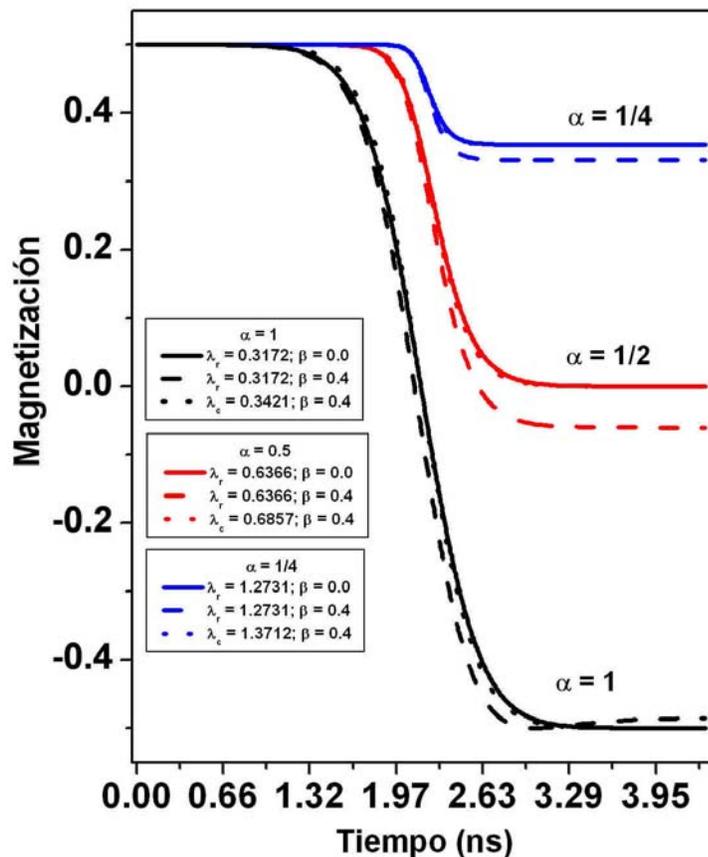


Figura 9: La evolución temporal para magnetización en el sitio 1, $\sigma_z(t)$, para valores de $\alpha = 1/2$, $1/4$, y 1. La figura tiene parámetros y condiciones definidas en la figura 8: (a) para cada caso se presenta una curva de referencia, λ_r y $\beta_0 = 0$, (b) al “encender” el término DM, $\beta_0 = 0.4$, con el mismo valor $\beta_0 = 0.4$, aparece un error en la operación, y (c) se calcula la curva corregida con λ_c y $\beta_0 = 0.4$.

Resultados de la concurrencia dependiente del tiempo se presentan en la figura 10. El estado inicial $|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$ es un estado completamente no entrelazado, con concurrencia $C=0$. Después de la operación de compuerta $(swap)^{1/2}$, el estado resultante es una combinación que produce un estado completamente entrelazado con concurrencia $C=1$. Para $\alpha = 1/4$, el estado final es un estado entrelazado parcialmente,

con concurrencia igual a $\frac{1}{\sqrt{2}}$. Para el caso $\alpha = 1$ el estado final $|\uparrow, \downarrow\rangle$ tiene concurrencia igual a cero. Al “encender” el término DM a $\beta_0 = 0.4$ podemos ver el mismo efecto descrito en las propiedades previas. Para $\alpha = 1/4$ y $\alpha = 1/2$ las concurrencias cambian a $C = 0.7485$ y $C = 0.992$. Un caso más interesante de esta propiedad se observa para $\alpha = 1$. Alrededor del punto $t = 2.96$ ns, donde la concurrencia alcanza el valor mínimo igual a cero, y posteriormente asciende nuevamente hasta un valor alrededor de 0.2. Esto puede ser explicado al considerar que la concurrencia es un valor absoluto y es definida por la ecuación (IV.29), y no puede tener valores negativos. El incremento súbito se debe al continuo efecto de la variable de intercambio dinámico $J(t)$, que hasta este punto solo ha actuado con el 86% de su fuerza. Al cambiar el área total del pulso, λ_c , se observa una corrección en los valores finales de esta propiedad.

En la figura 11, presentamos resultados numéricos para la dinámica de la fidelidad, tal como es determinada por la ecuación (IV.39). La fidelidad tiene un valor máximo de 1 para curva de referencia, λ_r . Al considerar al término DM distinto de cero, se puede observar una variación en el valor final con respecto a las curvas de referencia. Para $\alpha = 1/4$ el valor de la curva sería aproximadamente de $F = 0.9801$, $F = 0.9608$ para $\alpha = 1/2$ y para $\alpha = 1$, $F = 0.9854$. Después del esquema de corrección, con λ_r , se puede observar que la fidelidad no alcanza el máximo, sino que alcanza valores de $0.981 \sim 1 - \beta_0^2/8$ para $\alpha = 1/4$ y $0.964 \sim 1 - \beta_0^2/4$ para $\alpha = 1/2$. Esto muestra que para estos caso la aproximación (IV.37) es razonablemente válida. Después del esquema de corrección se presenta un incremento del 0.19% y de 0.31% en la fidelidad. Para $\alpha = 1$ la fidelidad si alcanza el máximo de $F = 1$. Esto se puede obtener debido que la matriz de densidad para $\alpha = 1$ no tiene elementos fuera de la diagonal, y por lo tanto las coherencias agregadas por la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$ es igual a cero. Se puede observar que para valores pequeños de α el valor inicial de la fidelidad se aproxima al valor máximo de 1. Este resultado implica que es necesario un pulso más rápido para generar la compuerta cuántica deseada.

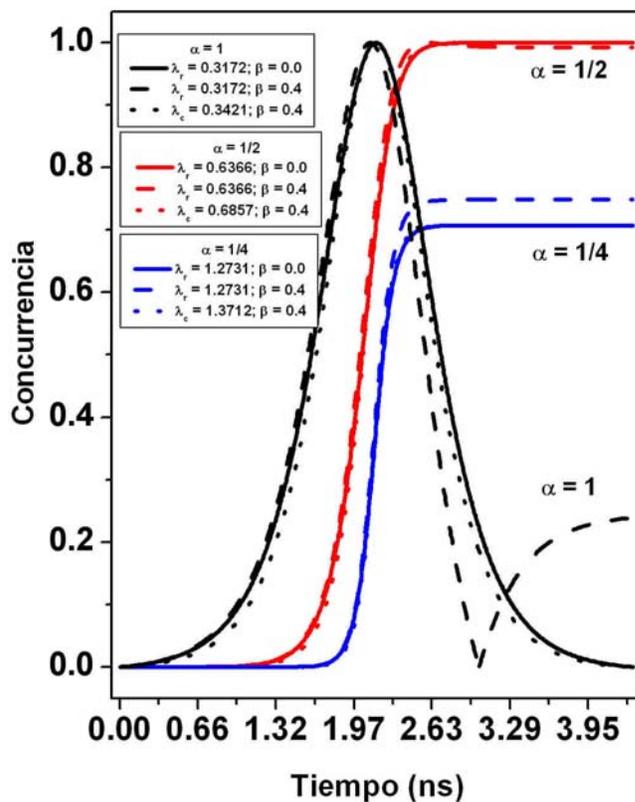


Figura 10: La evolución temporal de la concurrencia $C(t)$, para $\alpha = 1/2$, $1/4$, y 1 . La figura tiene parámetros y condiciones definidas en la figura 8: (a) para cada caso se presenta una curva de referencia, λ_r y $\beta_0 = 0$, (b) al “encender” el término DM, $\beta_0 = 0.4$, con el mismo valor $\beta_0 = 0.4$, aparece un error en la operación, y (c) se calcula la curva corregida con λ_c y $\beta_0 = 0.4$.

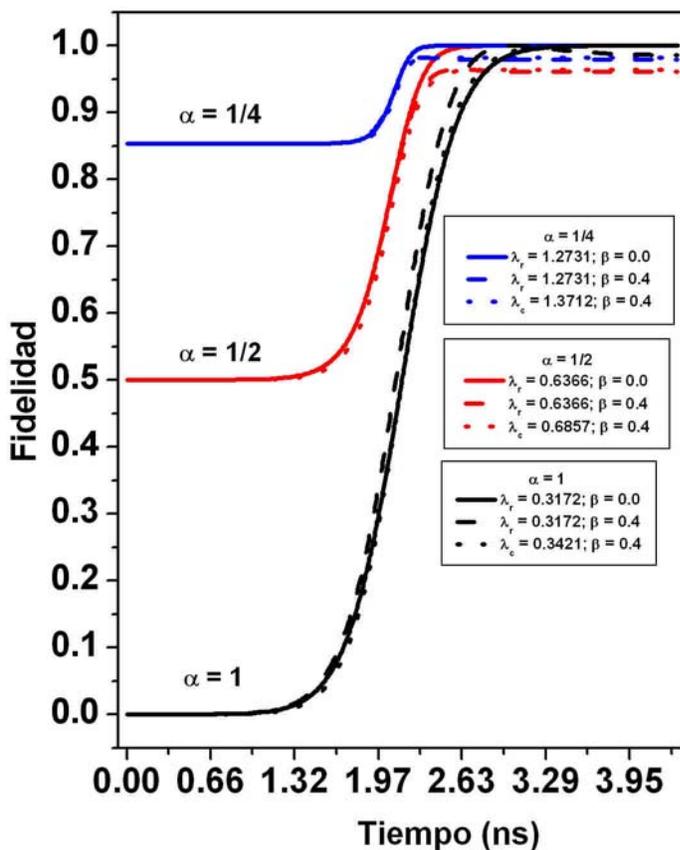


Figura 11. La evolución temporal de la fidelidad $F(t)$, para $\alpha = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, y 1. La figura tiene parámetros y condiciones definidas en la figura 8: (a) para cada caso se presenta una curva de referencia, λ_r y $\beta_0 = 0$, (b) al “encender” el término DM, $\beta_0 = 0.4$, con el mismo valor $\beta_0 = 0.4$, aparece un error en la operación, y (c) se calcula la curva corregida con λ_c y $\beta_0 = 0.4$.

Finalmente, en la figura 12 se presentan curvas que muestran el comportamiento de λ_c como función de la amplitud de DM, β_0 y se especifican en la condición (IV.45). Se presentan tres curvas para $\alpha = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, y 1 que ilustra como λ_c crece como una función de la amplitud β_0 . Para valores mayores de λ_c la forma de $J(t)$ debe ser más angosta, por lo que el área, $x(t)$, deber ser menor.

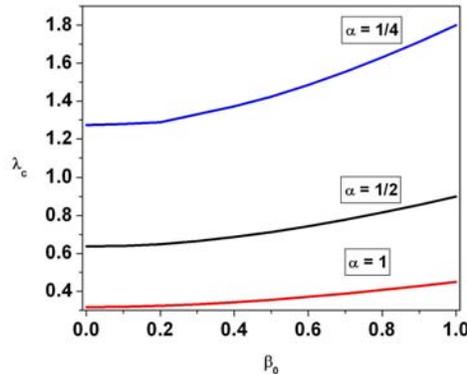


Figura 12: El parámetro de control, λ_c , el inverso de la amplitud del pulso, como función de la amplitud β_0 , bajo la condición del pulso (IV.40), para $\alpha = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, y 1. El parámetro λ_c puede ser ajustado a un comportamiento cuadrático con la amplitud β_0 .

Por lo tanto, para valores de α menores el pulso tiene que ser más rápido para producir la operación de compuerta deseada. La interacción DM tal como fue introducida en la ecuación (IV.41), modifica el valor de λ_c y con el área total $x(t)$ del pulso $J(t)$, lo cual se traduce un pulso más rápido (es decir λ_c mayor). Lo cual implica que para un valor mayor de la amplitud de término DM, β_0 , es necesario un pulso más rápido para incluir el efecto neto de dicho término en la operación de compuerta, considerando las limitaciones discutidas a través del texto. Estas curvas pueden ser ajustadas bastante bien con una dependencia cuadrática del término β_0 , específicamente de la forma $\lambda_c = \lambda_r + A_\alpha \beta_0^2$, donde las amplitudes para valor de α están dadas por $A_{1/4} = 0.53$, $A_{1/2} = 0.26$ y $A_1 = 0.13$. De tal forma que entre más pequeño sea el parámetro α , más rápido sea el crecimiento de λ_c mientras el término DM aumenta.

IV.3. Comentarios Finales

Hemos presentamos resultados analíticos y numéricos del efecto del término DM sobre la compuerta $(swap)^\alpha$. Se mostraron resultados que demuestran que a través la

elección adecuada de la forma del pulso de intercambio, $J(t)$, es posible inducir las probabilidades, concurrencia y magnetizaciones deseadas en los estados- α del sistema, sin embargo se demostró que las coherencias del sistema agregan un error a la dinámica del sistema el cual se refleja en los resultados de la fidelidad. Para valores pequeños de DM este error es proporcional a $C_\alpha^2 \beta_0^2 / 4$ que es modulada por la concurrencia del estado- α . Este error al parecer es intrínseco al sistema y no encontramos una relación que lleve la concurrencia a los valores deseados, y solo para $\alpha = 1$ fuimos capaz de reproducir un estado con fidelidad 1. Para otras condiciones de α y con valores de β_0 fuimos capaces de generar estados con fidelidad cercanas a 1. Calculamos la fidelidad para la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$, y se encontró que para todos excepto $\alpha = 1$ la fidelidad es distinta a 1 y es error incorregible.

También se han escrito resultados sobre la evolución temporal de la concurrencia del sistema. Se determinó que la expresión para la concurrencia y magnetización (IV.28), puede ser confirmada experimentalmente al considerar situaciones en donde al configuración experimental se encuentre en el subespacio $S_z = 0$, como aquellos presentados en los experimentos de Jonson y Petta [Jonson et al., 2005; Petta et al., 2005], y por mediciones de la magnetización en uno de los sitios, es posible determinar el valor de la concurrencia del estado- α . Consideramos que un experimento que realice estas mediciones es posible e interesante ya que la habilidad de medir la concurrencia (entrelazamiento), una propiedad cuántica, mediante una observable, presenta la habilidad de medir indirectamente uno de los recursos mas utilizados en los protocolos de información cuántica.

Presentamos una metodología para determinar la presencia del término DM en el sistema. Esta metodología es posible que no sea la más eficiente, en el mismo capítulo 4 se presentan algunas formas alternas quizás mas recomendables, sin embargo es un resultado encontrado de la manipulación de pulsos de intercambio.

Efecto de la interacción hiperfina en la compuerta (*swap*)^a

En el capítulo anterior discutimos el efecto del acoplamiento espín – órbita en el sistema de espines electrónicos acoplados, sin embargo, como se detallo en el capítulo 3 el sistema puede también acoplarse con los espines nucleares de la red vecina. Una suposición básica hecha en la literatura, es considerar el efecto de los espines nucleares sobre los electrónicos, como un campo magnético efectivo [Khaetskii et al., 2002; Mernulov et al., 2002]. Sin embargo un campo magnético de este tipo solo induce precesión y no la decoherencia observada en experimentos [Khaetskii et al., 2002; Mernulov et al., 2002]. Por lo tanto es necesario considerar al campo nuclear como un campo estocástico [Coish y Loss, 2005, Taylor et al., 2007]. Mas aún, la gran diferencia en los tiempos de relajación de los espines nucleares y electrónicos permite utilizar la aproximación quasi estática [Burkard et al., 1999; Khaetskii et al., 2002; Coish y Loss, 2004; Coish y Loss, 2005; Witzel et al., 2005; Yao et al., 2006; Deng y. Hu, 2006; Taylor et al., 2006]. El tiempo de relajación, nuclear, t_{nuc} , tiene una escala en el orden de segundo e inclusive minutos [Merkulov et al., 2002] T_2 , mientras que el de los electrones se encuentra entre 1 - 100 μ s [Kikkawa y Awschalom, 2001; Golovach et al., 2004]. Debe ser claro que para una configuración particular de espines nucleares el espín electrónico evoluciona de forma diferente en presencia de una configuración alterna del baño nuclear, por lo tanto, se considera que una descripción estadística representa eficientemente la evolución de los estados del sistema. La estadística de las propiedades que dependen de este baño se realizan sobre un número grande de realizaciones del baño nuclear, que varían de acuerdo alguna distribución estadística [Merkulov et al., 2002; Taylor et al., 2006], en particular utilizaremos una distribución Gaussiana, caracterizada por la varianza, σ , del campo hiperfino.

En este capítulo estudiamos el efecto del campo magnético nuclear sobre la operación de la compuerta (*swap*) ^{α} . Debido a la naturaleza estocástica del sistema presentamos resultados numéricos.

V.1. Modelo Básico para espines acoplados.

Como mencionamos, la diferencia de los tiempos de decaimiento entre los espines electrónicos y nucleares permite describir el sistema en la aproximación cuasi-estática, lo que implica que la descripción de cualquier propiedad del sistema se hace a través de un promedio estadístico de la distribución del campo magnético, ecuación (III.21), y de la variación del ahora campo magnético nuclear efectivo.

Consideremos al Hamiltoniano (III.23), que rescribimos aquí de nuevo,

$$H = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)_z \right] + \gamma_e \left[\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) + d\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 - \hat{S}_2) \right], \quad (\text{V.1})$$

con $\vec{B} = \vec{B}_{ext} + \frac{\vec{B}_{1,nuc} + \vec{B}_{2,nuc}}{2}$ y $d\vec{B} = \frac{\vec{B}_{1,nuc} - \vec{B}_{2,nuc}}{2}$ [Taylor et al., 2007], donde $\vec{B}_{1,nuc}$ y

$\vec{B}_{2,nuc}$ son el campo nuclear en el primer y segundo sitio.

En la base computacional podemos escribir a (V.1) como,

$$\begin{aligned} H &= H_{int} + H_{nuc} \\ &= \frac{J}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2(1+i\beta_0) & 0 \\ 0 & 2(1-i\beta_0) & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &\quad + \gamma_e \begin{pmatrix} 2B_z & \Theta^* + d\Theta^* & \Theta^* - d\Theta^* & 0 \\ \Theta + d\Theta & -2dB_z & 0 & \Theta^* - d\Theta^* \\ \Theta - d\Theta & 0 & 2dB_z & \Theta^* + d\Theta^* \\ 0 & \Theta - d\Theta & \Theta + d\Theta & -2B_z \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{V.2})$$

en donde H_{int} es el Hamiltoniano de intercambio, descrito en el capítulo IV, ecuacion (IV.1), H_{nuc} es el Hamiltoniano de interacción nuclear y de campo magnético externo y $\Theta = B_x + iB_y$ y $d\Theta = dB_x + idB_y$.

Consideremos un campo magnético externo finito a lo largo de z y con una energía de Zeeman asociado muy grande, tal que $B_z \gg B_{\text{nuc}}$, en donde los valores de estos son $B_z \approx 100$ mT y $B_{\text{nuc}} \approx 1$ a 5 mT [Petta et al., 2005], lo que implica que Θ y $d\Theta$ están muy separados de energía de B_z y dB_z y del resto del Hamiltoniano lo cual hace las

transiciones $|\uparrow, \uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow, \uparrow\rangle$ tengan probabilidades que no sean

relevantes..

lo que nos permite separar el sistema [Taylor et al., 2005] y la matriz (V.2) se puede reducir a,

$$H = \begin{pmatrix} \frac{J}{4} - \gamma_e B_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{J}{4} - \gamma_e dB_z & 2(1+i\beta_0)\frac{J}{4} & 0 \\ 0 & 2(1-i\beta_0)\frac{J}{4} & -\frac{J}{4} + \gamma_e dB_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J}{4} + \gamma_e B_z \end{pmatrix} \quad (\text{V.3})$$

donde las componentes perpendiculares de B y dB se encuentran separadas en energía del los elementos del Hamiltoniano (V.3). El Zeeman uniforme en la componente z asegura que el sistema satisface $[H, S_z] = 0$ [Taylor et al., 2005].

V.1.1. Propiedades del estado base con J constante.

Al resolver el eigensistema, con J constante, encontramos los siguientes valores y vectores propios,

$$\lambda_1 = \frac{J}{4} - \gamma_e B_z, \quad |v_1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle, \quad (\text{V.4})$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{4}[-J + 2\sqrt{\#}],$$

$$|v_2\rangle = \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{2}\sqrt{\#-2\gamma_e dB_z}\sqrt{\#}} \left[-\frac{2\gamma_e dB_z + \sqrt{\#}}{J^2(1-i\beta_0)} |\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right], \quad (\text{V.5})$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{4}[-J - 2\sqrt{\#}],$$

$$|v_3\rangle = \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{2}\sqrt{\#+2\gamma_e dB_z}\sqrt{\#}} \left[-\frac{2\gamma_e dB_z - \sqrt{\#}}{J^2(1-i\beta_0)} |\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right], \quad (\text{V.6})$$

$$\lambda_4 = \frac{J}{4} + \gamma_e B_z, \quad |v_4\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle, \quad (\text{V.7})$$

en donde el estado $|v_3\rangle$ (V.5) es el estado base y $\# = J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2$.

Utilizando las ecuaciones (II.77) y (II.59) podemos calcular la magnetización en sitio y concurrencia del estado base (V.5), y tenemos

$$\sigma_{1z} = \frac{\gamma_e dB_z}{\sqrt{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2}}, \quad (\text{V.8})$$

$$C = \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2}}, \quad (\text{V.9})$$

Al calcular el valor promedio de dichas propiedades, como promedio del campo nuclear

con ayuda de la ecuación, $\bar{F} = \int_{-\infty}^{\infty} F(dB_z)P(dB_z)d(dB_z)$, se obtiene

$$\bar{\sigma}_{1z} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_0^{\infty} \frac{\gamma_e dB_z e^{-\frac{(dB_z)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2}} d(dB_z), \quad (\text{V.10})$$

$$\bar{C} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_0^{\infty} \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2} e^{-\frac{(dB_z)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2}} d(dB_z). \quad (\text{V.11})$$

donde $\sigma^2 = \langle dB_z^2 \rangle$. La ecuación (V.10), es una función impar con dB_z y por lo tanto el promedio de la magnetización en sitio será cero, y el promedio de la concurrencia, ecuación (V.11), no puede ser calculada analíticamente, por lo tanto se calculan el promedio estadístico del cuadrado de estas propiedades,

$$\begin{aligned}
\overline{\sigma_{1z}^2} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_0^\infty \frac{(\gamma_e dB_z)^2 e^{-\frac{(dB_z)^2}{2\sigma^2}}}{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2} d(dB_z) \\
&= \frac{1}{4} \left\{ 1 - \sqrt{\pi} \frac{\sqrt{J^2(1+\beta_0^2)}}{\sqrt{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} e^{-\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{J^2(1+\beta_0^2)}}{\sqrt{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \right) \right\},
\end{aligned} \tag{V.12}$$

y

$$\begin{aligned}
\overline{C^2} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_0^\infty \frac{J^2(1+\beta_0^2) e^{-\frac{(dB_z)^2}{2\sigma^2}}}{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2} d(dB_z) \\
&= \sqrt{\pi} \frac{\sqrt{J^2(1+\beta_0^2)}}{\sqrt{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} e^{-\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{J^2(1+\beta_0^2)}}{\sqrt{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \right),
\end{aligned} \tag{V.13}$$

en donde la función $\operatorname{erf}(x)$ es la función error y se define como $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$. Las

ecuaciones (V.12) y (V.13) satisfacen (IV.22), es decir, $C^2 + 4\sigma_{1z}^2 = 1$. A la propiedad C^2 se le conoce también como “tangle” y es utilizada para medir el grado de entrelazamiento para sistemas tripartitos

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_0^\infty \frac{J^2(1+\beta_0^2) e^{-\frac{(dB_z)^2}{2\sigma^2}}}{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2} d(dB_z) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_0^\infty \frac{(2\gamma_e dB_z)^2 e^{-\frac{(dB_z)^2}{2\sigma^2}}}{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2} d(dB_z) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_0^\infty \frac{[J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2] e^{-\frac{(dB_z)^2}{2\sigma^2}}}{J^2(1+\beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2} d(dB_z) = 1.
\end{aligned} \tag{V.14}$$

Consideremos el comportamiento de los límites asintóticos de las ecuaciones (V.12) y

(V.13). Primero consideremos el límite en donde $\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2} \rightarrow \infty$ que implica $\sigma \rightarrow 0$ o

$\beta_0 \rightarrow \infty$. Bajo este límite tenemos

$$\begin{aligned}\overline{C^2} &\approx \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} e^{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}{J^2(1+\beta_0^2)}} e^{-\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \left[1 - \frac{\sigma^2(2\gamma_2)^2}{J^2(1+\beta_0^2)} \right] \\ &= 1 - \frac{\sigma^2(2\gamma_2)^2}{J^2(1+\beta_0^2)}\end{aligned}\quad (\text{V.15})$$

y

$$\begin{aligned}\overline{\sigma_{1z}^2} &\approx \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{\pi}}{4} \sqrt{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} e^{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}{J^2(1+\beta_0^2)}} e^{-\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \left[1 - \frac{\sigma^2(2\gamma_2)^2}{J^2(1+\beta_0^2)} \right] \\ &= \frac{\sigma^2(2\gamma_2)^2}{4J^2(1+\beta_0^2)}\end{aligned}\quad (\text{V.16})$$

cuyo resultado esta de acuerdo con los resultados numéricos de la figura 13 (curva sólida-negra) es cuadrática con la fluctuación. Al considerar el límite inverso $\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2} \rightarrow 0$

que implica $\sigma \rightarrow \infty$ o $\beta_0 \rightarrow 0$, se tiene

$$\overline{C^2} \approx \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} e^{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} = \frac{J^2(1+\beta_0^2)}{\sigma^2(2\gamma_e)^2}, \quad (\text{V.17})$$

que muestra un decaimiento cuadrático con la varianza.

$$\overline{\sigma_{1z}^2} \approx \frac{1}{4} \left\{ 1 - \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} e^{\frac{J^2(1+\beta_0^2)}{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2\sigma^2(2\gamma_e)^2}{J^2(1+\beta_0^2)}} \right\} = \frac{1}{4} \left\{ 1 - \frac{J^2(1+\beta_0^2)}{\sigma^2(2\gamma_e)^2} \right\}, \quad (\text{V.18})$$

que llega a un valor asiático de $\frac{1}{4}$ los resultados de igual forma se pueden verificar en las curvas numéricas.

Las figuras 13 (a) y 13 (b) presentan respectivamente resultados numéricos de $\overline{C^2}$ y $4\overline{\sigma_{1z}^2}$, como función de la amplitud del término DM, para valores del varianza del campo nuclear de $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT, y se observa de las figuras y de la ecuaciones (V.15) y (V.16) que el valor de estas propiedades, para valores grandes de β_0 dependen inversamente del valor de β_0 . Mientras que para valores pequeños de β_0 las ecuaciones

(V.17) y (V.18) Muestran que la concurrencia aumentara como función del término D, mientras que la magnetización disminuirá.

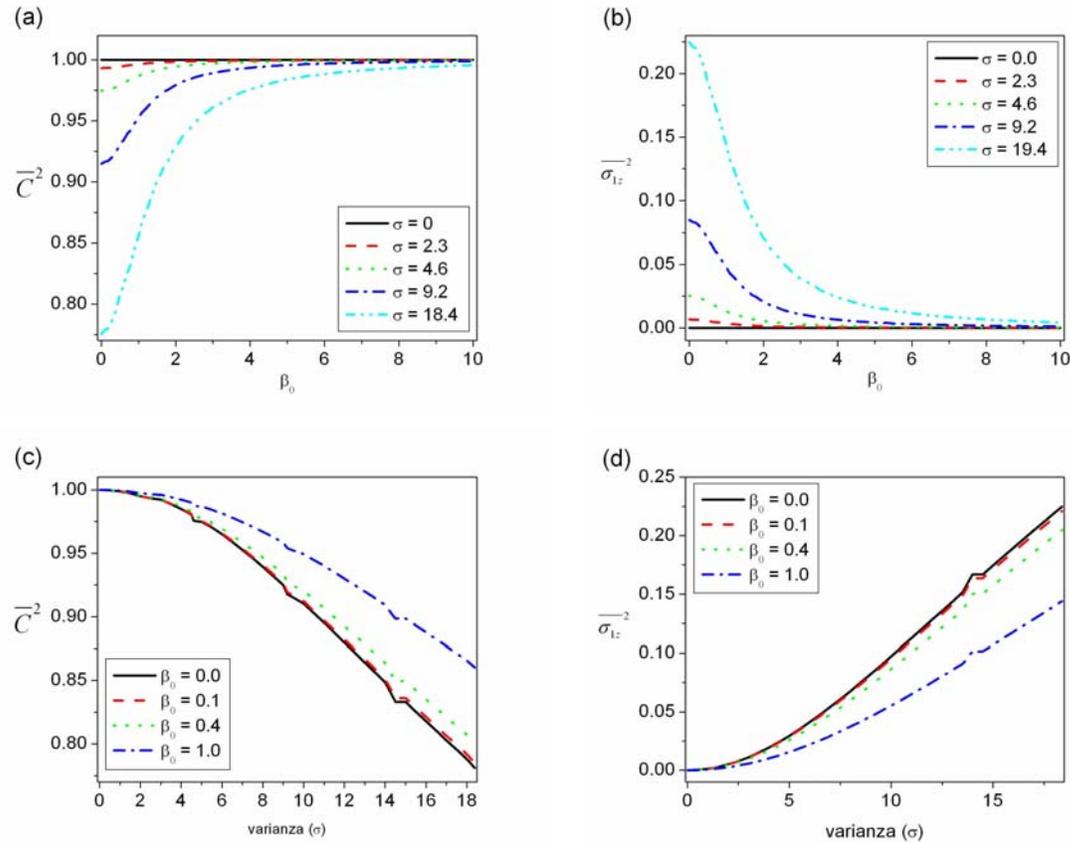


Figura 13: Promedio estadístico de la concurrencia y magnetización de espín 1. En (a) y (b) se muestran dichas propiedades respectivamente como función del término DM, β_0 , para valores de varianza, $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2, 18.4$. En (c) y (d) se muestran las mismas propiedades como función de la varianza para varios valores del término DM, $\beta_0 = 0, 0.1, 0.4$ y 1.0 .

Las figuras 13 (c) y 13 (d) se presentan resultados de las mismas propiedades con respecto a la varianza del campo nuclear, σ , para valores del término DM de, $\beta_0 = 0, 0.1, 0.4$ y 1.0 , que en donde estos valores en gran parte están sustentados por las referencias [Kavokin, 2001; Sucismita et al., 2006] y de la figura y de las relaciones (V.17) y (V.18) que para valores grandes de σ la concurrencia disminuye como función de la varianza, mientras que la magnetización aumenta de la misma manera hasta un valor asintótico de $\frac{1}{4}$. Mientras que para valores pequeños de σ la concurrencia aumentará a medida que σ

disminuye y la magnetización disminuirá. Ya que estas propiedades satisfacen la ecuación (IV.4) ambas son completarias y tendrán un comportamiento recíproco. Es claro de las ecuaciones (V.8) y (V.9) que el estado base en ausencia de campo hiperfino tendrán valores estacionarios de 0 para la magnetización y de 1 para la concurrencia.

El campo hiperfino, tiene como efecto inmediato, modificar los valores de la concurrencia y de la magnetización para valores pequeños del término DM, β_0 y de la varianza, σ . El valor de la magnetización para valores pequeños de σ aumenta mientras que el de la concurrencia disminuye.

También incluimos variaciones del término DM y se nota que ambas propiedades sufren cambio, la magnetización disminuye y la concurrencia aumenta. Al parecer el término DM presenta un efecto restaurador en presencia del campo hiperfino, por lo que podría ser utilizado como elemento generador de entrelazamiento.

V.2. Efecto del campo hiperfino en la operación compuerta (*swap*) ^{α} en el modelo de intercambio dinámico $J(t)$.

En el capítulo anterior se presentaron resultados para el Hamiltoniano de intercambio (IV.3) en el contexto de producción de la compuerta (*swap*) ^{α} . Este Hamiltoniano incluye a la interacción DM. Ahora consideramos el caso donde la interacción de intercambio, $J(t)$, como una variable dinámica.

Se demostró que la interacción DM agrega error en la operación de compuerta, y bajo manipulación del pulso de intercambio (IV.42), $J(t)$, es posible eliminar el error agregado por el término DM en algunas de las propiedades utilizadas para evaluar la operación. Por lo que es natural preguntarnos la capacidad del siguiente Hamiltoniano para producir la compuerta (*swap*) ^{α} ,

$$H(t) = J(t) \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)_{S_z=0} \right] + \gamma_e \left[\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) \Big|_{S_z=0} + d\vec{B} \cdot (\hat{S}_1 - \hat{S}_2) \Big|_{S_z=0} \right], \quad (\text{V.19})$$

el cual incluye ahora el acoplamiento al campo nuclear mediante la interacción hiperfina.

La expresión (V.19) puede expresarse en la base computacional como,

$$H(t) = \begin{pmatrix} \frac{J(t)}{4} - \gamma_e B_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{J(t)}{4} - \gamma_e dB_z & 2(1+i\beta_0)\frac{J(t)}{4} & 0 \\ 0 & 2(1-i\beta_0)\frac{J(t)}{4} & -\frac{J(t)}{4} + \gamma_e dB_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J(t)}{4} + \gamma_e B_z \end{pmatrix}. \quad (\text{V.20})$$

Por lo tanto el objetivo de este capítulo es evaluar el efecto que tiene la interacción hiperfina sobre la operación en la compuerta, y como compete con la interacción DM.

Suponemos las mismas condiciones de pulso como las que se presentaron en el capítulo anterior y evaluamos los errores inducidos por la presencia del campo magnético hiperfino mediante el parámetro σ .

La naturaleza estocástica del campo hiperfino hace difícil obtener expresiones analíticas de las propiedades mencionadas, por lo que los resultados en esta sección serán enteramente numéricos.

V.2.1. Resultados

Haremos uso de la ecuación (IV.62) para generar el pulso de la variable de intercambio, que escribimos nuevamente,

$$J(t) = J_0 \operatorname{sech}[2\lambda(t - t_0)]. \quad (\text{V.21})$$

Con el propósito de evaluar el efecto de la interacción hiperfina en la operación de compuerta (*swap*) ^{α} utilizaremos los mismos parámetros α , λ y β_0 , y evaluamos el efecto de la interacción hiperfina modificando el valor de la varianza del campo entre los valores $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT y calculamos la evolución dinámica de las probabilidades de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$, la magnetización del espín uno, la concurrencia del sistema, y la fidelidad de la operación de compuerta.

A continuación presentamos resultados numéricos para las probabilidades de ocupación, magnetización en sitio, concurrencia y fidelidad. Para cada una de estas propiedades, separaremos los resultados en los grupos que se presentan la tabla III en

grupos. El grupo A muestra para cada valor de α el valor de λ_r tal que asegura una operación de compuerta exitosa, $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$. En el grupo B, se presentan los mismo valores de λ_r pero ahora con $\beta_0 = 0.4$ y por ultimo en el grupo C se presentan los valores pulso corregido λ_c , con $\beta_0 = 0.4$, tal que satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$.

Tabla III. Parámetros de pulso utilizado en los cálculos numéricos. Para el grupo A, se presentan para cada α , valores de λ_r que satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi$ con $\beta_0 = 0$. Mientras que para el grupo B se presenta para cada valor de α el mismo valor de λ_r que en el grupo A pero ahora con $\beta_0 = 0.4$. En el grupo C se presenta, para cada valor α , la corrección de λ_c utilizando el esquema de pulsos de tal forma que $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$ con $\beta_0 = 0.4$.

	α	λ	$x(t_{\max})$	β_0
Grupo A	$\frac{1}{4}$	$\lambda_r = 1.2731$	$\alpha\pi$	0
	$\frac{1}{2}$	$\lambda_r = 0.6366$	$\alpha\pi$	0
	1	$\lambda_r = 0.3172$	$\alpha\pi$	0
Grupo B	$\frac{1}{4}$	$\lambda_r = 1.2731$	$\alpha\pi$	0.4
	$\frac{1}{2}$	$\lambda_r = 0.6366$	$\alpha\pi$	0.4
	1	$\lambda_r = 0.3172$	$\alpha\pi$	0.4
Grupo C	$\frac{1}{4}$	$\lambda_c = 1.3712$	$\alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$	0.4
	$\frac{1}{2}$	$\lambda_c = 0.6857$	$\alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$	0.4
	1	$\lambda_c = 0.3421$	$\alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$	0.4

V.2.1.1 Probabilidades de ocupación

V.2.1.1.1 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$

En la figura 14, presentamos curvas de probabilidad para los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ para los valores del grupo A de la tabla III.

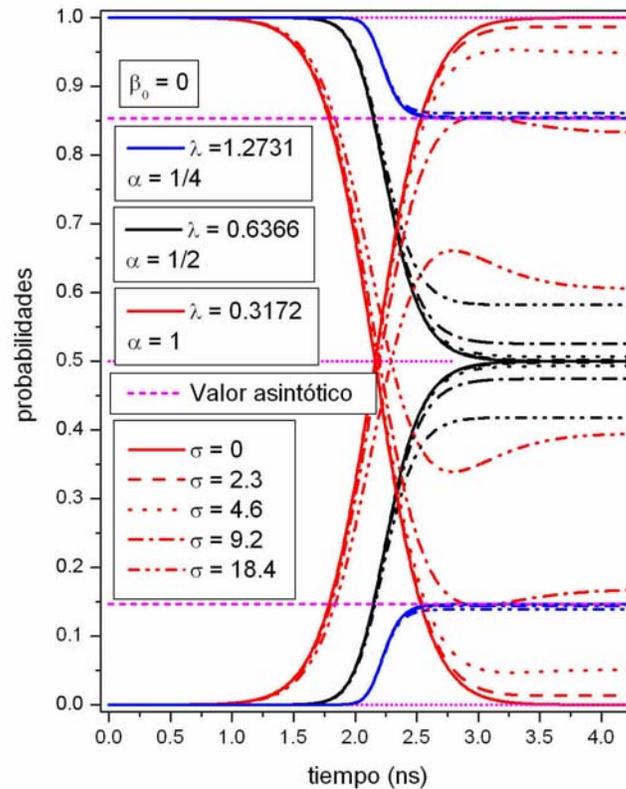


Figura 14: Probabilidad de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ como función del tiempo. Se presentan tres series de curvas para tres valores de $\alpha = 1/4, 1/2$ y 1 . El valor del término DM es igual a $\beta_0 = 0$. Se asegura que los valores de λ , para el pulso $J(t)$, para los tres valores son los ideales para producir la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$, es decir, $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, Grupo A. Se muestran curvas del efecto del campo hiperfino a través de cuatro valores de la varianza del campo nuclear $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

Las curvas para $\alpha = 1/4$ son las curvas azules, para $\alpha = 1/2$ son las curvas negras y para $\alpha = 1$, las curvas rojas. Las curvas sólidas aseguran que en ausencia de campo hiperfino una operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$ satisfactoria, es decir $x(t) = \alpha\pi$. Con el propósito de observar el efecto de campo hiperfino en la operación de compuerta incluimos 4 curvas adicionales en donde la varianza del campo hiperfino, σ , serán respectivamente de 2.3 mT (línea rayada), 4.6 mT (línea punteada), 9.2 (línea raya - punto) y 18.4 mT (línea continua - punto - punto).

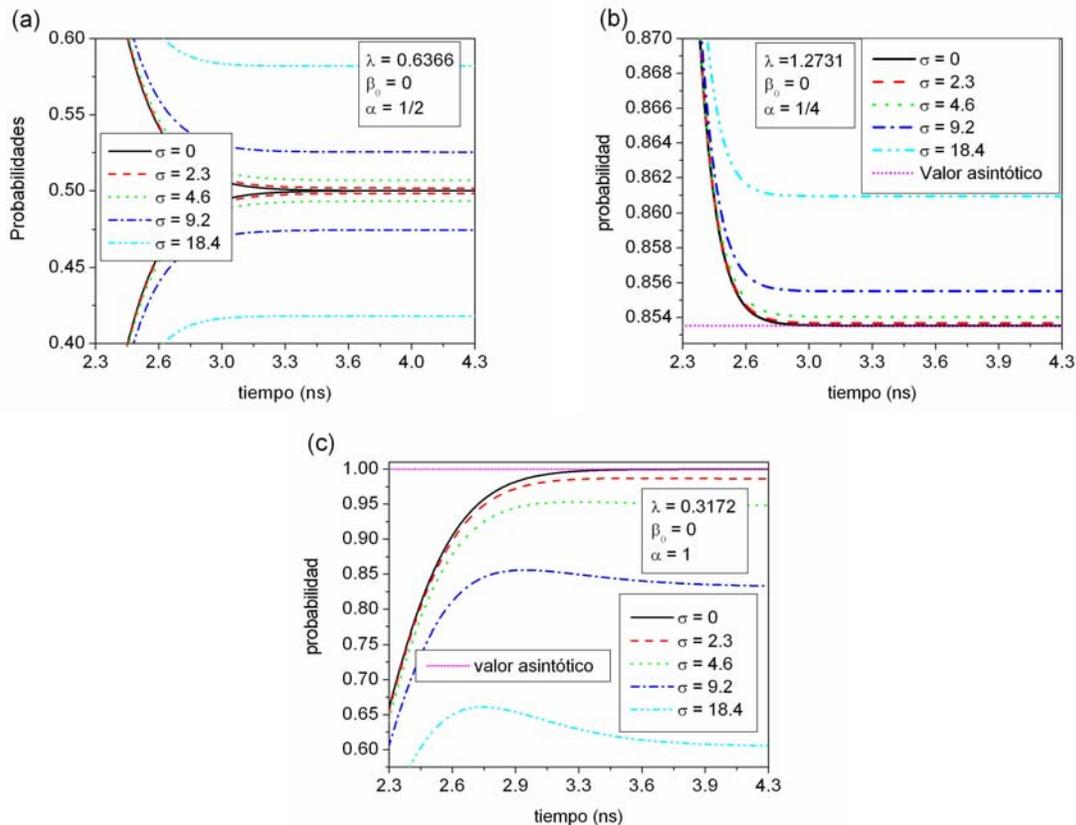


Figura 15: Probabilidades asintóticas. (a) Para $\alpha = \frac{1}{2}$ de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ con $\lambda = 0.6366$. (b) Para $\alpha = \frac{1}{4}$ el estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ con $\lambda = 1.2731$. (c) Para $\alpha = 1$ para el estado $|\uparrow, \downarrow\rangle$ con $\lambda = 0.3172$. Para las figuras (b) y (c) las probabilidades finales del estado $|\downarrow, \uparrow\rangle$ no se presentan aquí ya presentan variaciones iguales a las mostradas.

En la figura 15 se presenta la región asintótica de las probabilidades en el rango de 2.3 ps y 4.3 ns, y se observa que el campo hiperfino para las curvas de $\alpha = \frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$ y 1, figuras 15 (a), (b) y (c) respectivamente, tiene como efecto agregar un error en las probabilidades asintóticas, que crecen al aumentar la varianza del campo nuclear, σ . Cualitativamente, se observa que el error, con respecto al mismo valor σ , aumenta al incrementar α , y quizás este error sea corregible por medio de un esquema de pulsos. Con el propósito de evaluar mejor el error asociado al campo nuclear, en la Tabla IV presentamos las probabilidades finales de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ de la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$, para las condiciones mencionadas de pulso que asegura una operación exitosa, con $\beta_0 = 0$, para cada uno de los valores de α . También se incluye el

error agregado por la interacción hiperfina, el cual se calcula con respecto a la probabilidad final del sistema, en ausencia de campo hiperfino, $\sigma = 0$. Se observa que el error aumenta como función de la varianza del campo nuclear, σ y más aun como función de α . Es claro que a medida que el valor de α aumenta el error de la interacción hiperfina se vuelve más apreciable.

Tabla IV. Valores asintóticos de las probabilidades de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ en la operación de compuerta ($swap$) $^\alpha$, para $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT del campo nuclear. Los resultados se presentan para: $\lambda = 1.2731$ para $\alpha = \frac{1}{4}$, $\lambda = 0.6366$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ y $\lambda = 0.3172$ para $\alpha = 1$ con $\beta_0 = 0$, que corresponden al grupo A. Las condiciones del pulso dadas aseguran una operación exitosa con $\sigma = 0$.

$\beta_0 = 0$		$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^\alpha$	$ \Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} $	% de error	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle}^\alpha$	$ \Delta P_{ \downarrow, \uparrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} $	% de error
$\alpha = \frac{1}{4}$	$\sigma = 0$	0.85352295	0	0	0.14647705	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.85364948	0.00012653	0.015 %	0.14635052	0.00012653	0.015 %
	$\sigma = 4.6$	0.85402678	0.00050383	0.059 %	0.14597322	0.00050383	0.059 %
	$\sigma = 9.2$	0.85550284	0.00197989	0.231 %	0.14449716	0.00197989	0.231 %
	$\sigma = 18.4$	0.86093316	0.00741021	0.868 %	0.13906684	0.00741021	0.868 %
$\alpha = \frac{1}{2}$	$\sigma = 0$	0.5	0	0	0.5	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.50171059	0.00171059	0.342 %	0.49828941	0.00171059	0.342 %
	$\sigma = 4.6$	0.50677985	0.00677985	1.356 %	0.49322015	0.00677985	1.356 %
	$\sigma = 9.2$	0.52542506	0.02542506	5.085 %	0.47457494	0.02542506	5.085 %
	$\sigma = 18.4$	0.58191944	0.08191944	16.38 %	0.41808056	0.08191944	16.38 %
$\alpha = 1$	$\sigma = 0$	0	0	0	1	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.01370853	0.01370853	1.371 %	0.98629147	0.01370853	1.371 %
	$\sigma = 4.6$	0.05152995	0.05152995	5.153 %	0.94847004	0.05152995	5.153 %
	$\sigma = 9.2$	0.16717518	0.16717518	16.175 %	0.83282482	0.16717518	16.17 %
	$\sigma = 18.4$	0.39444211	0.39444211	39.44 %	0.60555789	0.39444211	39.44 %

En la figura 16 presentamos curvas del error con respecto a la varianza, σ .

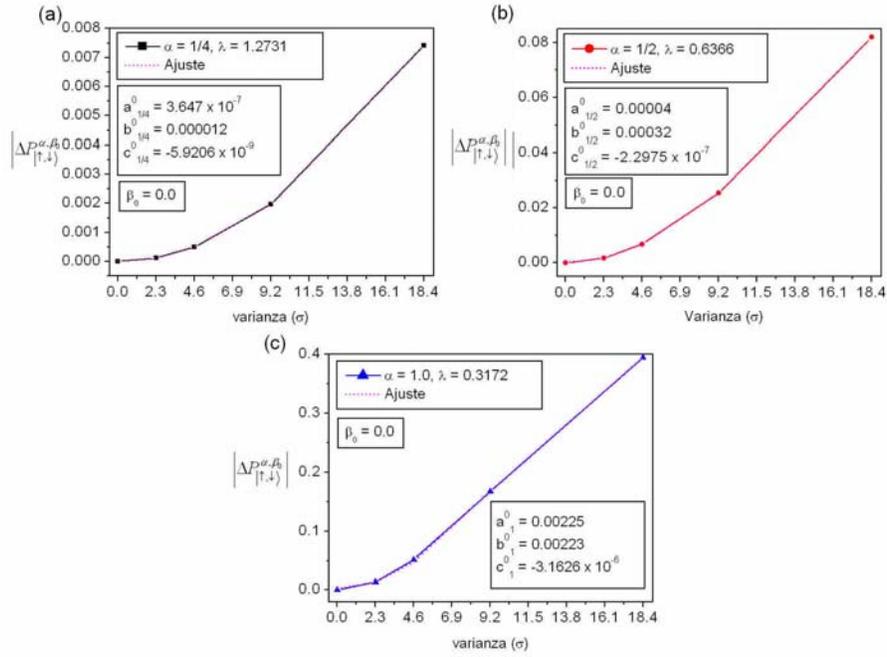


Figura 16: Curvas de error, $\Delta P_{|\uparrow, \downarrow}^{\alpha, \beta_0}$ de las probabilidades como función de σ para los valores presentados en la tabla III. Los valores del error $|\Delta P_{|\uparrow, \downarrow}^{\alpha, \beta_0}|$ pueden ajustarse adecuadamente con una curva de la forma $\Delta P_{|\uparrow, \downarrow}^{\alpha, \beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^4$, en la figura (a) se presenta la curva para $\alpha = 1/4$, en (b) para $\alpha = 1/2$ y en (c) para $\alpha = 1$. Los parámetros de ajuste se incluyen en cada figura.

El error al ajustarlo presenta una relación con σ de la forma $\Delta P_{|\uparrow, \downarrow}^{\alpha, \beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^4$, para $\alpha = 1/4$, figura 16 (a), los valores de ajuste son: $a_{1/4}^0 = 3.647 \times 10^{-7} \pm 3.359 \times 10^{-9}$, $b_{1/4}^0 = 1.2 \times 10^{-5} \pm 9.92 \times 10^{-9}$ y $c_{1/4}^0 = -5.9206 \times 10^{-9} \pm 2.81 \times 10^{-11}$; para $\alpha = 1/2$, figura 16 (b), los valores serán: $a_{1/2}^0 = 4 \times 10^{-5} \pm 4 \times 10^{-7}$, $b_{1/2}^0 = 3.2 \times 10^{-4} \pm 1.285 \times 10^{-6}$ y $c_{1/2}^0 = -2.2975 \times 10^{-7} \pm -2.297 \times 10^{-9}$; para $\alpha = 1$, figura 16 (c), tenemos que: $a_1^0 = 2.25 \times 10^{-3} \pm 2.03 \times 10^{-5}$, $b_1^0 = 2.23 \times 10^{-3} \pm 6 \times 10^{-7}$ y $c_{1/4}^0 = -3.1626 \times 10^{-6} \pm 6.701 \times 10^{-7}$. Es interesante observar que el error en la probabilidad de ocupación aumenta de forma cuadrada con respecto a la varianza del campo hiperfino. Para evaluar adecuadamente el efecto del campo hiperfino es necesario considerar el efecto de este en error a la operación de compuerta que muestra

que a medida que el valor de α aumenta incrementa el valor de $a_\alpha^{\beta_0}$, $b_\alpha^{\beta_0}$ y $c_\alpha^{\beta_0}$ indicando que el error aumenta de manera mas drastica para valores mayores de α .

V.2.1.1.2 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0.4$

En la figura 17 se “enciende” el término DM con $\beta_0 = 0.4$, para las mismas condiciones del grupo B. Las curvas azules corresponden a $\alpha = \frac{1}{4}$, para $\alpha = \frac{1}{2}$ las curvas negras y para $\alpha = 1$ las curvas negras.

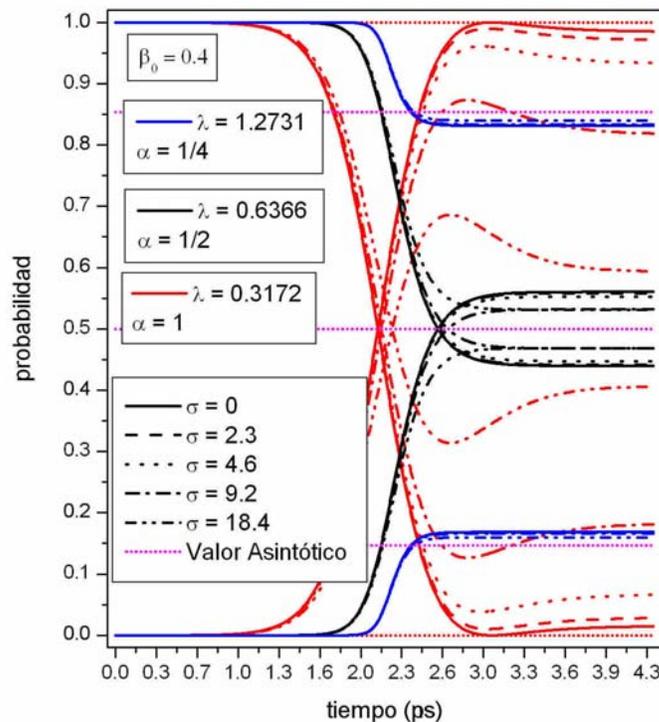


Figura 17: Probabilidades de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ en las mismas condiciones del pulso y σ que la figura 14, pero con la interacción DM $\beta_0 = 0.4$, para grupo B. Se observa que el término DM agrega una desviación del valor asintótico que unido con el del campo hiperfino genera un error corregible.

Presentamos varias curvas para cada valor de α en donde se varia σ , como lo hicimos en la subsección anterior. Las curvas se comportan similarmente a las presentadas en la figura 14, lo cual que indica que el proceso de modificación del pulso, presentado en el capítulo anterior es eficiente aún en presencia del campo hiperfino.

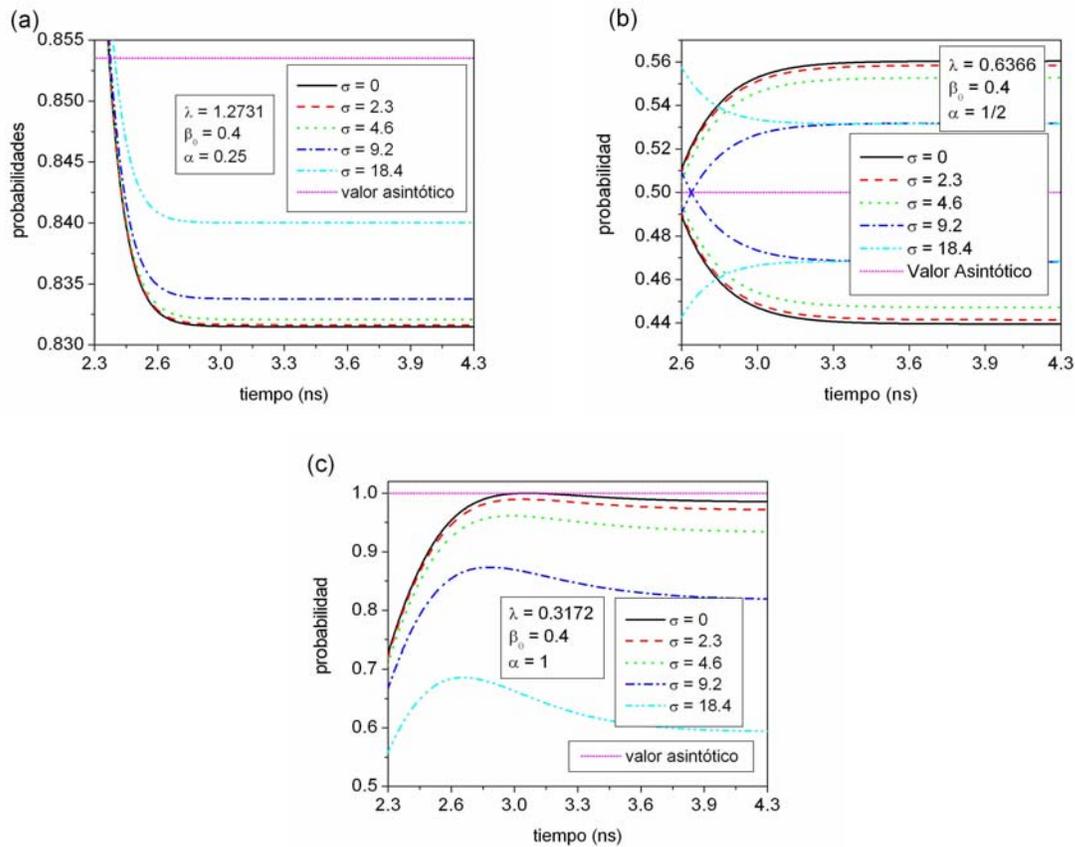


Figura 18: Las probabilidad asintóticas de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ de la figura 14 en el intervalo de tiempo 2.3 a 4.3 ns. (a) Para $\alpha = \frac{1}{4}$ y para (c) $\alpha = 1$ se muestra solo la probabilidad del estado $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y (b) Para $\alpha = \frac{1}{2}$ se muestran ambos estados.

En la figura 18 presentamos las curvas asintóticas de las probabilidad para $\alpha = \frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$ y 1. Observamos, para $\alpha = \frac{1}{4}$ y $\frac{1}{2}$, que el error agregado por la interacción DM disminuye a medida que aumenta el valor de la varianza, σ , del campo nuclear. En particular, para $\alpha = \frac{1}{2}$ se observa la probabilidad del estado $|\uparrow, \downarrow\rangle$ aumenta a medida que σ se incrementa mientras que la probabilidad del estado $|\downarrow, \uparrow\rangle$ disminuye, hasta que las probabilidades son tales que dichas curvas no se crucen, tal como lo hacen para valores

de $\sigma = 0$ a 9.2 mT. Este comportamiento nos hace pensar, que para combinaciones adecuadas de β_0 y σ , el error inducido por la interacción hiperfina y el término, $\left| \Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} \right|$, puede ser corregido.

Tabla V. Valores asintóticos de las probabilidades para las mismas condiciones de la Tabla IV excepto que el valor del término DM es aquí de $|\uparrow, \downarrow\rangle$. En gris se muestran los valores correctos de las probabilidades para una operación de compuerta, $(\text{swap})^\alpha$ exitosa, $x(t_{\max}) = \alpha\pi$.

$\beta_0 = 0.4$		$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^\alpha$	$\left \Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} \right $	% de error	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle}^\alpha$	$\left \Delta P_{ \downarrow, \uparrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} \right $	% de error
$\alpha = \frac{1}{4}$	$\sigma = 0$	Curva de referencia (asegura las probabilidades correctas de la compuerta)					
		0.85352295	0	0	0.14647705	0	0
	$\sigma = 0$	0.83149432	0.02202863	2.581 %	0.16850568	0.02202863	2.581 %
	$\sigma = 2.3$	0.83163993	0.02188302	2.564 %	0.16836007	0.02188302	2.564 %
	$\sigma = 4.6$	0.83207412	0.02144883	2.513 %	0.16792588	0.02144883	2.513 %
	$\sigma = 9.2$	0.83377272	0.01975023	2.314 %	0.16622728	0.01975023	2.314 %
	$\sigma = 18.4$	0.84002164	0.01250131	1.582 %	0.15997836	0.01250131	1.582 %
$\alpha = \frac{1}{2}$	$\sigma = 0$	Curva de referencia (asegura las probabilidades correctas de la compuerta)					
		0.5	0	0	0.5	0	0
	$\sigma = 0$	0.43962481	0.06037519	12.08 %	0.56037519	0.06037519	12.08 %
	$\sigma = 2.3$	0.44156693	0.05843307	11.69 %	0.55843307	0.05843307	11.69 %
	$\sigma = 4.6$	0.44725631	0.05274369	10.55 %	0.55274369	0.05274369	10.55 %
	$\sigma = 9.2$	0.46818063	0.03181937	6.364 %	0.53181937	0.03181937	6.364 %
	$\sigma = 18.4$	0.53156473	0.03156473	6.313 %	0.46843527	0.03156473	6.313 %
$\alpha = 1$	$\sigma = 0$	Curva de referencia (asegura las probabilidades correctas de la compuerta)					
		0	0	0	1	0	0
	$\sigma = 0$	0.01457064	0.01457064	1.457 %	0.98542935	0.01457064	1.457 %
	$\sigma = 2.3$	0.02825871	0.02825871	2.826 %	0.97174129	0.02825871	2.826 %
	$\sigma = 4.6$	0.06598595	0.06598595	6.598 %	0.93401405	0.06598595	6.598 %
	$\sigma = 9.2$	0.18101866	0.18101866	18.10 %	0.81898134	0.18101866	18.10 %
	$\sigma = 18.4$	0.40586015	0.40586015	40.06 %	0.59413985	0.40586015	40.06 %

Con el propósito de evaluar el error presentamos los valores finales de las probabilidades en la Tabla V, presentamos las probabilidades finales de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$, pero con $\beta_0 = 0.4$ y para los valores de α presentados en la figura 17. Además se incluye el error agregado por la interacción hiperfina, $\left| \Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} \right|$. Este error se calcula con respecto a la probabilidad final del sistema en ausencia de campo hiperfino, $\sigma = 0$ y con $\beta_0 = 0$, presentado en gris en la tabla. Al comparar los errores con aquellos de la tabla III se observa una pequeña disminución en el error en la operación de compuerta..

Para $\alpha = 1/4$, de los se observa el error en la operación de compuerta disminuye como función de la varianza del campo hiperfino. Si realizamos una extrapolación lineal, $P = P_0 + m\sigma$, se determina que la probabilidad alcanza el valor asintótico de $P_0 = 0.85352295$, para un valor de $\sigma = 38.8$ mT. Para $\alpha = 1/2$, en la figura 18 (b), se observa que el error disminuye como función de la varianza, desde $\sigma = 0, 2.3, 4.6$ y 9.2 mT. Sin embargo, para $\sigma = 18.4$ mT el error aumenta de nuevo. Al realizar una interpolación lineal $P = P_0 + m\sigma$ muestra que para un valor de $\sigma = 13.82$ mT la probabilidad alcanza el valor asintótico de $P_0 = 0.5$. Para $\alpha = 1$, se observa que el error aumenta a medida que aumenta la varianza. En general la varianza tiene como efecto el reducir la probabilidad final del estado $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y aumenta aquella del estado $|\downarrow, \uparrow\rangle$.

El campo hiperfino, es un campo magnético estocástico, pero su presencia genera polarización en los estados electrónicos, y es esta polarización lo que causa el error en la operación de compuerta,

La figura 19 muestra, para $\beta_0 = 0.4$ y para los valores $\lambda = 1.2731$ para $\alpha = 1/4$, $\lambda = 0.6366$ para $\alpha = 1/2$ y $\lambda = 0.3172$ para $\alpha = 1$, el error en la operación de compuerta, $\left| \Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} \right|$, presentado en la tabla V, como función de la varianza. A estos valores se les ajusta muy bien una curva descrita por $\Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^4$. Los parámetros de ajuste son: para $\alpha = 1/4$, $a_{1/4}^{0.4} = 0.02203 \pm 5.247 \times 10^{-8}$, $b_{1/4}^{0.4} = -3.6 \times 10^{-6} \pm 1.55 \times 10^{-12}$ y $c_{1/4}^{0.4} = 8.942 \times 10^{-10} \pm 4.39 \times 10^{-12}$; para $\alpha = 1/2$, $a_{1/2}^{0.4} = 0.06036 \pm 1 \times 10^{-5}$, $b_{1/2}^{0.4} = -4 \times 10^{-5}$

$\pm 3.5 \times 10^{-7}$ y $c_{1/2}^{0.4} = 8.942 \times 10^{-10} \pm 4.39 \times 10^{-12}$; para $\alpha = 1$, $a_1^{0.4} = 0.0146 \pm 2 \times 10^{-5}$, $b_1^{0.4} = -8.5483 \times 10^{-6} \pm 6.97 \times 10^{-7}$ y $c_1^{0.4} = -2.4941 \times 10^{-9} \pm 1.97 \times 10^{-9}$. Observamos que el error en la operación de compuerta disminuye como función de la varianza, σ y se refleja en el signo del término cuadrático, $b_\alpha^{\beta_0}$.

La figura 19 muestra que el error disminuye como función de la varianza. Mientras que la figura 15 muestra un comportamiento inverso, es decir, el error, $\left| \Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} \right|$, aumenta como función de la varianza.

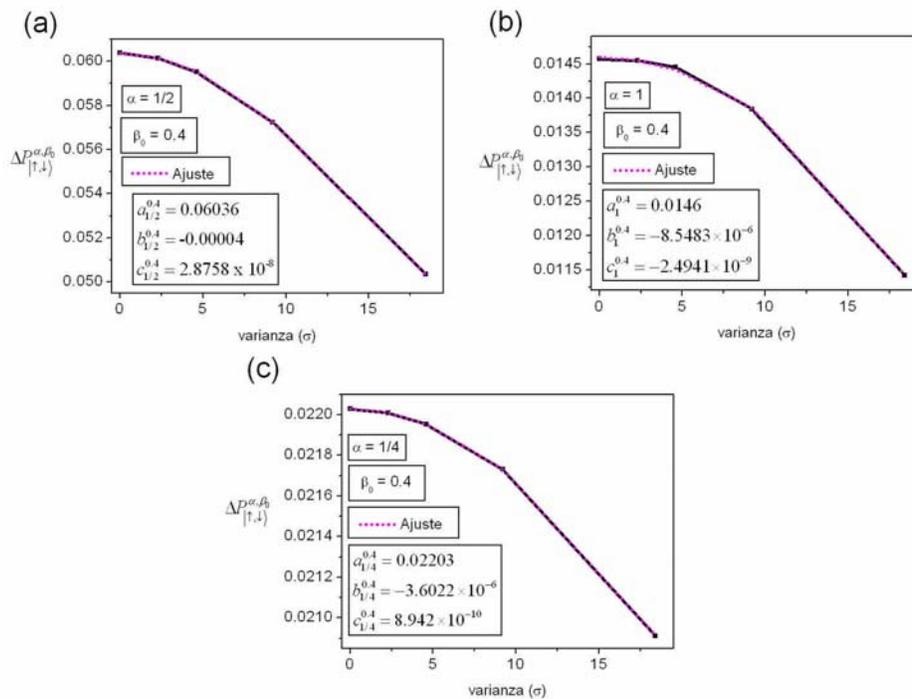


Figura 19: Curvas de error, $\Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0}$ para los valores de este presentados en la tabla IV. Las figuras se presentan para tres valores de $\alpha = 1/4$ (a), $1/2$ (b) y 1 (c). Las condiciones del pulso, $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, aseguran una operación exitosa para en la ausencia de campo hiperfino, $\sigma = 0$ y $\beta_0 = 0.4$. Se observa que los valores del error $\left| \Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} \right|$ pueden ajustarse adecuadamente con una curva de la $\Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} = a_\alpha^{\beta_0} + b_\alpha^{\beta_0} \sigma^2 + c_\alpha^{\beta_0} \sigma^4$. Los parámetros de ajuste se muestran en las figuras.

V.2.1.1.3 Valores del pulso corregido $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, con $\beta_0 = 0.4$

Consideramos ahora el esquema de corrección de pulso, $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, con el caso $\beta_0 = 0.4$ para en las compuertas $(\text{swap})^\alpha$, para $\alpha = 1/4, 1/2$ y 1. En la figura 20 presentamos curvas de probabilidad para los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$. Las probabilidades tendrán el valor asintótico adecuado para satisfacer la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$.

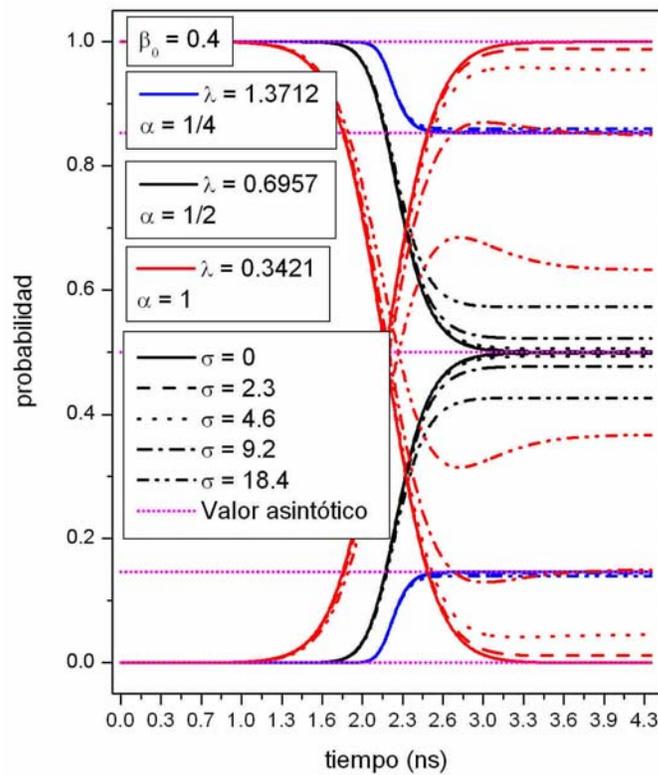


Figura 20: Probabilidad de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ como función del tiempo. Se presentan curvas para aquellas condiciones de pulso que satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, $\lambda = 1.3712$ para $\alpha = 1/4$, $\lambda = 0.6957$ para $\alpha = 1/2$ y $\lambda = 0.3421$ para $\alpha = 1$, grupo C. Para $\sigma = 0$ se presenta una curva de referencia (negra sólida) en donde se asegura que las probabilidades de los estados sean los adecuados para compuerta $(\text{swap})^\alpha$. Las curvas consecuentes son para valores de la varianza $\sigma = 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

En particular los parámetros son aquellos del grupo C de la tabla III. Las curvas azules corresponden a $\alpha = \frac{1}{4}$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ las curvas negras y para $\alpha = 1$ las curvas negras. La curva sólida en ausencia de campo hiperfino (aseguran una operación de compuerta (*swap*) $^\alpha$ satisfactoria.

La figura muestra una corrección en los valores de la probabilidad a aquellos valores en ausencia del término DM, $\beta_0 = 0$, y con su correspondiente condición de pulso, tal como los presentados para la figura 14.

Tabla VI. Valores asintóticos de las probabilidades de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ en la operación de compuerta (*swap*) $^\alpha$, para los valores de la figura 20.

$\beta_0 = 0.4$		$P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^\alpha$	$ \Delta P_{ \uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} $	% de error	$P_{ \downarrow, \uparrow\rangle}^\alpha$	$ \Delta P_{ \downarrow, \uparrow\rangle}^{\alpha, \beta_0} $	% de error
$\alpha = \frac{1}{4}$	$\sigma = 0$	0.85352295	0	0	0.14647705	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.85363798	0.00011503	0.013 %	0.14636202	0.00011503	0.013 %
	$\sigma = 4.6$	0.85396355	0.00044060	0.052 %	0.14603645	0.0004406	0.052 %
	$\sigma = 9.2$	0.85524107	0.00171812	0.201 %	0.14475893	0.00171812	0.201 %
	$\sigma = 18.4$	0.8599919	0.00646895	0.758 %	0.1400081	0.00646895	0.758 %
$\alpha = \frac{1}{2}$	$\sigma = 0$	0.5	0	0	0.5	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.50153971	0.00153971	0.308 %	0.49846029	0.00153971	0.308 %
	$\sigma = 4.6$	0.50592674	0.00592674	1.185 %	0.49407326	0.00592674	1.185 %
	$\sigma = 9.2$	0.52223735	0.02223735	4.448 %	0.47776265	0.02223735	4.448 %
	$\sigma = 18.4$	0.57320615	0.07320615	14.64 %	0.42679385	0.07320615	14.64 %
$\alpha = 1$	$\sigma = 0$	0	0	0	1	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.01193130	0.01193130	1.193 %	0.98804687	0.01193130	1.193 %
	$\sigma = 4.6$	0.04523377	0.04523377	4.523 %	0.95476623	0.04523377	4.523 %
	$\sigma = 9.2$	0.14974258	0.14974258	14.97 %	0.85025742	0.14974258	14.97 %
	$\sigma = 18.4$	0.36677377	0.36677377	36.68 %	0.63322623	0.36677377	36.68 %

En la tabla VI se presentan los valores asintóticos de las probabilidades, así como el error asociado a la operación $|\Delta P_{|\uparrow, \downarrow\rangle}^{\alpha, \beta_0}|$, el cual se calcula con respecto a la probabilidad asintótico en ausencia del campo nuclear, Al comparar los valores de las probabilidad

asintóticos de la tablas IV y VI se observa que son muy similares y la diferencia entre los valores puede asociarse a diferencias numéricas.

En este caso no hacemos análisis del error ya que el esquema de corrección de pulsos elimina el error del término DM en la operación de compuerta, y por lo tanto el error mostrado aquí es exclusivo a la varianza y estos se mostraron previamente.

V.2.1.2. Magnetización

A continuación presentamos resultados sobre la magnetización del espín 1 para la operación de compuerta $(swap)^\alpha$ en las mismas condiciones presentadas para las probabilidades.

V.2.1.2.1 Valores de pulso $x(t_{max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$

De la misma manera que se hizo para la probabilidad, presentamos primero un conjunto de curvas para las condiciones de referencia de grupo A.

En la figura 21, presentamos curvas de magnetización para los valores para $\alpha = \frac{1}{4}$ (curvas azules), para $\alpha = \frac{1}{2}$ (curvas negras) y para $\alpha = 1$ (curvas negras), los cuales se ha señalado en ausencia de campo hiperfino (curvas sólidas) aseguran una operación de compuerta $(swap)^\alpha$ satisfactoria, $x(t_{max}) = \alpha\pi$. Estas curvas se repiten para valores del campo hiperfino en donde la varianza, σ , serán respectivamente de 2.3 mT (línea continua), 4.6 mT (línea punteada), 9.2 (línea raya - punto) y 18.4 mT (línea continua - punto - punto).

En la figura 21, se ve que la diferencia entre los valores finales para $\alpha = \frac{1}{4}$ son muy cercanos entre si por lo que el error en la operación no es apreciable, por lo que en la figura 22 presentamos los valores finales de la magnetización en el intervalo de tiempo 2.6 a 4.3 ns para $\alpha = \frac{1}{4}$, los valores para el término DM y de σ son los mismos que los presentados en la figura 22.

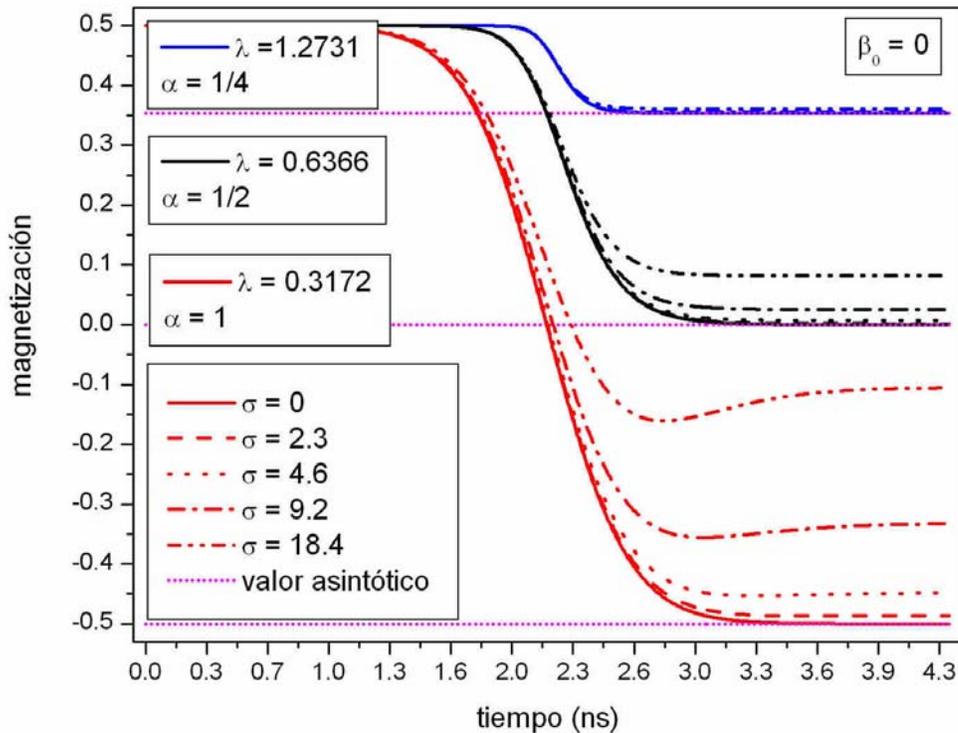


Figura 21: Evolución dinámica de la magnetización del espín 1 en la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$, con la condición del pulso tal que $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, que corresponde a $\lambda = 1.2731$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = \frac{1}{4}$ (curvas azules), $\lambda = 0.6366$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ (curvas negras) y $\lambda = 0.3172$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = 1$, para $\beta_0 = 0$ y la condición de pulso que asegura una operación de compuerta exitosa para la curva de referencia $\sigma = 0$ (curva sólida), grupo A. Se presentan, además, $\sigma = 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

De las figuras 21 y 22 se observa que el error en la magnetización aumenta como función de la varianza del campo nuclear y más aún el este error aumenta a medida que aumenta el valor de α .

Con el propósito de cuantificar el error en la operación, presentamos en la tabla VII los valores finales de la magnetización, para los mismos valores de α, β_0 y de σ de la figura 21, y calculamos el error en la operación, $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0}|$, debido al valor de la varianza del campo hiperfino.

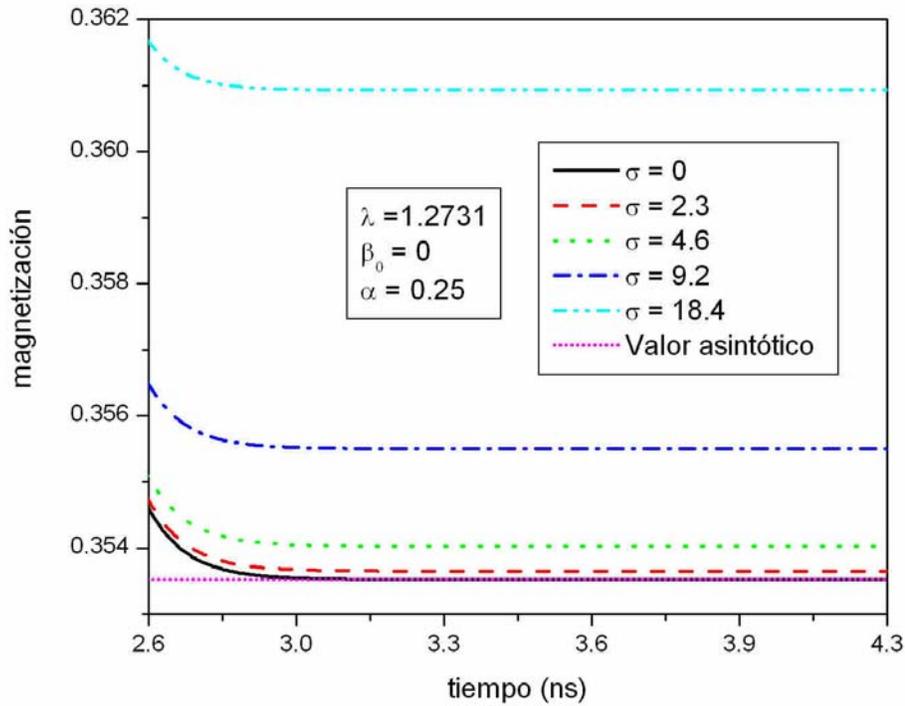


Figura 22: Valores finales en la región asintótica para la magnetización del espín 1 para $\alpha = \frac{1}{4}$ bajo las mismas condiciones de la figura 18.

La Tabla muestra el error agregado, $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0}|$, por la varianza, σ . También incluimos el porcentaje de error con respecto al valor de referencia, $\sigma = 0$, el cual observamos incrementa como función de la varianza y con el valor de α .

En la figura 23 presentamos las curvas del error, $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0}|$ presentados en la tabla VII y se observa que también se puede ajustar con una curva del tipo $\Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0}\sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0}\sigma^4$ similar a las usadas para las probabilidades. Los valores de ajuste están dados por: $a_{1/4}^0 = 5 \times 10^{-5} \pm 5 \times 10^{-5}$, $b_{1/4}^0 = 2 \times 10^{-5} \pm 1.46 \times 10^{-6}$ y $c_1^0 = 9.236 \times 10^{-9} \pm 4.15 \times 10^{-9}$; para $\alpha = \frac{1}{4}$, $a_{1/2}^0 = 4 \times 10^{-5} \pm 4 \times 10^{-5}$, $b_{1/2}^0 = 3.2 \times 10^{-4} \pm 1.235 \times 10^{-6}$ y $c_{1/2}^0 = -2.298 \times 10^{-7} \pm 3.64 \times 10^{-9}$; para $\alpha = 1$, $a_1^0 = 2.25 \times 10^{-3} \pm 2.03 \times 10^{-3}$, $b_1^0 = 2.23 \times 10^{-3} \pm 6 \times 10^{-5}$ y $c_1^0 = -3.163 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-7}$ para $\alpha = 1$.

Tabla VII. Valores asintóticos de la magnetización para las mismas condiciones de valores α , β_0 y de σ de la figura 22. El error de operación, $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0}|$, se calcula con respecto la curva de referencia $\sigma = 0$.

$\beta_0 = 0$		$\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0}$	$ \Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0} $	% de error
$\alpha = \frac{1}{4}$	$\sigma = 0$	0.35352295	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.35364948	0.00012653	0.036 %
	$\sigma = 4.6$	0.35402678	0.00050383	0.143 %
	$\sigma = 9.2$	0.35550284	0.00197989	0.560 %
	$\sigma = 18.4$	0.36093316	0.01580865	2.096 %
$\alpha = \frac{1}{2}$	$\sigma = 0$	0	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.001710585	0.001710585	0.171 %
	$\sigma = 4.6$	0.006779853	0.006779853	0.678 %
	$\sigma = 9.2$	0.025425064	0.025425064	2.543 %
	$\sigma = 18.4$	0.081919442	0.081919442	8.192 %
$\alpha = 1$	$\sigma = 0$	-0.5	0	0
	$\sigma = 2.3$	-0.48629147	0.01370853	2.742 %
	$\sigma = 4.6$	-0.44847004	0.05152996	10.31 %
	$\sigma = 9.2$	-0.33282482	0.16717518	33.43 %
	$\sigma = 18.4$	-0.10555789	0.39444211	78.89 %

En la figura 23 se ve, que el error, $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0}|$, en la magnetización del espín 1 incrementa de forma cuadrada con la varianza y se observa que la curvatura, $b_{\alpha}^{\beta_0}$, incrementa con α , lo cual indica que el error crecerá mas rápido con valores de α mayores.

La operación se computa se ve afectada por el campo hiperfino, lo cual era esperado, sin mebargo el incremento del error para valores mayores de α no lo era. Estos resultados indican que las compuertas que requieran un pulso de $J(t)$ más rapido, por ejemplo $\alpha = \frac{1}{4}$, serán menos afectadas que aquellas con pulsos de $J(t)$ con mayor area.

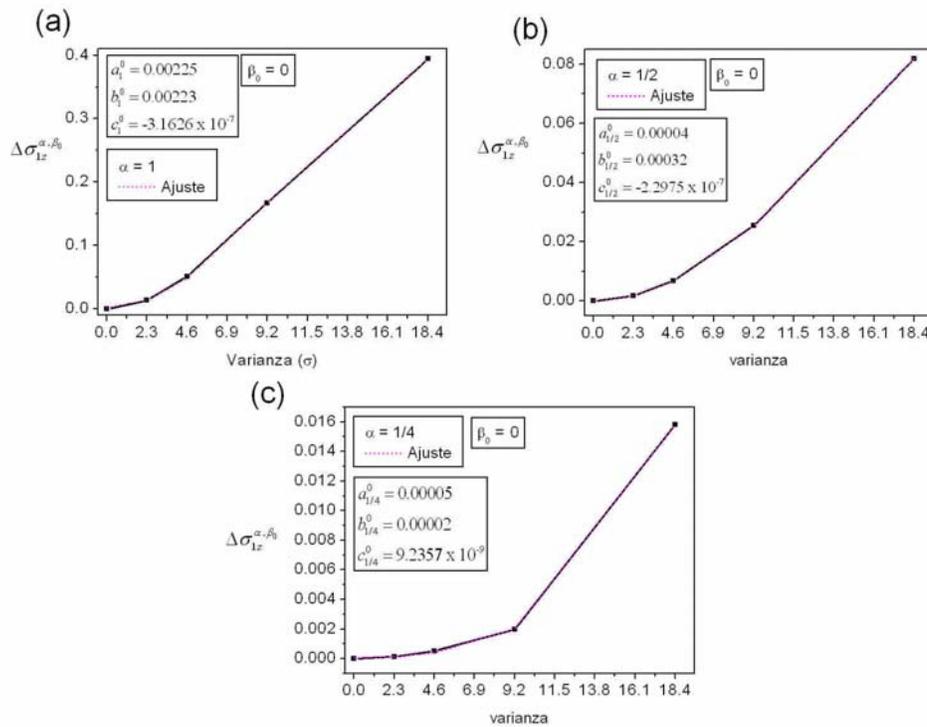


Figura 23: Curvas de error, $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0}|$ para los valores de este presentados en la tabla VI. Las figuras se presentan para tres valores de $\alpha = 1/4$ (a), $1/2$ (b) y 1 (c). Las condiciones del pulso aseguran una operación exitosa para en la ausencia de campo hiperfino, $\sigma = 0$ y para $\beta_0 = 0$. Se observa que los valores del error $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0}|$ pueden ajustarse adecuadamente con una curva de la $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0}| = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^4$, donde los parámetros de ajuste están expresados en cada figura.

V.2.1.2.2 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0.4$

Consideramos ahora la misma condición de pulso que se utilizó en la figura 22 pero ahora “prendemos” el término DM, $\beta_0 = 0.4$ y con las condiciones de pulso del gripo B de la tabla III calculamos la magnetización del espín 1, obtenemos nuevas curvas que se presentan en la figura 24.

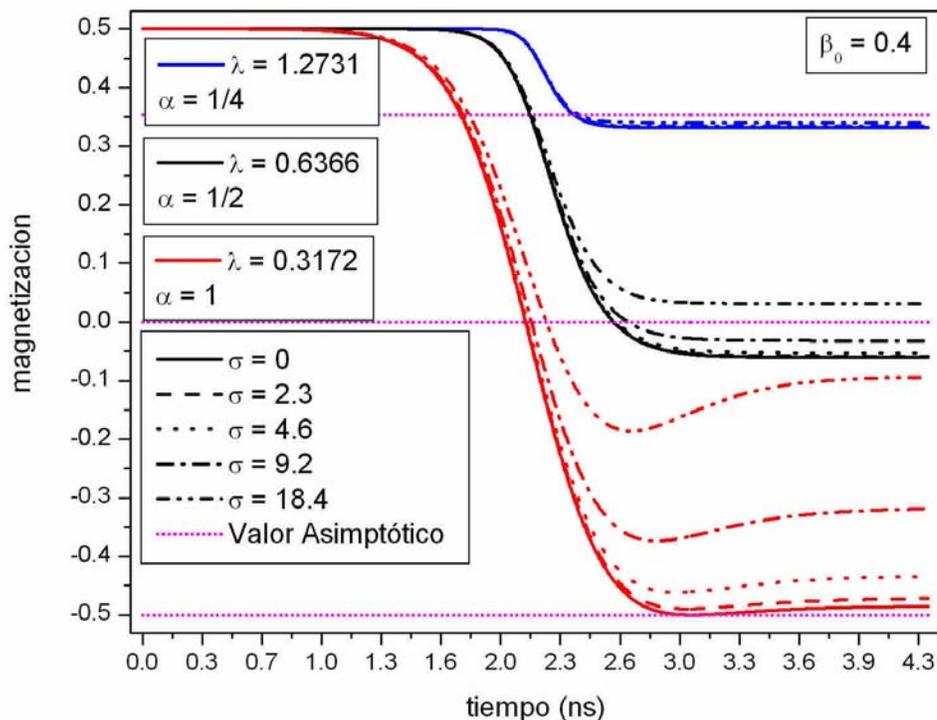


Figura 24: Evolución dinámica de la magnetización del espín 1 para las mismas condiciones de la figura 21 excepto que el término DM aquí tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$, grupo B.

La figura 24 muestra una desviación en la curva de referencia, $\sigma = 0$, con respecto a las de la figura 21. El término DM tiene como resultado modificar la magnetización, sin embargo, para las compuertas $\alpha = 1/4$ y $1/2$ observamos que la interacción hiperfina corrige hasta cierta medida el error asociado, más aún, para $\alpha = 1/2$, podríamos afirmar que un valor, no conocido, entre el rango de valores dados de la varianza, $\sigma = 0$ a 18.4 mT, corrige la operación. Sin embargo, para $\alpha = 1$, observamos que el error agregado por el término DM solo incrementa al aumentar los valores de la varianza

Por completes, en la tabla VIII presentamos los valores asintóticos de la magnetización mostrados en la figura 24, así como el error inducido a la operación de compuerta. En gris mostramos el valor correcto de la magnetización para la compuerta $(swap)^\alpha$ y usando esta como base calculamos el error y el porcentaje de error para valor de σ .

Tabla VIII. Valores asintóticos de la magnetización para las mismas condiciones de la tabla VII excepto que aquí $\beta_0 = 0.4$. Se agrega, en gris, el valor correcto de la magnetización para valor de α .

$\beta_0 = 0.4$		$\sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0}$	$ \Delta\sigma_{1z}^{\alpha, \beta_0} $	% de error
$\alpha = \frac{1}{4}$	Valor asintótico	0.35352295	0	0
	$\sigma = 0$	0.33149432	0.02202863	6.231 %
	$\sigma = 2.3$	0.33163993	0.02188302	6.190 %
	$\sigma = 4.6$	0.33207412	0.02144883	6.067 %
	$\sigma = 9.2$	0.33377272	0.01975023	5.587 %
	$\sigma = 18.4$	0.34002164	0.01350131	3.819 %
$\alpha = \frac{1}{2}$	Valor asintótico	0	0	0
	$\sigma = 0$	-0.060375193	0.060375193	6.038 %
	$\sigma = 2.3$	-0.058433075	0.058433075	5.843 %
	$\sigma = 4.6$	-0.052743692	0.052743692	5.274 %
	$\sigma = 9.2$	-0.031819365	0.031819365	3.182 %
	$\sigma = 18.4$	0.031564733	0.031564733	3.156 %
$\alpha = 1$	Valor asintótico	-0.5	0	0
	$\sigma = 0$	-0.48542935	0.01457065	2.914 %
	$\sigma = 2.3$	-0.47174129	0.02825871	5.652 %
	$\sigma = 4.6$	-0.43401405	0.06598595	13.20 %
	$\sigma = 9.2$	-0.31898134	0.18101866	36.20 %
	$\sigma = 18.4$	-0.094139852	0.405860148	81.17 %

Observamos de la tabla VIII que el porcentaje de error para $\alpha = \frac{1}{4}$ disminuye para valores mas grandes de la varianza del campo nuclear, se puede extrapolar por medio de una aproximación lineal, $P = m\sigma + P_0$ y se obtiene $\sigma = 38.3$ mT. Para $\alpha = \frac{1}{2}$ observamos que el porcentaje de error disminuye a medida que crece σ , sin embargo, se ve que los valores asintóticos han aumentado como función de σ , desde aproximadamente -0.06 hasta 0.032 mientras que el valor de la magnetización debe ser $\sigma_{1z}^{1/2,0.4} = 0$, por lo que realizamos una interpolación lineal $P = m\sigma + P_0$ y encontramos que para $\sigma = 18.82$ mT la magnetización seria $\sigma_{1z}^{1/2,0.4} = 0$. Esto presenta, de la misma manera que en las

probabilidades, la opción de control con σ y β_0 en la compuerta $(\text{swap})^\alpha$. Para $\alpha = 1$ se observa que el porcentaje de error incrementa con σ . El error en las condiciones, $|\Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0}|$, puede ajustarse utilizando una curva polinomial del tipo, $\Delta\sigma_{1z}^{\alpha,\beta_0} = a_\alpha^{\beta_0} + b_\alpha^{\beta_0}\sigma^2 + c_\alpha^{\beta_0}\sigma^4$.

V.2.1.2.3 Valores del pulso corregido $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, con $\beta_0 = 0.4$

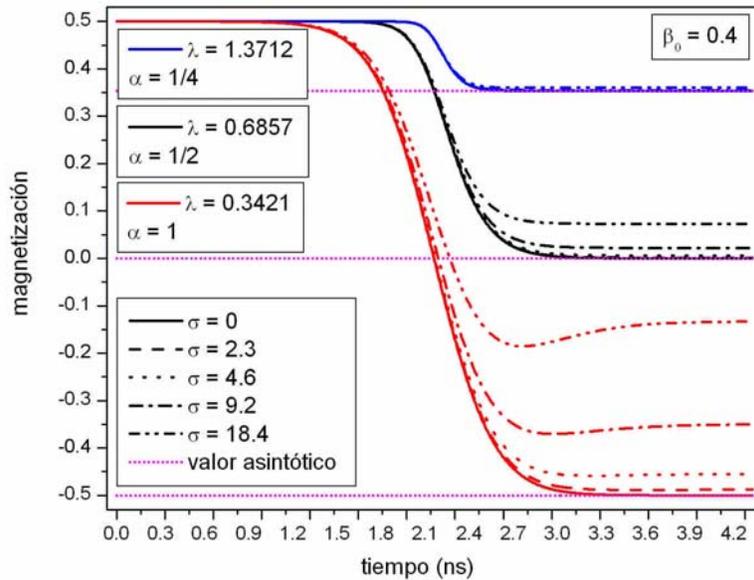


Figura 25: Evolución dinámica de la magnetización del espín 1 en la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$, para aquellos valores λ que satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, grupo C, $\lambda = 1.3712$ para $\alpha = \frac{1}{4}$ (curvas azules), $\lambda = 0.6857$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ (curvas negras) y $\lambda = 0.3421$ para $\alpha = 1$, para $\beta_0 = 0.4$ y la condición de pulso, después del esquema de corrección, aseguran una operación de compuerta exitosa para la curva de referencia $\sigma = 0$ (curva sólida). Se presentan, además, $\sigma = 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

Ahora si $\beta_0 = 0.4$, y utilizamos el esquema de pulsos presentado en el capítulo anterior los parámetros de pulso se ven modificados. En particular los valores del parámetro son aquellos del grupo C. Las curvas azules son para $\alpha = \frac{1}{4}$, para $\alpha = \frac{1}{2}$ las curvas negras y

para $\alpha=1$ las curvas negras, los cuales se ha señalado que en ausencia de campo hiperfino (curvas sólidas) aseguran una operación de compuerta ($swap$) $^\alpha$ satisfactoria.

La figura 25 muestra, las magnetización después del esquema de corrección de pulso presentado en el capítulo IV, se ve que el efecto del término DM se puede eliminar, si embargo, los resultados muestran que este término podría ser utilizado como parámetro de control para corregir los valores de la magnetización para una compuerta ($swap$) $^\alpha$ e implicaría tener alguna clase de control sobre el efecto espín – órbita del sistema.

V.2.1.3. Concurrencia

V.2.1.3.1 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$

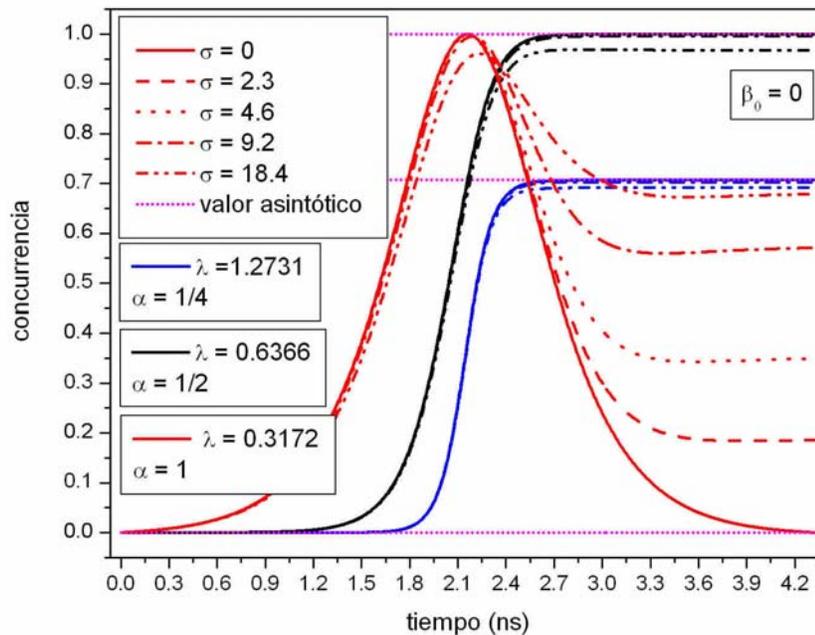


Figura 26: Concurrencia como función del tiempo. Se presentan tres series de curvas para tres valores del grupo A, $\lambda = 1.2731$ para $\alpha = \frac{1}{4}$ (curvas azules), $\lambda = 0.6366$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ (curvas negras) y $\lambda = 0.3172$ para $\alpha = 1$, los cuales satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi$. El valor del término DM es constante e igual. Se asegura que los valores de λ son los ideales para producir la operación de compuerta ($swap$) $^\alpha$. Se muestran curvas para diferentes valores de la varianza del campo nuclear $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

En la figura 26, presentamos curvas de concurrencia para los valores de λ del grupo A, en donde las curvas azules corresponden a para $\alpha = \frac{1}{4}$, para $\alpha = \frac{1}{2}$ las curvas negras y para $\alpha = 1$ las curvas rojas. Las curvas sólidas aseguran una operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$ satisfactoria. Con el propósito de observar el efecto de campo hiperfino en la operación de compuerta incluimos como antes 4 curvas adicionales en donde la varianza del campo hiperfino, σ , serán respectivamente de 2.3 mT (línea rayada), 4.6 mT (línea punteada), 9.2 (línea raya - punto) y 18.4 mT (continua – punto -punto).

Observamos, en la figura, que la varianza tiene como efecto agregar error a la concurrencia final de la operación y que incrementa como función de la varianza, σ y del parámetro de compuerta α . Para $\alpha = 1$ con $\sigma = 18.4$, el valor final de la concurrencia es mucho mas cercano al valor deseado de la concurrencia para $\alpha = \frac{1}{4}$ lo cual presenta el cuestionamiento, ¿es posible mediante condiciones de pulso para una compuerta $(\text{swap})^\alpha$ generar otra compuerta? o ¿al menos conseguir que los valores de algunas propiedades, como por ejemplo concurrencia, sean los de esta otra compuerta? Aparentemente la respuesta es si, sin embargo mas trabajo en este tema es necesario y lo dejamos para investigación futura.

Sin embargo es interesante el cambio en la conducta de la concurrencia para los tres valores de α . Mientras que el valor final de la concurrencia es menor para $\alpha = \frac{1}{4}$ y $\frac{1}{2}$ a medida que aumenta el valor de σ para $\alpha = 1$ el valor de la concurrencia aumenta.

Para $\alpha = \frac{1}{2}$, el sistema al final del tiempo de operación se encuentra en una mezcla simétrica de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ que tendrá concurrencia igual a 1, sin embargo, al encender la interacción hiperfina es precisamente esta nueva energética la que genera transiciones que llevaran al sistema a un estado fuera la configuración simétrica y fuera de un sistema con concurrencia igual a 1. Sin embargo para $\alpha = 1$ la situación es completamente inversa, el sistema después del tiempo de operación se encuentra en uno de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ o $|\downarrow, \uparrow\rangle$ los cuales tienen concurrencia igual a 0, sin embargo es el campo magnético nuclear el que genera transiciones entre estos y los mezcla a un estado con concurrencia diferente a cero.

Tabla IX. Valores asintóticos de la concurrencia para las mismas condiciones de los valores α , β_0 y de σ de la figura 21. El error de operación, $|\Delta\sigma_{12}^{\alpha,\beta_0}|$, se calcula con respecto la curva de referencia $\sigma = 0$.

$\beta_0 = 0$		C^{α,β_0}	$ \Delta C^{\alpha,\beta_0} $	% de error
$\alpha = \frac{1}{4}$	$\sigma = 0$	0.70716765	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.70691438	0.00025327	0.036 %
	$\sigma = 4.6$	0.70615598	0.00101167	0.143 %
	$\sigma = 9.2$	0.70314408	0.00402357	0.569 %
	$\sigma = 18.4$	0.69145148	0.01571617	2.222 %
$\alpha = \frac{1}{2}$	$\sigma = 0$	1	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.9999828	0.0000172	0.002 %
	$\sigma = 4.6$	0.99973822	0.00026178	0.026 %
	$\sigma = 9.2$	0.99654835	0.00345165	0.345 %
	$\sigma = 18.4$	0.96817893	0.03182107	3.182 %
$\alpha = 1$	$\sigma = 0$	0	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.18559976	0.18559976	18.56 %
	$\sigma = 4.6$	0.34962071	0.34962071	34.96 %
	$\sigma = 9.2$	0.57087047	0.57087047	57.09 %
	$\sigma = 18.4$	0.67899738	0.67899738	67.90 %

En la tabla IX presentamos los valores asintóticos de la concurrencia así como el error asociado a la operación y su porcentaje de error con respecto al valor de referencia, $\sigma = 0$ de la compuerta.

Se observa que el error en la compuerta aumenta como función de la varianza y del parámetro de compuerta α , y lo hace de una forma polinomial que se puede ajustar con una curva del tipo $\Delta C^{\alpha,\beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^4 + D_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^6$, en donde los parámetros de ajuste están dados para $\alpha = \frac{1}{4}$ por: $a_{1/4}^0 = -2.86 \times 10^9 \pm 4.35 \times 10^{-9}$, $b_{1/4}^0 = -5 \times 10^{-5} \pm 4.69 \times 10^{-10}$, $c_{1/4}^0 = -4.27 \times 10^{-9} \pm 6.52 \times 10^{-12}$ y $d_{1/4}^0 = -3.045 \times 10^{-13} \pm 1.53 \times 10^{-14}$; Para $\alpha = \frac{1}{2}$, $a_{1/2}^0 = -2.477 \times 10^{-6} \pm 3.77 \times 10^{-6}$, $b_{1/2}^0 = 1.633 \times 10^{-6} \pm 4.063 \times 10^{-7}$, $c_{1/2}^0 = 5.26 \times 10^{-7}$

$\pm 5.65 \times 10^{-9}$ y $d_{1/2}^0 = -7.49 \times 10^{-10} \pm 1.13 \times 10^{-11}$; Para $\alpha = 1$, $a_1^0 = 0.0359 \pm 0.0547$, $b_1^0 = -0.01947 \pm 5.9 \times 10^{-3}$, $c_1^0 = -1.9 \times 10^{-4} \pm 8.5 \times 10^{-5}$ y $d_1^0 = 4.8 \times 10^{-7} \pm 1.93 \times 10^{-7}$.

V.2.1.3.2 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0.4$

En la figura 27 se presentan curvas para la concurrencia bajo los mismos parámetros de la figura 26, excepto aquí el término DM tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$. Se ve que el término DM genera un error en las curvas de referencia, $\sigma = 0$. El cambio súbito de comportamiento para $\alpha = 1$ fue discutido en el capítulo anterior. Vemos que para los casos $\alpha = 1/4$ y 1 el término DM tiene como efecto elevar la concurrencia del sistema, mientras que para $\alpha = 1/2$ la reduce, que se lógico ya que el valor máximo de la concurrencia es 1 y por lo tanto el único cambio posible es reducir este valor.

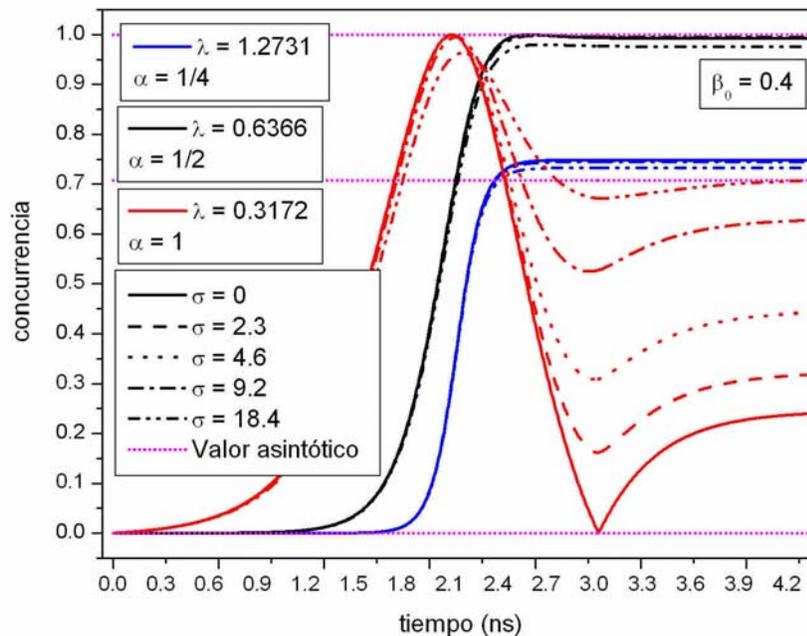


Figura 27: Concurrencia como función del tiempo, para los mismos valores de la figura 26 excepto que aquí $\beta_0 = 0.4$, grupo B.

En la tabla X presentamos los valores finales de la figura 27 así como el error asociado a la concurrencia y el porcentaje del mismo con respecto al valor de referencia que se encuentra en gris para caso de α .

Tabla X. Valores asintóticos de la concurrencia y el error asociado. Los parámetros son iguales a aquellos presentados en la tabla VIII pero aquí el termino DM tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$.

$\beta_0 = 0.4$		C^{α, β_0}	$ \Delta C^{\alpha, \beta_0} $	% de error
$\alpha = \frac{1}{4}$	Valor asintótico	0.70716765	0	0
	$\sigma = 0$	0.74862945	0.04146180	5.863 %
	$\sigma = 2.3$	0.74837126	0.04120361	5.827 %
	$\sigma = 4.6$	0.74759785	0.04043020	5.717 %
	$\sigma = 9.2$	0.74452204	0.03735439	5.282 %
	$\sigma = 18.4$	0.73252642	0.02535877	3.586 %
$\alpha = \frac{1}{2}$	Valor asintótico	1	0	0
	$\sigma = 0$	0.99268290	0.0073171	0.732 %
	$\sigma = 2.3$	0.99313310	0.0068669	0.687 %
	$\sigma = 4.6$	0.99420442	0.00579558	0.580 %
	$\sigma = 9.2$	0.99529067	0.00470933	0.471 %
	$\sigma = 18.4$	0.97624448	0.02375552	2.376 %
$\alpha = 1$	Valor asintótico	0	0	0
	$\sigma = 0$	0.23965260	0.23965260	23.97 %
	$\sigma = 2.3$	0.31790927	0.31790927	31.79 %
	$\sigma = 4.6$	0.44206530	0.44206530	44.21 %
	$\sigma = 9.2$	0.62725485	0.62725485	62.73 %
	$\sigma = 18.4$	0.70676753	0.70676753	70.68 %

El error asociado al varianza del campo nuclear muestra un comportamiento creciente el cual puede ser ajustado mediante una curva polinomial del tipo

$\Delta C^{\alpha, \beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^4 + D_{\alpha}^{\beta_0} \sigma^6$, en donde los parámetros de ajuste están dados para $\alpha = \frac{1}{4}$ por: $a_{1/4}^{0.4} = 0.04146 \pm 7.7 \times 10^{-10}$, $b_{1/4}^{0.4} = -5 \times 10^{-5} \pm 6.3 \times 10^{-11}$, $c_{1/4}^{0.4} = 3.8 \times 10^{-9} \pm 1.15 \times 10^{-12}$ y $d_{1/4}^{0.4} = 8.34 \times 10^{-13} \pm 2.72 \times 10^{-15}$; para $\alpha = \frac{1}{2}$, $a_{1/2}^{0.4} = -7.31 \times 10^{-3} \pm 5.6 \times 10^{-6}$, $b_{1/2}^{0.4} = -9 \times 10^{-5} \pm 6.04 \times 10^{-7}$, $c_{1/2}^{0.4} = 7.58 \times 10^{-7} \pm 8.4 \times 10^{-9}$ y $d_{1/2}^0 = -1.05 \times 10^{-9}$

$\pm 1.97 \times 10^{-11}$; y para $\alpha = 1$, $a_1^{0.4} = 0.2482 \pm 0.01305$, $b_1^{0.4} = 0.01134 \pm 1.41 \times 10^{-3}$, $c_1^0 = -1 \times 10^{-3} \pm 1.41 \times 10^{-4}$ y $d_1^0 = 2.03 \times 10^{-7} \pm 4.6 \times 10^{-8}$.

Es interesante observar que el valor de la concurrencia para $\alpha = 1$ con $\sigma = 18.4$ mT es muy similar al valor asintótico para la concurrencia de la compuerta $(\text{swap})^{1/4}$ de hecho la diferencia entre ambos es 0.0004, es decir, el resultado de la concurrencia compuerta swap para $\sigma = 18.4$ mT es 99.94 % el valor asintótico de la concurrencia para $(\text{swap})^{1/4}$.

En el capítulo 4 se discutió, el hecho que experimentalmente no es posible, actualmente, generar pulsos lo suficientemente cortos para producir la compuerta $(\text{swap})^{1/4}$ sin embargo se han reportado experimentalmente que las compuertas $(\text{swap})^{1/2}$ y (swap) han sido generadas (Petta et. a., 2005). En base a nuestros resultados podemos proponer que a partir de la compuerta (swap) y con un valor adecuado de la varianza y de β_0 sería posible generar los valores adecuados de la probabilidad, magnetización y concurrencia de la compuerta $(\text{swap})^{1/4}$.

V.2.1.3.3 Valores del pulso corregido $x(t_{\max}) = \alpha\pi / \sqrt{1 + \beta_0^2}$, con $\beta_0 = 0.4$

Por último, presentamos en la figura 28, curvas de la concurrencia, para los valores del grupo C. Las curvas para $\alpha = \frac{1}{4}$ se identifican con las curvas azules, para $\alpha = \frac{1}{2}$ las curvas negras y para $\alpha = 1$ las curvas rojas, las cuales se han señalado que en ausencia de campo hiperfino (curvas sólidas) aseguran una operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$ satisfactoria.

La figura 28 muestra corrección de los valores para $\sigma = 0$ de la concurrencia a los valores asintóticos esperados (líneas rosas). Se ve además el mismo comportamiento mostrado en las figuras 25 y 27.

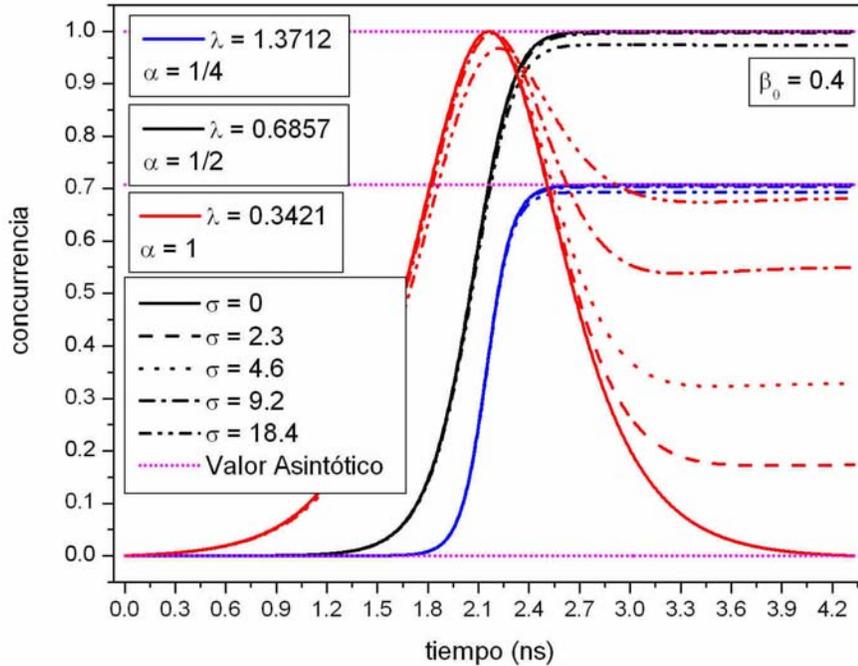


Figura 28: Concurrencia como función del tiempo en la operación de compuerta $(\text{swap})^\alpha$. Las condiciones satisfacen el grupo C y son $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$ para valores de $\lambda = 1.3712$ para $\alpha = \frac{1}{4}$ (curvas azules), $\lambda = 0.6857$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ (curvas negras) y $\lambda = 0.3421$ para $\alpha = 1$ (curvas negras), para $\beta_0 = 0.4$ y la condición de pulso, después del esquema de corrección, aseguran una operación de compuerta exitosa para la curva de referencia $\sigma = 0$ (curva sólida). Se presentan, además, $\sigma = 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

La tabla XI muestra los valores asintóticos de la concurrencia así como el error en cada operación en estas condiciones. Los valores para el parámetro de pulso, son los mismos que los de la figura 28. También incluimos el valor correcto de la concurrencia para cada operación α . El esquema de corrección cancela el error debido al término DM, el error presentado es mínimo.

El error debido a la interacción hiperfina es tal que, aparentemente podría corregirse con un esquema de pulsos como el utilizado en el capítulo IV.

Tabla XI. Valores asintóticos de la concurrencia y el error asociado. Los parámetros para σ y α son iguales a los presentados en la figura 28 pero aquí el termino DM tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$.

$\beta_0 = 0.4$		C^{α, β_0}	$ \Delta C^{\alpha, \beta_0} $	% de error
$\alpha = \frac{1}{4}$	Valor asintótico	0.70716765	0	0
	$\sigma = 0$	0.70715577	0.00000995	0.001 %
	$\sigma = 2.3$	0.70693743	0.00023022	0.033 %
	$\sigma = 4.6$	0.70628346	0.00088419	0.125 %
	$\sigma = 9.2$	0.70368366	0.00348399	0.493 %
	$\sigma = 18.4$	0.69354769	0.01361996	1.925 %
$\alpha = \frac{1}{2}$	Valor asintótico	1	0	0
	$\sigma = 0$	1	0	0
	$\sigma = 2.3$	0.99998680	0.00001320	0.001 %
	$\sigma = 4.6$	0.99980205	0.00019795	0.020 %
	$\sigma = 9.2$.997344030	0.00265597	0.266 %
	$\sigma = 18.4$	0.97425654	0.02574346	2.574 %
$\alpha = 1$	Valor asintótico	0	0	0
	$\sigma = 0$	0.00003420	0.00003420	0.003 %
	$\sigma = 2.3$	0.17354645	0.17354645	17.35 %
	$\sigma = 4.6$	0.32925519	0.32925519	32.93 %
	$\sigma = 9.2$	0.54941928	0.54941928	54.94 %
	$\sigma = 18.4$	0.68098581	0.68098581	68.10 %

V.2.1.4. Efecto de la interacción hiperfina en la relación

$$C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$$

En el capítulo IV encontramos que en la relación $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t) = 1$ es válida para cualquier combinación de valores de λ y β_0 , siempre que las propiedades mencionadas se encuentren en el subespacio $S_z = 0$. Sin embargo, la interacción hiperfina es un campo estocástico y por lo tanto es necesario analizar el efecto de este en dicha relación numéricamente.

En la figura 29 presentamos curvas de $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$, para $\sigma = 4.6$ mT (curvas rayadas) y 9.2 mT (curvas sólidas) para dos valores de $\beta_0 = 0$ y $\beta_0 = 0.4$. La figura (a) presenta curvas para los valores del grupo A de la tabla III, la curva negra corresponde a $\alpha = 1/4$, la roja a $\alpha = 1/2$ y la verde a $\alpha = 1$. La figura (b) presenta curvas para los valores del grupo B de la tabla III con la misma notación de colores para las curvas de α . Las figuras (c) y (d) presentan las regiones de 2 a 4 ns y de 0.994 y 1.0005 de $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$ para las curvas en (a) y (b) respectivamente.

Se observa que la relación, en presencia de campo hiperfino, es valida para valores menores a los 2 ps, y después de la curva sufre un decaimiento, que es más pronunciado a medida que aumenta α , es alrededor de este tiempo que el pulso $J(t)$ también tiene su máximo.

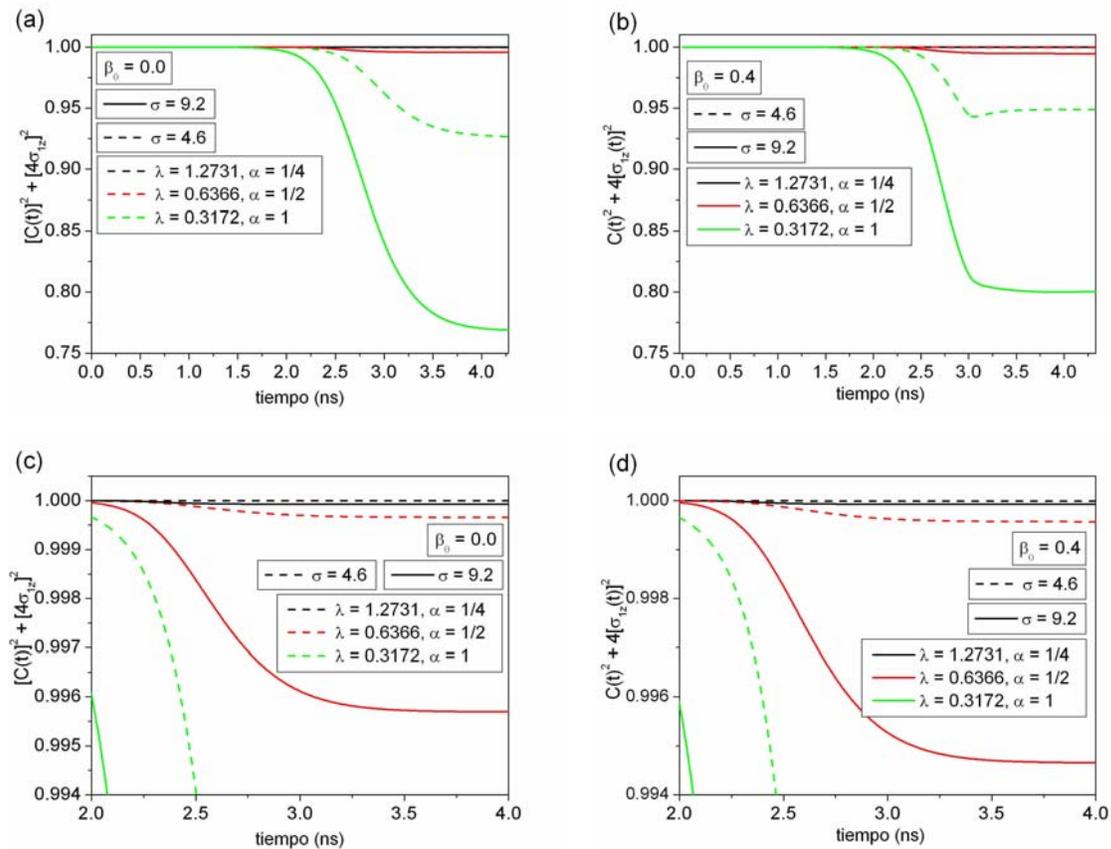


Figura 29: Curvas de la relación $c^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$ para $\sigma = 4.6$ mT y $\sigma = 9.2$ mT como función del tiempo (a) para los valores del grupo A de la tabla III (b) para los valores del grupo B de la tabla III. Las figuras (c) y (d) presentan respectivamente los valores finales de las figuras (a) y (b) en los rangos de 2 a 4 ps y de 0.994 a 1.0005 .

Se nota en la figura 29 que la varianza, σ , después de 3 ps, causa que la relación $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$ presente un decaimiento mas pronunciado como función de la misma para cualquier valor de α .

De las figuras 29 (a) y (c), podemos obtener los valores asintóticos de $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$ para $\alpha = 1/4$, son 0.999996 y 0.99993, para $\alpha = 1/2$ 0.99966 y 0.995696 y para $\alpha = 1$ 0.927089 y 0.7693459 para $\sigma = 4.6$ mT y 9.2 mT respectivamente. Para las figuras 29 (b) y (d), en donde, tenemos para $\alpha = 1/4$, 0.999995 y 0.99943, para $\alpha = 1/2$ 0.999585 y 0.994665 y para $\alpha = 1$ 0.948959 y 0.801333. Es claro que el decaimiento de $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$ es más pronunciado a medida que α aumenta. Para $\sigma = 4.6$ no podemos inducir nada ya que la cercanía entre estos valores es numéricamente indistinguible. Para $\alpha = 1$ es claro que $C^2(t) + 4\sigma_{1z}^2(t)$ aumenta ligeramente con $\beta_0 \neq 0$.

V.2.1.5. Fidelidad

La ultima de las propiedades utilizadas para evaluar la operación de compuerta es la fidelidad, la cual dejamos al final y de muchas formas excluimos de la discusión hecha durante el desarrollo de la sección ya que, como se vio en el capítulo anterior, incluye información sobre las coherencias del sistema, a diferencia de las probabilidades, magnetización y concurrencia que solo incluyen información sobre las probabilidades de los estados (diagonal principal en la matriz de densidad). La discusión sobre las curvas se hará de la misma manera que se hizo para el resto de las propiedades.

V.2.1.5.1 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0$

En la figura 30 se presentan curvas sobre la fidelidad para el grupo A de valores presentados en la tabla III para $\alpha = 1/4$, (a), $1/2$, (b) y 1, (c). Cada figura presenta curvas para valores de la varianza del campo nuclear de $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT

La fidelidad de la compuerta aumenta continuamente como función del tiempo y alcanza un máximo, que como veremos depende del valor del campo hiperfino, sin embargo, si el valor de la varianza del campo nuclear $\sigma \neq 0$ se observa un drástico decaimiento a cero del valor de la fidelidad, el tiempo de decaimiento depende del valor de la varianza. En particular para $\alpha = 1$ no se presenta este comportamiento.

Podemos asignar este comportamiento al pulso utilizado en cada una de las compuertas $(\text{swap})^\alpha$, ya que a medida que el término λ aumenta el ancho del pulso disminuye, lo cual permite que el sistema interactúe directamente con el campo hiperfino

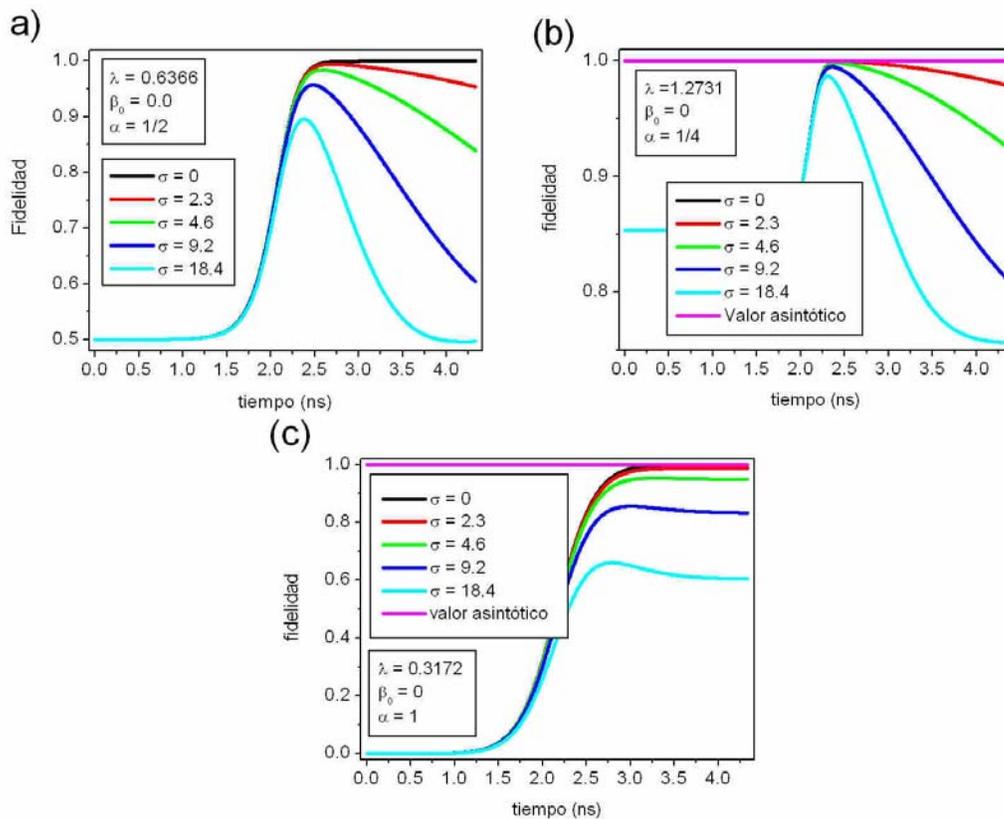


Figura 30: Fidelidad de compuerta como función del tiempo, para $\beta_0 = 0$, y con condición de pulso λ que garantiza una operación exitosa, $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, para $\sigma = 0$, $\alpha = \frac{1}{4}$, figura (a), $\lambda = 0.6366$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = \frac{1}{2}$, figura (b), y $\lambda = 0.3172$ con $\beta_0 = 0$ para $\alpha = 1$, figura (c). Se muestran curvas para $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

La tabla XII muestra el valor del máximo y valor final de la fidelidad así como el porcentaje de error respecto al valor ideal de la fidelidad, $F = 1$.

Tabla XII. Valores asintóticos de la Fidelidad para $\alpha = \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$ y 1, y para $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT. Las condiciones del pulso son iguales a las presentadas en la figura 29. El valor ideal de la fidelidad debe ser igual a $F = 1$.

$\beta_0 = 0$		F_{final}	% de error	F_{max}	% de error
α	σ	1	0	1	0
$\frac{1}{4}$	0	1	0	1	0
	2.3	0.97927797	2.072 %	0.99941002	0.059 %
	4.6	0.92684368	7.316 %	0.99824883	0.175 %
	9.2	0.81284715	18.715 %	0.99501910	0.498 %
	18.4	0.75640312	24.360 %	0.98672544	1.327 %
$\frac{1}{2}$	0	1	0	1	0
	2.3	0.95393066	4.607 %	0.99477128	0.523 %
	4.6	0.83953058	16.047 %	0.98457056	1.543 %
	9.2	0.60386205	39.614 %	0.95735468	4.265 %
	18.4	0.49668731	50.331 %	0.89567362	10.433 %
1	0	1	0	1	0
	2.3	0.98629147	1.309 %	0.98689670	1.310 %
	4.6	0.94847004	5.153 %	0.95315943	4.684 %
	9.2	0.83282482	16.718 %	0.85575214	14.424 %
	18.4	0.60555789	39.444 %	0.66083800	33.916 %

Primero analicemos los puntos máximos de la curva. Para las curvas con varianza $\sigma = 0$ se observa tanto en la figura 29 como en la tabla XI, que el valor máximo de la fidelidad es de 1 y permanece constante, este resultado ha sido discutido en el capítulo V. Sin embargo, después de “encender” el campo hiperfino se observa que el comportamiento de las curvas cambian drásticamente, en particular para aquellas curvas que corresponden a los valores $\alpha = \frac{1}{4}$ y $\frac{1}{2}$, ya que presentan un decaimiento drástico, para $\alpha = 1$ las curvas después del máximo tienen una pendiente mucho menor, que las correspondientes a los otros valores de α . Debe notarse que el error tanto para la fidelidad final y el máximo aumenta a medida que aumenta a medida que aumenta el valor de α para correspondientes valores de σ , esto último se ha notado que es un resultado constante para el campo hiperfino.

V.2.1.5.2 Valores de pulso $x(t_{\max}) = \alpha\pi$, con $\beta_0 = 0.4$

En la figura 31 se presentan curvas de la fidelidad para el grupo C de valores de la tabla III. Tal como se observo en el capítulo anterior al considerar la interacción DM en las curvas $\sigma = 0$ se presenta un desplazamiento de las curvas debido a la amplitud del término DM, en particular para $\alpha = 1$ este error no se presenta tal como fue discutido en dicho capítulo.

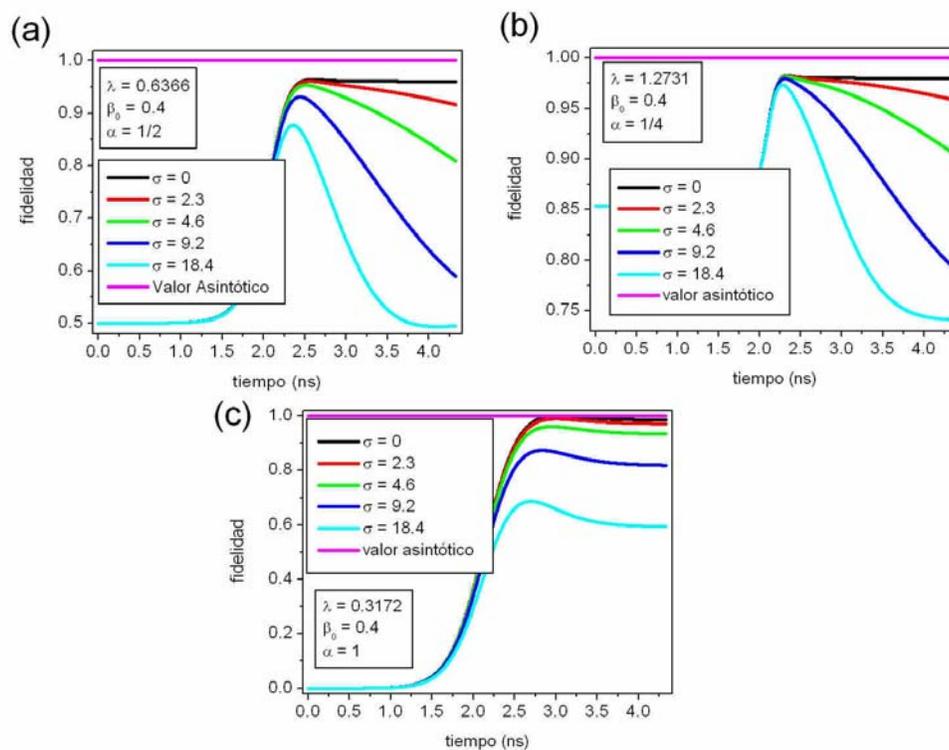


Figura 31: Fidelidad de compuerta como función del tiempo. La condición son las mismas que las presentas para la figura 30, excepto con $\beta_0 = 0.4$. Se muestra el error agregado debido a la operación debido al campo hiperfino Las curvas consecuentes son para (a) $\alpha = 1/4$, (b) $\alpha = 1/2$ y (c) $\alpha = 1$ para valores de la varianza de $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

El comportamiento decreciente que se muestra en la figura 31 es similar al presentado en la figura 30, sin embargo en este caso el término DM es de $\beta_0 = 0.4$, que como se mostró en el capítulo IV agregara un error a la operación de compuerta, que aquí se

observa en la brecha mas amplia entre el valor esperado de $F = 1$ y el máximo de la curva, este error ha sido caracterizado por la ecuación (IV.37).

V.2.1.5.3 Valores del pulso corregido $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, con $\beta_0 = 0.4$

La figura 32 muestra resultados de la fidelidad después de haber aplicado el esquema de corrección del pulso y refuerzan la conclusión del capítulo anterior, que la interacción DM agrega un error a la evolución dinámica de la fidelidad de la compuerta que no puede ser corregido. Ahora la incluir el campo hiperfino y al corregir el pulso observamos que el error aún se encuentra presente en la operación.

A lo largo del capítulo se observó que al aumentar la varianza del campo hiperfino aumenta el error agregado a la operación de compuerta y este ha sido caracterizado mediante un análisis numérico de las curvas las cuales han sido ajustado curvas analíticas que nos dan una idea básica de cómo la interacción hiperfina modifica el error.

A medida que aumenta el valor de α , también aumenta el porcentaje de error para una valor dado de la varianza σ , una explicación a este fenómeno puede ser que a medida que aumenta el valor de α el valor del parámetro del pulso λ disminuye haciendo de esta manera que el pulso sea mas amplio, lo cual incrementa el tiempo de operación del pulso, $J(t)$, sobre los espines, y es de alrededor de $t_j \approx 1/\lambda$, mientras que el tiempo de decaimiento debido al campo nuclear, es proporcional al valor de la varianza del campo nuclear y es de la forma $t_{nuc} \approx 1/\gamma_e\sigma$, [Taylor et al., 2005; Coish y Loss, 2005] y por lo tanto depende inversamente del valor de la varianza, σ , por lo que a medida que aumenta el ancho del pulso el campo hiperfino tendrá mas tiempo para afectar la dinámica de la compuerta causando error en la operación. Para ejemplificar este comportamiento presentamos algunos tiempos característicos. Para $\sigma = 18.4$ mT el tiempo asociado será $t_{nuc}^{\sigma=18.4} \approx 1403$ ps, mientras que para $\sigma = 2.3$ mT $t_{nuc}^{\sigma=2.3} \approx 11235$ ps. Para $\alpha = 1$, $\lambda = 0.3172$ y por lo tanto $t_j \approx 3.16$ ps que solo el 0.22% de $t_{nuc}^{\sigma=18.4}$ mientras que es el 0.028% de $t_{nuc}^{\sigma=2.3}$ con lo que se muestra que el sistema se vera mas afecto por la

interacción hiperfina para valores grandes del mismo. Para $\alpha = 1/4$, $\lambda = 1.2731$ el tiempo de operación es $t_j \approx 0.79$ ps que es el 0.056% del tiempo $t_{nuc}^{\sigma=18.4}$ y 0.007% del tiempo $t_{nuc}^{\sigma=2.3}$, es decir, en el tiempo de operación de la compuerta se afectado menos por el campo hiperfino que aquel para $\alpha = 1$, por lo que podemos afirmar que el efecto del campo nuclear será mas importante en sistemas con pulsos mas amplios, valores de α mayores.

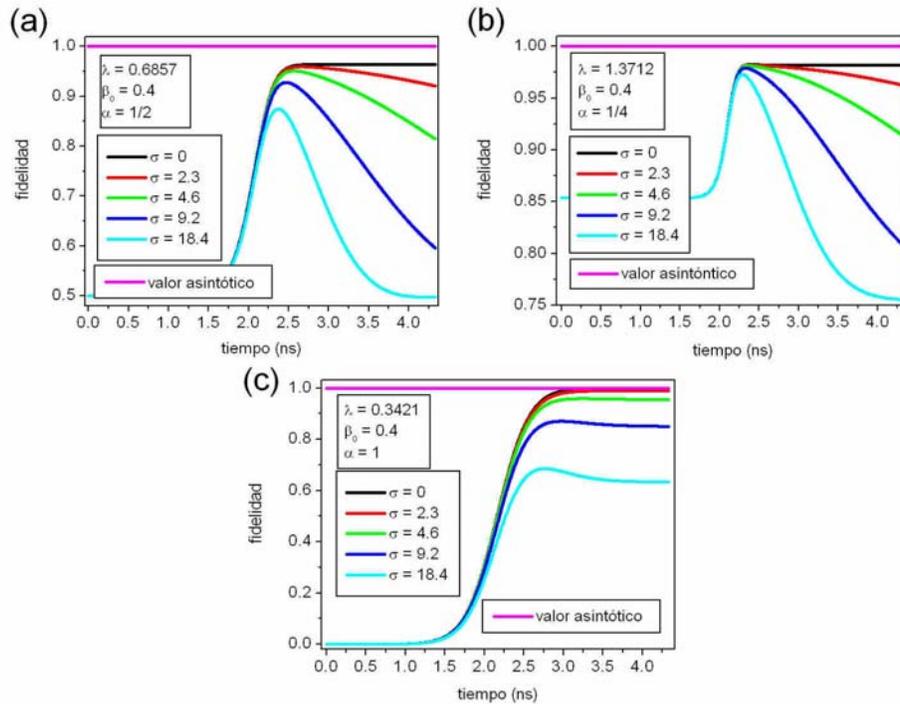


Figura 32: Fidelidad de compuerta como función del tiempo, para $\beta_0 = 0.4$, y con para valores que satisfacen $x(t_{\max}) = \alpha\pi/\sqrt{1+\beta_0^2}$, $\lambda = 1.3712$ para $\alpha = 1/4$ (a), $\lambda = 0.6857$ para $\alpha = 1/2$ (b) y $\lambda = 0.3421$ para $\alpha = 1$ (c). Se muestra el error agregado debido a la operación debido al campo hiperfino Las curvas consecuentes son para valores de la varianza de $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT.

V.3. Comentarios finales.

En este capítulo evaluamos el efecto del campo magnético nuclear, a través de la interacción hiperfina, en la operación de compuerta ($swap$) ^{α} . Presentamos la solución al

eigensistema así como expresiones para el promedio estadístico para el cuadrado de la magnetización y de la concurrencia del estado base. Se demostró que estas propiedades satisfacen la relación (IV.22) y que la concurrencia aumenta con el término DM y disminuye como función de la varianza del campo nuclear. La magnetización presenta un comportamiento inverso al mostrado por la concurrencia.

La naturaleza estocásticas del baño hiperfino, hace muy difícil obtener expresiones analíticas para las propiedades dinámicas de la concurrencia, magnetización, probabilidad de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ y fidelidad para el Hamiltoniano (V.20), por lo que no es posible presentar resultados analíticos para cuantificar el efecto del campo hiperfino en la operación de compuerta. Aún cuando es necesario un campo magnético externo grande $B_{ext} > 20$ mT para obtener el Hamiltoniano (V.20), esta no será una variable que afecte la evolución del subespacio $S_z = 0$, que es precisamente la región del sistema que contiene a los estados involucrados en la operación de compuerta.

En general encontramos en las propiedades de probabilidad, magnetización y concurrencia que la interacción hiperfina agrega un error que crece como función de la varianza, σ , de forma $\Delta\xi^{\alpha, \beta_0} = a_{\alpha}^{\beta_0} + b_{\alpha}^{\beta_0}\sigma^2 + c_{\alpha}^{\beta_0}\sigma^4$, donde ξ es cualquiera de las tres propiedades mencionadas. Además el error parece ser corregible con esquema de pulsos como el presentado en el capítulo IV, sin embargo, la fidelidad muestra un comportamiento totalmente diferente, ya que esta es un propiedad más completa, y tiene información sobre las coherencias del sistemas y un esquema de corrección de pulsos en donde la variable de control sea el inverso del ancho del pulso no será suficiente para realizar un corrección. Nosotros observamos que quizás con un esquema que modifique la amplitud del mismo o con pulsos diferente forma se podría realizar alguna clase de corrección o presentar un cambio en el comportamiento.

Se observo que el término DM, β_0 , agrega un error adicional a la operación de la compuerta, sin embargo, es interesante observar que el error es “opuesto” al agregado por la varianza del campo nuclear lo nos hace concluir que si fuera posible controlar a la varianza del campo nuclear y/o al término DM podríamos corregir el error en las probabilidades, concurrencia y magnetización.

Capítulo VI

Acoplamiento a reservorio térmico

Estamos interesados en estudiar al sistema descrito por el Hamiltoniano (IV.3) en la condición de contacto con un reservorio térmico en equilibrio termodinámico a temperatura T . En este capítulo consideramos al Hamiltoniano estacionario,

$$H = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)_z \right] + \gamma_e \left[\vec{B} \cdot \left(\hat{S}_1 + \hat{S}_2 \right) \right]_z + d\vec{B} \cdot \left(\hat{S}_1 - \hat{S}_2 \right) \Big|_z, \quad (\text{VI.1})$$

que reescribimos nuevamente aquí en la base computacional por comodidad para el lector y utilizamos las aproximaciones utilizadas en la ecuación (V.19),

$$H = \begin{pmatrix} \frac{J}{4} - \gamma_e B_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{J}{4} - \gamma_e dB_z & 2(1+i\beta_0)\frac{J}{4} & 0 \\ 0 & 2(1-i\beta_0)\frac{J}{4} & -\frac{J}{4} + \gamma_e dB_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J}{4} + \gamma_e B_z \end{pmatrix}. \quad (\text{VI.2})$$

Nuestro objetivo en este capítulo es describir sus propiedades de entrelazamiento y de magnetización como función de la temperatura en este modelo.

En el capítulo 5, se resolvió el eigensistema del Hamiltoniano (VI.2), por lo tanto, aquí nos limitamos a reescribir los cuatro eigenvalores y eigenvectores del sistema.,

$$\lambda_1 = \frac{J}{4} - \gamma_e B_z, \quad |v_1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle, \quad (\text{VI.3})$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{4} \left[-J + 2\sqrt{\#} \right],$$

$$|v_2\rangle = \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{2}\sqrt{\#-2\gamma_e dB_z}\sqrt{\#}} \left[-\frac{2\gamma_e dB_z + \sqrt{\#}}{J^2(1-i\beta_0)} |\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right], \quad (\text{VI.4})$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{4}[-J - 2\sqrt{\#}],$$

$$|v_3\rangle = \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{2}\sqrt{\#+2\gamma_e dB_z}\sqrt{\#}} \left[-\frac{2\gamma_e dB_z - \sqrt{\#}}{J^2(1-i\beta_0)} |\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right], \quad (\text{VI.5})$$

$$\lambda_4 = \frac{J}{4} + \gamma_e B_z, \quad |v_4\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle. \quad (\text{VI.6})$$

en donde el eigenvector (VI.5) es el estado base y $\# = J^2(1 + \beta_0^2) + (2\gamma_e dB_z)^2$.

Estos pares eigenestado – eigenfunción son la base para determinar la matriz de densidad térmica y de ahí las propiedades del entrelazamiento y magnetización.

VI.1 Entrelazamiento y Magnetización térmica.

La matriz de densidad del sistema en equilibrio termodinámico se escribe, en término de eigenfunciones y eigenestados (VI.3) – (VI.6) como

$$\rho = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^4 e^{-\beta\lambda_i} |v_i\rangle\langle v_i|, \quad (\text{VI.7})$$

la cual al ser expresada en la eigenbase (VI.3) – (VI.6) se tiene,

$$\rho = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\beta(\frac{1}{4}J - \gamma_e B_z)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{1}{4}\beta[-J^2 + 2\sqrt{\#}]} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{1}{4}\beta[-J^2 - 2\sqrt{\#}]} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(\frac{1}{4}J + \gamma_e B_z)} \end{pmatrix} \quad (\text{VI.8})$$

en donde, $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}]$ es la función de partición del ensemble canónico, $\beta = 1/k_B T$ y k_B es la constante de Boltzmann,

$$Z = 2e^{-\frac{1}{4}J\beta} \text{Cosh}[\beta\gamma_e B_z] + 2e^{\frac{1}{4}J\beta} \text{Cosh}\left[\frac{1}{2}\beta\sqrt{\#}\right]. \quad (\text{VI.9})$$

La matriz de densidad (VI.8) se encuentra expresada en la eigen base (VI.3) – (VI.6), sin embargo, la metodología presentada en las ecuaciones (II.67) y (II.68), para la concurrencia térmica, esta desarrollada para matrices de densidad expresadas en la base

computacional, por lo tanto, es necesario expresar la matriz de densidad (VI.8) en la base computacional. La transformación canónica de base, es del tipo $\rho = U\rho U^\dagger$, en donde,

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & B & 0 \\ 0 & C & D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{VI.10})$$

y constantes A , B , C y D están dadas por las amplitudes de los eigenvectores (VI.4) y (VI.5)

$$Z = 2e^{-\frac{1}{4}J\beta} \text{Cosh}[\beta\gamma_e B_z] + 2e^{\frac{1}{4}J\beta} \text{Cosh}\left[\frac{1}{2}\beta\sqrt{\#}\right]. \quad (\text{VI.11})$$

$$A = -\frac{\sqrt{1+\beta_0^2} (2\gamma_e dB_z + \sqrt{\#})}{\sqrt{2}(1-i\beta_0)\sqrt{\#+2\gamma_e dB_z}\sqrt{\#}}, \quad (\text{VI.12})$$

$$C = \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{2}\sqrt{\#+2\gamma_e dB_z}\sqrt{\#}}, \quad (\text{VI.13})$$

$$B = -\frac{\sqrt{1+\beta_0^2} (2\gamma_e dB_z - \sqrt{\#})}{\sqrt{2}(1-i\beta_0)\sqrt{\#-2\gamma_e dB_z}\sqrt{\#}}, \quad (\text{VI.14})$$

$$D = \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{2}\sqrt{\#-2\gamma_e dB_z}\sqrt{\#}}. \quad (\text{VI.15})$$

finalmente, la matriz de densidad en la base computacional queda expresada como,

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A^2\rho_2 + B^2\rho_3 & AC^*\rho_2 + BD^*\rho_3 & 0 \\ 0 & A^*C\rho_2 + B^*D\rho_3 & C^2\rho_2 + D^2\rho_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_4 \end{pmatrix} \quad (\text{VI.16})$$

en donde los ρ_i s son los elementos de la matriz de densidad (VI.8).

La estructura de bloques de la matriz de densidad (VI.16) permite utilizar la metodología presentada el cálculo de la concurrencia, $C = 2\max\left(0, |z| - \sqrt{u^+u^-}\right)$, presentada originalmente en la expresión (II.68), en donde z son las coherencias entre los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$, tal como se puede ver en la matriz de densidad (II.67) además

u^+ y u^- son las probabilidades de los estados $|\uparrow, \uparrow\rangle$ y $|\downarrow, \downarrow\rangle$ respectivamente. Donde identificamos,

$$z = AC^* \rho_2 + BD^* \rho_3 = \frac{1}{Z} \frac{J(1+\beta_0^2)}{\sqrt{\#}(1-i\beta_0)} e^{\frac{1}{4}\beta J} i \text{Senh}\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\#}\right), \quad (\text{VI.17})$$

donde,

$$|z| = \frac{1}{Z} \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{\#}} e^{\frac{1}{4}\beta J} \left| \text{Senh}\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\#}\right) \right|, \quad (\text{VI.18})$$

y de la misma forma,

$$\sqrt{u^+ u^-} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{4}\beta J}. \quad (\text{VI.19})$$

Aplicando los resultados (VI.9), (VI.18), (VI.19) en la relación (II.68), obtenemos la siguiente expresión para la concurrencia térmica en termino de z , u^+ y u^- ,

$$C = \text{Max} \left\{ 0, \frac{e^{\frac{1}{2}J\beta} \frac{J\sqrt{1+\beta_0^2}}{\sqrt{\#}} \left| \text{Senh}\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\#}\right) \right| - 1}{e^{\frac{1}{2}J\beta} \text{Cosh}\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\#}\right) + \text{Cosh}(\beta\gamma_e B_z)} \right\}, \quad (\text{VI.12})$$

esta propiedad expresa la capacidad del sistema de generar estados entrelazados como función de la temperatura. La concurrencia tiene un valor máximo de 1 y un valor mínimo de 0 que implica respectivamente un estado con máximo entrelazamiento o completamente desentrelazado. La ecuación (VI.19) predice un valor de la temperatura en donde el sistema pierde la capacidad de generar estados entrelazados, la cual recibe el nombre de temperatura crítica T_c . Esta puede encontrarse al considerar que el numerador

de la ecuación (VI.20) igual a cero. Lo que se obtiene es la condición, para $\beta_c = \frac{1}{k_B T_c}$,

$$e^{\frac{1}{2}J\beta_c} J\sqrt{1+\beta_0^2} \left| \text{Senh}\left(\frac{1}{2}\beta_c\sqrt{\#}\right) \right| = \sqrt{\#} \quad (\text{VI.21})$$

Utilizando la relación $\langle \sigma_{1z} \rangle = \text{Tr}[\rho S_{1z}]$ y la matriz de densidad (VI.16) podemos calcular también el valor esperado de la magnetización del espín 1 como función de la temperatura,

$$\langle \sigma_{1z} \rangle = \frac{1}{2} \frac{\text{Senh}(\beta\gamma_e B_z) - \frac{2\gamma_e dB_z}{\sqrt{\#}} e^{\frac{1}{2}\beta J} \text{Senh}\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\#}\right)}{\text{Cosh}(\beta\gamma_e B_z) + e^{\frac{1}{2}\beta J} \text{Cosh}\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\#}\right)}. \quad (\text{VI.22})$$

En el trabajo presentado en los capítulos 4 y 5, la evolución del los estados, y en consecuencia las propiedades calculadas, se localizada exclusivamente en el subespacio generado por los estados $|2\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|3\rangle = |\downarrow, \uparrow\rangle$, que es el subespacio con magnetización total $S_z = 0$. Sin embargo, en el estudio de propiedades térmicas es necesario incluir todos los estados de la base computacional, ya que el baño térmico genera transiciones entre los cuatro estados del sistema, y es en gran parte esto lo que genera la relajación de las probabilidades de ocupación de los estados del sistema y la perdida de las propiedades de entrelazamiento del sistema.

Estamos interesados es estudiar las propiedades de entrelazamiento y magnetización como función de la temperatura, para diferentes valores del campo magnético externo, del campo nuclear, caracterizada por σ y del término DM, β_0 .

Primero presentaremos un análisis de la concurrencia, magnetización y temperatura crítica como función de la temperatura en ausencia de campo nuclear, estudiaremos el efecto del campo magnético externo sobre dichas propiedades, en la siguiente sección analizaremos el efecto del término DM, β_0 , sobre estas propiedades. Estos cálculos al ser independientes del campo hiperfino no requieren un promedio estadístico y son relativamente directas de determinar.

Estos resultados servirán como referencia al incluir la interacción hiperfina en los cálculos de concurrencia, magnetización y temperatura crítica, en donde, es necesario realizar un promedio estadístico sobre realizaciones del campo magnético, como mencionamos el campo nuclear es considerado como una variable estocástica y por lo tanto relaciones analíticas para este caso no son fáciles de obtener.

VI.2. Propiedades térmicas en ausencia de campo hiperfino

Consideremos el caso en donde, en el Hamiltoniano (VI.1), el campo hiperfino es nulo ($\sigma = 0 \rightarrow B_N = 0$) y consideramos el campo magnético externo diferente a cero. Las

propiedades (VI.20) – (VI.22) se reducen de acuerdo con $\vec{B} = \vec{B}_{ext}^z$ y $d\vec{B} = 0$, y por lo tanto las propiedades de concurrencia, y magnetización se reducen a,

$$C = Max \left\{ 0, \frac{e^{\frac{1}{2}J\beta} \left| \text{Senh} \left(\frac{1}{2} \beta J \sqrt{1 + \beta_0^2} \right) \right| - 1}{e^{\frac{1}{2}J\beta} \text{Cosh} \left(\frac{1}{2} \beta J \sqrt{1 + \beta_0^2} \right) + \text{Cosh} \left(\beta \gamma_e B_{ext,z} \right)} \right\}, \quad (\text{VI.23})$$

$$\langle \sigma_{1z} \rangle = \frac{1}{2} \frac{\text{Senh} \left(\beta \gamma_e B_{ext,z} \right)}{\text{Cosh} \left(\beta \gamma_e B_{ext,z} \right) + e^{\frac{1}{2}J\beta} \text{Cosh} \left(\frac{1}{2} \beta J \sqrt{1 + \beta_0^2} \right)}, \quad (\text{VI.24})$$

y de la relación (VI.23) con la condición $C = 0$ se obtiene la siguiente relación para la temperatura crítica

$$e^{\frac{1}{2}J\beta} \left| \text{Senh} \left(\frac{1}{2} \beta_c J \sqrt{1 + \beta_0^2} \right) \right| = 1. \quad (\text{VI.25})$$

VI.2.1. Propiedades térmicas en función del campo magnético externo

La figura 33 muestra curvas de la concurrencia y de la magnetización térmica, expresadas por las ecuaciones (VI.23) y (VI.24), para $\beta_0 = 0$ y varios campos magnético externo.

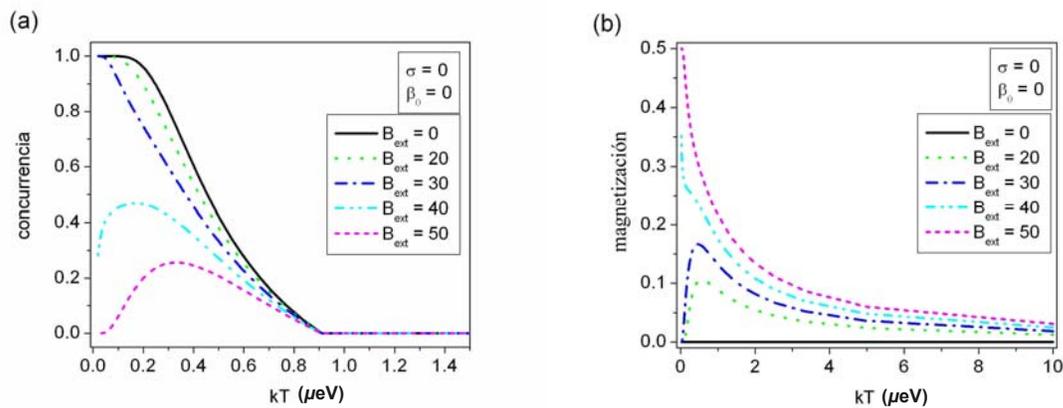


Figura 33: Concurrencia (a) y magnetización (b) como función de la temperatura en ausencia de campo hiperfino ($\sigma = 0$) e interacción DM ($\beta_0 = 0$). Se muestran curvas para valores del campo magnético externo desde 0 mT hasta 50 mT en paso de 10 mT.

La concurrencia, figura 33 (a), muestra que para valores grandes del campo magnético, mayores a 39 mT se presenta un máximo local a una temperatura T_1 , mientras que para la magnetización, figura 33 (b) el comportamiento es inverso, se observa un máximo local a una temperatura T_2 , para valores de hasta 39 mT. En la figura 34 ampliamos el rango de valores del campo magnético externo, de 39 mT a 50 mT de 2 mT para detallar el cambio de comportamiento de la naturaleza del máximo local que se presenta en la figura 33 y caracterizar la temperatura T_i .

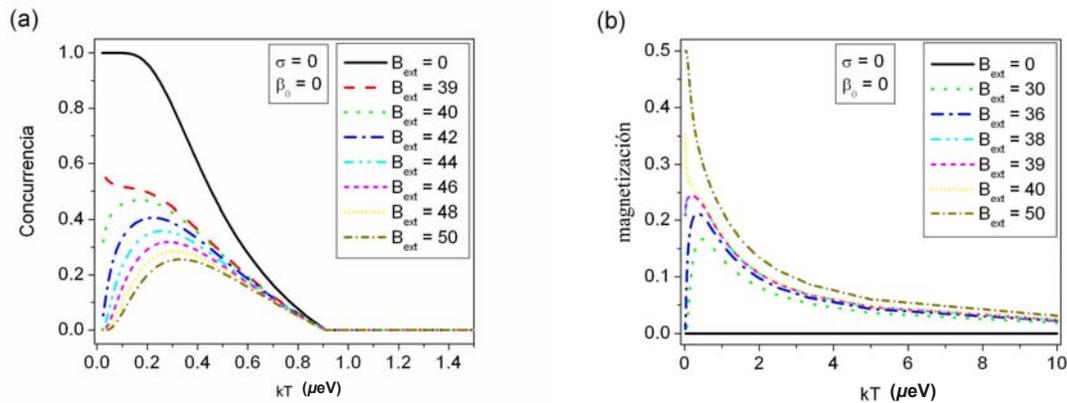


Figura 34: La concurrencia (a) y magnetización (b), en ausencia de campo hiperfino $\sigma = 0$ e interacción DM ($\beta_0 = 0$). Se incluye como referencia la curva con $B_{\text{ext}} = 0$. Para la concurrencia variamos el campo magnético externo desde 39 mT hasta 50 mT en pasos de 2 mT, para la magnetización se varia desde 30 mT hasta 50 mT.

Se observa de las figuras 33 (a) y 34 (a), para campos magnéticos menores a 39 mT, aproximadamente, la concurrencia decae monótonamente como función de la temperatura. Al aumentar el campo magnético externo, más allá de 39 mT, el valor de la concurrencia para temperaturas bajas disminuye, para después aumentar hasta un valor máximo de la concurrencia, $C_{\text{Max}}^{B_{\text{ext}}}$ a una temperatura T_1 .

El comportamiento monótono para valores pequeños del campo magnético externo se debe a que el factor dominante en el sistema es el término de intercambio, sin embargo, para valores superiores a 39 mT el comportamiento dominante es el Zeeman debido al campo magnético externo. La disminución de la concurrencia a temperaturas bajas, para valores del campo magnético externo grandes, se debe a que el campo externo polariza

los estados de espín y evoluciona al estado a bajas temperaturas a una aproximación del estado $|\uparrow, \uparrow\rangle$, que tiene concurrencia $C = 0$.

Se observa que la magnetización muestra un comportamiento inverso al presentado por la concurrencia, para valores menores a 39 mT presenta a una temperatura T_2 , un mínimo local, el cual, desaparece al aumentar el campo externo en valores superiores a 39 mT.

El comportamiento general de la temperatura de inhibir las propiedades de entrelazamiento y de magnetización, se explica al considerar que el acoplamiento con el baño térmico causa relajación y pérdida de coherencia en el sistema, que se refleja en la pérdida de la habilidad del sistema de generar entrelazamiento entre estados y en generar una mezcla cuasi simétrica de los eigenestados del sistema. Esta mezcla tendrá magnetización en el sitio 1 igual a cero, siempre y cuando las probabilidades de los estados $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ sean iguales, así como la los estados $|\uparrow, \uparrow\rangle$ y $|\downarrow, \downarrow\rangle$.

El máximo local para la concurrencia se presenta alrededor de 0.3 kT, los valores exactos de los máximos, $C_{Max}^{B_{ext}}$ y de su posición, T_1 se presentan la figura 35. Observamos que la amplitud del máximo disminuye a medida que el campo magnético externo aumenta, figura 35 (a). Por otro lado, la posición del máximo se desplaza a la derecha a medida que aumenta el campo magnético externo, como se muestra en la figura 35 (b).

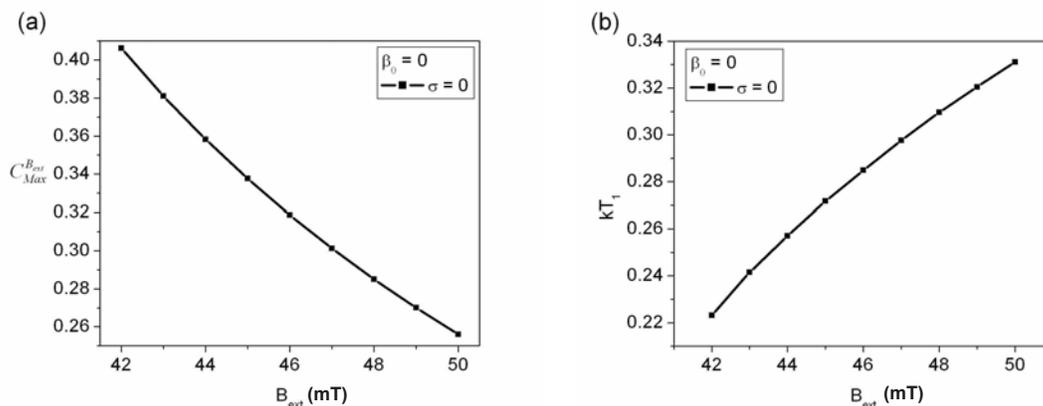


Figura 35: En la curva (a) se muestra la amplitud del máximo local de la concurrencia, $C_{Max}^{B_{ext}}$, como función del campo magnético externo. La curva (b) muestra la posición del máximo, kT_1 , como función del campo magnético externo.

Al hacer un análisis de las probabilidades de ocupación térmicas de los eigenestados del sistema, ecuaciones (VI.3) – (VI.6), podemos entender cualitativamente el esquema energético que lleva al sistema a tener un incremento local en la concurrencia. En este caso los eigenvectores son,

$$|v_1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle, \quad C = 0, \quad (\text{VI.26})$$

$$|v_2\rangle = -\frac{\sqrt{1+\beta_0^2}}{J(1-i\beta_0)}|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle, \quad C = 1, \quad (\text{VI.27})$$

$$|v_3\rangle = \frac{\sqrt{1+\beta_0^2}}{J(1-i\beta_0)}|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle, \quad C = 1, \quad (\text{VI.28})$$

$$|v_4\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle, \quad C = 0, \quad (\text{VI.29})$$

en donde, hemos incluido la concurrencia de cada eigenvector, en base al esquema presentado en la ecuación (III.59), $C(\psi) = |\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle|$ con $|\tilde{\psi}\rangle = \sigma_y \otimes \sigma_y |\psi^*\rangle$ ecuación (III.55). Es interesante notar que, aun cuando los eigenestados (VI.27) y (VI.28) tienen concurrencia máxima de 1, una suma simétrica de los estados $|v_2\rangle$ y $|v_3\rangle$ tendrá como resultado un estado con concurrencia igual a 0.

Las probabilidades de estos estados dada por $P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$. La figura 36, presenta el comportamiento de la concurrencia y como las probabilidades de los eigenestados afectan la concurrencia. En la figura 36 (a) se presentan estas propiedades para valores grandes del campo magnético externo, 50 mT, y en la figura 33 (b) para valores pequeños del mismo, 20 mT. La figura 35 (a) muestra, para $\beta_0 = 0.4$ y $B_{ext} = 50$ mT, las probabilidades como función de la temperatura, y para propósitos de la discusión agregamos la curva de la concurrencia.

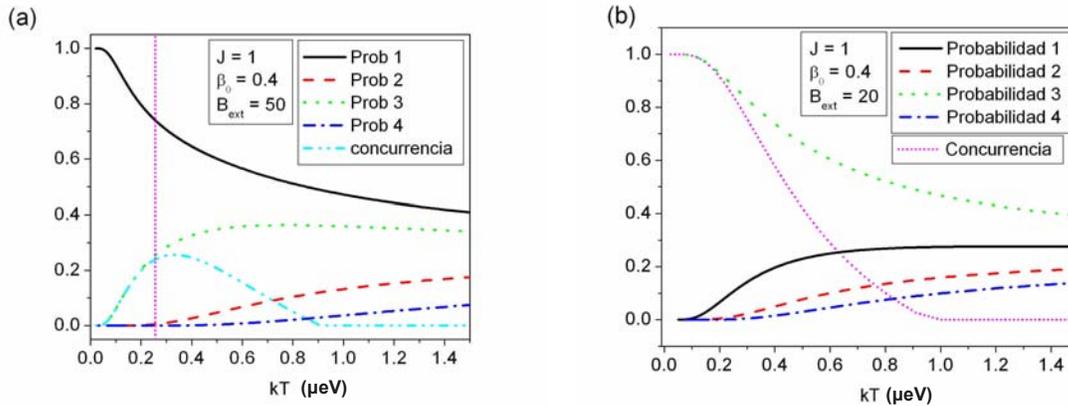


Figura 36: Probabilidad de los estados de la base computacional, $P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$ para y con una amplitud del término DM, $\beta_0 = 0.4$. La figura (a) muestra las probabilidades y la curva de la concurrencia para un campo magnético externo $B_{ext} = 50$ mT. La figura (b) muestra las probabilidades y la curva de la concurrencia para un campo magnético externo $B_{ext} = 20$ mT.

El máximo, para este caso, se encuentra entre de 0.2 y 0.28 meV y se observa que solo los estados $|\nu_1\rangle$ y $|\nu_3\rangle$ tienen probabilidad significativas. De los cuales solo el estado $|\nu_3\rangle$ tiene concurrencia distinta a cero, por lo que toda la contribución de la concurrencia del sistema esta dada por este estado. Después del máximo la probabilidad del estado $|\nu_2\rangle$, que es un estado con $C = 1$, es diferente a cero y se ver una desviación de la concurrencia con el valor de la probabilidad del estado $|\nu_3\rangle$, lo cual indica, que la temperatura a generado transiciones entre los estados $|\nu_1\rangle$ y $|\nu_3\rangle$, y dicha interacción afecta la concurrencia, que alcanza su máximo al aumentar la temperatura. Para temperaturas mayores las transiciones entre ambos estado se vuelven más probables, por lo tanto el valor de la concurrencia decaerá rápidamente a una combinación de estados con concurrencia igual a cero.

En la figura 36 (b), presentamos en el otro caso para $\beta_0 = 0.4$ y $B_{ext} = 20$ mT, se observa que la concurrencia tiene un valor máximo de 1 y se mantiene para bajas temperaturas, de 0 hasta alrededor de 0.2 kT y en este mismo intervalo vemos que la contribución principal a las probabilidades es por el estado $|\nu_3\rangle$, la probabilidad de este decae rápidamente mientras que la probabilidad de los otros engestado sube, es precisamente la contribución cuasi simétrica lo que reduce la concurrencia total, y para

altas temperaturas vemos que las probabilidades son básicamente iguales para los cuatro estados lo que hace que el sistema pierda propiedades de entrelazamiento.

Ahora, discutiremos la magnetización. Este tiene un comportamiento inverso al mostrado para la concurrencia. Para valores pequeños del campo magnético externo y de hasta un valor de alrededor de 39 mT, la magnetización presentara un mínimo local alrededor de 0.5 meV, tal como se ve en las figuras 33 (b) y 34 (b), y para valores superiores a este campo magnético externo el máximo local desaparece y la magnetización disminuye monótonamente como función de la temperatura.

De la figura 34 (b) se nota, que para valores del campo magnético externo, menores a 39 mT, se presenta un mínimo local de la magnetización. Para el rango de temperatura, donde se presenta este comportamiento, se observa en la figura 37, que la concurrencia y la magnetización satisface la condición, $C(t) = \left| \sqrt{1 - 4\sigma_z^2(t)} \right|$, ecuación (IV.27), para valores pequeños de la temperatura ($kT \leq \frac{1}{2}$), y el rango de valores de la temperatura en donde esta relación es valida disminuye a medida que aumenta el campo magnético externo, en particular en la figura 37 presentamos 6 valores de [0, 50] mT en paso de 10 mT.

y por lo tanto en este intervalo, la magnetización tiene un comportamiento inverso al de la concurrencia, y el máximo local se debe a una mezcla cuasi simétrica de los estados $|\uparrow, \uparrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$.

Para valores de la temperatura mayores a 0.5, observamos en las figuras 33 y 37 que la condición (IV.27) deja de satisfacerse. La figura 36 muestra que para valores de la temperatura mayores a 0.5 las probabilidades de los estados comienzan a mezclarse y por consiguiente la magnetización del espín 1 tiende a cero a medida que las probabilidades tienden a alcanzar valores simétricos.

Para valores del campo magnético externo mayor a 39 mT se observa que la magnetización térmica es una curva monótona decreciente, en donde, el decaimiento de la magnetización se debe a la combinación simétrica de los estados de la base computacional, es decir, el valor de la energía de Zeeman, que polariza a los espines de tal forma que entre mas grande el campo magnético mas cercano el valor inicial a 0.5,

compite con la energía térmica, la cual incrementa a medida que aumenta la temperatura combinando los estados, y por perdiendo polarización en los espines.

Resultados para la temperatura crítica, se dejaron para las siguientes secciones, ya que esta propiedad no depende del valor del campo magnético externo, como se ve en las expresiones (VI.24) y (VI.25).

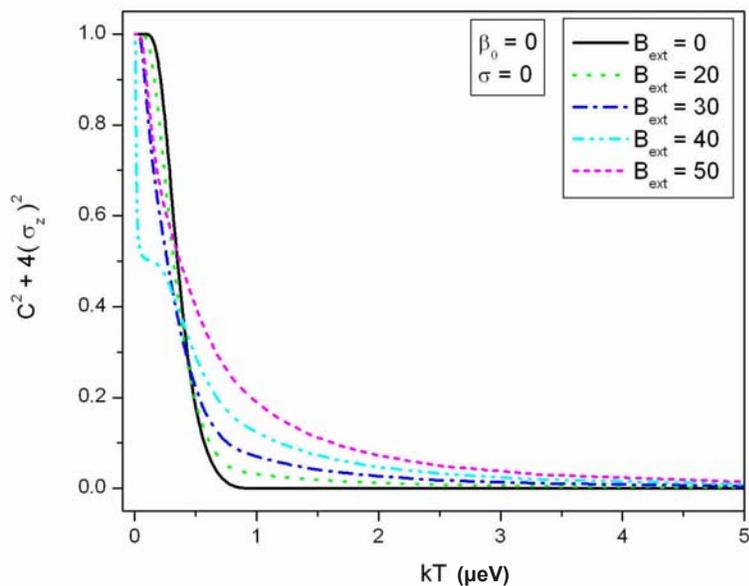


Figura 37: Curvas para la condición $c^2 + 4\sigma_z^2$, como función de la temperatura, para valores del campo magnético de 0 mT hasta 50 mT, en pasos de 10 mT.

VI.2.2 Propiedades térmicas en función del término DM

Hemos discutido el efecto del campo externo en la concurrencia y magnetización térmica. Sin embargo hemos excluido hasta este momento el efecto de la interacción DM en estas propiedades.

En la figura 37, presentamos curvas de la concurrencia (a) para 20 mT y (b) 50 mT y de la magnetización (c) para 20 mT y (d) para 50 mT para varios valores del término DM de [0,10] en incremento de 0.2 que asegura que observemos los comportamientos presentados en las figuras 33 y 34.

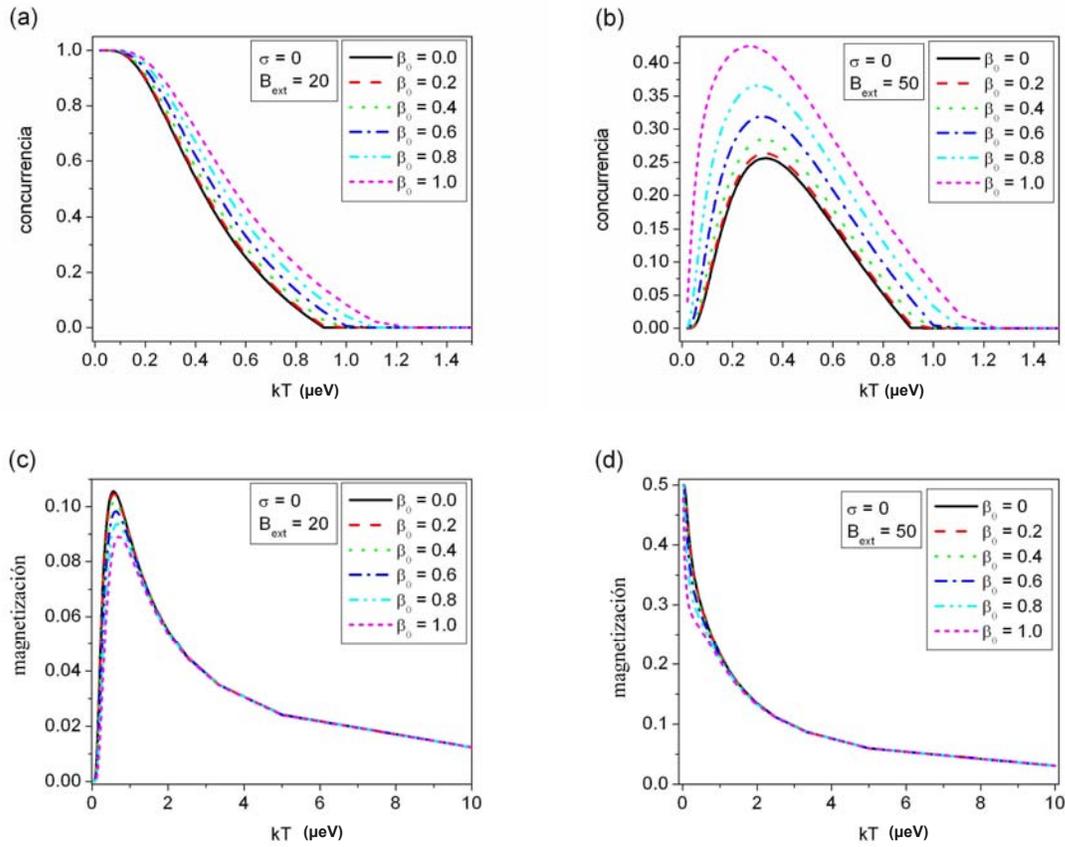


Figura 38: Concurrencia y magnetización como función de la temperatura, para diferentes valores de la amplitud del término DM, β_0 , desde 0 hasta 1 en paso de 0.2. Las figuras (a) y (d) muestran estas propiedades para campo magnético $B_{\text{ext}} = 20$ mT y las figuras (b) y (c) para $B_{\text{ext}} = 50$ mT.

Se observa, para ambos valores del campo magnético externo, que la concurrencia aumenta como función del término DM, por lo que podría pensarse en alguna metodología que involucre materiales con un acoplamiento espín – órbita grande para estados de mayor entrelazamiento en comparación a otros materiales con menor acoplamiento.

Es claro de la figura 38 (b) que la concurrencia presenta un máximo local para campos grandes, dicho máximo se incrementa con respecto al valor del término DM, β_0 . El valor del máximo puede demostrarse, mediante un ajuste numérico, que presenta un incremento de la forma $C_{\text{Max}}^{\beta_0} = P_1^{\beta_0} + P_2 (\beta_0)^2 + P_4^{\beta_0} (\beta_0)^4$, [véase figura 39 (a)], en donde los parámetros de ajuste son $P_1^{\beta_0} = 0.25632 \pm 0.00016$, $P_2^{\beta_0} = 0.17671 \pm 0.00098$ y $P_4^{\beta_0} = -$

0.00785 ± 0.00102 . También se observa que la posición del máximo disminuye al aumentar el valor del término DM. Un ajuste numérico también demuestra que será del tipo $kT_{\max}^{\beta_0} = a_{\beta_0} + b_{\beta_0} (\beta_0)^2 + c_{\beta_0} (\beta_0)^4$, véase la figura 39 (b), en donde $a_{\beta_0} = 0.33105 \pm 0.00024$, $b_{\beta_0} = -0.02246 \pm 0.00147$ y $c_{\beta_0} = -0.04142 \pm 0.00153$.

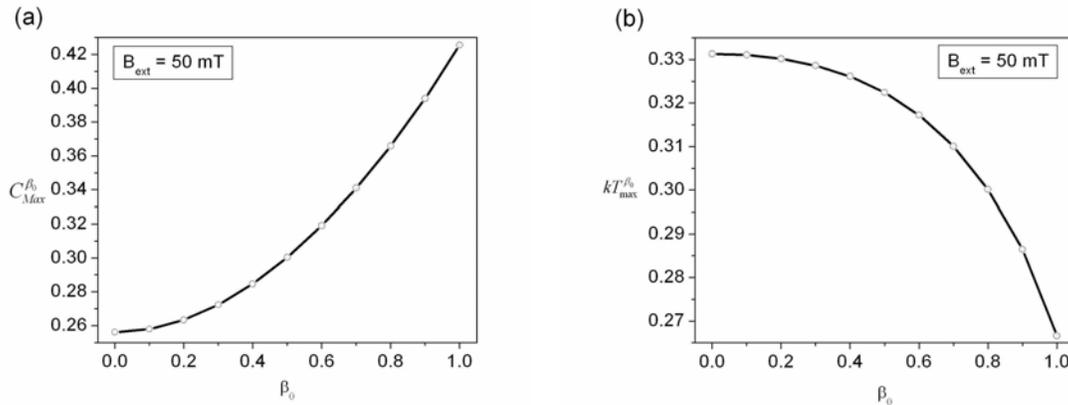


Figura 39: (a) Valor del máximo local de la concurrencia, $C_{Max}^{\beta_{ext}}$ como función del término DM, β_0 . (b) Posición del máximo, $kT_{\max}^{\beta_0}$, como función del término DM, β_0 . Para externo $B_{ext} = 50$ mT.

La magnetización como función de la temperatura se presentan en la figuras 38 (c) para $B_{ext} = 10$ mT y 38 (d) para $B_{ext} = 50$ mT para un rango de valores del término DM, β_0 , desde $[0, 1]$ en incrementos de 0.2. En la figura 38 (c) se observa que para valores pequeños del campo magnético externo a medida que aumenta el término DM, β_0 , la amplitud del máximo local disminuye. Para valores del campo magnético externo grandes, figura 38 (d) con $B_{ext} = 50$ mT, se observa que a temperaturas bajas la magnetización disminuye con β_0 . Para temperaturas altas se observa que la magnetización decae a cero.

Las figuras 39 (a) y 39 (b) muestran que el sistema pierde la capacidad de generar estados entrelazados hasta una temperatura crítica, T_c , la cual incrementa a medida que aumenta el valor del término DM. Este resultado es presentado de forma mas clara en la figura 40, en donde presenta la curva de la temperatura crítica, calculada numéricamente con ayuda de la ecuación (VI.25), la cual depende del término DM, β_0 y se demostró que

puede ser ajustada con una curva del tipo $T_c^{\beta_0} = A_{\beta_0} + B_{\beta_0,2}(\beta_0)^2 + C_{\beta_0,3}(\beta_0)^4$, con parámetros de ajuste $A_{\beta_0} = 0.91024 \pm 0.00002$, $B_{\beta_0,2} = 0.30213 \pm 0.00055$ y $C_{\beta_0,3} = -0.06851 \pm 0.00216$

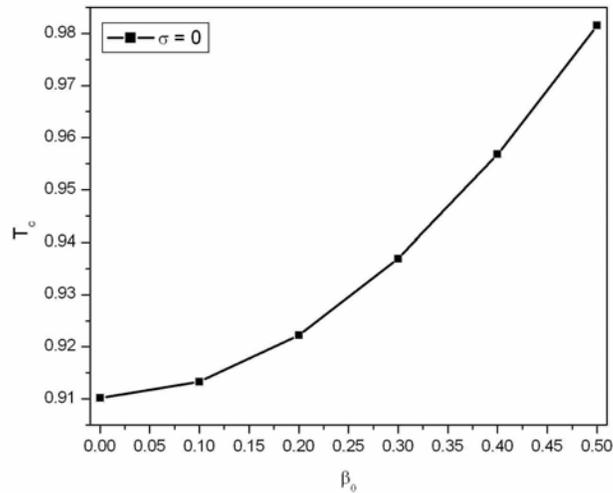


Figura 40: Temperatura crítica, T_c , como función del término DM, β_0 . La curva puede ajustarse utilizando una curva del tipo $T_c^{\beta_0} = A_{\beta_0} + B_{\beta_0,2}\beta_0^2 + C_{\beta_0,3}\beta_0^4$.

La figura 41 muestra la suma del cuadrado de la concurrencia más el cuadrado de la magnetización del espín 1, $C^2 + 4\sigma_{1z}^2$, como función de la temperatura, para varios valores del término DM. En particular, presentamos esta relación para dos valores del campo magnético, 20 y 50 mT, que presenta los dos comportamientos de la concurrencia y de la magnetización, para valores del término DM que varían en incremento de 0.2 de 0 hasta 1. Se observa en esta figura que esta relación decae más rápido para valores pequeños del campo magnético que para campos grandes.

Se observa en la figura 41, que para valores pequeños de la temperatura, la relación $C^2 + 4\sigma_{1z}^2 = 1$ es válida, sin embargo al aumentar la temperatura esta relación deja de ser válida pero se ve, en la figura 41 (a), para campos magnéticos externos pequeños, $B_{ext} = 20$ mT, que el intervalo de temperaturas donde es válida, aumenta ligeramente como función del término DM, β_0 .

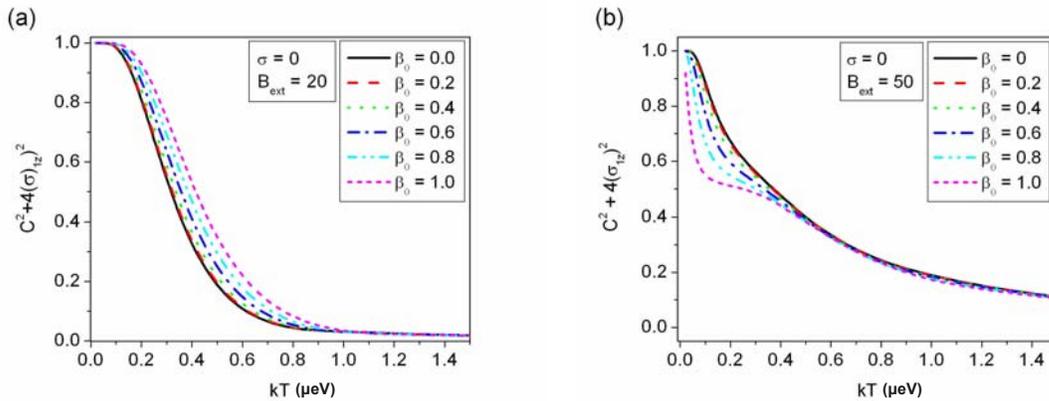


Figura 41: Presentamos curvas para la relación $c^2 + 4\sigma_{1z}^2$ como función de la temperatura. Las curvas se presentan para (a) $B_{ext} = 20$ mT y para (b) $B_{ext} = 50$ mT.

La figura 41 (a), se observa que el aumentar el valor del término DM, aumenta el rango de valores en donde la relación, $C^2 + 4\sigma_{1z}^2 = 1$, es valida, además se observa que el termino DM aumenta el valor esta relación, sin embargo, para valores de la magnetización grandes, $B_{ext} = 50$ mT, tal como lo muestra en la figura 41 (b), el rango de valores donde la relación, $C^2 + 4\sigma_{1z}^2 = 1$, es valida disminuye ligeramente como función del termino DM.

VI.3 Propiedades térmicas en presencia de campo hiperfino

Hemos discutido el efecto del campo magnético externo, y del término DM en la concurrencia y magnetización térmica del espín 1, así como en la temperatura crítica. Encontramos que el campo magnético externo tiene como efecto reducir el valor de la concurrencia a bajas temperaturas y aumentar los de la magnetización, además, se observa un valor del campo magnético en donde, para ambos casos la curva cambia de comportamiento, la concurrencia cambia de ser una curva estrictamente decreciente con la temperatura a una curva con un máximo local, mientras que la magnetización tiene un comportamiento inverso, para valores bajos del campo presenta curvas con un máximo local, para valores superiores del campo magnético la magnetización se convierte en una curva monótonamente decreciente.

Observamos, que la interacción DM, tiene como efecto en general incrementar el valor de la concurrencia y disminuir el valor de la magnetización. También se noto que la temperatura crítica aumenta como función de β_0 .

En la figura 42, presentamos figuras de la concurrencia térmica como función de la temperatura, para $\beta_0 = 0.4$. En cada figura se presenta una curva de referencia con $\sigma = 0$ y $B_{ext} = 0$ mT (curva negra sólida). Además, en cada figura se muestran curvas para los valores de la varianza del campo nuclear de $\sigma = 0$ (rayada roja), 2.3 (punteada verde), 4.6 (línea punto azul), 9.2 (línea doble punto azul claro) y 18.4 (línea corta magenta), para un valor específico del campo, el cual toma los valores de $B_{ext} = 20, 30, 35, 36, 37, 38$ y 39 mT que se muestran en las figuras 42 (a) - (h), respectivamente.

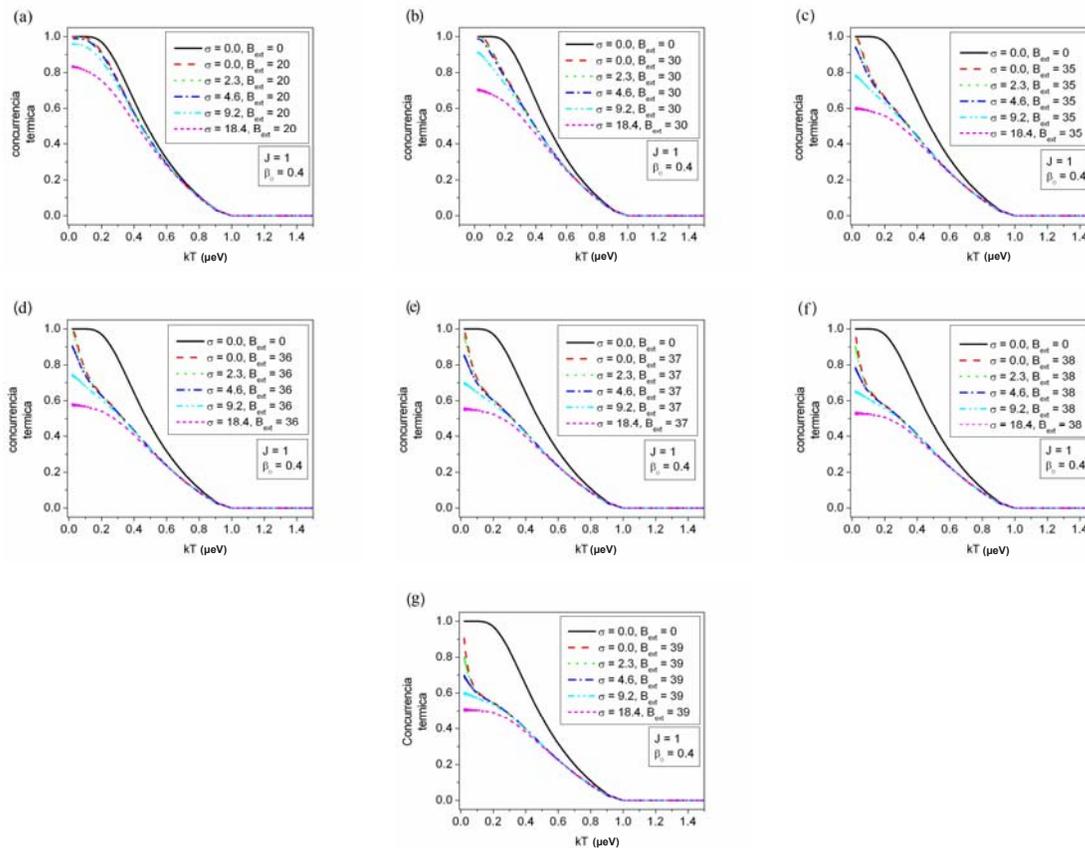


Figura 42: Concurrencia térmica, para $\beta_0 = 0.4$. Se presentan curvas para los valores de la varianza del campo hiperfino, $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 mT. Se presenta una curvas de referencia, para los valores $\sigma = 0$ y $B_{ext} = 0$ mT. Concurrencia para el campo externo de:

(a) $B_{ext} = 20$ mT. (b) $B_{ext} = 30$ mT. (c) $B_{ext} = 35$ mT. (d) $B_{ext} = 36$ mT. (e) $B_{ext} = 37$ mT. (f) $B_{ext} = 38$ mT. (g) $B_{ext} = 39$ mT.

Se observa que en el rango de 20 a 39 mT del campo magnético externo, la varianza genera una reducción en el valor de la concurrencia a bajas temperaturas, mientras que para valores grandes de la temperatura, el sistema pierde completamente las propiedades de entrelazamiento. En general la concurrencia, en este rango de valores del campo magnético externo, presenta un comportamiento estrictamente decreciente.

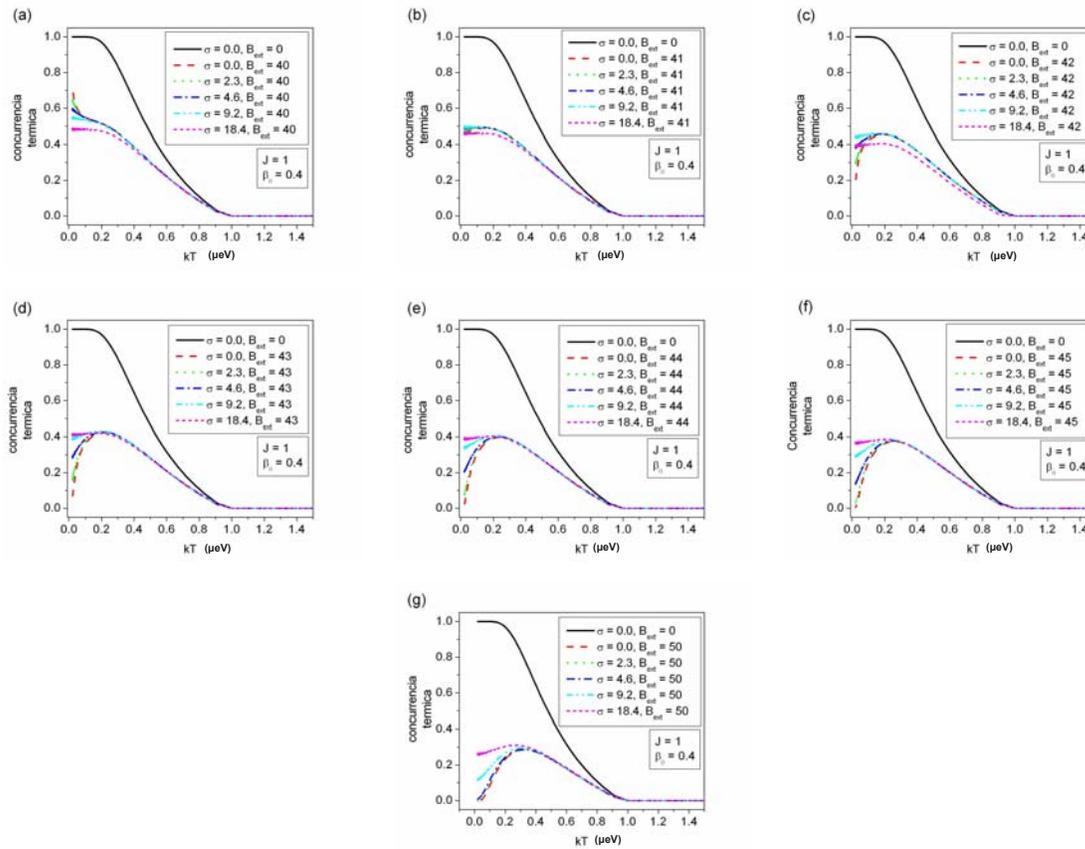


Figura 43: Concurrencia térmica para las mismas condiciones que las presentadas en la figura 39, excepto a los valores del campo magnético externo. (a) $B_{ext} = 40$ mT. (b) $B_{ext} = 41$ mT. (c) $B_{ext} = 42$ mT. (d) $B_{ext} = 43$ mT. (e) $B_{ext} = 44$ mT. (f) $B_{ext} = 45$ mT. (g) $B_{ext} = 50$ mT.

En la figura 43 presentamos curvas para la concurrencia térmica, bajo los mismos parámetros de la varianza y del término DM que aquellos de la figura 42, excepto que aquí el campo magnético externo toma los siguientes valores $B_{ext} = 40, 41, 42, 43, 44, 45$ y 50 mT. En este rango de valores del campo magnético observamos un cambio de comportamiento de la concurrencia, las curvas presentan un máximo local, alrededor de

0.3 kT y se observa que a temperaturas cercanas a cero la concurrencia aumenta como función de la temperatura. Estos comportamientos indica una competencia energética entre el campo externo, fijo en la componente z , y con el campo hiperfino, cuya naturaleza estocástica genera rotaciones en los espines electrónicos, alejando al estado inicial del estado $|\uparrow, \uparrow\rangle$ y por lo tanto aumentando la concurrencia del sistema.

En general se observa que el comportamiento de la concurrencia para campos magnéticos externos pequeños es inverso que para campos magnéticos externos para grandes.

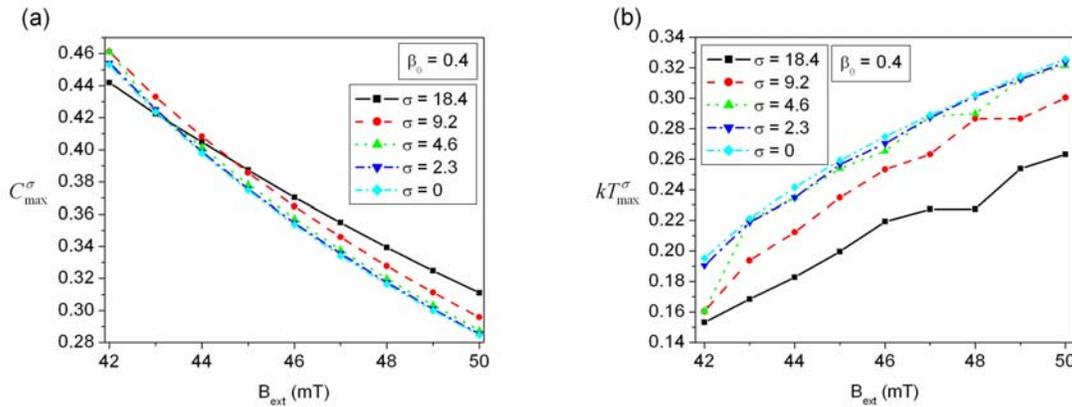


Figura 44: (a) amplitud del máximo de la concurrencia, C_{max}^σ , (b) posición, kT_{max}^σ , como función del campo magnético externo B_{ext} . Las curvas se presentan para valores de la varianza $\sigma = 0$, 2.3, 4.6, 9.2 y 18.4 mT y para un valor de $\beta_0 = 0.4$ para la interacción DM.

Los valores numéricos de de los máximos, C_{max}^σ , y de su posición, kT_{max}^σ como función del campo externo, se presentan en las figuras 44 (a) y (b) respectivamente. Observamos, en la figura 44 (a), que la amplitud del máximo, C_{max}^σ , disminuye como función del campo magnético y en general aumenta como función de la varianza del campo nuclear, σ . Mientras que la posición de este máximo, kT_{max}^σ , como se muestra en la figura 44 (b), se recorre a valores mayores de la temperatura como función del campo magnético, es decir, se recorre a la derecha, mientras que como función de la varianza, σ , el valor de la posición se recorre a valores menores de la temperatura, es decir se recorre a la izquierda. Observamos que mientras el campo magnético mueve al máximo hacia la derecha de la figura el campo nuclear lo recorre a la izquierda, entonces,

podemos asociar el efecto del campo estocástico unido como el campo magnético como si el sistema estuviera sometido a un campo externo de menor intensidad.

Ahora consideremos la condición (VI.21) para la temperatura crítica, la cual indica aquella temperatura en donde el sistema ha perdido la capacidad de generar estados entrelazados. En la figura 45 se presentan los valores de la temperatura crítica obtenidos al resolver numéricamente la ecuación (VI.20) para diferentes condiciones del campo hiperfino definido por σ .

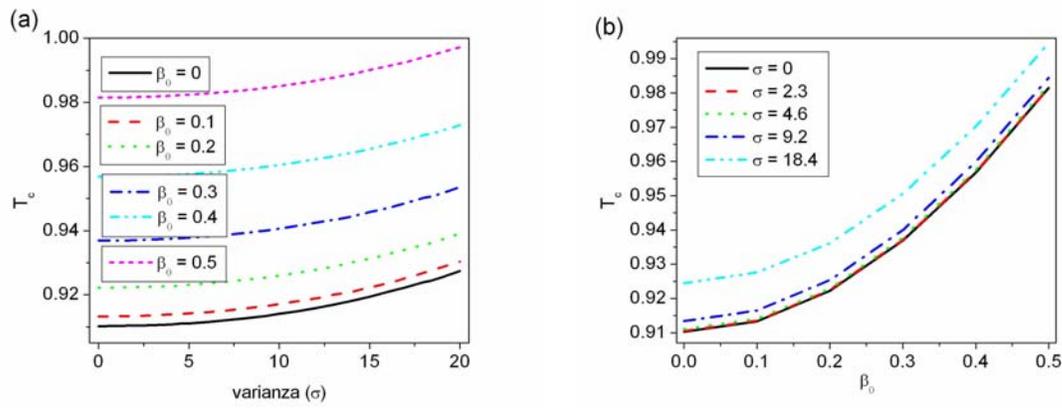


Figura 45: Temperatura crítica, T_c , como función de (a) la varianza, σ , con valores del término DM de $\beta_0 = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ y 0.5 y como función (b) el término DM, β_0 con valores de la varianza igual a $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 .

La figura 45 (a) muestra, para valores del término DM igual a $\beta_0 = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ o 0.5 , la temperatura crítica, T_c , como función de la varianza. Se observa que la temperatura crítica aumenta como función de la varianza, σ , y muestra un incremento polinomial, tal como se demuestra al ajustarle una curva del tipo $T_c^{\sigma, \beta_0} = P_0^{\sigma, \beta_0} + P_2^{\sigma, \beta_0} \sigma^2 + P_4^{\sigma, \beta_0} \sigma^4$. Además, la figura muestra que la temperatura crítica se incrementa con el valor del término DM, β_0 . La figura 45 (b) muestra, para valores de la varianza igual a $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ o 18.4 , la temperatura crítica como función del término DM, β_0 . Se observa que la temperatura crítica aumenta también de forma polinomial a medida que el término DM aumenta, y se le puede ajustar con una curva del tipo $T_c^{\beta_0, \sigma} = P_0^{\beta_0, \sigma} + P_2^{\beta_0, \sigma} (\beta_0)^2 + P_4^{\beta_0, \sigma} (\beta_0)^4$.

Las curvas muestran un incremento, al aumentar la varianza del campo hiperfino, ya que valores mayores de la varianza implican valores mayores del campo magnético nuclear, polarizando el espín electrónico y produce estados entrelazados.

La magnetización, se ha demostrado cumple con la relación $C(t) = \left| \sqrt{1 - 4\sigma_z^2(t)} \right|$, que la es una propiedad complementaria a la concurrencia. Por lo tanto presentamos resultados de la magnetización en la figura 45, que presenta resultados para la magnetización, para un valor de DM igual a $\beta_0 = 0.4$, como función de la temperatura. Se presenta un curva de referencia para cada figura con valores, $\sigma = 0$ y $B_{ext} = 0$, y en general se presentan 5 valores adiciones de la varianza $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ o 18.4 con un valor del campo magnético externo específico, el cual variamos de 20 a 50 mT en intervalos de 10 mT.

La figura 46 (a) muestra la magnetización para $B_{ext} = 20$ mT y se observa que muestra un máximo local en alrededor de 1 kT, y además se nota que la amplitud de este máximo aumenta a medida que aumenta el valor de la varianza a temperaturas grandes se observa que la magnetización decae a cero. Para la misma figura, notamos que el valor de la magnetización a temperaturas cercanas a cero, aumenta como función de la varianza, σ . Estos resultados son evidentes ya que el campo hiperfino no deja de ser un campo magnético que polariza los espines y por lo tanto aumenta la magnetización.

Las figuras 46 (b) – (d) muestran que al aumentar el campo magnético externo el valor de la magnetización para valores de la temperatura cercana a cero aumenta, y además el máximo local desaparece para campos magnéticos grandes

Podemos observar de estos resultados y aquellos presentados para la concurrencia, es que estos resultados son complementarios y tienen comportamiento inverso, por lo que, al menos a baja temperaturas, la relación, $C(t) = \left| \sqrt{1 - 4\sigma_z^2(t)} \right|$, es valida

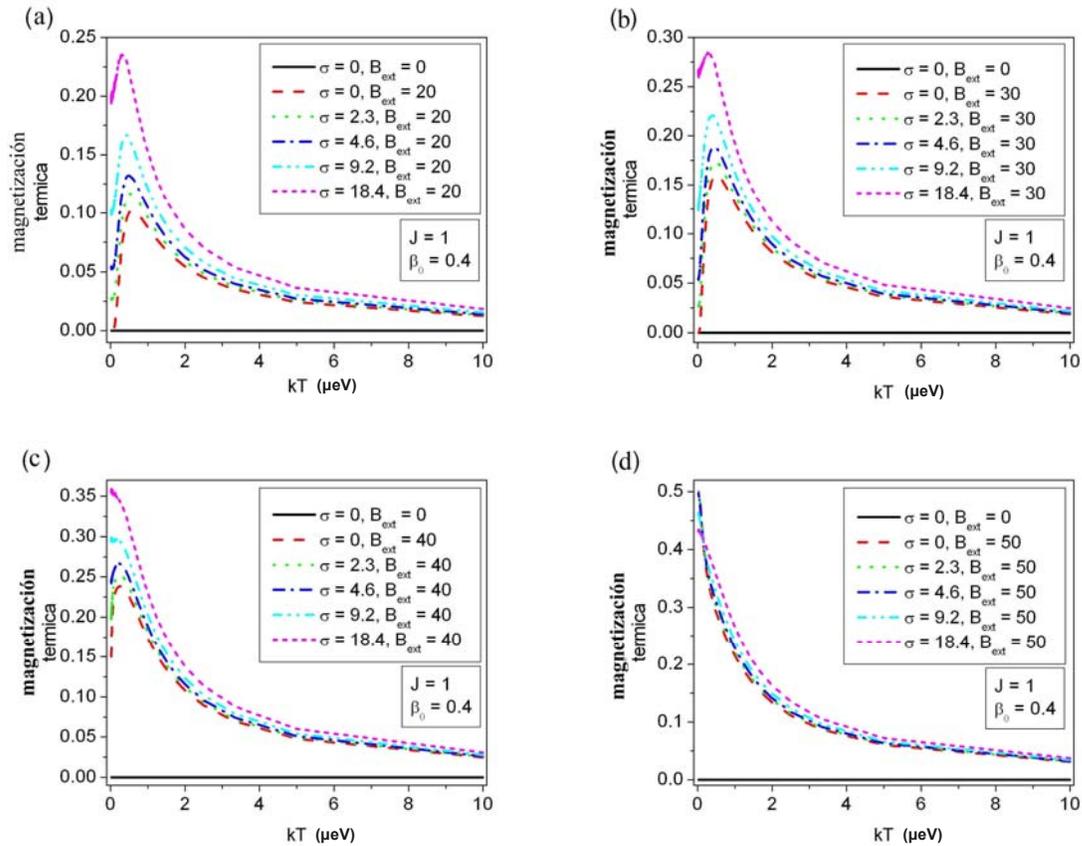


Figura 46: Magnetización del espín 1 como función de la temperatura en donde el valor del término DM, tiene un valor de $\beta_0 = 0.4$. Se presentan curvas para la varianza del campo hiperfino iguales a $\sigma = 0, 2.3, 4.6, 9.2$ y 18.4 . El valor del campo magnético externo se mantiene constante en cada figura y se muestra la variación de este de figura a figura. (a) $B_{ext} = 20$ mT, (b) $B_{ext} = 30$ mT, (c) $B_{ext} = 40$ mT, (d) $B_{ext} = 50$ mT. En cada figura se incluye una curva de referencia con $\sigma = 0$ y $B_{ext} = 0$ mT.

VI. Comentarios finales

Hemos presentado resultados analíticos y numéricos para la concurrencia térmica, y de la temperatura crítica, además, como complemento, se presentaron resultados para la magnetización del espín 1.

Se mostró que las propiedades de concurrencia dependen de la intensidad del campo magnético externo, y la conducta de estas propiedades tiene comportamiento diferente para valores pequeños y grandes del campo magnético externo. Para valores pequeños de

este, el valor de la concurrencia para valores cercanos a cero de la temperatura disminuyen a medida que aumenta el campo externo. Para valores grandes del campo externo se demostró que las curvas de la concurrencia presentan un mínimo local que disminuye su amplitud de forma polinomial con el campo externo y además que a medida que el campo aumentaba el máximo se presentaba a temperaturas mas altas. En este rango de valores del campo magnético la concurrencia a temperaturas muy próximas a cero incrementaba como función del campo magnético.

Las relaciones analíticas mostraron que bajo las condiciones establecidas para el Hamiltoniano (VI.1) la temperatura crítica no presenta dependencia con el rango de valores del campo magnético externo utilizado en trabajo. Sin embargo la relación (VI.12) que la condición $C = 0$ para temperatura crítica también será válida para valores del campo magnético externo excesivamente grandes en el rango de 1 T o mayores.

La influencia del término DM en la concurrencia se mostró para valores pequeños y grandes del campo magnético externo y se demostró que la concurrencia presenta un incremento en presencia de dicho término. Para valores grandes del campo magnético, se observó que la amplitud del máximo local aumenta polinomialmente como función del término DM y la localización de este se presenta a menores temperaturas a medida que aumenta la amplitud β_0 . La temperatura crítica presenta un crecimiento cuadrático con el término DM.

Estos resultados muestran que en sistemas en equilibrio termodinámico con un reservorio el término DM es un habilitador para las propiedades de entrelazamiento, por lo que experimentalmente es conveniente utilizar sistemas con valores grandes de β_0 , sin embargo a los resultados de los capítulos IV y V muestran que valores grandes de este término afectan a la operación de compuerta.

El campo hiperfino causa, para valores del campo magnético externo $B_{ext} < 39$ mT, que la concurrencia, a valores cercanos a cero de la temperatura, disminuya, mientras que para campos externos grandes la concurrencia aumenta.

Además, para valores grandes del campo magnético externo, se muestra que la varianza del campo nuclear, σ , causa que la amplitud del máximo local aumente, mientras que ocurre a menores temperaturas a medida que σ aumenta.

La temperatura crítica se demostró que aumenta ligeramente como función de la varianza, sin embargo, es dominante el efecto del término DM.

Los resultados de la magnetización se presentaron como complemento a los de la concurrencia y presentan una conducta inversa al presentado por la concurrencia, que demuestra que la relación $C(t) = \left| \sqrt{1 - 4\sigma_z^2(t)} \right|$ es válida para el sistema a bajas temperaturas.

Capítulo VII

Conclusiones y trabajo futuro

Hemos considerado al sistema de dos espines electrónicos acoplados, localizados en puntos cuánticos laterales, en donde, hemos incluido la interacción DM, causada por el potencial debido a la falta de simetría de inversión en materiales con estructura zincblenda o wurtzita y la interacción hiperfina con el campo magnético causado por los espines nucleares vecinos.

El efecto del término DM en la dinámica de la compuerta ($swap$) ^{α} fue presentado en el capítulo IV. Se encontró que dicho término agrega un error proporcional a $C_\alpha^2 \beta_0^2 / 4$, donde C_α es la concurrencia del estado- α , a la operación de compuerta y se encontró que mediante un esquema de corrección del pulso de la variable de intercambio es posible eliminar el error causado por el término DM en las probabilidades de estado, magnetización y concurrencia de la operación de compuerta. Sin embargo demostramos que el término DM agrega un error intrínseco a la operación de compuerta, que se refleja solamente en la fidelidad de la operación y que no puede ser corregido. Más aún, en este capítulo introducimos una relación, $C(t) = \left| \sqrt{1 - 4\sigma_z^2(t)} \right|$, que expresa al entrelazamiento, medido a través de la concurrencia, como función de la magnetización del espín 1, una observable, que consideramos puede ser demostrada bajo una preparación experimental adecuada.

En el capítulo V, se observó que la interacción hiperfina agrega error a la operación de compuerta ($swap$) ^{α} . En particular para las propiedades de probabilidades de estado, magnetización y concurrencia se observó que el error puede ser corregido con un esquema de pulsos y además se demostró que el error agregado varía de forma polinomial

con la varianza del campo magnético nuclear, es decir de la forma $\xi = P_0 + P_2\sigma^2 + P_4\sigma^4$, en donde ξ es cualquiera de estas propiedades. La fidelidad, sin embargo, presenta un comportamiento diferente, muestra un máximo local, el cual para valores del campo magnético externo menores que un valor crítico, $B_{ext} \ll B_c$, varía inversamente con la varianza del campo nuclear, después de este máximo la fidelidad se reduce drásticamente. Este efecto es evidente que está asociado con la naturaleza estadística del campo nuclear, y se observó que el esquema de pulsos presentado en el texto no es útil para corregir este error.

En el capítulo VI, se presentaron resultados para la concurrencia y magnetización térmica. Se demuestra que el comportamiento de ambas propiedades depende de la magnitud del campo magnético externo. Para valores pequeños de éste, la concurrencia presenta un comportamiento monótonamente decreciente con la temperatura mientras que para campos magnéticos externos presenta un máximo local. Mientras que la magnetización presenta a bajas temperaturas un comportamiento inverso al de la concurrencia lo cual demuestra, que al menos a bajas temperaturas la relación $C(t) = \left| \sqrt{1 - 4\sigma_z^2(t)} \right|$ es válida.

Observamos que el máximo en la concurrencia disminuye a medida que aumenta el campo magnético externo, mientras que la posición de éste se localiza a mayores temperaturas a medida que aumenta el campo magnético. También se observó que la relación entre la concurrencia y la magnetización es válida para bajas temperaturas, además, el rango donde esta relación es válida se vuelve mas corto al aumentar el campo magnético. El término DM tiene como efecto aumentar la amplitud del máximo local, siempre y cuando la condición del campo magnético sea la adecuado. Se demostró que la posición del máximo se presenta a menores temperaturas a medida que crece el valor de β_0 . El máximo en la magnetización disminuye con el término DM. La temperatura crítica aumenta a medida que aumenta el valor del término DM. La relación $C^2 + 4\sigma_z^2$ es válida a bajas temperaturas y el rango de valores de la temperatura donde es válida se incrementa con el término DM. Para valores pequeños del campo magnético, se demostró que la concurrencia disminuye como función de la varianza, σ , del campo nuclear,

mientras que para campos magnéticos grandes el valor de la concurrencia, para temperaturas bajas, aumenta como función de la varianza. La amplitud del máximo en la concurrencia aumenta con la varianza, mientras que la temperatura, en donde se localiza el máximo disminuye a medida que la varianza aumenta. La temperatura crítica aumenta de forma polinomial con la varianza, σ .

En resumen, estos resultados indican que el campo magnético externo, en general destruye las propiedades de entrelazamiento mientras que la interacción DM promueve las propiedades de entrelazamiento y aumenta la temperatura crítica del sistema. Mientras que el campo hiperfino tiene un comportamiento mixto, para valores pequeños del campo magnético externo la interacción hiperfina disminuye las propiedades de la concurrencia, mientras que para campos grandes promueve el entrelazamiento del sistema.

En general nuestro trabajo ha sido realizado en el subespacio $S_z = 0$, lo cual ha restringido al término DM a sólo su componente en z . Por lo tanto, sería interesante considerar a todas las componentes del término DM, en el proceso de evaluación de la compuerta $(swap)^\alpha$, que implicaría un análisis más detallado para determinar si un esquema de modificación del pulso de intercambio, como el presentado aquí, es suficiente para controlar los estados del sistema para obtener alguna corrección en alguna de las cuatro propiedades presentadas en esta tesis. Consideramos que un análisis completo de esta situación deberá incluir condiciones en donde $(\beta_0)_z = (\beta_0)_x = (\beta_0)_y$ y $(\beta_0)_z \neq (\beta_0)_x = (\beta_0)_y$.

En nuestro trabajo hemos considerado la propuesta de Loss y DiVincenzo, que consiste en considerar a la variable de intercambio, J , como una variable dinámica con el fin de controlar los estados del sistema. Sin embargo, es posible considerar al término DM como una variable dinámica, por lo que un análisis del efecto de este sobre la operación de compuerta es interesante. Un análisis de este tipo lleva a la considerar en que clase de sistemas la interacción espín – órbita es controlable, la respuesta evidente, en sistemas bidimensionales con espín – órbita tipo Rashba, por lo tanto es interesante considerar una interacción tipo Rashba al momento de calcular el Hamiltoniano de súper intercambio, esperamos que este Hamiltoniano sea muy similar al presentado en el texto,

ecuación (III.14) y en donde la variable β_0 tenga una relación íntima con la β de Rashba.

El Hamiltoniano (III.23) es el resultado de considerar al campo magnético externo mucho mayor al campo magnético nuclear, lo cual provoca una separación de los subsistemas de (III.23). Sin embargo, es interesante considerar este sistema para campos magnéticos pequeños, en donde se consideran todos los términos del campo nuclear. Bajo esta consideración veríamos una modificación de las eigenenergías y eigenvectores del sistema lo cual modificaría a los resultados para la concurrencia y magnetización térmica. También, bajo la propuesta de Loss y DiVincenzo, modificaría la dinámica del sistema.

Nos hemos enfocado en gran parte a medir la capacidad del sistema en generar estados entrelazados y en utilizar dicho recurso como una medida del proceso de la operación de compuerta, esto no es un evento único en la investigación en computación e información cuántica, ya que se ha identificado al entrelazamiento como el recurso principal en ambas áreas. El entrelazamiento de sistemas bipartitos, como dos espines electrónicos acoplados, está bien caracterizado [Wooters, 2008], sin embargo el entrelazamiento para sistemas tripartitos es una área relativamente joven y aún no se ha caracterizado y explorado lo suficiente [Röthlisberger et al., 2008]. Por lo tanto con la experiencia obtenida en el análisis de sistemas bipartitos es interesante extender a sistemas tripartitos en donde podemos caracterizar el efecto del término DM, del un campo magnético externo, campo nuclear y el efecto de un reservorio térmico sobre procesos de entrelazamiento en sistemas de tres espines.

Referencias

- Abragam, A. 1961. "The principles of Nuclear Magnetism". Oxford University Press. Oxford. 599 pp.
- Abragam, A, y B. Bleaney. 1986. "Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions". Dover. New York. 926 pp.
- Anderson, P. W. 1959. "New Approach to the Theory of Superexchange Interactions". Phys. Rev. **115**: 2 - 13
- Asoudeh, M., V. Karimipour. 2004. "Thermal entanglement of spins in the Heisenberg model at low temperatures". Phys. Rev. A. **70**: 052307-1-6.
- Asoudeh, M., V. Karimipour. 2005. "Thermal entanglement of spins in an inhomogeneous magnetic field". Phys. Rev. A. **71**: 022308-1-6.
- Asoudeh, M., V. Karimipour. 2006. "Thermal entanglement of spins in mean-field clusters". Phys. Rev. A. **73**: 062109-1-8.
- Aspect, A., P. Grangier y G. Roger. 1982. "Experimental realization of Einstein-Podolski-Rosen Gedankenexperiment: A new violation of Bell's inequality". Phys. Rev. Lett. **49**: 91-94.
- Auerbach, Assa. 1994. "Interacting Electrons and Quantum Magnetism". Springer-Verlag. New York, 255 pp.
- Averin, D. V. 1998. "Adiabatic quantum computation with cooper-pairs". Sol. State. Comm. **105**: 659-654.
- Awschalom, D. D., D. Loss, y N. Samarth. 2002. "Semiconductor spintronics and quantum Computing", Springer , New York. 315 pp.
- Barnes, C. H. W., J. M. Shilton y A. M. Robinson. 2000. "Quantum computation using electrons trapped by surface acoustic waves". Phys. Rev. B. **62**: 8410-8419.
- Barret, M. D. J. Chiaverini, T. Schaetz, J. Britton, W. M. Itano, J. D. Jost, E. Knill, C. Langer, D. Leibfried, R. Ozeri y D. J. Wineland. 2004. "Deterministic quantum teleportation of atomic qubits". Nature. **429**: 737-739.
- Bell, J. S. 1964. "On the Einstein-Podolski-Rosen Paradox". Physics. **1**:195-200
- Bennett, C. H. y S. J. Wiesner. 1992. "Communication via One and Two-particle Operators on Einstein-Podolski-Rosen States". Phys. Rev. Lett. **69**: 2881-2884.

- Bennett, C. H., G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, y W. K. Wootters. 1993. “Teleporting and Unknown Quantum State Via Dual Classical and Einstein-Podolski-Rosen Channels”. *Phys. Rev. Lett.* **70**: 1895-1899.
- Bennett, C. H. 1995. “Quantum Information and Computation”. *Physics Today*. **48**: 24-31.
- Blater, G. 2003. “The qubit duet”. *Nature*. **421**: 796-797.
- Blinov, B. B., D. L. Moehring, L. M. Duan y C. Monroe. 2004. “Observation of entanglement between a single trapped atom and a single photon”. *Nature* **428**” 153-157.
- Blum, K. 1981. “Density Matrix Theory and applications” Plenum Press. Primera Edición. New York. 217
- Bonesteel, N. E., D. Stepanenko y D. P. DiVincenzo. 2001. “Anisotropic Spin Exchange in Pulsed Quantum Gates” . *Phys. Rev. Lett.* **87**: 207901-1-4.
- Bouwmeester, D. y A. Zeilinger. 2000. “The physics of quantum information: Basics concepts”. En: D. Bouwmeester, A. Ekert y A. Zeilinger (eds.). *The physics of quantum information*. Springer. Primera Edición. Berlín. 314 pp.
- Bose, S., V. Vedral y P. L Knight. 1998. “Multiparticle generalization of entanglement swapping”. *Phys. Rev. A.* **57**: 822-829.
- Bose, S., V. Vedral y P. L Knight. 1998. “Multiparticle generalization of entanglement swapping”. *Phys. Rev. A.* **57**: 822-829
- Bracker, A. S., E. A. Stinaff, D. Gammon, M. E. Ware, J. G. Tischler, A. Shabaev, Al. L. Efros, D. Park, D. Gershoni, V. L. Korenev, I. A. Merkulov. 2005. “Optical Pumping of the Electronic and Nuclear Spin of Single Charge-Tunable Quantum Dots”. *Phys. Rev. Lett.* **94**: 047402-1-4
- Brassard, G. and Bennett, C.H., *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Systems and Signal Processing*, 1984.
- Braun P.-F., X. Marie, L. Lombez, B. Urbaszek, T. Amand, P. Renucci, V. K. Kalevich, K. V. Kavokin, O. Krebs, P. Voisin y Y. Masumoto. 2005. “Optical Pumping of the Electronic and Nuclear Spin of Single Charge-Tunable Quantum Dots”. *Phys. Rev. Lett.* **94**: 116601-1-4.
- Braunstein, S. L., C. M. Caves, R. Jozsa, N. Linden, S. Popescu, y R. Schack. 1999. “Separability of Very Noisy Mixed States and Implications for NMR Quantum Computing”. *Phys. Rev. Lett.* **83**: 1054-1-4.

- Brooks, M. 1999 “Quantum computing and communications”. Springer. Primera Edición. Cambridge. 152 pp .
- Burkard, G., D. Loss, y D. P. DiVincenzo. 1999. “Coupled quantum dot as quantum gates”. *Phys. Rev. B.* **59**: 2070-1-9.
- Burkard, G., D. Loss. 2002. “Cancellation of Spin-Orbit Effects in Quantum Gates Base don the Exchange Coupling in Quantum Dots”. **88**: 047903-1-4.
- Bychkov, Y. A. y E. I. Rashba. 1984. “”. *JETP Lett.* **39**: 78.
- Cerletti V, W. A. Coish, O. Gywat y D. Loss. 2005. “Recipes for spin-based quantum computing”. *Nanotechnology.* **16**: R27-R49.
- Chiorescu, I. P. Bertet, K. Semba, Y. Nakamura, C. J. P. M. Harmans y J. E. Mooik. 2004. “Coherent dynamics of a flux qubit coupled to a harmonic oscillator”. *Nature.* 431: 159-162.
- Chouikha, W. B., S. Jaziri y R. Bennaceur. 2003. “Measure of entanglement status of two interacting electrons in vertically coupled quantum dots induced by time-dependent electric field”. *J. Supercond. Inc. N. Mag.* **16**: 313-317.
- Chuang, I. L., L. M. K. Vandersypen, X. Zhou, D. W. Leung y S. Lloyd. 1996. “Experimental realization of a quantum algorithm”. *Nature.* **393**: 143-146
- Chutia S., M. Friesen y R. Joynt. 2006. “Detection and mesurement of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in double quantum dot systems”. *Phys. Rev B* **73**: 241304-1-4.
- Cirac, J. I. y P. Zoller. 1995. “Quantum computations with cold trapped ions”. *Phys. Rev. Lett.* **74**: 4091-1-4.
- Cohen-Tannoudji, C., B. Diu y F. Laloe. 1977. “Quantum Mechanics Vol. I.. John Wiley and Sons. Primera Edición. New York. 900 pp.
- Coish W. A., D. Loss. 2004. “Hyperfine interaction in a quantum dot: Non-Markovian electron spin dynamics”. *Phys. Rev. B* **65**: 205309-1-8.
- Coish W. A., D. Loss. 2005. “Singlet-triplet decoherence due to nuclear spins in a double quantum dot”. *Phys. Rev. B* **72**: 125337-1-12.
- Cory, D. G., R. Laflamme. E. Knill, L. Viola, T. F. Havel, Boulant, E. Fortunato, S. Lloyd, R. Martinez, M. Pravia, Y. Sharf, G. Teklemariam, Y. S. Weinstein y W. S. Zurek. 2000. “NMR based quantum information processing: Achievements and prospects”. *Forts. Phys.* **48**: 875-907.

- Crooker et al. 1997. "Optical spin resonance and transverse spin relaxation in magnetic semiconductor quantum wells". *Phys. Rev. B.* **56**: 7574-7588.
- Davidovich, L., N. Zagury, M. Brune, J. M. Raimond y S. Haroche. 1994. "Teleportation of an atomic state between two cavities using nonlocal microwave fields". *Phys. Rev. A.* **50**: 895-898.
- Deng, C., X. Hu. 2006. "Analytical solution of electron spin decoherence through hyperfine interaction in a quantum dot" *Phys. Rev. B.* **73**: 241303-1-4.
- Deutsch, D. 1985. "Quantum Theory, the Church-Turing Principle, and the Universal Quantum Computer". *Proc. Roy. Soc. Lond. A400* (1985) pp. 97-117.
- De Llano, M. 1996. "Mecánica Cuántica". UNAM Facultad de Ciencias. Primera Edición. México. 243 pp.
- de Sousa, R., S. Das Sarma. 2003. "Theory of nuclear-induced spectral diffusion: Spin decoherence of phosphorus donors in Si and GaAs quantum dots". *Phys. Rev. B.* **67**: 033301-1-13.
- de Sousa, R., S. Das Sarma. 2003. "Electron spin coherence in semiconductors: Considerations for a spin-based solid-state quantum computer architecture". *Phys. Rev. B.* **68**: 115322-1-13.
- Dirac, P. A. M. 1982. "The Principles of Quantum Mechanics". Oxford University Press. U.S.A. 314 pp.
- DiVincenzo, D. P. 2000. "The Physical Implementation of Quantum Computation". *Fortscher. Phys.* **48**: 771-783.
- DiVincenzo, D. P., D. Bacon, J. Kempe, G. Burkard, y K. B. Whaley. 2000. "Universal quantum computation with the exchange interaction". *Nature.* **408**: 339-342.
- Dresselhaus, G. 1955. "Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures". *Phys. Rev.* **100**: 580-586.
- Dür, W., G. Vidal, y J. I. Cirac. 2000. "Three qubits can be entangled in two inequivalent ways". *Phys. Rev. A.* **62**: 06234-1-12.
- Dutt, M. V. G., J. Cheng, B. Li, X. Xu, X. Li, P. R. Berman, D. G. Steel, A. S. Bracker, D. Gammon, S. E. Economou, R.-B. Liu y L. J. Sham. "Stimulated and Spontaneous Optical Generation of Electron Spin Coherence in Charged GaAs Quantum Dots". *Phys. Rev. Lett.* **94**: 227403-1-4.

- D'yakonov, M. I. y V. Y. Kachorovskii. 1986. "Nonmagnetic semiconductor spin transisto". *Sov. Phys. Semicond.* **20**: 110.
- Dzialoshinski, I. 1958. "A Thermodynamics Theory of Weak Ferromagnetism of Antiferromagnetism". *J. Phys. Chem. Solids.* **4**: 241-255.
- Einstein, A., B. Podolsky, N, Rosen. 1935. "Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?". *Phys. Rev.* **47**: 777-780.
- Erlingsson, S. I., Y. V. Nazarov, y V. I. Fal'ko. 2001. "Nucleus-mediated spin-flip transitions in GaAs quantum dots". *Phys. Rev. B.* **64**: 195306-1-4.
- Erlingsson, S. I., y Y. V. Nazarov. 2004. "Evolution of localized electron spin in a nuclear spin environment". *Phys. Rev. B.* **70**: 205327-1-9.
- Erlingsson, S. I., O. N. Jouravlev, y Y. V. Nazarov. 2005. "Coherent oscillations of current due to nuclear spins". *Phys. Rev. B.* **72**: 033301-1-4.
- Ekert, A. K. 1991. "Quantum cryptography based on Bell's theorem". *Phys. Rev. Lett.* **67**: 661-663.
- Engel, H. A., L. P. Kouwenhoven, D. Loss y C. M. Marcus. 2004. "Controlling Spin Qubits in Quantum Dots". *Quant. Inf. Pro.* **3**: 115-132.
- Fan, H., Vwani Roychowdhury, and Thomas Szkopek. 2005. "Optimal two-qubit quantum circuits using exchange interactions". *Phys. Rev. A.* **72**: 052323-1-4.
- Fattal, D., K. Inoue, J. Vuckovic, C. Santori, G. S. Solomon y Y. Yamamoto. 2004. "Entanglement Formation and Violation of Bell's Inequality with a Semiconductor Single Photon Source". *Phys. Rev. Lett.* **92**: 037903-1-4.
- Fano, U. 1957. "Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques". *Rev. Mod. Phys.* **29**: 74-93.
- Feshbach, H. 1962. "A unified Theory of Nuclear Reactions". *Annals of Physics.* **19**: 287-313.
- Feynman, R. P. "Simulating Physics with Computers" *International Journal of Theoretical Physics*, Vol. 21 (1982) pp. 467-488.
- Fujisawa, T., D. G. Austing, Y. Tokura, Y. Hirayama, y S. Tarucha. 2002. "Allowed and forbidden transitions in artificial hydrogen and helium atoms". *Nature.* **419**: 278-281.

- Galindo, A., y Martín-Delgado, M. A. 2002. “Information and computation: Classical and quantum aspects” *Rev. of Mod. Phys.* **74**: 347-423.
- García-Maraver, R., R. Corbalán, K. Eckert, S. Rebia, M. Hartón y J. Mompart. 2004. “Cavity QED quantum phase gates for a single longitudinal mode of the intra cavity field”. *Phys. Rev. A.* **70**: 062324-1-6.
- Gershenfeld, N. A. e I. L. Chuang. 1997. “Bulk spin-resonance quantum computation”. *Science.* **275**: 350-356.
- Golovach, V. N., A. Khaetskii y D. Loss. 2004. “Phonon-Induced Decay of Electron Spin in Quantum Dots” *Phys. Rev. Lett.* **93**: 016601-1-4.
- Grover. L. K. 1996. “A fast quantum mechanical algorithm for database search”. *Proc. 28th ACM Symp. Theory of Computing.* **2**: 212-219.
- Häffner, E., W. Hansel, C. F. Roos, J. Benhelm, D. Chek-al-kar, M. Chwalla, T. Korber, U. D. Rapol, M. Riebe, P. O. Schmidt, C. Becher, O. Guhne, W. Dur y R. Blatt. 2005. “Scalable multiparticle entanglement of trapped ions”. *Nature.* **438**: 643-646.
- Hanson, R., L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, L. M. K. Vandersypen. 2007. “Spins in few-electron quantum dots”. *Rev. of Mod. Phys.* **79**: 1217-1265.
- Hanson, R., G. Burkard. 2007. “Universal set of quantum gates for double-dot qubits with fixed interdot coupling”. *Phys. Rev. Lett.* **98**: 050502.
- Hanson, R., L. H. Willems van Beveren, I. T. Vink, J. M. Elzerman, W. J. M. Naber, F.H. L. Koppens, L. P. Kouwenhoven, y L. M. K. Vandersypen. 2005. “Single-Shot Readout of Electron Spin States in a Quantum Dot Using Spin-Dependent Tunnel Rates”. *Phys. Rev. Lett.* **94**: 196802
- Heitler, W, y F. London. 1927. *Zeitschrift für Physik.* **44**: 455. *Quantum Chemistry: Classic Scientific Papers.* 2000. World Scientific Publishing Company. 500 pp
- Hichri, A. S. Jaziri y R, Ferreira. 2004. “Entangled Bell status of two electrons in coupled quantum dots-phonon decoherence”. *Physica E.* **24**: 234-243.
- Hill, S. y W. K. Wootters. 1997. “Entanglement of a pair of quantum bits”. *Phys. Rev. Lett.* **78**: 5022-5025.
- Hughes, R, J., Morgan, G. L. y Peterson, C. G. 2000. “Quantum key distribution over a 48 km optical fibre network”. *J. Mod. Optics.* **47**: 533-547.

- Hu, X., y S. Das Sarma. 2006. “Charge-Fluctuation-Induced Dephasing of Exchange-Coupled Spin Qubits”. *Phys. Rev. Lett.* **96**: 100501-1-4.
- Jelezko, F., T. Gaebel, I. Popa, M. Domhan, A. Gruber, and J. Wrachtrup. 2004. “Observation of Coherent Oscillation of a Single Nuclear Spin and Realization of a Two-Qubit Conditional Quantum Gate”. *Phys. Rev. Lett.* **93**: 130501-1-4.
- Johnson, A. C., J. R. Petta, J. M. Taylor, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. 2005. “Triplet-singlet spin relaxation via nuclei in a double quantum dot”. *Nature*. **435**: 925-934.
- Kane, B. E. 1998. “A silicon-based nuclear spin quantum computer”. *Nature*. **393**: 431-548.
- Kaplan, T. A., y C. Piermarocchi. 2004. “Spin swap double occupancy in quantum gates”. *Phys. Rev. Lett.* **70**: 161311-1-4
- Kavokin, K. V. 2001. “Anisotropic exchange interaction of localized conduction-band electrons in semiconductors”. *Phys. Rev. B.* **64**: 175305-1-7.
- Kaye P., R. LaFlame, y M. Mosca. 2007. “An introduction tu quantum computing”. Oxford Press. 271 pp.
- Kessler, J. 1985. “Polarized Electrons”. Springer. Berlin. Heidelberg. 299 pp.
- Keyl, M. 2002. “Fundamentals of quantum information theory”. *Phys. Rep.* **369**: 431-548.
- Khaetskii A. V., D. Loss, L. Grazman. 2002. “Electron Spin Decoherence in Quantum Dots due to Interaction with Nuclei”. *Phys. Rev. Lett.* **88**: 186802-1-4.
- Khaetskii A. V., D. Loss, L. Grazman. 2003. “Electron spin evolution by interaction with nuclei ia a quantum dot”. *Phys. Rev. B.* **67**: 195329-1-11.
- Kikkawa, J. M., D. D. Awschalom. 2001. “Resonant Spin Amplification in *n*-Type G”. *Phys. Rev. Lett.* **80**: 4313-1-4.
- Kim, Y. K., S. P. Kulik, M. V. Chekhova, W. P. Grice y Y. Shih. 2003. “Experimental entanglement concentration and universal Bell-state synthesizer” *Phys. Rev. A.* **67**: 010301-1-4.
- Klauser, W. A., W. A. Coish y D. Loss. 2006. “Nuclear spin state narrowing via gate-controlled Rabi oscillations in a double quantum dot”. *Phys. Rev. B.* **73**: 205302-1-12.

- Koiller, B., X. Hu, R. B. Capaz, A. S. Martins y S. Das Sarma. 2005. "Silicon-based spin and charge quantum computation". AN. Acad. Bras. Cienc. **77**: 201-222.
- Koppens, F. H. L., J. A. Folk, J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, I. T. Vink, H. P. Tranitz, W. Wegscheider, L. P. Kouwenhoven y L. M. K. Vandersypen. 2005. "Control and Detection of Singlet-Triplet Mixing in a Random Nuclear Field". Science **309**: 1346-1350.
- Landau, L. D., E. M. Lifshitz. 1977. "Quantum Mechanics". Pergamon Press. 170 pp.
- Lampel, G. 1968. "Nuclear Dynamic Polarization by Optical Electronic Saturation and Optical Pumping in Semiconductors". Phys. Rev. Lett. **20**: 491-493.
- Liang, X. T. 2005. "Non-Markovian dynamics and phonon decoherence of a double quantum dot charge qubit". Phys. Rev. B. **72**: 245328-1-5.
- Lo, H. K. 1998. "Quantum Cryptology" En: H. K. Lo, S. Popescu y T. Spiller (eds.). Introduction to Quantum Computation and Information. World Scientific. Primera Edición Singapur. 44 pp.
- Loss, D. y D. P. DiVincenzo. 1998. "Quantum Computation with quantum dots". Phys. Rev. A. **57**: 120-126.
- Mahler, G. y V. A. Weberruß. 1995. "Quantum networks: Dynamics of open nanostructures". Springer-Verlag. Primera Edición. Berlin. 340 pp.
- Meier, F. y B. P. Zakharchenya. 1984. "Optical Orientation Modern Problems in Condensed Matter Sciences". North-Holland. Amsterdam. Vol. 8.
- Makhlin, Yu., G. Schoen y A. Shnirman. 1998. "Josephson-junction qubits with controlled couplings". Nature, **398**: 305-307.
- Marder, M. P. 2000. "Condensed Matter Physics". Wiley-Interscience. New York. 894 pp.
- Meier, L., et al. 2007. "Measurement of Rashba and Dresselhaus spin-orbit magnetic fields". Nature **3**: 650-653
- Merkulov, I. A., A. L. Efros, M. Rosen. 2002. "Electron spin relaxation by nuclei in semiconductor quantum dots". Phys. Rev. B **65**: 205309-1-8.
- Messina, A. 2002. "A Single atom-based generation of Bell states of two cavities". Europhys. J. D. **18**: 379-383.

- Mintern, F. 2004. “Measures and dynamics of entangled states”. Tesis doctoral. Ludwig-Maximilians University of Oxford. 54 pp.
- Mintern, F., A. R. R. Carvalho, M. Kus y A. Buchleiter. 2005. “Measures and dynamics of entangled states”. Phys. Rep **415**: 207-259.
- Moore, G. E. 1965. “Cramming more components onto integrated circuits” Electronics, Volume 38, Number 8,
- Moriya, T. 1960. “Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism”. Phys. Rev. **120**: 91-98.
- Moura Alves, C. 2005. “Detection of quantum entanglement in physical systems”. PhD. Thesis Merton College. University of Oxford. 54 pp
- Nakamura, S., A. Napoli, A. Messina y F. Petruccione, 2004. “Dissipation-induced stationary entanglement in dipole-dipole interacting atomic simples”. Phys. Rev. A. **70**: 022511-1-4.
- Nielsen, M. e I. L. Chuang. 2000. “Quantum Computation and Quantum Information”. Cambridge University Press. Primera Edición. Cambridge. 676 pp.
- Osenda, O, G. A. Raggio. 2005. “Entanglement in thermal equilibrium states”. Phys. Rev. A. **72**: 064102-1-4.
- Pashkin, Y. A., T. Yamamoto, O. Astafiev, Y. Nakamura, D. V. Averin y J. S. Tsai. 2003. “Quantum oscillations in two coupled charge qubits”. Nature. **421**: 823-826.
- Peget, D., G. Lampel, B. Sapoval, y V. I. Safarov. 1977. “Low field electron-nuclear spin coupling in gallium arsenide under optical pumping conditions”. Phys. Rev. B. **15**: 5780-5796.
- Petta, J. R., A. Johnson, A. Yacoby, C. Marcus, M. Hanson, and A. Gossard, 2005, “Pulsed-gate measurements of the singlet-triplet relaxation time in a two-electron double quantum dot” Phys. Rev. B **72**, 161301-1-4.
- Pfeffer, P. 1999. “Effect of inversion asymmetry on the conduction subbands in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs heterostructures”. Phys. Rev. B. **59**: 15902-15909.
- Popescu, S. y D. Rohrlich. 1998. “The joy of entanglement”. En” H. Lo, S. Popescu y T. Spiller (eds.) “Introduction to quantum computation and information”, World Scientific. Singapur. 20 pp.

- Poyatos, J. F., J. I. Cirac y P. Zoller. 1997. "Complete Characterization of a Quantum Process: The Two-Bit Quantum Gate". *Phys. Rev. Lett.* **78**: 39-1-4.
- Rashba, E. I. 1960. "Properties of Semiconductors with an external Loop I_0 Cyclotron and combinational resonance in a Magnetic Field Perpendicular to the Plane of the Loop". *Sov. Phys. Solid State.* **2**: 1109
- Preskill, J. 2004. "Lectura notes on Quantum Information and Computation". California Institute of Technology. Los Angeles. 481 pp.
- Rauschenbeutel, A., G. Nogues, S. Osnaghi, P. Bertet, M. Brune, J. M. Raimond y S. Haroche. 1999. "Coherent Operation of a Tunable Quantum Phase Gate in Cavity QED" *Phys. Rev. Lett.* **83**: 5166-5169.
- Riebe, M. H. Häffner, C. F. Roos, W. Hansek, J. Benhelm, G. P. T. Lancaster, T. W. Korber, C. Becher, F. Schmidt-Kaler, D. F. V. James y R. Blatt. 2004. "Deterministic quantum teleportation with atoms". *Nature.* **429**: 734-737.
- Rieffel, E. y W. Polak. 2000. "An Introduction to Quantum Computing for Non-Physicists". *ACM Computing Surveys.* **32**: 300-335.
- Roos, C. F. G. P. T. Lancaster, M. Riebe, H. Häffner, S. Gulde, C. Becher, J. Eschner, F. Schmidt-Kaler y R. Blatt. 2004. "Bell States of Atoms with Ultralong Ligetimes and Their Tomographic State Analisis". *Phys. Rev. Lett.* **92**: 220402-1-4.
- Röthlisberger, B., J. Lehmann, D. S. Saraga, P. Traber y D. Loss. 2008. "Highly entangled Ground status in Tripartite Qubit Systems". *Phys. Rev. A.* **100**: 100502.
- Sakurai. J. J. 2001 "Modern Quantum Mechanics". Pearson Education Asia. Tercera Edición. Singapore. 500 pp.
- Schliemann, J., A. V. Khaetskii, D, Loss. 2002. "Spin decay and quantum parallelism". *Phys. Rev. B* **66**: 245303-1-6.
- Schumacher, B. 1995. "Quantum Mechanics". Springer. t Edición. Berlín. 416 pp.
- Schwabl, F. 2005. "Advanced Quantum Mechanics". Springer. Tercera Edición Berlín. 405 pp.
- Schwabl, F. 1995. "Quantum Mechanics". Springer. Segunda Edición Berlín. 416 pp.
- Schulten, K. y P. G. Wolynes. 1978. "Semiclassical description of electron spin motion in radicals including the effect of electron hopping". *J. Chem. Phys.* **68**: 3292-3297.

- Shekhtman, L., O. Entin-Wohlman, A. Aharony. 1992. "Moriya's Anisotropic Superexchange Interaction, Frustration, and Dzyaloshinsky's Weak Ferromagnetism". *Phys. Rev. Lett.* **69**: 836-1-4.
- Shnirman, A. G. Schönmy Z. Hermon. 1997. "Quantum Manipulations of Small Josephson Junctions". *Phys. Rev. Lett.* **79**: 2371-2374.
- Shor, P. 1994. "Algorithms for quantum computation: Discrete log and factoring". *Proc. Symp. Found. Comp. Sci.* 124-134.
- Shor, P. 1997. "Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer". *SIAM Journal of Computing*: 1484-1509.
- Slichter, C. P. 1990. "Principles of Magnetic Resonance". Tercera Edición. Springer-Verlag. Berlín. 655 pp.
- Souza, A. M., M. S. Reis, D. O. Soares-Pinto, I. S. Oliveira, R. S. Sarthour. 2008. "Experimental determination of thermal entanglement in spin clusters using magnetic susceptibility measurements". *Phys. Rev. A* **77**: 104402-1-6.
- Stepanenko, D., N. E. Bonesteel. 2004 "Universal Quantum Computation through Control of Spin-Orbit Coupling". *Phys. Rev. Lett.* **93**: 140501-1-4.
- Sun, Z. K. Yao, W. Yao, D. Zhang, Z. Liu. 2008. "Finite-temperature entanglement for low-dimensional quantum spin chains" *Phys. Rev. A* **77**: 014416-1-8.
- Tanamoto, T. 2000. "Quantum gates by coupled asymmetric quantum dots and controlled-NOT-gate operation". *Phys. Rev. A* **61**: 022305-1-7.
- Taylor, J. M., W. Dür, P. Zoller, A. Yacoby, C. M. Marcus, y M. D. Lukin. 2005. "Solid-State Circuit for Spin Entanglement Generation and Purification". *Phys. Rev. Lett.* **94**: 236803-1-4.
- Taylor, J. M., J. R. Petta, A. C. Johnson, A. Yacoby, C. M. Marcus, and M. D. Lukin. 2007. "Relaxation, dephasing, and quantum control of electron spins in double quantum dots". *Phys. Rev. B* **76**: 035315-1-17.
- Turchette Q. A., C. S. Wood, B. E. King, C. J. Myatt, W. M. Itano, C. Monroe y D. J. Wineland. 1998. "Deterministic entanglement of two trapped ions". *Phys. Rev. Lett.* **81**: 3631-3634.

- Vabdersypen. L. M. K., M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood y I. L. Chuang. 2001. "Experimental realization of Shore's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance". *Nature*. **414**: 883-887.
- Vedral, V., M. B. Plenio, M. A. Rippin y P. L. Knight. 1997. "Quantifying Entanglement". *Phys. Rev. Lett.* **78**: 2275-2279.
- Vedral, V., M. B. Plenio y P. L. Knight. 2001. "Entanglement Quantification". En: D. Bouwmeester, A. Eijert y A. Zeilinger (eds.). *The physics of quantum information*. Springer. Primera Edición. Berlin. 314 pp.
- Vendersypen, L. M. K., M. Steffen. G. Breyta, C. S. Yannoni. M. H. Sherwood y I. L. Chuang. 2001. "Experimental realization of Shore's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance". *Nature*. **414**: 883-887.
- Vidal, G. y R. F. Werner. 2002. "Computable measure of entanglement". *Phys. Rev. A*. **65**: 032314-1-11.
- Vrijen, R. E. Yablonovitch, K. Wang, H. W. Jiang, A. Balandin, V. Roychowdhury, T. Mor y D. P. DiVincenzo. 2000. "Electron-spin-resonance transistors for quantum computing in silicon-germanium heterostructures". *Phys. Rev. A*. **62**: 012306-1-10.
- Walther, P. y A. Zeilinger. 2005. "Experimental realization of a photonic Bell-state analyser". *Phys. Rev. A*. **72**: 10302-1-4.
- Wang X., and Z. D. Wang. 2006. "Thermal entanglement in ferromagnetic chains". *Phys. Rev. A* **73**: 064302-1-3.
- Wiesner, S. "Conjugate Coding" SIGACT News, Vol. 15, 1983, pp. 78-88.
- Witzel, W. M., R. de Sousa, K. B. Whaley. "Universal scaling of hyperfine-induced electron spin echo decay". *Phys. Rev. B*. **71**: 224411-1-8.
- Wooters W. K. 1998. "Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits". *Phys. Rev. Lett.* **80**: 2245-1-4.
- Wrinkler, R. 2003. "Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems". Springer-Verlag. Berlin. 228 pp.
- Hao, X. and S. Zhu. 2005. "Entanglement in a spins-s antiferromagnetic Heisenberg chain". *Phys. Rev. A*. **72**: 042306-1-4.
- Yamamoto, T., Yu. A. Pashkin, O. Astafiev, Y. Nakamura y J. S. Tsai, 2003. "Demonstration of conditional gate operation using superconducting charge qubits". *Nature*. **425**: 941-944.

- Yao W., R.-B Liu, L. J. Sham. 2006. “Theory of electron spin decoherence by interacting nuclear spins in a quantum dot”, *Phys. Rev. B.* **74**: 195301-1-11.
- Zeilinger, A. 1998. “Quantum Entanglement: a fundamental concept finding its applications”. *Phys. Scr.* **76**: 203-209.
- Zhang, P., X. G. Li y X. G. Zhao. 2002. “Entanglement of two interacting electrons in a double quantum dot”. *Phys. Lett. A.* **294**: 108-112.
- Zhang G. and S. Li. 2007. “Thermal entanglement in a two-qubit Heisenberg XXZ spin chain under an inhomogenous magnetic field”. *Phys. Rev. A.* **75**: 0344302-1-4.
- Zhang G. 2007. “Thermal entanglement and teleportation in a two-qubit Heisenberg chain with Dzyaloshinski-Moriya anisotropic antisymmetric interaction”. *Phys. Rev. A.* **75**: 034304-1-4.

Hamiltoniano de intercambio: formalismo de intercambio

El surgimiento de interacciones entre espines debido a interacción Coulombiana es claramente ilustrado por cálculos hechos por Heitler y London (figura 47) [Heitler y London, 1927].

Para propósito de ejemplificación consideremos dos átomos adyacentes, separados una distancia, $\vec{R}_{12} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$, y sean $\phi_1(\vec{r})$ y $\phi_2(\vec{r})$ funciones de onda espaciales de los electrones en las capas superiores de los átomos 1 y 2. Estas funciones de ondas se determinan al considerar a los átomos separados infinitamente, y sin interacción entre ellos, las fuerzas Coulombianas serán consideradas como perturbaciones [Marder, 2000].

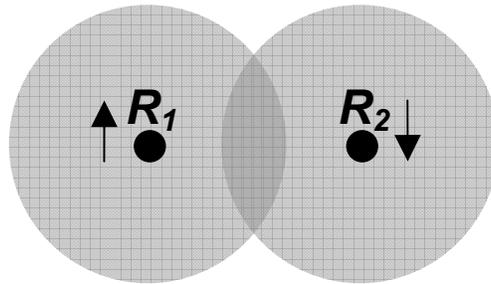


Figura 47: Dos electrones localizados con \vec{R}_1 y \vec{R}_2 , con espines posiblemente distintos, rodean al núcleo. El traslape de sus funciones de onda inducen correlaciones entre los espines.

Las funciones de onda $\phi_1(\vec{r})$ y $\phi_2(\vec{r})$ no son ortogonales, ya que las funciones de onda se determinan cuando estas se encuentran separadas infinitamente y por lo tanto la matriz de traslape [Marder, 2000],

$$I = \left| \int \phi_1^*(\vec{r}) \phi_2(\vec{r}) \right| = \left| \langle \phi_1(\vec{r}) | \phi_2(\vec{r}) \rangle \right| \quad (\text{A1.1})$$

no es cero.

Cuando los electrones se acerquen, y siempre y cuando los estados excitados de los dos átomos permanezcan irrelevantes, la función de onda de los dos electrones consistirá de la combinación lineal del producto antisimétrico de $\phi_1(\vec{r})$ y $\phi_2(\vec{r})$. Sin embargo, no es suficiente solo considerar la dependencia espacial de los electrones, es también necesario considerar el espín de estos, ya que los electrones utilizan su espín para reducir su energía, por lo tanto, el espín debe incluirse explícitamente en los cálculos [Marder, 2000].

Sin embargo, el Hamiltoniano del sistema no depende explícitamente del espín, por lo tanto las funciones de onda $\phi_1(\vec{r})$ y $\phi_2(\vec{r})$ conmutan con los operadores \hat{S}^2 y \hat{S}^Z .

Las eigenfunciones de espín son,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{\uparrow}(\sigma_1)\chi_{\downarrow}(\sigma_2) - \chi_{\downarrow}(\sigma_1)\chi_{\uparrow}(\sigma_2)] \quad (\text{A1.2})$$

con eigenvalores $\hat{S}^2 = \hat{S}^Z = 0$ y define el estado singulete. El triplete esta dado por

$$\begin{aligned} \chi_{\uparrow}(\sigma_1)\chi_{\uparrow}(\sigma_2) & S = 1; \quad S_Z = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{\uparrow}(\sigma_1)\chi_{\downarrow}(\sigma_2) + \chi_{\downarrow}(\sigma_1)\chi_{\uparrow}(\sigma_2)] & S = 1; \quad S_Z = 0 \\ \chi_{\downarrow}(\sigma_1)\chi_{\downarrow}(\sigma_2) & S = 1; \quad S_Z = -1 \end{aligned} \quad (\text{A1.3})$$

El producto de las funciones de onda espacial y de espín debe ser antisimétrica bajo intercambio de partículas. Debido que la función de onda del singulete es impar, es necesario que sea multiplicada por una función de onda espacial que sea par, mientras que las funciones de onda del triplete son pares, es necesario una función de onda espacial impar. Solo una función para y una impar pueden ser construidas a partir de las funciones ϕ_1 y ϕ_2 , y al considerar la integral de traslape (A1.1), las combinaciones normalizadas son [Marder, 2000]:

$$\phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2 + 2I^2}}[\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) + \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)], \quad (\text{A1.4})$$

$$\phi_t(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2 + 2I^2}}[\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) - \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)] \quad (\text{A1.5})$$

Ya que el Hamiltoniano no incluye al espín es necesario incluir en las ecuaciones (A1.2) y (A1.3) las funciones de onda que describen los grados de libertad del sistema (A1.4) y (A1.5). El espacio generado por el producto de las cuatro funciones de onda,

describen el comportamiento del sistema y más aún serán soluciones a la ecuación de Schrödinger.

Sea ε_0 la energía de cada átomo cuando están infinitamente separados, de tal manera que

$$\left[\frac{\hat{P}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_1|} \right] \phi_1(\vec{r}_1) = \varepsilon_0 \phi_1(\vec{r}_1). \quad (\text{A1.6})$$

Al acercarse a los dos átomos el Hamiltoniano será,

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_1|} + \frac{\hat{P}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_1|}, \quad (\text{A1.7})$$

en donde el primer y tercer término describen la energía cinética, segundo y cuarto la energía potencial del electrón con el núcleo, el quinto describe la interacción electrón – electrón, la interacción núcleo – núcleo está dada en el sexto término, los dos últimos términos es la interacción de cada electrón con el núcleo vecino.

Entonces los elementos de matriz del Hamiltoniano son,

$$\int \phi_1^*(\vec{r}_1) \phi_2^*(\vec{r}_2) \hat{H} \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \int \phi_2^*(\vec{r}_1) \phi_1^*(\vec{r}_2) \hat{H} \phi_2(\vec{r}_1) \phi_1(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 2\varepsilon_0 + U \quad (\text{A1.8})$$

donde

$$U = \int \left[\frac{|\phi_1(\vec{r}_1)|^2}{|\phi_2(\vec{r}_2)|^2} \right] \left[\frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_1|} \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (\text{A1.9})$$

y

$$\int \phi_2^*(\vec{r}_1) \phi_1^*(\vec{r}_2) \hat{H} \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \int \phi_1^*(\vec{r}_1) \phi_2^*(\vec{r}_2) \hat{H} \phi_2(\vec{r}_1) \phi_1(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 2\varepsilon_0 l^2 + V \quad (\text{A1.10})$$

con

$$V = \int \left[\frac{\phi_1^*(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2)}{\phi_2^*(\vec{r}_1) \phi_1(\vec{r}_2)} \right] \left[\frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_1|} \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (\text{A1.11})$$

Con estas encontramos

$$\varepsilon_s = \langle \phi_s | \hat{H} | \phi_s \rangle = 2 \frac{2\varepsilon_0 + U + 2l^2 \varepsilon_0 + V}{2 + 2l^2} = 2\varepsilon_0 + \frac{U + V}{1 + l^2} \quad (\text{A1.12})$$

$$\varepsilon_t = \langle \phi_t | \hat{H} | \phi_t \rangle = 2 \frac{2\varepsilon_0 + U - 2l^2 \varepsilon_0 - V}{2 - 2l^2} = 2\varepsilon_0 + \frac{U - V}{1 - l^2} \quad (\text{A1.13})$$

y la diferencia entre las energías del singulete y triplete se define como,

$$\varepsilon_t - \varepsilon_s = \frac{2l^2U - 2V}{1-l^4} \equiv -J \quad (\text{A1.14})$$

El signo de la diferencia entre las energías del singulete y triplete pueden variar de acuerdo a las magnitudes de las integrales l , U , y V [Marder, 2000].

Dirac y Heisenberg demostraron que debido a que las funciones de onda espaciales de dos electrones están indudablemente correlacionados con los funciones de onda espín, por lo tanto el Hamiltoniano (A1.7), que actúa solo en los grados de libertad espaciales del sistema, pueden ser remplazado por un Hamiltoniano que actué solo en los grados de libertad espinóricos.

Los cuatro estados electrónicos creados por el producto de (A1.2), (A1.3), (A1.4) y (A1.5) tienen dos energías. Los estados triplete comparten la misma energía y están relacionados por simetría. Las energías del triplete y singulete son invariantes a la rotación simultánea de ambos espines [Marder, 2000]. Esta observación sugiere un Hamiltoniano del tipo

$$\hat{H} = a + b\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = a + b\left(\hat{S}_1^Z \hat{S}_2^Z + \frac{1}{2}[\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- + \hat{S}_2^+ \hat{S}_1^-]\right) \quad (\text{A1.15})$$

Cuando este Hamiltoniano actúa en el triplete resulta en $a + b/4$, mientras que al actuar en el singulete se obtiene $a - 3b/4$. La diferencia entre las energías del singulete y triplete es igual a $-b$ y $a = \frac{1}{4}J + 2\varepsilon_0 + \frac{U-V}{1-l^2}$, entonces

$$\hat{H} = 2\varepsilon_0 + \frac{U-V}{1-l^2} + \left(\frac{1}{4} - \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2\right)J \quad (\text{A1.16})$$

Un valor positivo de J causa que ambos espines en el estado base apunten en la misma dirección.

El cuarto término de (A1.16) es el Hamiltoniano de Heisenberg [Marder, 2000; Sakurai, 2001; Schwabl, 1995],

$$\hat{H} = JS_1 \cdot S_2 \quad (\text{A1.17})$$

el cual describe la interacción entre dos espines acoplados y sus eigenvectores son la base singulete – triplete y sus energías correspondientes.

Apéndice B

El Hamiltoniano de súper intercambio

En este apéndice discutimos la deducción del Hamiltoniano con acoplamiento espín – orbita de súper intercambio el cual será utilizado en el transcurso del trabajo.

Consideremos el Hamiltoniano [Moriya, 1960; Dzialoshinski, 1958. Shekhtman, et al., 1992],

$$H = \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - t \sum_s (d_{1s}^\dagger d_{2s} + d_{2s}^\dagger d_{1s}) + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{s,s'} d_{is}^\dagger [\vec{C}_0 \cdot \vec{\sigma}]_{s,s'}^{i,j} d_{js'} \quad (\text{B.1})$$

en donde d_{is}^\dagger y d_{is} son operadores de creación y aniquilación de espín, en los orbitales ortogonales $i=1,2$, con espín s , localizados en los puntos cuánticos y $\hat{n}_{i\uparrow} = d_{i\uparrow}^\dagger d_{i\uparrow}$ y $\hat{n}_{i\downarrow} = d_{i\downarrow}^\dagger d_{i\downarrow}$.

Por cuestión de claridad en nuestros cálculos separamos de la siguiente manera

$$H_0 = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (\text{B.2})$$

que es el Hamiltoniano de Hubbard que describe la energía del electrón por doble ocupación.

$$H_1 = -t \sum_s (d_{1s}^\dagger d_{2s} + d_{2s}^\dagger d_{1s}) \quad (\text{B.3})$$

da la energía de tunelaje de los electrones.

$$H_2 = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{s,s'} d_{is}^\dagger [\vec{C}_0 \cdot \vec{\sigma}]_{s,s'} d_{js'} \quad (\text{B.4})$$

que es el Hamiltoniano de espín – órbita.

El espacio de Hilbert de (B.1) esta expandido por los elementos de la base computacional y estados de doble ocupación. En término de los operadores de creación y aniquilación estos estados se definen como,

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= d'_{1\uparrow} d'_{1\downarrow} |0\rangle = |\uparrow\downarrow, 0\rangle; & |4\rangle &= d'_{1\uparrow} d'_{2\downarrow} |0\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle \\
|2\rangle &= d'_{2\uparrow} d'_{2\downarrow} |0\rangle = |0, \uparrow\downarrow\rangle; & |5\rangle &= d'_{1\downarrow} d'_{2\uparrow} |0\rangle = |\downarrow, \uparrow\rangle \\
|3\rangle &= d'_{1\uparrow} d'_{2\uparrow} |0\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle; & |6\rangle &= d'_{1\downarrow} d'_{2\downarrow} |0\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{B.5}$$

El efecto de Hamiltonianos (B.2) – (B.4) sobre estos estados están dadas por los,

$$\begin{aligned}
H_0 |1\rangle &= U |1\rangle, \\
H_0 |2\rangle &= U |1\rangle, \\
H_0 |3\rangle &= H_0 |4\rangle = H_0 |5\rangle = H_0 |6\rangle = 0,
\end{aligned} \tag{B.6}$$

$$\begin{aligned}
H_1 |1\rangle &= H_1 |2\rangle = -t |5\rangle + t |4\rangle \\
H_1 |3\rangle &= H_1 |6\rangle = 0 \\
H_1 |4\rangle &= -H_1 |5\rangle = t |1\rangle + t |2\rangle
\end{aligned} \tag{B.7}$$

$$\begin{aligned}
H_2 |1\rangle &= [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |3\rangle + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |4\rangle - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |5\rangle - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |6\rangle \\
H_2 |2\rangle &= -[\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |3\rangle + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |4\rangle - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |5\rangle + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |6\rangle \\
H_2 |3\rangle &= [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |1\rangle - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |2\rangle \\
H_2 |4\rangle &= [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |1\rangle + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |2\rangle \\
H_2 |5\rangle &= -[\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |1\rangle - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |2\rangle \\
H_2 |6\rangle &= -[\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |1\rangle + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |2\rangle
\end{aligned} \tag{B.8}$$

A partir de estos estados podemos utilizar el formalismo de Feshbach [Feshbach, 1962] para encontrar el Hamiltoniano efectivo en el espacio (B.2) – (B.6),

$$H_{eff} = PHP + PHQ \frac{1}{E - QHQ} QHP \tag{B.9}$$

En donde P es el proyector del subespacio de ocupación sencilla de H y Q es el proyector del subespacio de doble ocupación,

$$\begin{aligned}
P &= |3\rangle\langle 3| + |4\rangle\langle 4| + |5\rangle\langle 5| + |6\rangle\langle 6|, \\
Q &= |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|.
\end{aligned} \tag{B.10}$$

En donde separamos los estados de doble ocupación Q , del subespacio de los estados de ocupación sencilla P . Esta separación se permite ya que los dos subespacios se encuentran desacoplados y separados en energía.

Con $H = H_0 + H_1 + H_2$ podemos separar los diferentes terminos de (B.9) como,

$$\begin{aligned}
 P(H_0 + H_1 + H_2)P &= P(H_0 + H_1)P + P(H_2)P, \\
 P(H_0 + H_1 + H_2)Q &= P(H_0 + H_1)Q + P(H_2)Q, \\
 Q(H_0 + H_1 + H_2)Q &= Q(H_0 + H_1)Q + Q(H_2)Q, \\
 Q(H_0 + H_1 + H_2)P &= Q(H_0 + H_1)P + Q(H_2)P
 \end{aligned}
 \tag{B.11}$$

Aplicando las ecuaciones (B.6) y (B.7) en (C.11),

$$\begin{aligned}
 P(H_0 + H_1)P &= 0 \\
 P(H_0 + H_1)Q &= t\{|4\rangle\langle 1| + |4\rangle\langle 2| - |5\rangle\langle 1| - |5\rangle\langle 2|\} \\
 Q(H_0 + H_1)Q &= U\{|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|\} \\
 Q(H_0 + H_1)P &= t\{|1\rangle\langle 4| - |1\rangle\langle 5| + |2\rangle\langle 4| - |2\rangle\langle 5|\}
 \end{aligned}
 \tag{B.12}$$

$$\begin{aligned}
 P(H_2)P &= Q(H_2)Q = 0 \\
 P(H_2)Q &= \left\{ \begin{aligned} &[\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |3\rangle\langle 1| - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |3\rangle\langle 2| \\ &+ [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |4\rangle\langle 1| + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |4\rangle\langle 2| \\ &- [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |5\rangle\langle 1| - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |5\rangle\langle 2| \\ &- [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |6\rangle\langle 1| + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |6\rangle\langle 2| \end{aligned} \right\} \\
 Q(H_2)P &= \left\{ \begin{aligned} &[\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |1\rangle\langle 3| - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |2\rangle\langle 3| \\ &+ [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |1\rangle\langle 4| + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |2\rangle\langle 4| \\ &- [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |1\rangle\langle 5| - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |2\rangle\langle 5| \\ &- [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |1\rangle\langle 6| + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |2\rangle\langle 6| \end{aligned} \right\}
 \end{aligned}
 \tag{B.13}$$

Aplicando (B.12) y (B.3) en (B.9) obtenemos,

$$H_{eff} = [P(H_0 + H_1)Q + P(H_2)Q] \frac{1}{E - Q(H_0 + H_1)Q} [Q(H_0 + H_1)P + Q(H_2)P] \tag{B.14}$$

En donde utilizando la identidad,

$$\frac{1}{E - Q(H_0 + H_1)Q} = \frac{1}{E - Q(H_0)Q} \sum_{n=0}^{\infty} \left(QH_1Q \frac{1}{E - QH_0Q} \right)^n \tag{B.15}$$

se puede expandir el término como una expansión de perturbación y considerando como valor de referencia a $E = 0$, se obtiene

$$\begin{aligned}
&= [P(H_0 + H_1)Q + P(H_2)Q] \frac{Q}{-U} [Q(H_0 + H_1)P + Q(H_2)P] \\
&= -\frac{1}{U} [P(H_0 + H_1)Q + P(H_2)Q] [Q(H_0 + H_1)P + Q(H_2)P] \\
&= -\frac{1}{U} \left\{ \begin{aligned} &P(H_0 + H_1)QQ(H_0 + H_1)P + P(H_0 + H_1)QQ(H_2)P \\ &+ P(H_2)QQ(H_0 + H_1)P + P(H_2)QQ(H_2)P \end{aligned} \right\}
\end{aligned} \tag{B.16}$$

Si cada término de la última ecuación se desarrolla independientemente se identifican varios Hamiltonianos

$$\frac{1}{U} P(H_0 + H_1)QQ(H_0 + H_1)P = -\frac{2t^2}{U} \{ |4\rangle\langle 4| - |4\rangle\langle 5| - |5\rangle\langle 4| + |5\rangle\langle 5| \} \tag{B.17}$$

Expresando este operador en forma matricial en el subespacio P tenemos

$$\frac{1}{U} P(H_0 + H_1)QQ(H_0 + H_1)P = -\frac{2t^2}{U} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{B.18}$$

Si modificamos este matriz con el factor $\frac{t^2}{U} \bar{I}$

$$-\frac{4t^2}{U} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{4t^2}{U} \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} \end{pmatrix} = \frac{4t^2}{U} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{B.19}$$

En donde podemos identificar al término $J \equiv \frac{4t^2}{U}$ y a la matriz como $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, por lo que

$$\frac{1}{U} P(H_0 + H_1)QQ(H_0 + H_1)P + \frac{t^2}{U} \bar{I} = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \tag{B.20}$$

Ahora para tenemos en forma matricial el segundo y tercer termino de (B.16) con

$$C_{ij} = C_{ji} = C_0$$

$$\begin{aligned}
& P(H_0 + H_1)QQ(H_2)P + P(H_2)QQ(H_0 + H_1)P \\
&= 2\frac{tC}{U} \begin{pmatrix} 0 & -(\hat{i} - \hat{j}) & (\hat{i} - \hat{j}) & 0 \\ (\hat{i} + \hat{j}) & 0 & 2\hat{k} & (\hat{i} - \hat{j}) \\ -(\hat{i} + \hat{j}) & -2\hat{k} & 0 & (\hat{i} - \hat{j}) \\ 0 & (\hat{i} + \hat{j}) & -(\hat{i} + \hat{j}) & 0 \end{pmatrix} \quad (B.21)
\end{aligned}$$

El cual lo podemos identificar con el elemento $\vec{\beta}_0 \cdot \vec{S}_1 \times \vec{S}_2$ con $\frac{t^2}{U} \vec{I}$, por lo que

$$P(H_0 + H_1)QQ(H_2)P + P(H_2)QQ(H_0 + H_1)P = \vec{\beta}_0 \cdot \vec{S}_1 \times \vec{S}_2 \quad (B.22)$$

El último término de la ecuación (B.16) se expresa como

$$\begin{aligned}
\frac{1}{U} P(H_2)QQ(H_2)P = & \left\{ \begin{aligned}
& + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |3\rangle\langle 3| + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |3\rangle\langle 4| \\
& - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |3\rangle\langle 5| - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |3\rangle\langle 6| \\
& + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |3\rangle\langle 3| - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |3\rangle\langle 4| \\
& + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |3\rangle\langle 5| - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |3\rangle\langle 6| \\
& + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |4\rangle\langle 3| + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |4\rangle\langle 4| \\
& - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |4\rangle\langle 5| - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |4\rangle\langle 6| \\
& - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |4\rangle\langle 3| + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |4\rangle\langle 4| \\
& - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |4\rangle\langle 5| + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |4\rangle\langle 6| \\
& - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |5\rangle\langle 3| - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |5\rangle\langle 4| \\
& + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |5\rangle\langle 5| + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |5\rangle\langle 6| \\
& + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |5\rangle\langle 3| - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |5\rangle\langle 4| \\
& + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |5\rangle\langle 5| - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |5\rangle\langle 6| \\
& - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |6\rangle\langle 3| - [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |6\rangle\langle 4| \\
& + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |6\rangle\langle 5| + [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |6\rangle\langle 6| \\
& - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} |6\rangle\langle 3| + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\uparrow} |6\rangle\langle 4| \\
& - [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\downarrow} |6\rangle\langle 5| + [\bar{C}_{12} \cdot \bar{\sigma}]_{\downarrow\uparrow} [\bar{C}_{21} \cdot \bar{\sigma}]_{\uparrow\downarrow} |6\rangle\langle 6|
\end{aligned} \right\} \quad (B.23)
\end{aligned}$$

El cual puede identificarse con,

$$\frac{1}{U} P(H_2)QQ(H_2)P = \vec{S}_1 \cdot \vec{\Gamma} \cdot \vec{S}_2 \quad (B.24)$$

En donde $\bar{\bar{\Gamma}} = \frac{4\vec{C}_0 \cdot \vec{C}_0}{U}$ y $C_{ij} = C_{ji} = C_0$.

Por lo tanto se obtiene el Hamiltoniano efectivo de superintercambio

$$H_{eff} = J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \beta_0 \cdot \vec{S}_1 \times \vec{S}_2 + \vec{S}_1 \cdot \bar{\bar{\Gamma}} \cdot \vec{S}_2), \quad (\text{B.25})$$

en donde los coeficientes, $J = \frac{4t^2}{U}$, $\vec{\beta}_0 = \frac{4tC_0}{U}$ y $\bar{\bar{\Gamma}} = \frac{4\vec{C}_0 \cdot \vec{C}_0}{U}$ son variables de súper intercambio [Moriya, 1960; Dzialoshinski, 1958. Shekhtman, et al., 1992], la variable β_0 es el vector de Moriya – Dzialoshinski y $\bar{\bar{\Gamma}}$ es un tensor de segundo orden.