

**Centro de Investigación Científica y de Educación  
Superior de Ensenada, Baja California**



---

**Doctorado en Ciencias  
en Física de Materiales**

---

**Correlaciones cuánticas en sistemas biológicos**

Tesis

para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de  
Doctor en Ciencias

Presenta:

**Moisés Chávez Huerta**

Ensenada, Baja California, México

2020

Tesis defendida por

**Moisés Chávez Huerta**

y aprobada por el siguiente Comité

---

Dr. Fernando Rojas Íñiguez

Director de tesis

Dr. Ernesto Cota Araiza

Dr. Rubén Dario Cadena Nava

Dr. Armando Reyes Serrato

Dr. Roberto Romo Martínez



---

Dr. Sergio Fuentes Moyado

Coordinador del Posgrado en Física de Materiales

---

Dra. Rufina Hernández Martínez

*Directora de Estudios de Posgrado*

*Moisés Chávez Huerta © 2020*

*Queda prohibida la reproducción parcial o total de esta obra sin el permiso formal y explícito del autor y director de la tesis*

Resumen de la tesis que presenta Moisés Chávez Huerta como requisito parcial para la obtención del grado de Doctor en Ciencias en Física de Materiales.

## Correlaciones cuánticas en sistemas biológicos

Resumen aprobado por:

---

Dr. Fernando Rojas Íñiguez

Director de tesis

La bacteria verde del azufre es un organismo fotosintético cuya estructura colectora de luz alberga un complejo proteína-pigmento llamado Fenna-Matthews-Olson (FMO). El complejo FMO sostiene coherencia cuántica y correlaciones cuánticas entre los estados electrónicos de moléculas pigmento espacialmente separadas mientras la energía se mueve al centro de reacción con una eficiencia cuántica cercana al 100%. Embebidas en el complejo FMO, siete moléculas pigmento, llamadas cromóforos, conforman una red de qubits. En esta investigación se presenta un método basado en la incertidumbre cuántica asociada a mediciones locales para cuantificar correlaciones cuánticas tipo discordia entre dos subsistemas donde uno es un qubit y el otro es un qudit. En la primera etapa del trabajo el método se implementa calculando incertidumbre local cuántica (LQU), concurrencia y coherencia entre subsistemas de estados puros y mixtos representados por los eigenestados y por el estado en equilibrio térmico determinados por el Hamiltoniano FMO. En la primera etapa de la investigación se demuestra que: la LQU como cuantificador de correlaciones cuánticas es más general que las medidas de entrelazamiento, es más fácil de calcular que la definición directa de discordia cuántica, permite la identificación de las asociaciones más fuertes en redes de qubits, es una función monótonamente creciente de la coherencia, y puede ser fácilmente implementado en modelos dinámicos. En la segunda etapa del trabajo se investiga la posibilidad de que las correlaciones cuánticas en complejos colectores de luz puedan desempeñar un papel funcional mejorando la eficiencia en el transporte de energía. Para lograr esto, se compara la  $LQU_{acumulada}$  con la eficiencia en el transporte de energía. En la segunda etapa de la investigación la estrategia consiste en: (1) usar un modelo dinámico que considera al complejo FMO como un sistema cuántico abierto sujeto a disipación y decoherencia, (2) utilizar el modelo dinámico para identificar las condiciones bajo las cuales se presenta el transporte asistido por ruido y (3) implementar el método LQU en el modelo dinámico para identificar las asociaciones de cromóforos cuya  $LQU_{acumulada}$  aumenta con la eficiencia en el transporte de energía. La implementación del enfoque LQU en un modelo dinámico del complejo FMO permitió realizar una búsqueda sistemática de las correlaciones cuánticas específicas que no decrecen monótonamente con el desfaseamiento. Sólo para las asociaciones  $C_3$  con el resto de la red y  $C_3$  con  $C_4$  se cumple que su  $LQU_{acumulada}$  aumenta, alcanza un máximo global y desaparece de forma simultánea con la eficiencia en el transporte de energía. La asociación de  $C_3$  con  $C_4$  representa la mayor contribución a las correlaciones cuánticas de  $C_3$  con el resto de la red. Estos hallazgos son la primera evidencia de que correlaciones cuánticas específicas pueden funcionar como un recurso para promover el transporte eficiente de la excitación electrónica en complejos colectores de luz.

**Palabras clave:** Proteína FMO, Correlaciones Cuánticas, Incertidumbre Local Cuántica, Transporte de energía asistido por ruido, Biología cuántica

Abstract of the thesis presented by Moisés Chávez Huerta as a partial requirement to obtain the Doctor of Science degree in Materials Physics with orientation in Theoretical physics.

## Quantum correlations in biological systems

Abstract approved by:

---

Dr. Fernando Rojas Íñiguez

Thesis Director

Green sulfur bacteria is a photosynthetic organism whose light-harvesting complex accommodates a pigment-protein complex called Fenna-Matthews-Olson (FMO). The FMO complex sustains quantum coherence and quantum correlations between the electronic states of spatially separated pigment molecules as energy moves with nearly a 100% quantum efficiency to the reaction center. In the FMO complex, seven pigment molecules, called chromophores, form a qubits network. In this research we present a method based on the quantum uncertainty associated to local measurements to quantify discord-like quantum correlations between two subsystems where one is a qubit and the other is a qudit. Three partitions of the seven chromophores network define the subsystems: one chromophore with six chromophores, pairs of chromophores, and one chromophore with two chromophores. In the first stage of the work we implement the method by calculating local quantum uncertainty (LQU), concurrence, and coherence between subsystems of pure and mixed states represented by the eigenstates and by the thermal equilibrium state determined by the FMO Hamiltonian. Implementation of the LQU approach allows us to characterize quantum correlations that had not been studied before, identify the most quantum correlated subsets of chromophores, and determine that, in the strongest associations of chromophores, the LQU is a monotonically increasing function of the coherence. In the first stage of the research we show that: LQU as quantifier of quantum correlations is more general than entanglement measures, it is easier to compute than direct definition of quantum discord, it allows identification of the strongest associations in qubits networks and it can be readily implemented in dynamical models. In the second stage of the work we investigate the possibility that quantum correlations in light-harvesting complexes have a functional role enhancing energy transport efficiency. To do so, we compare  $LQU_{cumulative}$  with energy transport efficiency. In the second stage of the research the strategy is: (1) to use a dynamic model that considers the FMO complex as an open quantum system subject to dissipation and decoherence, (2) to utilize the dynamic model to identify the conditions that allow noise-assisted energy transfer, and (3) to implement the LQU method in the dynamic model to identify the associations of chromophores whose  $LQU_{cumulative}$  increases with energy transport efficiency. Implementation of the LQU approach in a dynamic model of the FMO complex enable us to perform a systematic search for the specific quantum correlations that do not decrease with dephasing. Only the  $LQU_{cumulative}$  of the associations  $C_3$  with the rest of the network and  $C_3$  with  $C_4$  increases, reaches a global maximum, and disappears simultaneously with energy transport efficiency. These findings are the first evidence that specific quantum correlations could serve as a resource to enhance efficient transmission of excitations in light-harvesting complexes.

**Keywords:** FMO protein, Quantum correlations, Local quantum uncertainty, Noise-assisted energy transport, Quantum biology

## **Dedicatoria**

***Dedico este trabajo a la memoria  
de mi mejor amigo  
Salvador Alejandro Juárez Reyes***

## Agradecimientos

Mi mayor agradecimiento es hacia mis padres Carolina Huerta y David Chávez, quienes me apoyaron con amor y sin condiciones todos los días.

Agradezco a mi asesor el profesor Fernando Rojas por enseñarme física con disponibilidad, pasión y paciencia.

También quiero agradecer a los muchos amigos que me cuidaron mientras estuve enfermo, especialmente a Carolina Montaña, Enrique Contreras, Marco Gonzalez, Mónica Vázquez, María Riesgo y Alberto Riesgo.

Agradezco a los profesores miembros del comité de evaluación del proyecto de tesis: Dr. Ernesto Cota, Dr. Armando Reyes, Dr. Ruben Darío, y Dr. Roberto Romo.

Agradezco CONACYT por la beca otorgada durante el doctorado, así como a CICESE y al CNYN-UNAM por haberme aceptado al posgrado y darme la oportunidad de estudiar en sus instalaciones. Agradezco a DGAPA-UNAM con proyecto PAPPIT IN10571 por apoyo financiero.

# Tabla de contenido

	Página
Resumen en español .....	ii
Resumen en inglés .....	iii
Dedicatoria .....	iv
Agradecimientos .....	v
Lista de figuras .....	viii
<b>Capítulo 1. Introducción</b>	
1.1. Antecedentes .....	1
1.2. Objetivos .....	3
1.2.1. Objetivo general .....	3
1.2.2. Objetivos específicos .....	4
<b>Capítulo 2. Metodología</b>	
2.1. Postulado 1: estado cuántico .....	5
2.1.1. Sistemas cuánticos .....	5
2.1.2. Superposiciones coherentes .....	6
2.1.3. Matriz densidad .....	7
2.1.4. Información cuántica .....	8
2.2. Postulado 2: medición .....	10
2.2.1. Mediciones generalizadas .....	11
2.2.2. POVM .....	12
2.2.3. Mediciones proyectivas .....	13
2.2.4. Principio de incertidumbre de Heisenberg .....	14
2.3. Postulado 3: evolución .....	15
2.4. Postulado 4: sistemas compuestos .....	16
2.4.1. Vectores, operadores, trazas .....	17
2.4.1.1. Vectores .....	17
2.4.1.2. Operadores .....	18
2.4.1.3. Trazas .....	20
2.4.2. Transformaciones unitarias .....	21
2.4.2.1. Transformaciones unitarias locales .....	21
2.4.2.2. Transformaciones unitarias globales .....	22
2.4.3. Medición .....	22
2.4.3.1. Afirmaciones sobre probabilidad .....	22
2.4.3.2. Mediciones selectivas .....	24
2.4.3.3. Mediciones no selectivas .....	25
2.5. Recursos cuánticos .....	27
2.5.1. Coherencia cuántica .....	27
2.5.2. Correlaciones clásicas, cuánticas y totales .....	28
2.5.2.1. Entrelazamiento .....	28
2.5.2.2. Información mútua .....	33
2.5.2.3. Discordia cuántica .....	35
2.5.2.4. Incertidumbre local cuántica .....	37

## Tabla de contenido (continuación)

2.6.	Dinámica de sistemas cuánticos abiertos . . . . .	39
2.6.1.	Operaciones cuánticas . . . . .	40
2.6.2.	Teorema de Kraus . . . . .	41
2.6.3.	La ecuación maestra de Lindblad . . . . .	41
<b>Capítulo 3.</b>	<b>Resultados</b>	
3.1.	LQU como una métrica robusta . . . . .	45
3.1.1.	Modelo para la red de cromóforos del complejo FMO . . . . .	45
3.1.2.	Descripción del enfoque LQU . . . . .	47
3.1.3.	Implementación del método LQU en el complejo FMO . . . . .	51
3.1.4.	Subconjuntos cuanticamente correlacionados dentro del contexto físico del sistema FMO en equilibrio térmico . . . . .	60
3.2.	Transporte-LQU . . . . .	64
3.2.1.	Modelo dinámico del transporte de energía . . . . .	64
3.2.2.	Transporte asistido por ruido . . . . .	66
3.2.3.	Eficiencia y LQU . . . . .	67
<b>Capítulo 4.</b>	<b>Discusión</b>	
<b>Capítulo 5.</b>	<b>Conclusiones</b>	
<b>Literatura citada</b>	. . . . .	79

# Lista de figuras

Figura	Página
1. LQU entre un cromóforo $\{C_r\}$ y los 6 cromóforos restantes $\{C_s, C_t, C_u, \dots\}$ para los siete eigenestados $\{ M\rangle\}$ del Hamiltoniano FMO. (a) $r = 1, 2, 3, 4$ , (b) $r = 5, 6, 7$	52
2. LQU entre un cromóforo $\{C_r\}$ y los 6 cromóforos restantes $\{C_s, C_t, C_u, \dots\}$ para el estado en equilibrio térmico como función de la temperatura. (a) $r = 3, 4$ , (b) $r = 1, 2, 5, 6, 7$	53
3. (a) Coherencia de la red de los siete cromóforos como función de la temperatura para el estado en equilibrio térmico. (b) LQU entre un cromóforo $\{C_r\}$ y los 6 cromóforos restantes $\{C_s, C_t, C_u, \dots\}$ como función de la coherencia, con $r = 3, 4$	54
4. LQU entre los cromóforos $\{C_r\}$ y $\{C_s\}$ para el estado base (a) y el primer estado excitado (b)	55
5. LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos $\{C_3, C_4\}$ , $\{C_4, C_5\}$ , $\{C_4, C_7\}$ y $\{C_1, C_2\}$	55
6. LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos $\{C_2, C_3\}$ , $\{C_6, C_7\}$ , $\{C_5, C_7\}$ y $\{C_5, C_6\}$	56
7. LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos $\{C_3, C_5\}$ , $\{C_2, C_4\}$ , $\{C_1, C_3\}$ y $\{C_3, C_6\}$	56
8. LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos $\{C_1, C_7\}$ , $\{C_1, C_6\}$ , $\{C_1, C_5\}$ y $\{C_2, C_6\}$	57
9. LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos $\{C_1, C_4\}$ , $\{C_2, C_5\}$ , $\{C_2, C_7\}$ y $\{C_3, C_7\}$	57
10. LQU entre los cromóforos $\{C_r\}$ y $\{C_s, C_t\}$ para el estado base (a) y el primer estado excitado (b)	58
11. Valores altos de LQU entre los cromóforos $\{C_r\}$ y $\{C_s, C_t\}$ para el estado termal como función de la temperatura (a) y de la coherencia (b)	59
12. Valores bajos de LQU entre los cromóforos $\{C_r\}$ y $\{C_s, C_t\}$ para el estado termal como función de la temperatura (a) y de la coherencia (b)	59
13. El panel principal muestra las poblaciones de los siete sitios como función de la temperatura. El inset muestra la LQU entre $C_3$ y el resto de la red como función de la población del sitio 3.	60
14. El panel principal muestra el calor específico a volumen constante como función de la temperatura. El inset muestra la fluctuación de la energía del sistema $\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$ como función de la temperatura.	61
15. El panel principal muestra el calor específico a volumen constante como función del LQU asociado a los subconjuntos de cromóforos más correlacionados, es decir, $C_3$ con el resto de la red, $C_3$ con $C_4$ , y $C_3$ con $\{C_2, C_4\}$ . El inset muestra la fluctuación del sistema $\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$ como función del LQU entre $C_3$ y el resto de la red.	61
16. Poblaciones de los sitios versus tiempo (en segundos)	67

## Lista de figuras (continuación)

Figura	Página
17. Eficiencia del transporte energético y $LQU_{acumulada}$ para $C_3$ con el resto de la red y para $C_3$ con $C_4$ después de 5 ps de evolución . . . . .	68
18. Eficiencia del transporte energético y $LQU_{acumulada}$ para $C_3$ con el resto de la red y para $C_3$ con $C_4$ después de 7.5 ps de evolución . . . . .	69
19. Eficiencia del transporte energético y $LQU_{acumulada}$ para $C_3$ con el resto de la red y para $C_3$ con $C_4$ después de 10 ps de evolución . . . . .	70
20. Gráfica paramétrica (EFICIENCIA (DEFASAMIENTO), $LQU_{acumulada}$ (DEFASAMIENTO)) para $C_3$ con el resto de la red y para $C_3$ con $C_4$ , después de 10 ps de evolución dinámica . . . . .	71
21. LQU entre un cromóforo $\{C_r\}$ y los 6 cromóforos restantes $\{C_s, C_t, C_t\dots\}$ durante los primeros 5ps para $r = 1, 2, 3, \dots, 7$ . . . . .	72
22. $LQU_{acumulada}$ como función del tiempo para los pares $\{C_3, C_r\}$ , con $r = 1, 2, 4, 5, 6, 7$ . . . . .	72

# Capítulo 1. Introducción

---

## 1.1. Antecedentes

La fotosíntesis es el proceso biológico que transforma la luz del sol en energía química que es utilizada para suministrar energía a todos los organismos en la tierra. En la etapa inicial de la fotosíntesis, la luz se absorbe en complejos proteína-pigmento (PPC) y la excitación electrónica se transfiere a un centro de reacción (RC), donde ocurre una reacción de separación de carga (Mohseni *et al.*, 2014).

La bacteria verde del azufre es un organismo fotosintético cuyo complejo colector de luz se compone de una antena de clorosomas (un PPC con forma de barra que tiene alrededor de 200 000 pigmentos altamente organizados que absorben la luz) anclada a agregados de una proteína llamada complejo Fenna-Matthews-Olson (FMO) (Camara-Artigas *et al.*, 2003; Li *et al.*, 1997). El complejo FMO sirve como un alambre cuántico que entrega energía electrónica del clorosoma al RC con una eficiencia cuántica cercana al 100 % (Chin *et al.*, 2010).

El complejo FMO es una proteína trimérica de subunidades idénticas que funcionan independientemente una de la otra. Las subunidades del complejo FMO consisten de dos hojas  $\beta$  que forman una bolsa hidrofóbica que sostiene 7 moléculas pigmento fuertemente acopladas, llamadas cromóforos o bacterioclorofilas a (Camara-Artigas *et al.*, 2003; Li *et al.*, 1997).

La coherencia cuántica se puede usar como un recurso operacional para realizar tareas que no serían posibles por medios clásicos. La coherencia tiene aplicaciones en óptica cuántica, información cuántica, física del estado sólido, termodinámica cuántica, metrología cuántica, correlaciones cuánticas y biología cuántica (Streltsov *et al.*, 2016; Baumgratz *et al.*, 2014; Winter y Yang, 2016).

Experimentos de espectroscopía electrónica dos dimensional ultrarápida han revelado que durante el transporte de energía el complejo FMO sostiene coherencia cuántica electrónica entre los siete cromóforos. La coherencia dura al menos 300 fs a temperatura ambiente, suficiente para impactar la dinámica de la transferencia de energía (Engel *et al.*, 2007; Panitchayangkoon *et al.*, 2010, 2011). En la proteína FMO, el papel funcional de la coherencia se manifiesta en una interacción entre la dinámica coherente del sistema y efectos incoherentes del ambiente que ayuda a la eficiencia

del transporte cuántico (Chin *et al.*, 2010; Rebentrost *et al.*, 2009; Mohseni *et al.*, 2008; Olaya-Castro *et al.*, 2008; Caruso *et al.*, 2009). Experimentos subsecuentes de espectroscopía electrónica dos dimensional (Cho *et al.*, 2005; Brixner *et al.*, 2005) y una revisión teórica (Ishizaki y Fleming, 2009) demuestran que la excitación se mueve coherentemente a través de dos caminos alternativos de transferencia de energía dependiendo del sitio que se excita inicialmente. La configuración de los caminos de transferencia de energía depende tanto de la diferencia en los niveles energéticos como del traslape espacial de las funciones de onda del excitón deslocalizado.

Las correlaciones cuánticas entre las diferentes partes de un sistema son vistas como un signo distintivo de su naturaleza no clásica. Los primeros esfuerzos para medir la parte no clásica de las correlaciones estaban basados en la no separabilidad de los estados de los subsistemas (entrelazamiento cuántico). El entrelazamiento es un recurso esencial pero delicado para la implementación de computación cuántica y protocolos de comunicación cuántica (Nielsen y Chuang, 2010). La discordia cuántica es otro cuantificador de correlaciones cuánticas que incluye al entrelazamiento como un subconjunto y es más robusto que el entrelazamiento contra influencias externas (Werlang *et al.*, 2012; Ferraro *et al.*, 2010). La discordia también se puede utilizar como un recurso útil para llevar a cabo tareas que son clásicamente imposibles (Datta *et al.*, 2008; Merali, 2011; Park *et al.*, 2013; Dakić *et al.*, 2012; Pirandola, 2014; Girolami *et al.*, 2014).

Las investigaciones en la dinámica de la transferencia de energía del complejo FMO han revelado la existencia de entrelazamiento bipartita y global entre los estados electrónicos de cromóforos espacialmente separados (Caruso *et al.*, 2009; Sarovar *et al.*, 2009; Ishizaki y Fleming, 2010; Brádler *et al.*, 2010; Whaley *et al.*, 2011; Thilagam, 2012). Estos estudios sobre la dinámica de la excitación muestran que el entrelazamiento dura 1-2 ps bajo modelos Markovianos y más de 4 ps bajo modelos no Markovianos más exactos. De acuerdo a los autores, el hecho que el tiempo de vida del entrelazamiento sea comparable con la escala de tiempo de la transferencia de energía en complejo FMO, algunos picosegundos, sugiere que las correlaciones cuánticas pueden beneficiar el transporte de la excitación. De forma interesante, la discordia cuántica entre pares de cromóforos vive por tiempos mayores que el entrelazamiento (Brádler *et al.*, 2010). Un papel funcional para las correlaciones cuánticas en PPC es consistente con la coherencia mejorando las propiedades del transporte de energía como eficiencia o robustez (Chin *et al.*, 2010; Rebentrost *et al.*, 2009; Mohseni *et al.*, 2008; Olaya-Castro *et al.*, 2008; Caruso *et al.*, 2009). Los resultados de investigación reciente donde se demuestra que el entrelazamiento es máximo sobre los dos caminos de transferencia electrónica también apoyan la idea de un papel funcional para las correlaciones cuánticas

(Zhu *et al.*, 2012; Chanda *et al.*, 2014; Skochdopole y Mazziotti, 2011). Tres investigaciones han estudiado el papel que las correlaciones no clásicas entre cromóforos juegan en la eficiencia de la transmisión energética: dos de ellos (Caruso *et al.*, 2010; Fassioli y Olaya-Castro, 2010) no encontraron resultados concluyentes y el tercero (Scholak *et al.*, 2011), con resultados positivos, fue sujeto a fuertes críticas del grupo que calculó por primera vez entrelazamiento en la proteína FMO.

Las mediciones con un observable cuántico pueden exhibir incertidumbre como consecuencia de la naturaleza probabilística de la mecánica cuántica. La incertidumbre de un observable en un estado cuántico tiene contribuciones de orígenes clásicos y cuánticos. La mínima contribución cuántica a la incertidumbre asociada a la medición de sistemas compuestos con observables locales se conoce como incertidumbre local cuántica (LQU) (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017). Recientemente, se ha probado que la LQU cumple los criterios de un cuantificador de correlaciones cuánticas tipo discordia: (1) LQU es cero si y sólo si la matriz densidad es clásica-cuántica, (2) LQU es invariante bajo operaciones unitarias locales, (3) LQU no se incrementa bajo operaciones locales en el subsistema que no se mide y (4) LQU se reduce a un monótono del entrelazamiento para estados puros.

LQU se ha usado como medida de las correlaciones cuánticas para garantizar una precisión mínima en el protocolo de estimación de fase óptima (Girolami *et al.*, 2013). Las correlaciones cuánticas asociadas a LQU se han utilizado para caracterizar transiciones de fase cuánticas en un sistema compuesto de  $n$  qubits (Coulamy *et al.*, 2016). LQU se empleó para estudiar la dinámica de las correlaciones cuánticas de un átomo de dos niveles interactuando con un estado coherente atrapado en una cavidad con pérdidas que evoluciona bajo un reservorio térmico (Sales *et al.*, 2015).

## **1.2. Objetivos**

### **1.2.1. Objetivo general**

El objetivo general de estudiar coherencia y correlaciones cuánticas en estructuras colectoras de luz es que la caracterización precisa de estos recursos cuánticos es esencial, por un parte, para entender su relación funcional con el mecanismo de transferencia de energía y, por otra parte, para ser capaz de construir dispositivos cuánticos naturalmente robustos basados en esa mecánica.

### 1.2.2. Objetivos específicos

- El primer objetivo es demostrar que la Incertidumbre Local Cuántica es una métrica altamente flexible, robusta y consistente para caracterizar correlaciones cuánticas, y es un nuevo enfoque que no había sido estudiado antes.
- Se determina la Incertidumbre Local Cuántica en subconjuntos de la red de cromóforos en un ensemble térmico de Gibbs porque una descripción correcta de cuales cromóforos permanecen cuánticamente correlacionados a tiempos largos depende del estado en equilibrio térmico alcanzado por el sistema.
- La Incertidumbre Local Cuántica como cuantificador tipo discordia de correlaciones cuánticas expande el conjunto de medidas que han sido calculadas en el complejo FMO, provee información al estudio de correlaciones cuánticas en subsistemas de redes de qubits y puede ser muy versátil. Además, se establece su relación con el entrelazamiento, una métrica basada en no separabilidad, y con el reciente recurso cuántico de coherencia.
- La identificación de las asociaciones más fuertes como subsistemas de tres sitios sirve para investigar si es posible relacionar correlaciones cuánticas en subconjuntos de la red de cromóforos con caminos de transporte de energía.
- La implementación del método basado en Incertidumbre Local Cuántica en un modelo dinámico se realiza para investigar la posible relación entre la transmisión de energía cuántica y correlaciones no clásicas en el complejo FMO.

## Capítulo 2. Metodología

---

En este capítulo se introducen 4 temas selectos de la teoría cuántica relacionados con esta investigación: coherencia, correlaciones cuánticas, incertidumbre local cuántica y la ecuación de Lindblad. La presentación de los 4 temas selectos viene después de establecer los 4 postulados básicos de la mecánica cuántica. El desarrollo de los postulados no es exhaustivo, es el mínimo necesario para poder exponer los temas selectos de interés.

### 2.1. Postulado 1: estado cuántico

Los experimentos físicos en la microescala exhiben comportamientos que no se pueden explicar dentro del marco conceptual de la física clásica. Además, en estos experimentos aparecen fenómenos que no tienen análogos en los sistemas macroscópicos. El acceso experimental a sistemas cuánticos se hace usando aparatos macroscópicos que sirven como interfaces entre el dominio cuántico (microscópico) y el dominio clásico (macroscópico). Ejemplos de sistemas cuánticos son una molécula, un átomo o un fotón (Audretsch, 2007).

La implementación de un experimento consiste en que el sistema cuántico pase por tres procesos: procedimiento de preparación, transformación determinista y medición con resultado probabilístico. En la realización secuencial de los tres procesos el sistema cuántico pasa por tres aparatos: aparato de preparación, aparato de transformación y aparato de medición (Audretsch, 2007).

#### 2.1.1. Sistemas cuánticos

Un sistema cuántico puro es una colección (o ensemble) de sistemas físicos del mismo tipo que han pasado por el mismo procedimiento de preparación. Mediciones en sistemas cuánticos puros conllevan, en general, a resultados distintos. Si se llevan a cabo mediciones en muchos sistemas preparados de manera idéntica se puede determinar una distribución probabilística de resultados experimentales. A un procedimiento de preparación se le asocia un objeto matemático, el estado cuántico, que permite calcular sin ambigüedad las probabilidades de los posibles resultados de la medición (Audretsch, 2007).

Entre la preparación y la medición, los aparatos de transformación son influencias externas que actúan en la evolución de los sistemas cuánticos. Un sistema cuántico cerrado es una idealización que considera: 1) el caso especial en que las influencias externas (por ejemplo campos electromagnéticos o gravitacionales) se pueden describir usando física clásica y 2) la aproximación de que el sistema cuántico está aislado del mundo exterior en el sentido de que sistemas externos no se ven afectados (Audretsch, 2007).

**Postulado 1:** El estado cuántico de un sistema cuántico cerrado en estado puro es un vector  $|\phi\rangle$  en un espacio de Hilbert  $H$  (un espacio vectorial con producto interno positivo definido) sobre el campo de los números complejos (Nielsen y Chuang, 2010).

### 2.1.2. Superposiciones coherentes

La naturaleza lineal del espacio de Hilbert permite construir combinaciones lineales de vectores de estado, llamadas superposiciones coherentes. El principio de superposición establece que las combinaciones lineales de vectores de estado son un nuevo estado cuántico en que se puede encontrar (o preparar) el sistema. Esto quiere decir que si los vectores de estado  $\{|\phi_n\rangle\}$  representan un conjunto de estados cuánticos, la combinación lineal:

$$|\Psi\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle \quad (1)$$

también corresponde a un válido y posible estado cuántico, donde  $\{\alpha_n\}$  son coeficientes complejos (Schlosshauer, 2007).

Una superposición coherente no representa una situación donde el sistema está en algún estado  $\{|\phi_n\rangle\}$  pero se desconoce cuál. Tampoco representa una situación en que un conjunto de sistemas físicos del mismo tipo están en los estados  $\{|\phi_n\rangle\}$ . En vez de eso, la superposición coherente de la Ecuación 1 define el estado cuántico de un sistema individual en el que todos los componentes  $\{|\phi_n\rangle\}$  están simultáneamente presentes. En esta situación se dice que existe coherencia entre estos componentes (Schlosshauer, 2007).

### 2.1.3. Matriz densidad

En situaciones físicas más generales, donde estén involucrados ensembles estadísticos o varios subsistemas, el estado cuántico del sistema es la matriz densidad. La matriz densidad de un sistema puro cuyo estado cuántico es el vector normalizado  $|\Psi\rangle$  es un operador  $\rho$  que se define de la siguiente forma (Audretsch, 2007):

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (2)$$

A diferencia de los sistemas puros, los componentes de un sistema cuántico mixto (o ensemble mixto), se encuentran en estados cuánticos distintos. Lo que se tiene es un conjunto de poblaciones donde los componentes de cada población se caracterizan por estar en el estado  $|\Psi_l\rangle$ . El conjunto de componentes de cada población constituye una fracción  $w_l$  relativa al ensemble mixto completo. Estas frecuencias  $w_l$  son siempre números reales e indican cuantos de los constituyentes del ensemble mixto están caracterizados por un vector  $|\Psi_l\rangle$ . Este tipo ensembles también se llaman mezclas estadísticas y su matriz densidad  $\rho$  es un operador que se forma como un promedio ponderado de los estados puros  $\{|\Psi_l\rangle\langle\Psi_l|\}$  pesados con su respectiva frecuencia  $\{w_l\}$  (Audretsch, 2007):

$$\rho = \sum_l w_l |\Psi_l\rangle\langle\Psi_l| \quad (3)$$

Las frecuencias relativas  $\{w_l\}$  son también las probabilidades clásicas asociadas a la presencia de los estados  $\{|\Psi_l\rangle\langle\Psi_l|\}$ , así que deben cumplir con (Audretsch, 2007):

$$\sum_l w_l = 1 \quad (4)$$

La matriz densidad de sistemas puros o mixtos cumple con (Audretsch, 2007):

1. Es autoadjunta:  $\rho^\dagger = \rho$
2. Está normalizada:  $Tr(\rho) = 1$
3. Es positiva:  $\langle\varphi|\rho|\varphi\rangle \geq 0$

Además, la matriz densidad para estados mixtos cumple con (Audretsch, 2007):

$$1/d \leq \text{tr}(\rho^2) \leq 1 \quad (5)$$

Se puede hacer una interpretación física de la Ecuación 5 usando la descomposición espectral de  $\rho$ :

$$\rho = \sum_{j=1}^d \lambda_j |j\rangle \langle j| \quad (6)$$

donde  $d$  es la dimensión del espacio vectorial en cuestión. El mínimo valor para  $\text{tr}(\rho^2)$  es  $1/d$  y esto ocurre cuando  $\lambda_j = 1/d$  para todos los  $\lambda_j$ . Las frecuencias relativas  $\{\lambda_j = 1/d\}$  son las probabilidades clásicas asociadas a los estados  $\{|j\rangle \langle j|\}$ . Si todas las probabilidades son iguales es porque corresponden a un ensemble completamente aleatorio, es decir un ensemble donde no hay un estado preferencial. En el sentido de preferencia por un estado, este ensemble es lo contrario de un ensemble puro donde todos sus componentes son descritos con un solo vector de estado. La traza de  $\rho^2$  se usa como una medida del grado de mezcla:  $1/d$  para estados máximamente mezclados y uno para estados puros (Audretsch, 2007).

#### 2.1.4. Información cuántica

Si Alicia quiere transmitirle a Bob una señal cuántica se dice que llevan a cabo transmisión de información cuántica. Una señal cuántica es un mensaje compuesto por una serie muy grande de estados  $|\Psi_i\rangle$  que Alicia va preparando y enviando:  $\{|\Psi_2\rangle, |\Psi_3\rangle, |\Psi_{1022}\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots, |\Psi_{78}\rangle\}$ . Alicia tiene disponibles un número finito de estados  $\{|\Psi_i\rangle\}$  y los manda en el orden que quiere pero tiene que respetar una restricción: cada procedimiento  $|\Psi_i\rangle$  lo debe usar con una frecuencia  $\mathbb{P}_i$ . Entonces Alicia dispone de un ensemble  $\{|\Psi_i\rangle, \mathbb{P}_i\}$  y comparte esta información con Bob mediante algún medio clásico. Bob quiere leer el mensaje pero sólo puede acceder al mensaje interviniendo en él. Bob realiza una medición a cada objeto cuántico que Alice le manda: esta es la forma en que Bob puede leer el mensaje. Generalmente, habrá pérdida de información pues la intervención a través de la medición implica colapso (Audretsch, 2007).

En la transmisión de información cuántica estamos interesados en cuestionamientos sobre la información y la ignorancia promedio.

Alicia y Bob conocen la distribución de probabilidades dada por el ensemble  $\{|\Psi_i\rangle, \mathbb{P}_i\}$ . Si bien sólo Alicia decide que estado mandar, Bob no es completamente ignorante. Supongamos que el ensemble es  $\{|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle\}, \{\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2\}$ . Donde  $\mathbb{P}_1 = 0.7$  y  $\mathbb{P}_2 = 0.3$ . En este caso Bob sabe que hay mayor probabilidad de que el siguiente estado sea  $|\Psi_1\rangle$ . Consideremos los extremos: si  $\mathbb{P}_1 = 0.5$  y  $\mathbb{P}_2 = 0.5$  entonces Bob es completamente ignorante de cual será el siguiente estado, el otro extremo es cuando  $\mathbb{P}_1 = 1$  y  $\mathbb{P}_2 = 0$ , en este caso Bob sabe con completa certeza que el siguiente estado será  $|\Psi_1\rangle$  (Audretsch, 2007). Se hacen tres observaciones:

Lo primero es que se puede hablar de una ignorancia promedio, pues en estos ejemplos no se habló de que tan largo es el mensaje sino que la ignorancia es una cualidad del ensemble que usa Alicia. Lo segundo es que el ejemplo de  $\mathbb{P}_1 = 0.5$  y  $\mathbb{P}_2 = 0.5$  corresponde a un ensemble máximamente mezclado mientras que el ejemplo de  $\mathbb{P}_1 = 1$  y  $\mathbb{P}_2 = 0$  corresponde a un ensemble puro. Lo tercero es que el ensemble que usa Alicia es equivalente a un estado cuántico mixto representado por la matriz densidad  $\rho$  (Audretsch, 2007):

$$\rho = \sum_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \mathbb{P}_i \quad (7)$$

La entropía de von Neuman se usa para cuantificar la ignorancia promedio. Esta entropía es una función del ensemble y se define (Audretsch, 2007):

$$S = -tr(\rho \log_2 \rho) \quad (8)$$

Si la descomposición espectral de la matriz densidad en la Ecuación 8 es:

$$\rho = \sum_l \lambda_l |l\rangle \langle l| \quad (9)$$

entonces la entropía se puede escribir como una función de los eigenvalores  $\{\lambda_l\}$  de  $\rho$  (Audretsch, 2007):

$$S = - \sum_l \lambda_l \log_2 \lambda_l \quad (10)$$

A continuación dos propiedades de la entropía:

1. Un estado puro  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  tiene el mínimo valor de la entropía:  $S(\rho) = 0$ . Un estado puro corresponde a cuando Bob sabe con completa certeza cual será el siguiente estado, es decir la ignorancia promedio es cero. La forma de cuantificar la ignorancia promedio que se ha escogido, la entropía, concuerda para este caso (Audretsch, 2007).
2. La entropía cumple:

$$0 \leq S(\rho) \leq \log_2(d) \quad (11)$$

donde  $d$  es la dimensión del espacio de Hilbert. Para demostrar esto se usan multiplicadores de Lagrange. El resultado es que la entropía toma su mayor valor cuando  $\lambda_l = 1/d$  para cada  $l$ :

$$S\left(\frac{1}{d}I\right) = \log_2(d) \quad (12)$$

El ensemble de esta matriz densidad corresponde al ensemble máximamente mezclado. Este es el caso cuando no existe ningún estado cuántico preferencial y la ignorancia promedio de Bob es máxima. Una vez más la entropía es consistente como medida de la ignorancia promedio (Audretsch, 2007).

## 2.2. Postulado 2: medición

En una medición, el investigador usa un sistema físico externo (su equipo experimental) para observar un sistema cuántico. Una medición es una intervención en un sistema cuántico llevada a cabo por un aparato de medición. El efecto que la medición produce en el aparato de medición se determina leyendo un número real: el resultado de la medición. Para sistemas cuánticos preparados de la misma forma (sistemas descritos por el mismo estado cuántico) los posibles resultados de la medición ocurren aleatoriamente (Audretsch, 2007).

En una intervención subsecuente a la medición se puede hacer una selección de acuerdo a algún resultado particular filtrando el resto. Tomadas juntas, las dos intervenciones se llaman medición selectiva (Audretsch, 2007).

Un procedimiento alternativo consiste en no realizar una selección posterior a la medición, esto se conoce como medición no selectiva (Audretsch, 2007).

### 2.2.1. Mediciones generalizadas

El efecto de intervenir mediante una medición generalizada se describe a través del siguiente postulado:

**Postulado 2:** Una medición selectiva generalizada se describe por el conjunto  $\{M_\alpha\}$  de operadores lineales. Cada operador  $M_\alpha$  corresponde a obtener como resultado de la medición el valor  $\alpha$  (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007).

La medición transforma el estado  $|\psi\rangle$  de la siguiente forma:

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'_\alpha\rangle = \frac{M_\alpha|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_\alpha^\dagger M_\alpha|\psi\rangle}} \quad (13)$$

La probabilidad  $\mathbb{P}_\alpha$  de obtener como resultado el valor  $\alpha$  es:

$$\mathbb{P}_\alpha = \langle\psi|M_\alpha^\dagger M_\alpha|\psi\rangle \quad (14)$$

Se pide que los operadores  $\{M_\alpha^\dagger M_\alpha\}$  sean positivos y cumplan la relación de completéz:

$$\sum_\alpha M_\alpha^\dagger M_\alpha = I \quad (15)$$

para mantener correcta la interpretación de probabilidad:

$$1 = \sum_\alpha \mathbb{P}_\alpha = \sum_\alpha \langle\psi|M_\alpha^\dagger M_\alpha|\psi\rangle \quad (16)$$

En el formalismo de la matriz densidad, una medición selectiva generalizada transforma un sistema cuántico (puro o mixto) representado por  $\rho$  de la siguiente forma (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$\rho \longrightarrow \rho'_a = \frac{M_a \rho M_a^\dagger}{\text{tr}(M_a^\dagger M_a \rho)} \quad (17)$$

Esta transformación y obtener como resultado de la medición el valor  $a$  ocurre con probabilidad  $\mathbb{P}_a$  (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$\mathbb{P}_a = \text{tr}(M_a^\dagger M_a \rho) \quad (18)$$

En el caso de una medición generalizada no selectiva, la transformación es un promedio ponderado de los estados después de la medición pesados con sus respectiva probabilidad (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$\rho \longrightarrow \rho'_{N.S.} = \sum_a \mathbb{P}_a \rho'_a = \sum_a \mathbb{P}_a \frac{M_a \rho M_a^\dagger}{\text{tr}(M_a^\dagger M_a \rho)} = \sum_a M_a \rho M_a^\dagger \quad (19)$$

### 2.2.2. POVM

*Positive Operator-Valued Measure* (POVM) son caso especial de las mediciones generalizadas. Este formalismo se usa cuando el estado después de la medición no es de interés. Por ejemplo, en un experimento donde el sistema se mide y el experimento concluye. El formalismo POVM se adapta convenientemente al análisis de estas mediciones y, en algunos casos, puede dar una mejor idea de la medición cuántica (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007).

Una medición descrita por los operadores  $\{M_a\}$  se realiza en el estado  $\rho$ . La probabilidad de obtener  $a$  es:  $\mathbb{P}_a = \text{tr}(M_a^\dagger M_a \rho)$ . Se define el conjunto de operadores positivos  $\{E_a\}$  (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$E_a \equiv M_a^\dagger M_a \quad (20)$$

Entonces se cumple que  $\sum_{\alpha} E_{\alpha} = I$  y  $\mathbb{P}_{\alpha} = \text{tr}(E_{\alpha}\rho)$ . Los operadores  $E_{\alpha}$  son suficientes para determinar las probabilidades  $\mathbb{P}_{\alpha}$  de los resultados  $\alpha$ . A los operadores  $E_{\alpha}$  se le conoce como los elementos POVM asociados a la medición y al conjunto completo  $\{E_{\alpha}\}$  se le conoce como un POVM (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007).

### 2.2.3. Mediciones proyectivas

Una medición proyectiva también es un caso particular de mediciones generalizadas. Una medición proyectiva está descrita por un observable  $S$ , un operador hermitiano en el espacio de estados del sistema. Suponiendo no degeneración, el operador  $S$  tiene descomposición espectral:

$$S = \sum_i s_i P_i \quad (21)$$

donde  $\{s_i\}$  son los eigenvalores y  $\{P_i\}$  son proyectores definidos a partir de los eigenvectores  $|s_i\rangle$  de la siguiente manera (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$P_i = |s_i\rangle\langle s_i| \quad (22)$$

Los proyectores cumplen la condición de completitud (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$\sum_i P_i = I \quad (23)$$

A través de una medición proyectiva en el estado  $\rho$  descrita por el observable  $S$ , la probabilidad de obtener como resultado de la medición el eigenvalor  $s_i$  es:

$$\mathbb{P}_i = \text{tr}(\rho P_i) \quad (24)$$

y el estado  $\rho$  se transforma de la siguiente manera (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$\rho \longrightarrow \rho'_i = \frac{P_i \rho P_i}{\text{tr}(\rho P_i)} = \frac{P_i \rho P_i}{\mathbb{P}_i} \quad (25)$$

En el caso de una medición proyectiva no selectiva, la transformación es un promedio ponderado de los estados después de la medición pesados con sus respectiva probabilidad (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$\rho \longrightarrow \rho'_{N.S.} = \sum_i \mathbb{P}_i \frac{P_i \rho P_i}{\text{tr}(\rho P_i)} = \sum_i P_i \rho P_i \quad (26)$$

Una propiedad particular de las mediciones proyectivas es que se calcula fácilmente el valor promedio  $\langle S \rangle$  de la medición sobre  $\rho$  (Nielsen y Chuang, 2010; Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} \langle S \rangle &= \sum_i s_i \mathbb{P}_i \\ &= \sum_i s_i \text{tr}(\rho P_i) \\ &= \text{tr} \left( \rho \sum_i s_i P_i \right) \\ &= \text{tr}(\rho S) \end{aligned} \quad (27)$$

#### 2.2.4. Principio de incertidumbre de Heisenberg

La forma compacta del valor promedio de una medición proyectiva permite establecer una desigualdad que relaciona las desviaciones estándar de dos mediciones independientes con el conmutador de sus observables. La desigualdad se conoce como Principio de Incertidumbre de Heisenberg (Nielsen y Chuang, 2010).

La desviación estándar  $\Delta(M)$  asociada a una medición realizada con el observable  $M$  es (Nielsen y Chuang, 2010):

$$\begin{aligned} [\Delta(M)]^2 &= \langle [M - \langle M \rangle]^2 \rangle \\ &= \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \end{aligned} \quad (28)$$

Sean  $A, B$  son dos operadores hermitianos en el mismo espacio de estados que cumplen con  $\langle AB \rangle = x + iy$ , donde  $x, y$  son reales. Se tiene que  $\langle [A, B] \rangle = 2iy$  y  $\langle \{A, B\} \rangle = 2x$ . Entonces se cumple (Nielsen y Chuang, 2010):

$$|\langle [A, B] \rangle|^2 + |\langle \{A, B\} \rangle|^2 = 4|\langle AB \rangle|^2 \quad (29)$$

Y aplicando la desigualdad de Cauchy-Schwarz (Nielsen y Chuang, 2010):

$$|\langle AB \rangle|^2 \leq \langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \quad (30)$$

Ahora se hacen la sustituciones  $A = C - \langle C \rangle$  y  $B = D - \langle D \rangle$  para obtener el principio de incertidumbre (Nielsen y Chuang, 2010):

$$\Delta(C)\Delta(D) \geq \frac{|\langle [C, D] \rangle|}{2} \quad (31)$$

### 2.3. Postulado 3: evolución

**Postulado 3:** La evolución de un sistema cuántico cerrado la describe un operador unitario de evolución temporal  $U(t)$  que satisface la siguiente ecuación diferencial:

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = H(t)U(t) \quad (32)$$

donde  $\hbar = 1.054571800(13) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$  es la constante de Planck y  $H$  es el observable asociado a la energía total del sistema (Hamiltoniano) (Audretsch, 2007).

Un estado cuántico  $|\psi(t_0)\rangle$  evoluciona a  $|\psi(t)\rangle$  de la siguiente manera (Audretsch, 2007):

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (33)$$

Al usar la ecuación 33 en 32 se obtiene la ecuación de Schrödinger. La ecuación de Schrödinger

es la representación de la ecuación de evolución temporal en vectores de estado (Audretsch, 2007):

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle \quad (34)$$

La ecuación de von Neumann es la ecuación de evolución temporal en matrices densidad. Si se sustituye la ecuación de Schrödinger 34 en la siguiente ecuación:

$$\frac{d}{dt}\rho = \frac{d}{dt}(|\psi\rangle\langle\psi|) = \left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right)\langle\psi| + |\psi\rangle\frac{d}{dt}\langle\psi| \quad (35)$$

se obtiene la ecuación de von Neumann (Audretsch, 2007):

$$\frac{d}{dt}\rho = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] \quad (36)$$

## 2.4. Postulado 4: sistemas compuestos

Un sistema clásico compuesto se puede describir completamente en términos de sus subsistemas y de las interacciones dinámicas entre ellos. Por otra parte, los sistemas cuánticos compuestos pueden exhibir propiedades unificadas diferentes, ajenas a las de los sistemas clásicos. Estas propiedades se manifiestan cuando un sistema cuántico compuesto se encuentra en estado entrelazado (Audretsch, 2007).

Hay sistemas cuánticos que exhiben una estructura interna: se pueden distinguir subsistemas que se accesan separadamente. Los subsistemas se pueden identificar experimentalmente y en ellos se pueden llevar a cabo intervenciones individuales. Las intervenciones individuales se conocen como operaciones locales (Audretsch, 2007).

Ejemplos de sistemas compuestos bipartitos (Audretsch, 2007):

- Un sistema compuesto de dos fotones que se detectan en dos lugares diferentes.
- Un sistema compuesto de dos electrones que se detectan en dos lugares diferentes.

- Un sistema donde se detecta en un lugar un fotón y en otro lugar un átomo.
- Un sistema compuesto de la órbita y de la polarización de un mismo objeto cuántico.
- Dos sistemas separados, completamente independientes uno del otro, también se pueden considerar un sistema compuesto.

La posibilidad de manipulaciones por separado, y no la individualidad de los objetos cuánticos, define los subsistemas (Audretsch, 2007).

**Postulado 4:** El espacio de estados de un sistema compuesto es el producto tensorial de los espacios de estados de los sistemas físicos componentes (Nielsen y Chuang, 2010).

## 2.4.1. Vectores, operadores, trazas

### 2.4.1.1. Vectores

Un sistema cuántico  $S^{AB}$  compuesto por los subsistemas  $S^A$  y  $S^B$  tiene asociados los espacios de Hilbert  $H^A$  y  $H^B$ . El espacio de Hilbert para los dos subsistemas corresponde al producto tensorial  $H^{AB} = H^A \otimes H^B$  (Audretsch, 2007).

Si  $\{|i^A\rangle\}$  (con  $i = 1, \dots, n$ ) es una base ortonormal para  $H^A$  y  $\{|j^B\rangle\}$  (con  $j = 1, \dots, m$ ) es una base ortonormal para  $H^B$ , entonces la base para  $H^{AB}$  tiene dimensión  $n \times m$  y se forma con el producto tensorial de las dos bases:  $\{|i^A\rangle \otimes |j^B\rangle\}$  (Audretsch, 2007).

Las siguientes notaciones se usan de manera equivalente (Audretsch, 2007):

$$|i^A\rangle \otimes |j^B\rangle = |i^A\rangle |j^B\rangle = |i^A, j^B\rangle \quad (37)$$

Los vectores  $|\psi^{AB}\rangle$  en  $H^{AB}$  se expanden usando la base  $\{|i^A\rangle \otimes |j^B\rangle\}$  (Audretsch, 2007):

$$|\psi^{AB}\rangle = \sum_{ij} \alpha_{ij} |i^A, j^B\rangle \quad (38)$$

Los vectores  $|\psi^{AB}\rangle$  en  $H^{AB}$  formados por el producto de un vector  $|\varphi^A\rangle$  en  $H^A$  y un vector  $|\chi^B\rangle$  en  $H^B$  se llaman vectores producto (Audretsch, 2007):

$$|\psi^{AB}\rangle = |\varphi^A\rangle \otimes |\chi^B\rangle \quad (39)$$

Los vectores  $|\psi^{AB}\rangle$  en  $H^{AB}$  que no son vectores producto se llaman vectores entrelazados (Audretsch, 2007).

El producto interno entre los vectores producto  $|\psi^{AB}\rangle = |\varphi^A, \chi^B\rangle$  y  $|\phi^{AB}\rangle = |\xi^A, \zeta^B\rangle$  se hace espacio por espacio (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} \langle \phi^{AB} | \psi^{AB} \rangle &= \langle \xi^A, \zeta^B | \varphi^A, \chi^B \rangle \\ &= \langle \xi^A | \varphi^A \rangle \langle \zeta^B | \chi^B \rangle \end{aligned} \quad (40)$$

Si  $\{|c_n^A\rangle\}$  y  $\{|d_i^B\rangle\}$  son bases ortonormales de  $H^A$  y  $H^B$  entonces un estado puro  $|\psi^{AB}\rangle$  del sistema  $S^{AB}$  se expande (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} |\psi^{AB}\rangle &= \sum_n \sum_i \alpha_{ni} |c_n^A, d_i^B\rangle \\ &= \sum_n |c_n^A\rangle \otimes \sum_i \alpha_{ni} |d_i^B\rangle \\ &= \sum_n |c_n^A\rangle \otimes |\tilde{w}_n^B\rangle \\ &= \sum_n |c_n^A, \tilde{w}_n^B\rangle \end{aligned} \quad (41)$$

Se ha definido a los vectores no normalizados  $|\tilde{w}_n^B\rangle$  del subespacio  $S^B$  como combinación lineal de los vectores base en ese subespacio. A  $|\tilde{w}_n^B\rangle$  se le llama el estado relativo perteneciente a  $|c_n\rangle$  (Audretsch, 2007).

#### 2.4.1.2. Operadores

Si tenemos un operador  $C^A$  en  $H^A$  y un operador  $D^B$  en  $H^B$  entonces el producto tensorial  $C^A \otimes D^B$  es un operador producto en  $H^{AB}$  y actúa espacio por espacio:

$$(C^A \otimes D^B) |\varphi^A, \chi^B\rangle = |C^A \varphi^A, D^B \chi^B\rangle \quad (42)$$

y además es lineal en  $H^{AB}$  (Audretsch, 2007):

$$(C^A \otimes D^B) \sum_{ij} \alpha_{ij} |i^A, j^B\rangle = \sum_{ij} \alpha_{ij} |C^A i^A, D^B j^B\rangle \quad (43)$$

El producto exterior formado por los vectores  $|\psi^{AB}\rangle = |\varphi^A, \chi^B\rangle$  y  $|\phi^{AB}\rangle = |\xi^A, \zeta^B\rangle$  también es un operador producto (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} |\psi^{AB}\rangle \langle \phi^{AB}| &= |\varphi^A, \chi^B\rangle \langle \xi^A, \zeta^B| \\ &= |\varphi^A\rangle \langle \xi^A| \otimes |\chi^B\rangle \langle \zeta^B| \end{aligned} \quad (44)$$

El operador identidad  $I^{AB}$  en  $H^{AB}$  se puede expandir en términos de la base  $\{|i^A, j^B\rangle\}$  (Audretsch, 2007):

$$I^{AB} = \sum_{i,j} |i^A, j^B\rangle \langle i^A, j^B| = I^A \otimes I^B \quad (45)$$

Con el operador identidad de uno de los subespacios se forman operadores que actúan en sólo uno de los subespacios. Estos operadores se llaman operadores locales y se denotan con un sombrero (Audretsch, 2007):

$$\hat{C}^{AB} = C^A \otimes I^B \quad (46)$$

$$\hat{D}^{AB} = I^A \otimes D^B \quad (47)$$

Usando la expansión del operador identidad 45 se puede escribir la representación de un operador generalizado en términos de la base  $\{|i^A, j^B\rangle\}$  (Audretsch, 2007):

$$Z^{AB} = \sum_{ijkl} \langle i^A, j^B | Z^{AB} | k^A, l^B \rangle (|i^A\rangle \langle k^A| \otimes |j^B\rangle \langle l^B|) \quad (48)$$

### 2.4.1.3. Trazas

La traza de un operador  $Z^{AB}$  en  $H^{AB}$  se define en términos de la base ortonormal  $\{|i^A, j^B\rangle\}$  (Audretsch, 2007):

$$tr[Z^{AB}] = \sum_{i,j} \langle i^A, j^B | Z^{AB} | i^A, j^B \rangle \quad (49)$$

La traza para un operador producto  $C^A \otimes D^B$  es (Audretsch, 2007):

$$tr[C^A \otimes D^B] = \sum_i \langle i^A | C^A | i^A \rangle \sum_j \langle j^B | D^B | j^B \rangle = tr_A[C^A] tr_B[D^B] \quad (50)$$

La traza se calcula espacio por espacio. Esto lleva a definir la traza parcial sobre uno de los subespacios (Audretsch, 2007):

$$tr_A[Z^{AB}] = \sum_i \langle i^A | Z^{AB} | i^A \rangle \quad (51)$$

La operación traza parcial sobre el espacio  $H^A$  genera un operador en  $H^B$ . Para un operador producto la traza parcial toma la forma (Audretsch, 2007):

$$tr_A[C^A \otimes D^B] = tr_A[C^A] D^B \quad (52)$$

La traza total se encuentra a través de las trazas parciales (Audretsch, 2007):

$$tr[Z^{AB}] = tr_A[tr_B[Z^{AB}]] = tr_B[tr_A[Z^{AB}]] \quad (53)$$

La traza se usa como producto interno en el espacio de operadores para expandirlos en términos de su base. Si  $\{Q_\alpha^A\}$  es una base para los operadores en  $H^A$  y  $\{R_\beta^B\}$  es una base para los operadores en  $H^B$  entonces los siguientes operadores producto:

$$T_{\alpha\beta}^{AB} = Q_\alpha^A \otimes R_\beta^B \quad (54)$$

son una base para el espacio  $H^{AB}$  (Audretsch, 2007).

Los vectores base son ortonormales (Audretsch, 2007):

$$\text{tr} \left[ T_{\alpha\beta}^{AB\dagger} S_{\kappa\eta}^{AB} \right] = \delta_{\alpha\kappa} \delta_{\beta\eta} \quad (55)$$

Con los vectores base se puede expandir cualquier operador  $Z^{AB}$  en  $H^{AB}$  (Audretsch, 2007):

$$Z^{AB} = \sum_{\alpha\beta} \text{tr} \left[ T_{\alpha\beta}^{AB\dagger} Z^{AB} \right] T_{\alpha\beta}^{AB} \quad (56)$$

## 2.4.2. Transformaciones unitarias

### 2.4.2.1. Transformaciones unitarias locales

Una dinámica unitaria actuando sobre el subsistema  $S^A$  la describe el siguiente operador local (Audretsch, 2007):

$$\hat{U}^{AB} = U^A \otimes I^B \quad (57)$$

La dinámica unitaria local sobre el estado puro  $|\psi^{AB}\rangle$  produce la siguiente transición (Audretsch, 2007):

$$|\psi^{AB}\rangle \longrightarrow |\psi^{AB'}\rangle = \sum_n |U^A c_n^A\rangle |\tilde{w}_n^B\rangle \quad (58)$$

La transición cambia el estado del subsistema  $S^A$  y del sistema compuesto  $S^{AB}$ . El estado del subsistema  $S^B$  no cambia (Audretsch, 2007).

### 2.4.2.2. Transformaciones unitarias globales

Se consideran transformaciones unitarias sobre el sistema compuesto  $\rho^{AB}$ . Para ello, se usa la ecuación de von Neumann (Ecuación 36) pero aplicada a sistemas compuestos:

$$\frac{d}{dt}\rho^{AB} = -\frac{i}{\hbar} [H^{AB}, \rho^{AB}] \quad (59)$$

donde el Hamiltoniano del sistema compuesto tiene la forma (Audretsch, 2007):

$$H^{AB} = H^A \otimes I^B + I^A \otimes H^B + H_{int}^{AB} \quad (60)$$

Si existe una interacción entre los subsistemas descrita por  $H_{int}^{AB} \neq 0$  entonces los subsistemas individuales son sistemas cuánticos abiertos (Audretsch, 2007). Este tema se trata en la sección 2.6.

### 2.4.3. Medición

#### 2.4.3.1. Afirmaciones sobre probabilidad

Se considera un sistema cuántico compuesto  $S^{AB}$  formado por los subsistemas  $S^A$  y  $S^B$ . Una medición que se realiza en uno de los subsistemas se llama medición local. Hay dos formas de realizar afirmaciones sobre probabilidad en los resultados de mediciones locales. Una forma es considerando el estado  $\rho^{AB}$  del sistema compuesto  $S^{AB}$  y la otra es tomar en cuenta el estado cuántico del subsistema que se mide. El estado cuántico de los subsistemas  $S^A$  y  $S^B$  son las matrices densidad reducidas  $\rho^A$  y  $\rho^B$ . Se llaman matrices densidad reducidas porque se calculan con la traza parcial sobre el otro subsistema (Audretsch, 2007):

$$\rho^A = tr_B(\rho^{AB}) \quad \rho^B = tr_A(\rho^{AB}) \quad (61)$$

Si se considera el operador identidad  $I^B$  en  $H^B$  y el observable  $C^A$  en  $H^A$  cuya ecuación de eigenvalores es:

$$C^A |c_n^A\rangle = c_n^A |c_n^A\rangle \quad (62)$$

entonces una medición de  $C^A$  en el subsistema  $S^A$  está caracterizada por el operador de proyección local (Audretsch, 2007):

$$\hat{P}_n^A = P_n^A \otimes I^B = |c_n^A\rangle \langle c_n^A| \otimes I^B \quad (63)$$

La probabilidad de obtener como resultado  $c_n$  al medir  $S^A$  es (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_n &= tr(\hat{P}_n^A \rho^{AB}) \\ &= tr_A(tr_B(P_n^A \otimes I^B \rho^{AB})) \\ &= tr_A(P_n^A tr_B(I^B \rho^{AB})) \\ &= tr_A(P_n^A \rho^A) \end{aligned} \quad (64)$$

La Ecuación 64 es una generalización de la Ecuación 24. De manera similar, con el observable local  $\hat{C}^A = C^A \otimes I^B$  se calcula el valor esperado (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}^A \rangle &= tr(\hat{C}^A \rho^{AB}) \\ &= tr_A(tr_B(C^A \otimes I^B \rho^{AB})) \\ &= tr_A(C^A tr_B(I^B \rho^{AB})) \\ &= tr_A(C^A \rho^A) \end{aligned} \quad (65)$$

La Ecuación 65 es una generalización de la Ecuación 27. De las ecuaciones 64 y 65 se concluye que las afirmaciones sobre probabilidad en los resultados de mediciones locales se obtienen al aplicar el formalismo de mediciones proyectivas a la matriz densidad reducida  $\rho^A$  (Ecuación 61) del subsistema  $S^A$ . Esta es la razón por la que  $\rho^A$  es el estado cuántico del subsistema  $S^A$  (Audretsch, 2007).

### 2.4.3.2. Mediciones selectivas

Nuevamente, se considera un sistema cuántico compuesto  $S^{AB}$  formado por los subsistemas  $S^A$  y  $S^B$ . Una medición con el observable  $C^A$  al subsistema  $S^A$  en la cual se realiza una selección entre los resultados de la medición  $\{c_n\}$  transforma el estado  $\rho^{AB}$  del sistema compuesto  $S^{AB}$  de la siguiente forma (Audretsch, 2007):

$$\rho^{AB} \longrightarrow \rho^{AB'} = \frac{\hat{P}_n^A \rho^{AB} \hat{P}_n^A}{\text{tr}(\hat{P}_n^A \rho^{AB})} = \frac{\hat{P}_n^A \rho^{AB} \hat{P}_n^A}{\mathbb{P}_n} \quad (66)$$

La ecuación 66 es una generalización de la Ecuación 25.  $\mathbb{P}_n = \text{tr}(\hat{P}_n^A \rho^{AB})$  es la probabilidad de que una medición lleve al valor  $c_n$  (Ecuación 64).

En el caso especial de que el sistema compuesto  $S^{AB}$  esté en el estado puro  $|\psi^{AB}\rangle$  (descrito por la Ecuación 41) con matriz densidad:

$$\begin{aligned} \rho^{AB} &= |\psi^{AB}\rangle \langle \psi^{AB}| \\ &= \sum_{nm} |c_n^A\rangle \langle c_m^A| \otimes |\tilde{w}_n^B\rangle \langle \tilde{w}_m^B| \end{aligned} \quad (67)$$

una medición al subsistema  $S^A$  que selecciona  $c_l$  entre los resultados causa la siguiente transición (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} \rho^{AB} \longrightarrow \rho_l'^{AB} &= \frac{1}{\mathbb{P}_l} \hat{P}_l^A \rho^{AB} \hat{P}_l^A \\ &= \frac{1}{\mathbb{P}_l} (P_l^A \otimes I^B) \sum_{nm} |c_n^A\rangle \langle c_m^A| \otimes |\tilde{w}_n^B\rangle \langle \tilde{w}_m^B| (P_l^A \otimes I^B) \\ &= \frac{1}{\mathbb{P}_l} |c_l^A\rangle \langle c_l^A| \otimes |\tilde{w}_l^B\rangle \langle \tilde{w}_l^B| \end{aligned} \quad (68)$$

El subsistema  $S^A$  se transforma al estado  $|c_l^A\rangle$  y el subsistema  $S^B$  se transforma al estado relativo  $|\tilde{w}_l^B\rangle$ , perteneciente a  $|c_l^A\rangle$ . El estado resultante  $\rho_l'^{AB}$  es un estado producto: una medición selectiva en uno de los subsistemas rompe el entrelazamiento (Audretsch, 2007).

En este caso especial donde  $\rho^{AB} = |\psi^{AB}\rangle \langle \psi^{AB}|$ , la probabilidad  $\mathbb{P}_l$  de que una medición lleve al valor  $c_l$  es (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_l &= \text{tr} \left( (P_l^A \otimes I^B) \rho^{AB} \right) \\
&= \text{tr} \left( (P_l^A \otimes I^B) \rho^{AB} (P_l^A \otimes I^B) \right) \\
&= \text{tr} \left( (P_l^A \otimes I^B) \sum_{nm} |c_n^A\rangle \langle c_m^A| \otimes |\tilde{w}_n^B\rangle \langle \tilde{w}_m^B| (P_l^A \otimes I^B) \right) \\
&= \text{tr} \left( \sum_{nm} P_l^A |c_n^A\rangle \langle c_m^A| P_l^A \otimes I^B |\tilde{w}_n^B\rangle \langle \tilde{w}_m^B| I^B \right) \\
&= \text{tr} \left( |c_l^A\rangle \langle c_l^A| \otimes |\tilde{w}_l^B\rangle \langle \tilde{w}_l^B| \right) \\
&= \langle \tilde{w}_l^B | \tilde{w}_l^B \rangle
\end{aligned} \tag{69}$$

La descripción operacional de una medición selectiva en un sistema compuesto  $S^{AB}$  es la siguiente (Audretsch, 2007):

1. Alicia mide en su subsistema  $S^A$  el observable  $C^A$  y obtiene los resultados  $\{c_n\}$
2. En una intervención subsecuente a la medición, Alicia selecciona los objetos cuánticos de acuerdo a algún resultado particular  $c_l$  y los deja pasar para que sigan formando parte del experimento. Alicia filtra el resto.
3. Alicia usa algún medio de comunicación clásico para avisarle a Bob los resultados de cada medición.
4. Bob selecciona en su subsistema  $S^B$  los objetos cuánticos de acuerdo a los resultados de Alicia y los deja pasar para que sigan formando parte del experimento. Bob filtra el resto.

El procedimiento descrito prepara al sistema  $S^{AB}$  en el estado  $|\psi^{AB'}\rangle = |c_l^A, \tilde{w}_l^B\rangle$ . El procedimiento de preparación usa entrelazamiento y algún canal de comunicación clásica para que Bob obtenga objetos cuánticos en el estado  $|\tilde{w}_l^B\rangle$ : no se necesitan transmitir objetos cuánticos entre Alicia y Bob (Audretsch, 2007).

### 2.4.3.3. Mediciones no selectivas

Una vez más, se considera un sistema cuántico compuesto  $S^{AB}$  formado por los subsistemas  $S^A$  y  $S^B$ . Una medición con el observable  $C^A$  al subsistema  $S^A$  en la cual no se realiza selección

entre los resultados de la medición  $\{c_n\}$  transforma el estado  $\rho^{AB}$  del sistema compuesto  $S^{AB}$  de la siguiente forma (Audretsch, 2007):

$$\rho^{AB} \longrightarrow \rho_{N.S.}^{AB'} = \sum_n \mathbb{P}_n \frac{\hat{P}_n^A \rho^{AB} \hat{P}_n^A}{\text{tr}(\hat{P}_n^A \rho^{AB})} = \sum_n \hat{P}_n^A \rho^{AB} \hat{P}_n^A \quad (70)$$

La Ecuación 70 es una generalización de la Ecuación 26.

En el caso especial de que el sistema compuesto  $S^{AB}$  esté en el estado puro  $|\psi^{AB}\rangle$  (Ecuación 67) una medición al subsistema  $S^A$  sin selección de resultados causa la siguiente transición (Audretsch, 2007):

$$|\psi^{AB}\rangle \longrightarrow \rho_{N.S.}^{AB'} = \sum_n \hat{P}_n^A \rho^{AB} \hat{P}_n^A = \sum_n |c_n^A\rangle \langle c_n^A| \otimes |\tilde{w}_n^B\rangle \langle \tilde{w}_n^B| \quad (71)$$

La Ecuación 71 es una generalización de la Ecuación 26 donde se ha usado la Ecuación 68.

Ahora se estudia la manera en que se transforman los estados de los subsistemas (Ecuación 61) bajo una medición no selectiva. Si se mide el subsistema  $S^A$  entonces ocurre la siguiente transición para  $\rho^A$  (Audretsch, 2007):

$$\rho^A \longrightarrow \rho_{N.S.}^{A'} = \text{tr}_B(\rho_{N.S.}^{AB'}) = \text{tr}_B\left(\sum_n \hat{P}_n^A \rho^{AB} \hat{P}_n^A\right) = \sum_n P_n^A \rho^A P_n^A \quad (72)$$

Al comparar la Ecuación anterior 72 con la Ecuación 26 se observa que para las transiciones entre operadores densidad reducidos después de mediciones locales selectivas o no selectivas se aplican los mismos procedimientos del Postulado 2 (Audretsch, 2007).

Finalmente se estudia la manera en que se transforma el estado del subsistema que no se mide después de una medición no selectiva:

$$\begin{aligned}
\rho^B \longrightarrow \rho_{N.S.}^{B'} &= \text{tr}_A(\rho_{N.S.}^{AB'}) \\
&= \text{tr}_A\left(\sum_n \hat{\rho}_n^A \rho^{AB} \hat{\rho}_n^A\right) \\
&= \sum_n \text{tr}_A(\hat{\rho}_n^A \rho^{AB} \hat{\rho}_n^A) \\
&= \sum_n \text{tr}_A(\hat{\rho}_n^A \rho^{AB}) \\
&= \text{tr}_A\left(\left[\sum_n \hat{\rho}_n^A\right] \rho^{AB}\right) \\
&= \rho^B
\end{aligned} \tag{73}$$

donde se han usado las Ecuaciones 23 y 45 para la condición de completez:  $\sum_n \hat{\rho}_n^A = I^{AB}$ . Después de una medición no selectiva en  $S^A$  el estado cuántico  $\rho^B$  del subsistema  $S^B$  no cambia. Bob no tiene manera de saber si Alicia realizó una medición no selectiva (Audretsch, 2007).

## 2.5. Recursos cuánticos

### 2.5.1. Coherencia cuántica

En la ciencia de información cuántica, la coherencia se usa como un recurso que se consume para realizar tareas que no son posibles usando medios clásicos. La teoría de recursos para la coherencia interpreta las leyes físicas como constricciones en el conjunto de operaciones cuánticas libres que se implementan en estados cuánticos. Si un estado coherente es el recurso a consumir entonces el conjunto de operaciones cuánticas libres son las operaciones incoherentes y los estados cuánticos libres son los estados incoherentes. Una medida correcta de la coherencia  $C$  debe cumplir las siguientes condiciones:  $C(\rho) = 0$  cuando  $\rho$  es un estado incoherente,  $C$  no aumenta bajo operaciones incoherentes (monotonicidad),  $C$  no aumenta en promedio bajo operaciones selectivas incoherentes (monotonicidad fuerte),  $C$  no aumenta bajo el mezclado de estados cuánticos (convexidad). La  $l_1$  norma de coherencia  $C_{l_1}$  definida por:

$$C_{l_1}(\rho) \equiv \sum_{i \neq j} |\rho_{ij}| \tag{74}$$

cumple las condiciones anteriores así que se usa como una medida apropiada de la coherencia (Streltsov *et al.*, 2016; Baumgratz *et al.*, 2014).

Para un espacio de Hilbert  $d$ -dimensional con base de referencia  $\{|i\rangle\}_{i=0,\dots,d-1}$  el estado máximamente coherente es:  $|\Psi_d\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_0^{d-1} |i\rangle$ . Para el estado  $|\Psi_d\rangle$  la  $l_1$  norma de coherencia  $C_{l_1}$  toma el valor:  $C_{l_1}(|\Psi_d\rangle) = d - 1$  (Streltsov *et al.*, 2016; Baumgratz *et al.*, 2014).

## 2.5.2. Correlaciones clásicas, cuánticas y totales

Los estados cuánticos que están compuestos de dos subsistemas pueden llevar a correlaciones en los valores observados después de medir los subsistemas. Se está interesado tanto en cuantificar las correlaciones como en distinguir entre correlaciones clásicas de cuánticas.

### 2.5.2.1. Entrelazamiento

Las primeras propuestas para caracterizar la parte no clásica de las correlaciones estaban basadas en entrelazamiento cuántico, es decir, la no separabilidad de los subsistemas. Bajo este criterio, sólo los estados entrelazados contienen correlaciones cuánticas y los estados separables no llevan a correlaciones o sólo contienen correlaciones clásicas.

**Estados separables** Los estados separables comprenden a estados producto:

$$|\Psi^{AB}\rangle = |\phi^B\rangle \otimes |\chi^A\rangle \quad (75)$$

y a mezclas de estados producto (Audretsch, 2007):

$$\rho^{AB} = \sum_i \mathbb{P}_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B, \quad \mathbb{P}_i > 0, \quad \sum_i \mathbb{P}_i = 1 \quad (76)$$

Los subsistemas de estados producto son completamente independientes uno del otro y no están correlacionados. Las mezclas de estados producto sí pueden llevar a correlaciones en los valores medidos. Un ejemplo es el siguiente estado clásicamente correlacionado (Audretsch, 2007):

$$\rho^{AB} = \mathbb{P}_1 |0^A\rangle\langle 0^A| \otimes |0^B\rangle\langle 0^B| + \mathbb{P}_2 |1^A\rangle\langle 1^A| \otimes |1^B\rangle\langle 1^B| \quad (77)$$

Si en este estado  $\rho^{AB}$  se mide el subsistema  $S^A$  con el observable  $\sigma_z$  se obtiene con probabilidad  $\mathbb{P}_1$  el resultado +1. Si después se mide el subsistema  $S^B$  con el observable  $\sigma_z$  entonces se obtiene con completa certeza el resultado +1. Por otro lado, si en este estado se mide el subsistema  $S^A$  con el observable  $\sigma_z$  se obtiene con probabilidad  $\mathbb{P}_2$  el resultado -1. Si después se mide el subsistema  $S^B$  entonces se obtiene con completa certeza el resultado -1. Los únicos resultados de la medición son los pares (+1,+1) y (-1,-1): los resultados de la medición están correlacionados. Estas correlaciones tienen similitudes a las correlaciones observadas en sistemas clásicos por lo que se conocen como correlaciones clásicas. Por ejemplo, en un conjunto de pares de cajas donde cada par contiene sólo pelotas Amarillas o sólo pelotas Blancas. Al abrir las cajas los colores de las pelotas están correlacionados (Audretsch, 2007).

Para mezclas de estados producto, Alicia y Bob preparan el sistema compuesto  $S^{AB}$  comenzando con estados producto. Alicia y Bob operan en sus respectivos subsistemas a través de manipulaciones locales como transformaciones unitarias o mediciones. Además, Alicia y Bob intercambian información usando algún canal de comunicación clásico para coordinar sus acciones. Los recursos usados en la preparación del estado cuántico compuesto, operaciones locales y comunicación clásica, son clásicos y se abrevian LOCC. En la preparación del sistema compuesto, primero Alicia prepara su subsistema  $S^A$  en el estado  $\rho_i^A$ , después usa algún medio de comunicación clásica para informar a Bob, quien prepara su subsistema  $S^B$  en el estado  $\rho_i^B$ . Esta secuencia de acciones se realiza muchas veces de manera aleatoria manteniendo registro de las frecuencias  $\mathbb{P}_i$ . El estado compuesto  $\rho^{AB}$  que se prepara de esta manera es una mezcla de estados producto (Ecuación 76) y lleva a correlaciones en los resultados de la medición (Audretsch, 2007).

**Estados entrelazados** Por otro lado, un estado puro o mixto que no es separable se llama entrelazado y contiene correlaciones cuánticas. Es decir, contiene un tipo de correlaciones que no ocurren en sistemas clásicos. Los estados entrelazados no se pueden preparar usando LOCC, ésta es una definición alternativa de estados entrelazados. Un ejemplo que ilustra las correlaciones cuánticas es el siguiente estado entrelazado:

$$|\psi^{AB}\rangle = \alpha |0^A, 0^B\rangle + \beta |1^A, 1^B\rangle \quad (78)$$

donde se mide el observable  $\sigma_z$  en ambos subsistemas. Se obtienen los resultados correlacionados (-1,-1) o (+1,+1). Al comparar los estados entrelazados con los sistemas clásicamente correlacionados (Ecuación 77) se observa que las correlaciones vienen de una estructura diferente (Audretsch, 2007).

Los estados de Bell están máximamente entrelazados y son una base para el espacio de dos qubits (Audretsch, 2007):

$$|\Phi_{\pm}^{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0^A, 0^B\rangle \pm |1^A, 1^B\rangle) \quad (79)$$

$$|\Psi_{\pm}^{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0^A, 1^B\rangle \pm |1^A, 0^B\rangle) \quad (80)$$

Para los estados de Bell, los subsistemas están máximamente mezclados como consecuencia del entrelazamiento (Audretsch, 2007):

$$\rho^A = \text{tr}_B [\Phi_{\pm}^{AB}] = \frac{1}{2} I^A \quad (81)$$

$$\rho^B = \text{tr}_A [\Psi_{\pm}^{AB}] = \frac{1}{2} I^B \quad (82)$$

**Entropía de entrelazamiento** A continuación se presenta una medida del entrelazamiento para estados puros definidos en el espacio  $H_d \otimes H_d$ . Los estados puros de sistemas compuestos son estados producto (sin correlaciones) o estados entrelazados (con correlaciones cuánticas). Se define la entropía del estado compuesto como  $S(AB) = S(\rho^{AB})$  y la entropía de los subsistemas como  $S(A) = S(\rho^A)$  y  $S(B) = S(\rho^B)$ . De acuerdo a la sección 2.1.4, para estados puros se tiene la máxima información sobre el sistema compuesto (Audretsch, 2007):

$$S(AB) = 0 \quad (83)$$

En un estado producto, ya que los subsistemas se encuentran en estado puro, también se tiene la máxima información sobre ellos (Audretsch, 2007):

$$S(A) = S(B) = 0 \quad (84)$$

Por el contrario, la matriz densidad para los subsistemas de los estados de Bell es máximamente mezclada:

$$\rho^A = \rho^B = \frac{1}{2}I \quad (85)$$

así que la indeterminación sobre el estado de los subsistemas es máxima (Audretsch, 2007):

$$S(A) = S(B) = 1$$

La entropía de los subsistemas es una medida de la información faltante (indeterminación, ignorancia) cuando se compara con la del sistema compuesto. Cuando sólo se consideran los subsistemas se pierde información sobre el sistema compuesto, información contenida en las correlaciones entre los subsistemas. Mientras mayor sea la entropía de los subsistemas, el estado compuesto está más correlacionado y por lo tanto, más entrelazado. Esto justifica tomar, para un estado puro  $|\psi^{AB}\rangle$ , a la entropía de los subsistemas como una medida del entrelazamiento:

$$0 \leq E(|\psi^{AB}\rangle) = S(A) = S(B) \leq \log(d) \quad (86)$$

donde  $E$  se conoce como entropía de entrelazamiento,  $|\psi^{AB}\rangle$  es el estado del sistema compuesto y  $d$  es la dimensión del espacio de los subsistemas:  $H_d \otimes H_d$ . En el caso de un sistema compuesto por 2 qubits, un estado separable cumple con  $E = 0$  mientras que un estado máximamente entrelazado cumple con  $E = 1$  (Audretsch, 2007).

**Concurrencia** En esta parte se presenta a la concurrencia como una medida del entrelazamiento para estados mezclados de sistemas compuestos por dos qubits. Se considera el sistema compuesto  $S^{AB}$  cuyos subsistemas  $S^A$  y  $S^B$  son qubits. De acuerdo a la sección 2.5.2.1, para estados puros  $|\psi^{AB}\rangle$  una medida del entrelazamiento  $E(|\psi^{AB}\rangle)$  es:

$$E(|\psi^{AB}\rangle) = -tr[\rho_A \log \rho_A] = -tr[\rho_B \log \rho_B] \quad (87)$$

donde  $\rho_A$  y  $\rho_B$  son las matrices densidad reducidas de los subsistemas  $S^A$  y  $S^B$  (Audretsch, 2007).

El estado puro  $|\psi^{AB}\rangle$  se expande en términos de la base computacional:

$$|\psi^{AB}\rangle = a|0^A, 0^B\rangle + b|0^A, 1^B\rangle + c|1^A, 0^B\rangle + d|1^A, 1^B\rangle \quad (88)$$

y se sustituye en la Ecuación 87 para obtener:

$$E(|\psi^{AB}\rangle) = h\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C(|\psi^{AB}\rangle)^2}}{2}\right) \quad (89)$$

donde se han introducido la entropía binaria  $h$ :

$$h(x) = -[x \log_2 x + (1 - x) \log_2(1 - x)] \quad (90)$$

y la concurrencia  $C$  (Audretsch, 2007):

$$C(|\psi^{AB}\rangle) = 2|ad - bc|, \quad C \leq 1 \quad (91)$$

Ya que la entropía de entrelazamiento  $E$  es una función monótonamente creciente de la concurrencia  $C$ ,  $C$  también se puede tomar como una medida del entrelazamiento. Un estado separable cumple con  $E = C = 0$  mientras que un estado máximamente entrelazado cumple con  $E = C = 1$  (Audretsch, 2007).

La concurrencia también se puede escribir como:

$$C(|\psi^{AB}\rangle) = |\langle \psi^{AB} | \bar{\psi}^{AB} \rangle| \quad (92)$$

donde  $|\bar{\psi}^{AB}\rangle$  se obtiene con el estado de la Ecuación 88. Primero se define  $|\psi^{AB}\rangle^*$  que es igual al estado de la Ecuación 88 pero con los coeficientes conjugados ( $a \rightarrow a^*$ ,  $b \rightarrow b^*$ ,  $c \rightarrow c^*$ ,  $d \rightarrow d^*$ ). Luego se define  $|\bar{\psi}^{AB}\rangle$  de la siguiente manera (Audretsch, 2007):

$$|\bar{\psi}^{AB}\rangle = \sigma_y^A \otimes \sigma_y^B |\psi^{AB}\rangle^* \quad (93)$$

Usando la Ecuación 92 se escribe la concurrencia en términos de  $|\bar{\psi}^{AB}\rangle$ :

$$\begin{aligned}
C(|\psi^{AB}\rangle)^2 &= |\langle \psi^{AB} | \bar{\psi}^{AB} \rangle| \\
&= \langle \psi^{AB} | \bar{\psi}^{AB} \rangle \langle \bar{\psi}^{AB} | \psi^{AB} \rangle \\
&= \text{tr} [ |\psi^{AB}\rangle \langle \psi^{AB}| \bar{\psi}^{AB} \langle \bar{\psi}^{AB}| ] \\
&= \text{tr} [\rho^{AB} \bar{\rho}^{AB}] \\
&= \text{tr} [R^{AB}]
\end{aligned} \tag{94}$$

donde se han definido  $R^{AB} = \rho^{AB} \bar{\rho}^{AB}$  y  $\bar{\rho}^{AB} = |\bar{\psi}^{AB}\rangle \langle \bar{\psi}^{AB}|$ . Una manera alternativa de expresar a  $\bar{\rho}^{AB}$  es:

$$\bar{\rho}^{AB} = (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B) \rho^{*AB} (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B) \tag{95}$$

donde  $\rho^{*AB}$  se obtiene al escribir  $\rho^{AB}$  en la base computacional y conjugar sus elementos matriciales, igual que para  $|\psi^{AB*}\rangle$  (Audretsch, 2007).

Esta representación de la concurrencia como función de  $\rho^{AB}$  sugiere una generalización para mezclas que puede formalizarse de la siguiente manera:

$$C(\rho^{AB}) = \text{máx}\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\} \tag{96}$$

donde  $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\}$  son las raíces de los eigenvalores de la matriz  $R^{AB}$  en orden descendente y  $\rho^{AB}$  puede ser un estado puro o mezcla (Wootters, 1998).

### 2.5.2.2. Información mútua

En esta sección se presenta a la información mútua como una medida de las correlaciones totales en sistemas compuestos. Primero se definen la entropía conjunta y la entropía relativa y se presenta la desigualdad de Klein; después se desarrollan dos resultados parciales que sirven para calcular  $\text{tr}_{AB} [\rho^{AB} \log(\rho^A \otimes \rho^B)]$  y finalmente se establece el concepto de información mútua.

La entropía conjunta  $S(AB)$  de un estado compuesto  $\rho^{AB}$  (Audretsch, 2007):

$$S(AB) = S(\rho^{AB}) = -\text{tr}_{AB} (\rho^{AB} \log \rho^{AB}) \tag{97}$$

La entropía relativa  $S(\rho \parallel \sigma)$  para las matrices densidad  $\rho$  y  $\sigma$  (Audretsch, 2007):

$$S(\rho \parallel \sigma) = tr[\rho \log \rho] - tr[\rho \log \sigma] \quad (98)$$

La entropía relativa sirve para establecer la desigualdad de Klein (Audretsch, 2007):

$$S(\rho \parallel \sigma) \geq 0 \quad (99)$$

Para el primer resultado parcial se consideran las matrices densidad reducidas  $\rho^A$  y  $\rho^B$  asociadas a los subsistemas de un estado compuesto  $\rho^{AB}$ . La descomposición espectral de las matrices reducidas es (Audretsch, 2007):

$$\rho^A = \sum_i a_i |i^A\rangle \langle i^B| \quad (100)$$

$$\rho^B = \sum_j b_j |j^A\rangle \langle j^B| \quad (101)$$

Con las matrices densidad reducidas  $\rho^A$  y  $\rho^B$  se forma el estado producto  $\rho^A \otimes \rho^B$ . Se usan las Ecuaciones 100 y 101 para aplicar la función logaritmo al estado producto  $\rho^A \otimes \rho^B$  (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} \log(\rho^A \otimes \rho^B) &= \sum_{i,j} \log(a_i b_j) |i^A\rangle \langle i^B| \otimes |j^A\rangle \langle j^B| \\ &= (\log \rho^A) I^B + I^A (\log \rho^B) \end{aligned} \quad (102)$$

Se usan las Ecuaciones 65 y 102 para encontrar el segundo resultado parcial (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned} tr_{AB}[\rho^{AB} \log(\rho^A \otimes \rho^B)] &= tr_{AB}[\rho^{AB} (\log \rho^A) I^B] + tr_{AB}[\rho^{AB} I^A (\log \rho^B)] \\ &= tr_A[\rho^A \log \rho^A] + tr_B[\rho^B \log \rho^B] \end{aligned} \quad (103)$$

Al sustituir  $\rho \rightarrow \rho^{AB}$  y  $\sigma \rightarrow \rho^A \otimes \rho^B$  en la Desigualdad 99 y usar el resultado 103 se encuentra:

$$S(AB) \leq S(A) + S(B) \quad (104)$$

donde la igualdad se cumple sólo si los subsistemas son independientes uno del otro, es decir, son estados producto. La Desigualdad 104 se conoce como la subaditividad de la entropía en sistemas compuestos y establece que el sistema como un todo contiene más información que los subsistemas. La información adicional yace en las correlaciones entre los subsistemas (Audretsch, 2007). La Desigualdad 104 sirve como motivación para introducir la información mútua.

Se introduce la información mútua  $I(A : B) = S(\rho^{AB} \parallel \rho^A \otimes \rho^B)$  como una medida del grado de correlación entre los subsistemas:

$$I(A : B) = S(A) + S(B) - S(AB) \geq 0 \quad (105)$$

$I(A : B)$  indica cuanta más incertidumbre hay en los subsistemas juntos que en el sistema compuesto. Otra forma de establecerlo es que  $S(A : B)$  es una medida de cuánta más información hay en el sistema compuesto que en los subsistemas (Audretsch, 2007).

### 2.5.2.3. Discordia cuántica

El entrelazamiento no da cuenta de todas las correlaciones no clásicas porque las mezclas de estados producto usualmente contienen correlaciones cuánticas. La discordia cuántica es un cuantificador de correlaciones cuánticas más general que los basados en entrelazamiento. La discordia cuántica está basada en la idea de que al medir uno de los subsistemas se puede extraer la información clásica compartida (Modi *et al.*, 2012).

En la teoría de información clásica hay dos maneras de escribir la información mútua. Para dos variables aleatorias  $A, B$  con valores  $\{a\}, \{b\}$  y probabilidades  $\mathbb{P}_a, \mathbb{P}_b$  la información mútua se puede expresar con la ecuación simétrica 105. Para variables aleatorias clásicas, el cambio que se realiza para que tenga sentido la ecuación 105 es que se calcula la entropía Shannon en vez de la entropía de von Neuman. La otra forma de expresar la información mútua es usando la ecuación no simétrica:

$$J(B|A) = S(B) - S(B|A) \quad (106)$$

donde  $J(B|A)$  es la información mútua,  $S(B)$  es la entropía Shanon de la variable aleatoria  $B$  y  $S(B|A)$  es la entropía condicional. La entropía condicional  $S(B|A)$  describe la incertidumbre promedio remanente de  $B$  cuando el observador ya conoce el valor de  $A$  (Audretsch, 2007):

$$S(A|B) = \sum_{\alpha} \mathbb{P}_{\alpha} S(B|_{\alpha}) \quad (107)$$

La ecuación 106 establece que las correlaciones clásicas se pueden interpretar como la ganancia en información sobre un subsistema como resultado de medir el otro (Audretsch, 2007).

Usando como motivación la idea de que las correlaciones clásicas se pueden extraer a través de mediciones, una forma directa de cuantificar las correlaciones clásicas en un estado cuántico  $\rho^{AB}$  es usar una expresión análoga a 106:

$$J(B|A) = S(B) - \min_{\{E_{\alpha}\}} S(B|\{E_{\alpha}\}) \quad (108)$$

donde  $J(B|A)$  cuantifica las correlaciones clásicas,  $S(B)$  es la incertidumbre en el subsistema  $S^B$  y  $S(B|\{E_{\alpha}\})$  es la entropía condicional cuántica que se define en forma análoga a 107:

$$S(B|\{E_{\alpha}\}) = \sum_{\alpha} \mathbb{P}_{\alpha} S(\rho_{\alpha}^B) \quad (109)$$

$\rho_{\alpha}^B = \text{tr}_A [E_{\alpha} \rho^{AB}] / \mathbb{P}_{\alpha}$  es el estado del subsistema  $S^B$  después de medir el subsistema  $S^A$  usando los elementos POVM  $\{E_{\alpha}\}$  y obtener el resultado  $\alpha$  con probabilidad  $\mathbb{P}_{\alpha}$ . Hay muchas formas de realizar una medición cuántica, en 108 se escoge el mínimo porque con la medición se desea extraer la mayor cantidad de información posible (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017; Modi *et al.*, 2012).

La discordia cuántica  $D(B|A)$  mide las correlaciones no clásicas en un sistema compuesto al restar las correlaciones clásicas 108 de las correlaciones totales 105 (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017; Modi *et al.*, 2012)

$$D(B|A) = I(A : B) - J(B|A) \quad (110)$$

### 2.5.2.4. Incertidumbre local cuántica

Excepto por algunos casos sencillos la discordia cuántica es difícil de calcular, sin embargo una aparente desventaja inherente a la mecánica cuántica (incertidumbre) provee un método más sencillo para calcular la discordia cuántica.

Hay una relación estrecha entre la incertidumbre inducida cuánticamente y las correlaciones cuánticas que se puede aprovechar para establecer un cuantificador tipo discordia de las correlaciones cuánticas. En sistemas cuánticos la incertidumbre en la medición puede tener contribuciones clásicas y cuánticas. Si el estado a ser medido es incoherente en la eigenbase del observable la estadística resultante de la medición será clásica: la medición de un estado puro es completamente determinística y exhibirá variancia nula pero para estados mixtos la contribución a la variancia viene de incertidumbre clásica debida al mezclado en el estado. En estados que exhiben coherencia, la incertidumbre en la medición tiene dos contribuciones, además de la aleatoriedad clásica que viene del mezclado, hay una aleatoriedad cuántica que es intrínseca a la coherencia. Esta aleatoriedad cuántica se manifiesta en el patrón de interferencia de la estadística resultante de la medición y es una componente cuántica adicional a la incertidumbre (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017; Girolami *et al.*, 2013).

La contribución cuántica a la incertidumbre se debe a la no conmutabilidad entre el estado  $\rho$  y el observable  $K$ . Una medida confiable de la incertidumbre cuántica es cero si y sólo  $\rho$  y  $K$  conmutan ( $\rho$  es un eigenestado de  $K$  o una mezcla de eigenestados de  $K$ ), no aumenta bajo mezclado clásico y es igual a la varianza para estados puros. La Wigner-Yanase skew information  $\mathcal{I}(\rho, K)$  definida por:

$$\mathcal{I}(\rho, K) = -\frac{1}{2} \text{tr} \{ [\rho^{1/2}, K]^2 \} \quad (111)$$

cumple con las condiciones previas así que se usará como una medida conveniente la incertidumbre cuántica (Luo, 2004).

Hemos identificado la parte cuántica de la incertidumbre en la medición y la hemos cuantificado con una medida de la no conmutabilidad entre el estado  $\rho$  y el observable  $K$ . Ahora se procederá a establecer la relación entre incertidumbre cuántica y correlaciones cuánticas. En un sistema bipartito sólo estados con discordia cero:

$$\rho_{AB} = \sum_i p_i |i_A\rangle \langle i_A| \otimes \rho_B \quad (112)$$

pueden conmutar con observables locales  $K_A \otimes \mathbb{I}_B$  (los vectores  $\{|i_A\rangle\}$  forman una base ortonormal donde  $K_A$  es diagonal). Si el sistema bipartito comparte correlaciones no clásicas su estado cuántico no conmuta con ninguna observable local  $K_A \otimes \mathbb{I}_B$  y las mediciones con observables individuales en  $A$  exhibirán una inherente incertidumbre cuántica (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017; Girolami *et al.*, 2013).

La mínima skew information asociada a una medición local en el subsistema  $A$  se llama incertidumbre local cuántica (LQU por sus siglas en inglés) y se denotará por  $U_A(\rho_{AB})$ :

$$U_A(\rho_{AB}) = \min_{K_A} \mathcal{I}(\rho_{AB}, K_A \otimes \mathbb{I}_B) \quad (113)$$

donde la minimización es sobre el conjunto de observables locales de espectro no degenerado. Se puede demostrar que la LQU cumple los requerimientos para ser un cuantificador tipo discordia de las correlaciones no clásicas en estados bipartitos. Hay una interpretación de la LQU que sugiere una relación con la discordia simétrica: la LQU es la mínima distancia Hellinger entre el estado  $\rho_{AB}$  antes y después de que se ha aplicado un operador unitario raíz de unidad (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017; Girolami *et al.*, 2013).

Para minimizar la skew information, el observable local  $K_A$  se puede parametrizar usando las matrices de Pauli y el operador identidad:

$$K_A = \alpha n \cdot \sigma_A + \beta \mathbb{I}_A \quad (114)$$

donde  $\alpha, \beta$  son escalares complejos,  $n$  es un vector unitario y  $\sigma_A = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  son las matrices de Pauli. De esta manera, la skew information es (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017; Girolami *et al.*, 2013):

$$\mathcal{I}(\rho_{AB}, K_A \otimes \mathbb{I}_B) = \alpha^2 \mathcal{I}(\rho_{AB}, \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A \otimes \mathbb{I}_B) \quad (115)$$

La ventaja de este enfoque yace en la existencia de una forma cerrada para calcular la LQU para estados bipartitos donde  $A$  es un qubit y  $B$  es un qudit de dimensión  $d$  ( $\rho_{AB}$  es un estado

definido en un espacio de Hilbert  $C^2 \otimes C^d$ ):

$$\begin{aligned}
 U_A(\rho_{AB}) &= \min_{\vec{n}} \mathcal{I}(\rho_{AB}, \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A \otimes \mathbb{1}_B) \\
 &= 1 - \max_{\vec{n}} \text{tr} \left\{ \rho_{AB}^{1/2} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A \otimes \mathbb{1}_B) \rho_{AB}^{1/2} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A \otimes \mathbb{1}_B) \right\} \\
 &= 1 - \max_{\vec{n}} \sum_{ij} (W_{AB})_{ij} n_i n_j
 \end{aligned} \tag{116}$$

donde los elementos matriciales de  $(W_{AB})_{ij}$  son (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017; Girolami *et al.*, 2013):

$$(W_{AB})_{ij} = \text{tr} \left\{ \rho_{AB}^{1/2} (\sigma_{iA} \otimes \mathbb{1}_B) \rho_{AB}^{1/2} (\sigma_{jA} \otimes \mathbb{1}_B) \right\} \tag{117}$$

La Ecuación 116 involucra la maximización de una forma cuadrática que resulta en:

$$U_A(\rho_{AB}) = 1 - \lambda_{\max} \{W_{AB}\} \tag{118}$$

donde  $\lambda_{\max} \{W_{AB}\}$  es el máximo eigenvalor de la matriz  $(W_{AB})_{ij}$  (Fernandes Fanchini *et al.*, 2017; Girolami *et al.*, 2013).

La forma cerrada (Ecuaciones 117 y 118) para calcular la LQU entre dos subsistemas donde uno es un qubit y el otro es un qudit es adecuada para caracterizar correlaciones cuánticas en redes de qubits.

## 2.6. Dinámica de sistemas cuánticos abiertos

Un sistema cuántico abierto es un sistema cuántico  $S^A$  que está acoplado a otro sistema cuántico llamado ambiente  $S^B$ . El sistema cuántico abierto  $S^A$  es un subsistema del sistema compuesto  $S^{AB}$ , el cual se asume que es cerrado y sigue una dinámica Hamiltoniana. El estado del sistema cuántico abierto evoluciona como consecuencia de su dinámica interna propia y por la interacción con sus alrededores (ambiente). Como resultado de las interacciones con el ambiente, la evolución del estado de  $S^A$  ya no es descrita en términos de una dinámica Hamiltoniana unitaria (Ecuación 33). La motivación para estudiar sistemas cuánticos abiertos es que en muchas situaciones físicas un modelo matemático de la dinámica del sistema compuesto  $S^{AB}$  es demasiado complicada. Incluso si se conoce una solución, las variables físicas relevantes son un promedio de muchos gra-

dos de libertad irrelevantes. Además, en muchas situaciones, los grados de libertad del ambiente no se conocen o no se controlan. Por lo tanto, se desarrolla una descripción más simple para el sistema reducido  $S^A$ , el cual se forma con el conjunto restringido de variables físicas relevantes (Petruccione y Breuer, 2002).

### 2.6.1. Operaciones cuánticas

Las operaciones cuánticas son un enfoque útil para desarrollar una formulación dinámica de los sistemas cuánticos abiertos.

La evolución general de un sistema cuántico transforma el estado inicial  $\rho$  de la siguiente forma:

$$\rho \longrightarrow \rho' = \mathcal{E}(\rho) \quad (119)$$

donde  $\mathcal{E}$  es una operación cuántica. Una operación cuántica es un mapeo que se describe por un superoperador  $\mathcal{E}$  que cumple (Audretsch, 2007):

- $\mathcal{E}$  es un superoperador positivo. Un superoperador positivo mapea operadores positivos a operadores positivos.
- $\mathcal{E}$  no aumenta la traza:

$$\text{tr}[\rho] = 1 \Rightarrow \text{tr}[\mathcal{E}(\rho)] \leq 1 \quad (120)$$

- $\mathcal{E}$  es un mapeo completamente positivo. Un mapeo completamente positivo  $\mathcal{E}$  cumple: si un sistema arbitrario adicional  $S^B$  se añade al sistema bajo consideración  $S^A$  y el superoperador  $\mathcal{E}^A$  de evolución para  $S^A$  se extiende a la forma  $\mathcal{E}^A \otimes I^B$  para generar un operador de evolución que actúe sobre el sistema compuesto  $S^{AB}$ , entonces  $\mathcal{E}^A \otimes I^B$  es también un superoperador positivo en  $H^A \otimes H^B$ .

### 2.6.2. Teorema de Kraus

Un mapeo  $\rho \longrightarrow \rho' = \mathcal{E}(\rho)$  es una operación cuántica si y sólo si tiene una descomposición:

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_i K_i \rho K_i^\dagger \quad (121)$$

donde  $\{K_i\}$  son operadores lineal que cumplen:

$$\sum_i K_i K_i^\dagger \leq 1 \quad (122)$$

y mapean el espacio de Hilbert entrante al espacio de Hilbert saliente. Las dimensiones pueden ser diferentes. Sólo cuando se cumple:

$$\sum_i K_i K_i^\dagger = 1 \quad (123)$$

la operación cuántica  $\mathcal{E}(\rho)$  conserva la traza y se conoce como una operación cuántica completa. La descomposición de la Ecuación 121 no es única y los operadores  $\{K_i\}$  se conocen como operadores de Kraus (Audretsch, 2007).

### 2.6.3. La ecuación maestra de Lindblad

El superoperador  $\mathcal{E}$  mapea el estado inicial al estado final de la evolución dinámica (Ecuación 119), pero para evaluaciones prácticas es más conveniente expresar el cambio en el estado reducido a través de una ecuación diferencial. Las ecuaciones diferenciales para la evolución dinámica de sistemas cuánticos abiertos se conocen como ecuaciones maestras (Audretsch, 2007).

La aproximación Markoviana se limita situaciones físicas particulares donde el estado  $\rho(t + dt)$  sólo depende del estado anterior  $\rho(t)$  y de un término lineal a  $dt$  (Audretsch, 2007):

$$\rho(t + dt) = \rho(t) + O(dt) \quad (124)$$

En la aproximación Markoviana la evolución del sistema  $S^A$  sólo depende del estado  $\rho(t)$  al

tiempo  $t$  y no de estados anteriores  $\rho(t' < t)$ . En este sentido se dice que el sistema ha olvidado su historia o que no tiene memoria. La justificación de la aproximación Markoviana para un caso particular sólo se decide a partir de la descripción microscópica del sistema compuesto  $S^{AB}$  y de la interacción entre  $S^A$  y  $S^B$  (Audretsch, 2007).

La operación cuántica asociada a  $\rho(t + dt)$  tiene una descomposición de Kraus:

$$\rho(t + dt) = \mathcal{E}(\rho(t)) = \sum_i K_i(dt) \rho(t) K_i^\dagger(dt) \quad (125)$$

donde los operadores de Kraus  $K_i$  y la operación cuántica  $\mathcal{E}$  también pueden depender del tiempo  $t$  (Audretsch, 2007).

Al considerar la aproximación de Markov 124, alguno de los operadores de Kraus, por ejemplo  $K_1$ , puede ser de la forma  $K_1 = I + O(dt)$ . El operador lineal  $O(dt)$  se puede expandir en términos de los operadores Hermitianos  $R$  y  $H$  (Audretsch, 2007):

$$K_1 = I + \left( R - \frac{1}{\hbar} H \right) dt \quad (126)$$

Para esta elección, el resto de los operadores de Kraus  $\{K_i, i > 1\}$  deben ser proporcionales a  $\sqrt{dt}$ :

$$K_i = L_i \sqrt{dt} \quad (127)$$

donde los operadores  $\{L_i\}$  se llaman operadores de Lindblad y en general no son Hermitianos ni unitarios (Audretsch, 2007).

La Ecuación 123 lleva a:

$$I = I + \left( 2R + \sum_{i>1} L_i^\dagger L_i \right) dt + O(dt^2) \quad (128)$$

y al resolver para  $R$  (Audretsch, 2007):

$$R = -\frac{1}{2} \sum_{i>1} L_i^\dagger L_i + O(dt) \quad (129)$$

Al sustituir el resultado anterior en la Ecuación 125 se obtiene (Audretsch, 2007):

$$\begin{aligned}
\rho(t + dt) &= \left\{ I + \left( R - \frac{i}{\hbar} H \right) dt \right\} \rho(t) \left\{ I + \left( R + \frac{i}{\hbar} H \right) dt \right\} + \sum_{i>1} L_i \rho(t) L_i^\dagger dt \\
&= \rho(t) + dt \left\{ [\rho(t), R]_+ - \frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]_- + \sum_{i>1} L_i \rho(t) L_i^\dagger \right\} + O(dt^2) \\
&= \rho(t) + dt \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \rho(t), \sum_{i>1} L_i^\dagger L_i \right]_+ - \frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]_- + \sum_{i>1} L_i \rho(t) L_i^\dagger \right\} + O(dt^2)
\end{aligned} \tag{130}$$

La ecuación maestra de Lindblad se obtiene al tomar el límite cuando  $dt \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]_- + \sum_{i>1} \left( L_i \rho(t) L_i^\dagger - \frac{1}{2} [\rho(t), L_i^\dagger L_i]_+ \right) \\
&= \mathcal{L}(\rho(t))
\end{aligned} \tag{131}$$

donde se ha definido el superoperador  $\mathcal{L}$  que actúa sobre  $\rho(t)$  y se llama Lindbladiano (Audretsch, 2007).

Si los operadores de Lindblad se escogen sin dimensión:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]_- + \sum_{i>1} \kappa_i \left( L_i \rho(t) L_i^\dagger - \frac{1}{2} [\rho(t), L_i^\dagger L_i]_+ \right) \tag{132}$$

entonces los coeficientes  $\kappa_i$  representan tasas de decoherencia ya que tienen unidades de tiempo inverso (Schlossauer, 2007).

La ecuación maestra de Lindblad proporciona un esquema simple e intuitivo de representar el monitoreo ambiental de un sistema cuántico abierto. El superoperador  $\mathcal{L}$  se puede expresar como la suma de dos términos (Schlossauer, 2007):

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]_- + \sum_{i>1} \kappa_i \left( L_i \rho(t) L_i^\dagger - \frac{1}{2} [\rho(t), L_i^\dagger L_i]_+ \right) \\
&= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]_- + D(\rho(t))
\end{aligned} \tag{133}$$

Una parte unitaria está dada por el conmutador con el Hamiltoniano  $H$  perturbado por la pre-

sencia del ambiente. La parte no unitaria:

$$D(\rho(t)) = \sum_{i>1} \kappa_i \left( L_i \rho(t) L_i^\dagger - \frac{1}{2} [\rho(t), L_i^\dagger L_i]_+ \right) \quad (134)$$

se conoce como disipador, y representa decoherencia y disipación debidas al ambiente.

## Capítulo 3. Resultados

---

### 3.1. LQU como una métrica robusta

#### 3.1.1. Modelo para la red de cromóforos del complejo FMO

La proteína FMO es un trímero constituido de tres monómeros idénticos que funcionan de forma independiente. Por esta razón, se estudia la transferencia de excitación electrónica en sólo uno de los monómeros. Cada monómero tiene una red de siete cromóforos embebida en su estructura. En la red, las funciones de onda de los cromóforos están suficientemente alejadas entre ellas como para superponerse.

El estado electrónico del cromóforo  $m$  pasa de su estado base  $|m_g\rangle$  al primer estado electrónico excitado  $|m_e\rangle$  cuando absorbe un fotón del complejo colector de luz. La transferencia de la excitación electrónica a través de la red de cromóforos toma lugar una excitación a la vez así que se usa la base de sitio  $\{|m\rangle\}$  con  $m = 1, \dots, 7$ :

$$|m\rangle = |m_e\rangle \prod_{n \neq m} |n_g\rangle \quad (135)$$

donde el vector base  $|m\rangle$  representa al sitio  $m$  en el estado excitado mientras el resto de los sitios están en el estado base. El estado molecular representado por  $|m\rangle$  se llama excitón de sitio. De esta forma, el Hamiltoniano excitónico  $H$  se expresa como:

$$H = \sum_{m=1}^7 E_m |m\rangle \langle m| + \sum_{m \neq n} V_{mn} |m\rangle \langle n| \quad (136)$$

donde las energías de sitio  $E_m$  son las energías de transición ópticas para cada sitio y los términos de interacción  $V_{nm}$  de transferencia de energía corresponden a interacciones dipolo-dipolo entre pares de excitones de sitio.

(Adolphs y Renger, 2006) calcularon las energías de excitación individuales corriendo un algoritmo genético que toma las energías de sitio como parámetros que se optimizan para ajustarse al espectro de absorción lineal y al de dicroísmo circular y lineal; los términos de interacción se

calcularon usando información estructural del cristal de la proteína FMO. (Hayes y Engel, 2011) emplearon espectroscopía electrónica tridimensional de tercer orden para obtener los eigenestados electrónicos experimentales para el complejo y usaron esta información para calcular el Hamiltoniano del complejo FMO. En la base de sitio, los valores del Hamiltoniano excitónico calculado por (Adolphs y Renger, 2006) son:

$$H = \begin{pmatrix} 200 & -87.7 & 5.5 & -5.9 & 6.7 & -13.7 & -9.9 \\ -87.7 & 320 & 30.8 & 8.2 & 0.7 & 11.8 & 4.3 \\ 5.5 & 30.8 & 0 & -53.5 & -2.2 & -9.6 & 6.0 \\ -5.9 & 8.2 & -53.5 & 110 & -70.7 & -17.0 & -63.3 \\ 6.7 & 0.7 & -2.2 & -70.7 & 270 & 81.1 & -1.3 \\ -13.7 & 11.8 & -9.6 & -17.0 & -81.1 & 420 & 39.7 \\ -9.9 & 4.3 & 6.0 & -63.3 & -1.3 & 39.7 & 230 \end{pmatrix} \quad (137)$$

donde los valores están en  $\text{cm}^{-1}$  y las energías de sitio se corren  $12210 \text{ cm}^{-1}$  para establecer la menor energía de sitio en cero por conveniencia.

Los eigenestados excitónicos deslocalizados  $\{|M\rangle\}$  y los eigenvalores de energía  $\{\epsilon_M\}$  se encuentran resolviendo la ecuación de eigenvalores del Hamiltoniano:

$$H|M\rangle = \epsilon_M|M\rangle \quad (138)$$

con  $M = 1, \dots, 7$ . Los eigenestados  $\{|M\rangle\}$  son una superposición cuántica de los excitones de sitio:

$$|M\rangle = \sum_m c_m^M |m\rangle \quad (139)$$

donde  $c_m^M$  es la amplitud de probabilidad asociada al eigenestado  $|M\rangle$  para que el sitio  $m$  esté en estado excitado. Cada eigenestado  $\{|M\rangle\}$  tiene asociada una matriz densidad  $\{\rho_M\}$  cuya representación en la base de sitio es:

$$\rho_M = |M\rangle\langle M| = \sum_{mn} \lambda_{mn}^M |m\rangle\langle n| \quad (140)$$

donde los elementos de la matriz densidad de los eigenestados son:

$$\lambda_{mn}^M = c_m^M \tilde{c}_n^M \quad (141)$$

y el superíndice  $M$  indica el eigenestado al que pertenecen.

Si el sistema está en equilibrio térmico el estado mixto se puede escribir como:

$$\rho_t = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H) = \frac{1}{Z} \sum_M \exp(-\beta \epsilon_M) |M\rangle \langle M| = \sum_{mn} \lambda_{mn}^t |m\rangle \langle n| \quad (142)$$

donde  $Z = \text{tr}\{\exp(-\beta H)\}$  es la función de partición,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  es el factor de energía térmica y:

$$\lambda_{mn}^t = \frac{1}{Z} \sum_M \exp(-\beta \epsilon_M) \lambda_{mn}^M \quad (143)$$

son los elementos de la matriz densidad cuando el estado se expresa en términos de la base de sitio.

Se han introducido los eigenestados y el estado en equilibrio térmico (definidos por el Hamiltoniano FMO) porque servirán como la información de entrada para ilustrar el potencial del enfoque basado en LQU. El objetivo es demostrar que el método LQU es robusto y permite: la caracterización de correlaciones en un enfoque que no había sido estudiado antes, la identificación de las correlaciones no clásicas más fuertes en redes de qubits y la posible implementación en sistemas dinámicos. Para esto, se calcula la LQU entre subsistemas (definidos por tres familias de particiones) de estados puros y mixtos. Siendo los eigenestados  $\{|M\rangle\}$  los estados cuánticos característicos de los siete cromóforos ellos servirán como los estados puros; por otro lado, los estados mixtos serán ejemplificados por el estado en equilibrio térmico así como por los estados cuánticos reducidos de dos y tres cromóforos.

### 3.1.2. Descripción del enfoque LQU

Para demostrar las características convenientes del enfoque LQU se seguirá este método: (1) definir familias de particiones en el sistema, (2) determinar los estados cuánticos y (3) calcular la LQU entre subsistemas. Se escogen tres formas de dividir la red de siete cromóforos; cada partición define una familia de correlaciones cuánticas.

La primera familia  $f_1$  corresponde a la LQU entre un cromóforo  $\{C_r\} = \mathbf{Subsistema A}_1$  y los 6 cromóforos remanentes  $\{C_s, C_t, C_u, \dots\} = \mathbf{Subsistema B}_1$  (con  $s, t, u, \dots \neq r$ ). Las correlaciones de la familia  $f_1$  exponen una perspectiva global de la partición individual de los cromóforos.

La segunda familia  $f_2$  da cuenta de la LQU entre el cromóforo  $\{C_r\} = \mathbf{Subsistema A}_2$  y el cromóforo  $\{C_s\} = \mathbf{Subsistema B}_2$  (con  $r \neq s$ ). La familia  $f_2$  servirá a dos propósitos: proveer información acerca de las asociaciones específicas de cromóforos que sostienen las correlaciones cuánticas de la familia  $f_1$  y realizar una comparación con un cuantificador de entrelazamiento de dos qubits.

La tercera familia  $f_3$  está formada por las correlaciones cuánticas de un cromóforo  $\{C_r\} = \mathbf{Subsistema A}_3$  con pares de cromóforos  $\{C_s, C_t\} = \mathbf{Subsistema B}_3$  (con  $s, t \neq r$ ). La familia  $f_3$  identificará los subsistemas con las asociaciones más fuertes de cromóforos.

Las correlaciones cuánticas definidas por la familia  $f_1$  se calculan en los estados puros dados por la Ecuación 140 y en el estado mixto determinado por la Ecuación 142. Las familias  $f_2$  y  $f_3$  de correlaciones cuánticas se calculan en subsistemas definidos por todas las combinaciones de dos y tres cromóforos. Incluso si el estado de los siete cromóforos es puro (como cualquier eigenestado  $\{|M\rangle\}$  de la Ecuación 140) los estados de sus subsistemas pueden ser mezclas. Estos estados de los subsistemas no son mezclas estadísticas, se conocen como mezclas impropias porque con respecto a su preparación no ha ocurrido ningún mezclado.

Después de haber definido las familias de correlaciones cuánticas el siguiente paso es determinar los estados cuánticos. Cuando el sistema se describe por un eigenestado  $|M\rangle$  las familias de correlaciones cuánticas  $\{f_l\}$  se calculan usando las matrices densidad  $\{\rho_M^{f_1}, \rho_M^{f_2}, \rho_M^{f_3}\}$  y si el estado está en equilibrio térmico las matrices densidad correspondientes a las tres familias de correlaciones cuánticas son  $\{\rho_t^{f_1}, \rho_t^{f_2}, \rho_t^{f_3}\}$ . Su descomposición espectral es:

$$\rho_g^{f_l} = \sum_p \varphi_{g,p}^{f_l} |\varphi_{g,p}^{f_l}\rangle \langle \varphi_{g,p}^{f_l}| \quad (144)$$

donde el índice  $g$  especifica si la familia de correlaciones cuánticas se calcula en un eigenestado ( $g = M$ ) o en equilibrio térmico ( $g = t$ ).

Ahora que se han definido las familias de correlaciones cuánticas y se han determinado los estados cuánticos se procede a calcular la LQU entre subsistemas. Para esto, se necesita obtener las matrices  $(W_{AB})_{ij}^{g,f_l}$ , esto se logra al insertar la Ecuación 144 en la Ecuación 117:

$$(W_{AB})_{ij}^{g,f_l} = \sum_{pq} \sqrt{\varphi_{g,p}^{f_l}} \sqrt{\varphi_{g,q}^{f_l}} \langle \varphi_{g,p}^{f_l} | \sigma_{iA_l} \otimes \mathbb{1}_{B_l} | \varphi_{g,q}^{f_l} \rangle \langle \varphi_{g,q}^{f_l} | \sigma_{jA_l} \otimes \mathbb{1}_{B_l} | \varphi_{g,p}^{f_l} \rangle \quad (145)$$

La Ecuación 145 es la fórmula general que se usará para calcular todas las familias de correlaciones cuánticas en los eigenestados y en el estado de equilibrio térmico.

Se comienza con la familia  $f_1$ ; sus correlaciones cuánticas involucran la red completa así que las matrices densidad  $\rho_M^{f_1}$  y  $\rho_t^{f_1}$  corresponden a  $\rho_M$  y a  $\rho_t$  de las Ecuaciones 140 y 142. De acuerdo a estas ecuaciones,  $\rho_M^{f_1}$  y  $\rho_t^{f_1}$  son diagonales en la base de excitón deslocalizado así que se pueden escribir de forma explícita las correspondientes matrices  $(W_{AB})_{ij}^{g,f_1}$  de la Ecuación 145 en la base de sitio.

Con respecto a los eigenestados representados por  $\rho_M^{f_1}$ , sólo hay un elemento en su descomposición espectral  $\varphi_M^{f_1} = 1$ ,  $|\varphi_M^{f_1}\rangle = |M\rangle$  así que la fórmula de la ecuación 145 se expresa como:

$$(W_{AB})_{ij}^{M,f_1} = \sum_{mnm'n'} \lambda_{mn}^M \lambda_{m'n'}^M \langle n | \sigma_{iA_1} \otimes \mathbb{1}_{B_1} | m' \rangle \langle n' | \sigma_{jA_1} \otimes \mathbb{1}_{B_1} | m \rangle \quad (146)$$

donde los eigenestados están expresados en términos de la base de sitio y los factores  $\lambda_{mn}^M$  son los elementos del operador densidad en la ecuación 141.

Los elementos de la descomposición espectral para el estado en equilibrio térmico son:  $\varphi_{t,M}^{f_1} = \frac{1}{Z} \exp(-\beta \epsilon_M)$  y  $|\varphi_{t,M}^{f_1}\rangle = |M\rangle$  así que la fórmula de la Ecuación 145 toma la forma:

$$(W_{AB})_{ij}^{t,f_1} = \frac{1}{Z} \sum_{MNmm'n'} \exp\left(\frac{-\beta(\epsilon_M + \epsilon_N)}{2}\right) \lambda_{m'm}^M \lambda_{nn'}^N \times \langle m | \sigma_{iA_1} \otimes \mathbb{1}_{B_1} | n \rangle \langle n' | \sigma_{jA_1} \otimes \mathbb{1}_{B_1} | m' \rangle \quad (147)$$

donde el estado ha sido expresado en términos de la base de sitio de acuerdo a la Ecuación 142 y los elementos  $\lambda_{mn}^t$  de la matriz densidad están dados por la Ecuación 143.

Ahora que se ha estudiado la familia  $f_1$ , se determinarán las correlaciones cuánticas definidas por las familias  $f_2$  y  $f_3$  en subsistemas de dos y tres cromóforos, respectivamente. Para los eigenestados, se calculan las trazas parciales al estado del sistema completo  $\rho_M$  sobre 5 y 4 subsistemas para obtener los estados cuánticos de dos  $tr_{5s}(\rho_M) = \rho_M^{f_2}$  y tres cromóforos  $tr_{4s}(\rho_M) = \rho_M^{f_3}$ , res-

pectivamente. Los estados cuánticos  $\rho_M^{f_2}$  y  $\rho_M^{f_3}$  son mezclas impropias porque vienen de estados puros. Para el estado en equilibrio térmico  $\rho_t$ , se sigue un procedimiento similar para obtener los estados cuánticos de dos  $tr_{5s}(\rho_t) = \rho_t^{f_2}$  y tres cromóforos  $tr_{4s}(\rho_t) = \rho_t^{f_3}$ .

Se calculan las correlaciones cuánticas de la familia  $f_2$  usando la expresión explícita para el estado de dos cromóforos  $\{C_r, C_s\}$ :

$$\rho_g^{f_2} = \begin{pmatrix} \sum_{m \neq r,s} \lambda_{mm}^g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{rr}^g & \lambda_{rs}^g & 0 \\ 0 & \lambda_{sr}^g & \lambda_{ss}^g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (148)$$

donde los elementos  $\lambda_{mn}^g$  están definidos en las Ecuaciones 141 y 143. Con la matriz de la Ecuación 148 se puede expresar la coherencia para el estado de dos cromóforos  $\{C_r, C_s\}$ :

$$C_{l_1}(\rho_g^{f_2}) = 2|\lambda_{rs}^g| \quad (149)$$

Se calcularon las correlaciones cuánticas de la familia  $f_3$  usando la expresión explícita para el estado de tres cromóforos  $\{C_r, C_s, C_t\}$ :

$$\rho_g^{f_3} = \begin{pmatrix} \sum_{m \neq r,s,t} \lambda_{mm}^g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{tt}^g & \lambda_{ts}^g & 0 & \lambda_{tr}^g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{st}^g & \lambda_{ss}^g & 0 & \lambda_{sr}^g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{rt}^g & \lambda_{rs}^g & 0 & \lambda_{rr}^g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (150)$$

donde los elementos  $\lambda_{mn}^g$  están definidos en las Ecuaciones 141 y 143. Con la matriz en la ecuación 150 se puede expresar la coherencia para el estado de tres cromóforos  $\{C_r, C_s, C_t\}$ :

$$C_{l_1}(\rho_g^{f_3}) = 2 \left( |\lambda_{ts}^g| + |\lambda_{tr}^g| + |\lambda_{sr}^g| \right) \quad (151)$$

Las matrices densidad  $\rho_g^{f_2}$  y  $\rho_g^{f_3}$  no son diagonales en la base de excitón deslocalizado así que no se pueden escribir explícitamente  $(W_{AB})_{ij}^{g,f_2}$  ni  $(W_{AB})_{ij}^{g,f_3}$  como se hizo con  $\rho_g^{f_1}$ .

Para validar el enfoque LQU de medir correlaciones cuánticas se le comparó con un cuantificador del entrelazamiento: concurrencia para un estado de dos qubits. La comparación se realizó en todas las combinaciones de dos cromóforos. Hay una forma directa de calcular la concurrencia en matrices densidad  $\hat{X}$  de dos qubits (Rafsanjani y Agarwal, 2012). Esto es útil porque el estado cuántico de dos cromóforos es una matriz  $\hat{X}$ , como puede ser visto en la Ecuación 148. Una matriz  $\hat{X}$  tiene la siguiente forma:

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} Q_{11} & 0 & 0 & Q_{14} \\ 0 & Q_{22} & Q_{23} & 0 \\ 0 & Q_{32} & Q_{33} & 0 \\ Q_{41} & 0 & 0 & Q_{44} \end{pmatrix} \quad (152)$$

Y la concurrencia  $C(\hat{X})$  es:

$$C(\hat{X}) = 2 \max \left\{ 0, |Q_{14}| - \sqrt{Q_{22}Q_{33}}, |Q_{23}| - \sqrt{Q_{11}Q_{44}} \right\} \quad (153)$$

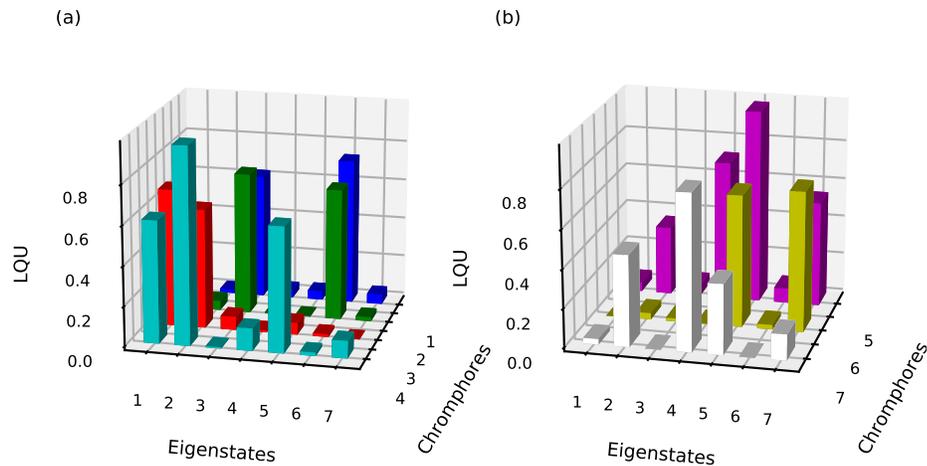
En el caso específico de dos excitones de sitio, los elementos  $\{Q_{14}, Q_{41}, Q_{44}\}$  son cero, por lo tanto para cualquier par de cromóforos  $\{C_r, C_s\}$  con estado cuántico  $\rho_g^{f_2}$  la concurrencia simplemente es:

$$C(\rho_g^{f_2}) = 2|\lambda_{rs}^g| \quad (154)$$

la cual es igual a la coherencia, como se puede ver en la ecuación 149.

### 3.1.3. Implementación del método LQU en el complejo FMO

Se calculó LQU, concurrencia y coherencia en estados puros y mixtos de la proteína FMO. Los estados puros están constituidos por los eigenestados  $\{|M\rangle\}$  del Hamiltoniano FMO; con respecto a los estados mixtos, las mezclas impropias vienen de subsistemas de los eigenestados y las



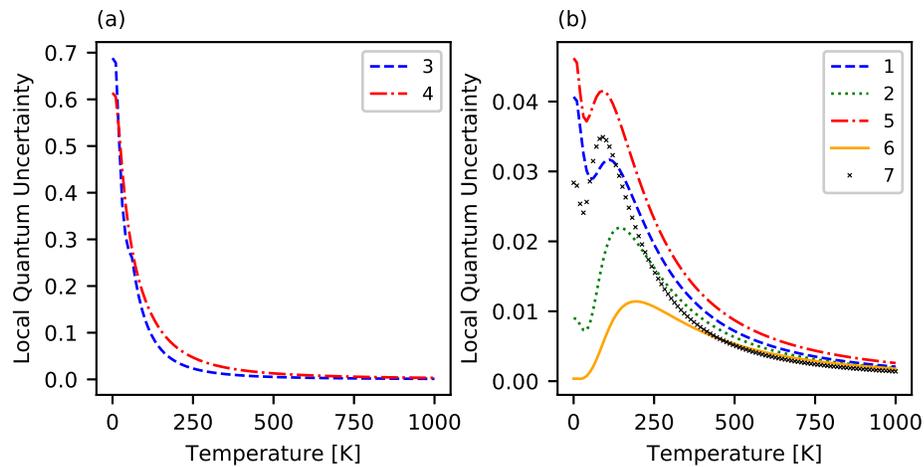
**Figura 1.** LQU entre un cromóforo  $\{C_r\}$  y los 6 cromóforos restantes  $\{C_s, C_t, C_u, \dots\}$  para los siete eigenestados  $\{|M\rangle\}$  del Hamiltoniano FMO. (a)  $r = 1, 2, 3, 4$ , (b)  $r = 5, 6, 7$

mezclas estadísticas son el estado en equilibrio térmico y sus subsistemas. Los recursos cuánticos se caracterizan dividiendo la red de siete cromóforos en particiones que definen familias de correlaciones cuánticas. La LQU y concurrencia van de 0 para estados no correlacionados a 1 para estados completamente correlacionados.

Primero, se procede a calcular recursos cuánticos en la red completa de los siete cromóforos. Para este propósito, la estructura de siete cromóforos se divide en dos subsistemas: un cromóforo  $\{C_r\} = \mathbf{Subsistema A}_1$  y los 6 cromóforos restantes  $\{C_s, C_t, C_u, \dots\} = \mathbf{Subsistema B}_1$  (con  $s, t, u, \dots \neq r$ ). Las correlaciones cuánticas entre el  $\mathbf{Subsistema A}_1$  y el  $\mathbf{Subsistema B}_1$  no habían sido calculadas antes.

En la Figura 1, dos histogramas muestran la LQU entre el  $\mathbf{Subsistema A}_1$  y el  $\mathbf{Subsistema B}_1$  para los siete eigenestados  $\{|M\rangle\}$  del Hamiltoniano FMO. La información de los cromóforos  $C_1, C_2, C_3$ , y  $C_4$  está en la Figura 1 (a) y la información de los cromóforos  $C_5, C_6$ , y  $C_7$  está en la Figura 1 (b). En la Figura 1 (a) se ve que los eigenestados 3 y 6 son los que más contribuyen a la correlación de  $C_1$  y  $C_2$  con el resto de la red de cromóforos; y que los eigenestados 1 y 2 son los que más contribuyen a la correlación de  $C_3$  y  $C_4$  con el resto de la red de cromóforos. En la Figura 1 (b) se ve que los eigenestados que más participan a la LQU de  $C_5$  y  $C_7$  con el resto de la red de cromóforos son 2, 4, 5 y 7; y que los eigenestados 5 y 7 tienen los valores más altos de LQU para las correlaciones entre  $C_6$  y el resto de la red de cromóforos.

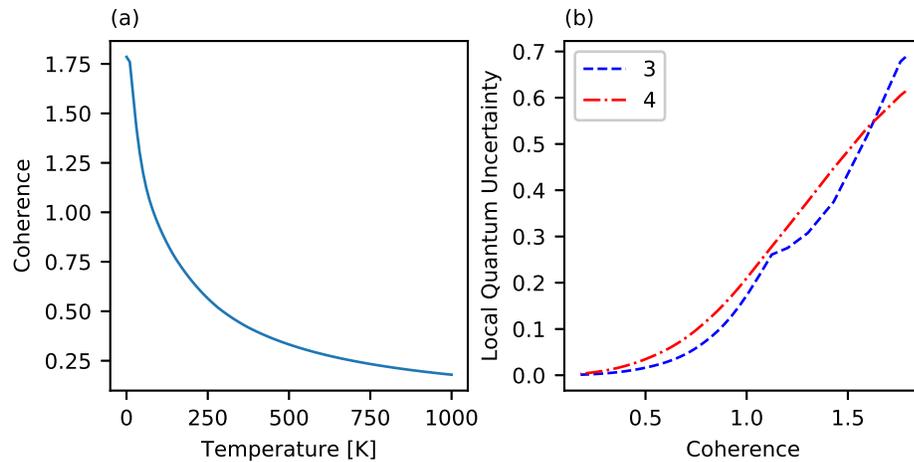
El siguiente paso es extender el análisis de correlaciones cuánticas de estados puros, representados por los eigenestados, al estado en equilibrio térmico. En la Figura 2 se muestran la LQU entre cromóforos individuales  $\mathbf{Subsistema A}_1$  y los 6 cromóforos restantes  $\mathbf{Subsistema B}_1$



**Figura 2.** LQU entre un cromóforo  $\{C_r\}$  y los 6 cromóforos restantes  $\{C_s, C_t, C_u, \dots\}$  para el estado en equilibrio térmico como función de la temperatura. (a)  $r = 3, 4$ , (b)  $r = 1, 2, 5, 6, 7$

como función de la temperatura para el estado en equilibrio térmico. En la Figura 2 (a) se muestra la LQU de los cromóforos  $C_3$  y  $C_4$  con el resto de la red de cromóforos. A bajas temperaturas, los cromóforos  $C_3$  y  $C_4$  son los más correlacionados cuánticamente con el resto de la red. Esto se puede explicar si se recuerda que los eigenestados con la mayor contribución a la LQU entre  $C_3$  (o  $C_4$ ) y el resto de la red son el estado base y el primer estado excitado. En la Figura 2 (b) se muestra la LQU de los cromóforos  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_5$ ,  $C_6$ , y  $C_7$  con el resto de la red de cromóforos. Respecto a las asociaciones de la Figura 2 (b), los valores de LQU son marginales en amplitud y las curvas muestran un máximo local alrededor de 100 K. Además de la diferencia en valores de LQU, las asociaciones de la familia  $f_1$  están separadas en dos conjuntos porque en la Figura 2 (a) la LQU es una función estrictamente decreciente mientras que en la Figura 2 (b) la LQU primero disminuye, luego aumenta y, finalmente, disminuye otra vez al aumentar la temperatura. La LQU de las asociaciones en la Figura 2 (b) toma valores pequeños a bajas energías porque los eigenestados 1 y 2 no tienen una participación importante; al aumentar la temperatura también lo hace la LQU porque los eigenestados 3, 4 y 5 comienzan a participar. A temperaturas altas, las correlaciones desaparecen en estados de Gibbs porque todos los eigenestados son igualmente probables, esto es, el mezclado es máximo y se pierden las correlaciones no clásicas.

Para investigar la relación entre dos recursos cuánticos diferentes se calcula la coherencia cuántica del sistema y se compara con la LQU. En la Figura 3 (a) se grafica la coherencia cuántica  $C_{l_1}$  de los siete cromóforos como función de la temperatura para el estado en equilibrio térmico. Como se espera, la coherencia desaparece al aumentar la temperatura. En la Figura 3 (b) se usa la temperatura como parámetro para obtener curvas de LQU contra coherencia:  $(C_{l_1}(T), LQU(T))$ . La comparación facilitada por las curvas paramétricas permite ver que la LQU de los cromóforos



**Figura 3.** (a) Coherencia de la red de los siete cromóforos como función de la temperatura para el estado en equilibrio térmico. (b) LQU entre un cromóforo  $\{C_r\}$  y los 6 cromóforos restantes  $\{C_s, C_t, C_u, \dots\}$  como función de la coherencia, con  $r = 3, 4$

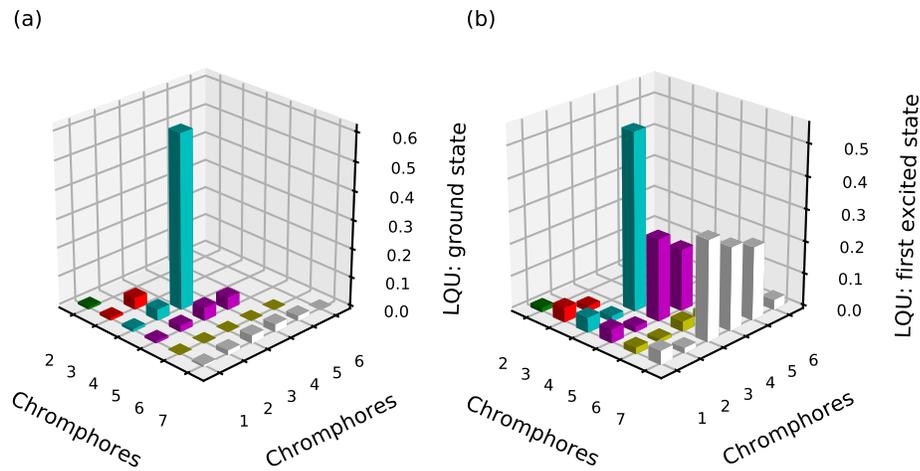
$C_3$  y  $C_4$  es una función monótonamente creciente de la coherencia. No se presentan las correspondientes curvas paramétricas para los cromóforos  $C_1, C_2, C_5, C_6,$  o  $C_7$  porque no tienen una participación global importante.

Se usa la familia  $f_2$  de correlaciones cuánticas en la búsqueda de la asociación específica de cromóforos que sostienen las correlaciones cuánticas definidas por la familia  $f_1$ .

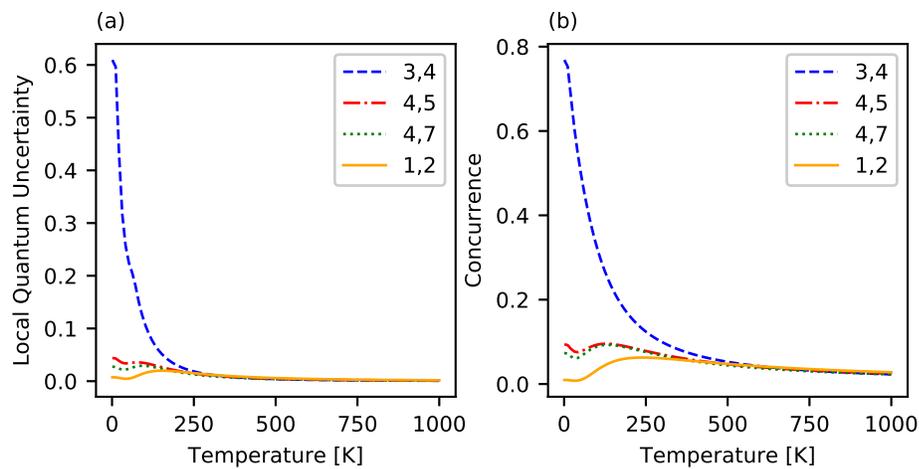
Primero, se examinan las asociaciones determinadas por la familia  $f_2$  en los eigenestados más bajos del Hamiltoniano FMO. En la Figura 4 se muestra la LQU entre los cromóforos  $\{C_r\} = \mathbf{Subsistema A}_2$  y  $\{C_s\} = \mathbf{Subsistema B}_2$  (con  $r \neq s$ ) para el estado base y para el primer estado excitado. Los resultados muestran que tanto para el estado base como para el primer estado excitado la correlación más alta es entre los cromóforos  $C_3$  y  $C_4$ . En orden decreciente, las correlaciones que también sobresalen cuando el sistema está en el primer estado excitado son:  $\{C_7, C_3\}, \{C_5, C_3\}, \{C_7, C_4\}, \{C_7, C_5\},$  y  $\{C_5, C_4\}$ .

Después de estudiar las correlaciones en los eigenestados, se usa el estado en equilibrio térmico para establecer la fiabilidad del enfoque LQU al compararlo con la concurrencia (un cuantificador válido del entrelazamiento en el subespacio de dos qubits).

Las Figuras 5-9 muestran una comparación entre el enfoque LQU y el enfoque de concurrencia para calcular correlaciones cuánticas como función de la temperatura en todos los pares posibles de cromóforos. Las curvas de LQU se colectan en 5 figuras de acuerdo a su valor a 300K. Las correlaciones cuánticas en pares de cromóforos con los mayores valores aparecen en la Figura 5 y los valores disminuyen en las siguientes figuras.



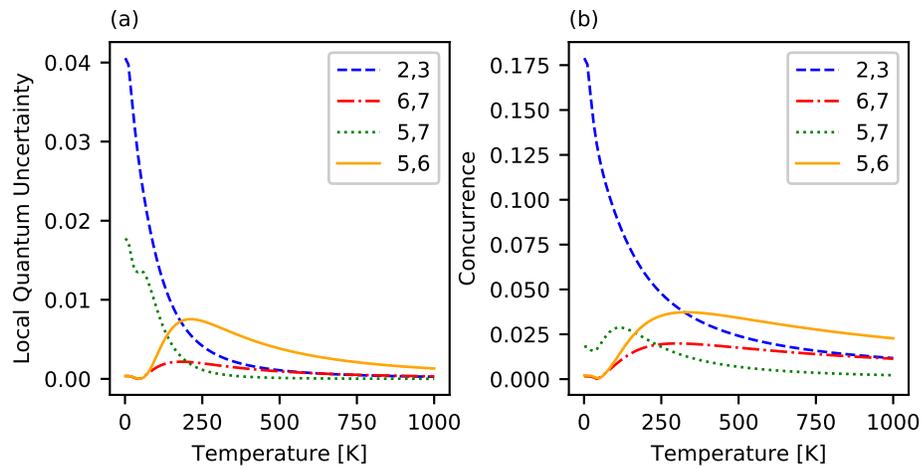
**Figura 4.** LQU entre los cromóforos  $\{C_r\}$  y  $\{C_s\}$  para el estado base (a) y el primer estado excitado (b)



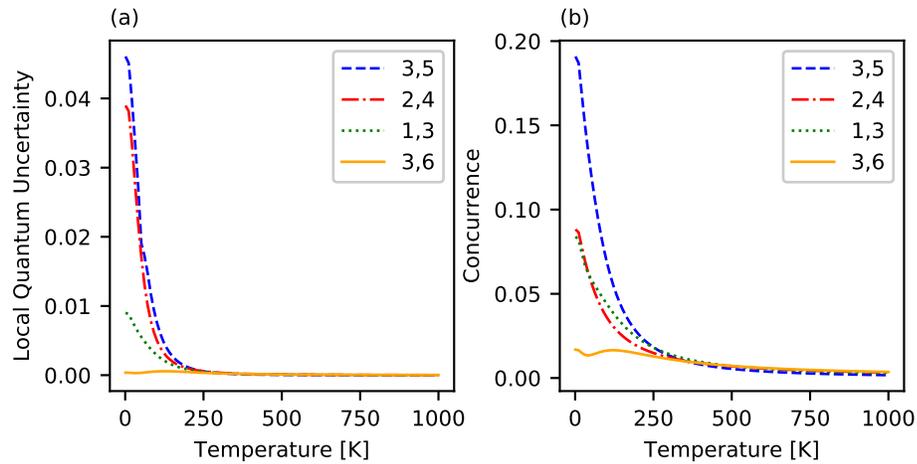
**Figura 5.** LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos  $\{C_3, C_4\}$ ,  $\{C_4, C_5\}$ ,  $\{C_4, C_7\}$  y  $\{C_1, C_2\}$

La Figura 5 (a) exhibe las curvas LQU para los pares  $\{C_3, C_4\}$ ,  $\{C_4, C_5\}$ ,  $\{C_4, C_7\}$ , y  $\{C_1, C_2\}$ ; mientras que la figura 5 (b) presenta las curvas de concurrencia correspondientes. En la Figura 5, hay una similitud cualitativa y cuantitativa entre las curvas LQU y las curvas de concurrencia. A temperaturas bajas, la LQU entre el par  $\{C_3, C_4\}$  es un orden de magnitud mayor que para cualquier otro par. La razón de esto es el alto valor de LQU tanto para el estado base como para el primer estado excitado en este par. Esta conducta también estaba presente entre los subsistemas con los valores más altos de correlaciones cuánticas de la familia  $f_1$ .

La Figura 6 (a) muestra la LQU para los pares  $\{C_2, C_3\}$ ,  $\{C_6, C_7\}$ ,  $\{C_5, C_7\}$ , y  $\{C_5, C_6\}$  y la Figura 6 (b) muestra las gráficas de concurrencia análogas. En la Figura 6 hay una diferencia significativa entre las escalas de LQU y las escalas de concurrencia, sin embargo, se conserva la similitud cualitativa. Siendo la LQU un cuantificador tipo discordia, éste da cuenta de correlaciones que las medidas basadas en entrelazamiento no consideran; esta puede ser la razón por la que a



**Figura 6.** LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos  $\{C_2, C_3\}$ ,  $\{C_6, C_7\}$ ,  $\{C_5, C_7\}$  y  $\{C_5, C_6\}$

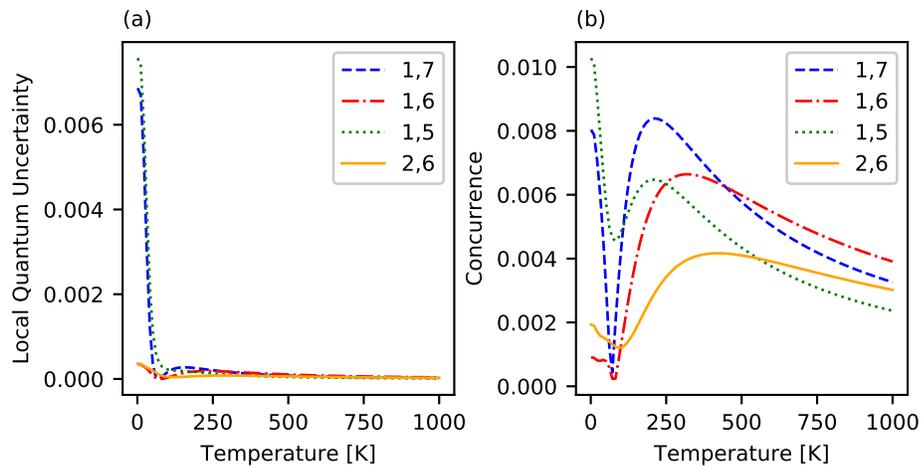


**Figura 7.** LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos  $\{C_3, C_5\}$ ,  $\{C_2, C_4\}$ ,  $\{C_1, C_3\}$  y  $\{C_3, C_6\}$

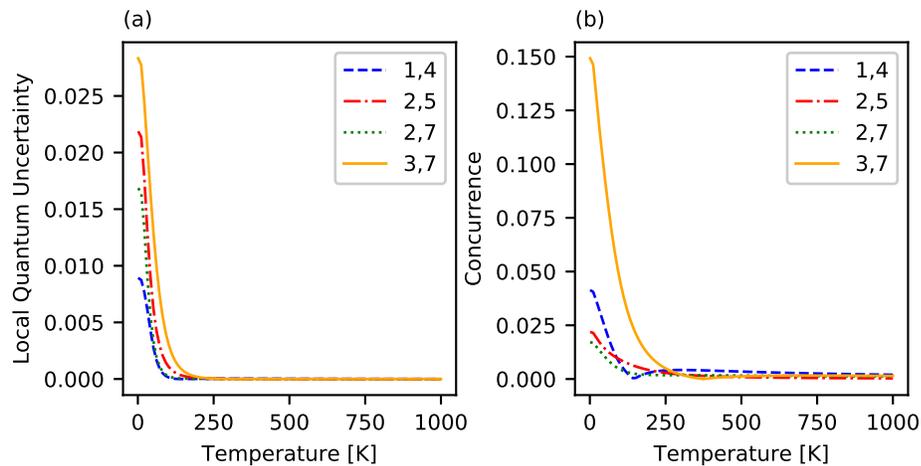
bajas temperaturas el par  $\{C_5, C_7\}$  tiene valores mayores de LQU que de concurrencia.

Se continúa con la LQU en la Figura 7 (a) y la concurrencia en la Figura 7 (b) como función de la temperatura para los pares  $\{C_3, C_5\}$ ,  $\{C_2, C_4\}$ ,  $\{C_1, C_3\}$ , y  $\{C_3, C_6\}$ . Los pares en las Figuras 5, 6 y 7, que tienen correlaciones más fuertes, están formados por cromóforos adyacentes o cercanos, en contraste, los pares en las Figuras 8 y 9, que exhiben correlaciones más débiles, están formados por cromóforos separados.

Se presenta la LQU en la Figura 8 (a) y la concurrencia en la Figura 8 (b) para los pares  $\{C_1, C_7\}$ ,  $\{C_1, C_6\}$ ,  $\{C_1, C_5\}$ , y  $\{C_2, C_6\}$ . Las escalas de LQU y concurrencia en la Figura 8 son similares pero las correlaciones son notablemente menores que en los ejemplos anteriores. Los cuatro pares en la Figura 8 tienen correlaciones que presentan un máximo local alrededor de 250 K que es más pronunciado en las curvas de concurrencia.



**Figura 8.** LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos  $\{C_1, C_7\}$ ,  $\{C_1, C_6\}$ ,  $\{C_1, C_5\}$  y  $\{C_2, C_6\}$

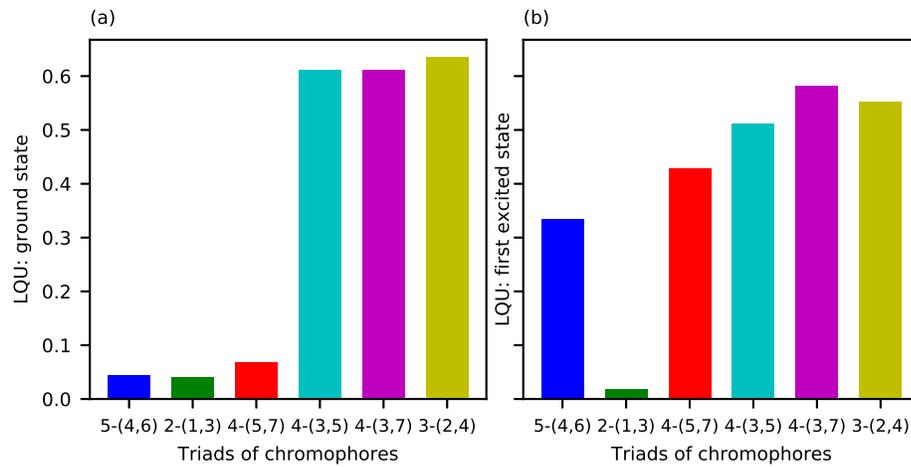


**Figura 9.** LQU (a) y concurrencia (b) como función de la temperatura para los pares de cromóforos  $\{C_1, C_4\}$ ,  $\{C_2, C_5\}$ ,  $\{C_2, C_7\}$  y  $\{C_3, C_7\}$

La Figura 9 (a) muestra las curvas de LQU y la Figura 9 (b) muestra las curvas de concurrencia para el último conjunto de pares, específicamente  $\{C_1, C_4\}$ ,  $\{C_2, C_5\}$ ,  $\{C_2, C_7\}$ , and  $\{C_3, C_7\}$ . Los pares en la Figura 9 presentan la mayor diferencia entre las escalas de LQU y de concurrencia.

Las Figuras 5-9 muestran una similitud cualitativa entre las curvas de LQU y de concurrencia. Estos resultados confirman que el enfoque LQU es un método confiable para medir correlaciones cuánticas en subsistemas del complejo FMO.

Un resultado directo para cualquier par de cromóforos  $\{C_r, C_s\}$  con estado cuántico  $\rho_g^{f_2}$  es que la norma  $l_1$  de coherencia  $C_{l_1}(\rho_g^{f_2})$  es igual a la concurrencia  $C(\rho_g^{f_2})$ . Esto se puede ver al comparar la Ecuación 149 con la Ecuación 154. En el caso específico de dos excitones de sitio, la coherencia es igual a la concurrencia y las Figuras 5-9 muestran suficiente similitud cuantitativa entre LQU y concurrencia para implicar, por transitividad, que hay una relación cercana entre



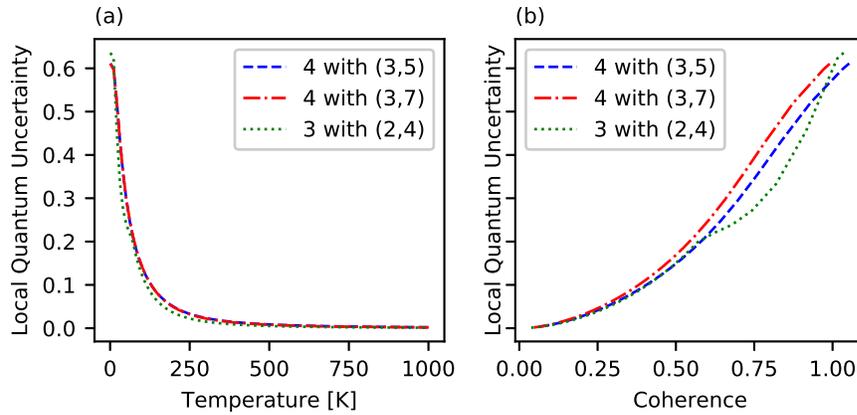
**Figura 10.** LQU entre los cromóforos  $\{C_r\}$  y  $\{C_s, C_t\}$  para el estado base (a) y el primer estado excitado (b)

coherencia y LQU. Una función monótonamente creciente entre LQU y coherencia también estaba presente en las asociaciones más correlacionadas de la familia  $f_1$ .

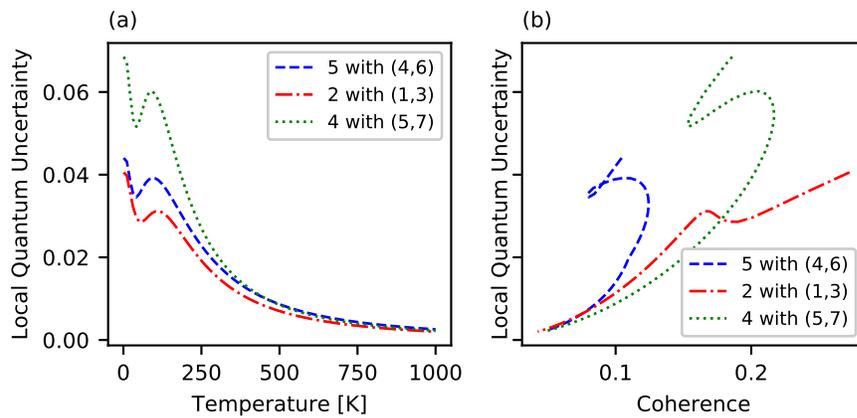
Ahora que se tiene evidencia que la LQU es un cuantificador válido de correlaciones cuánticas en subsistemas del complejo FMO se buscan triadas de cromóforos cuya asociación resulte en correlaciones más fuertes que las encontradas en sistemas bipartitos. Para esto, se calcula LQU entre un cromóforo  $\{C_r\} = \mathbf{Subsistema A}_3$  y pares de cromóforos  $\{C_s, C_t\} = \mathbf{Subsistema B}_3$  (con  $s, t \neq r$ ). Se consideraron todas las combinaciones posibles pero sólo se presentan resultados de triadas seleccionadas con la siguiente conducta: la LQU entre el **Subsistema A<sub>3</sub>** y el **Subsistema B<sub>3</sub>** es más fuerte que la LQU entre  $\{C_r\}$  y alguno de los cromóforos ( $\{C_s\}$  o  $\{C_t\}$ ) del **Subsistema B<sub>3</sub>**. La búsqueda y selección de triadas de cromóforos fuertemente correlacionados se logró en virtud de la robustez del enfoque LQU. En el complejo FMO, las correlaciones cuánticas entre el **Subsistema A<sub>3</sub>** y el **Subsistema B<sub>3</sub>** no habían sido calculadas antes.

Se continúa con el análisis en conjuntos de tres cromóforos considerando los dos eigenestados con menor energía. En la Figura 10 se presentan dos histogramas de la LQU en las triadas de cromóforos seleccionadas tanto para el estado base (a) como para el primer estado excitado (b). Los resultados muestran que tanto para el estado base como para el primer estado excitado los conjuntos con los valores más altos de LQU son el cromóforo  $C_4$  con el par  $\{C_3, C_7\}$ , el cromóforo  $C_3$  con el par  $\{C_2, C_4\}$ , y el cromóforo  $C_4$  con el par  $\{C_3, C_5\}$ .

Después de considerar los eigenestados se ampliará el análisis al estado térmico. En las Figuras 11 y 12 se presentan las triadas seleccionadas donde la LQU entre un cromóforo **Subsistema A<sub>3</sub>**

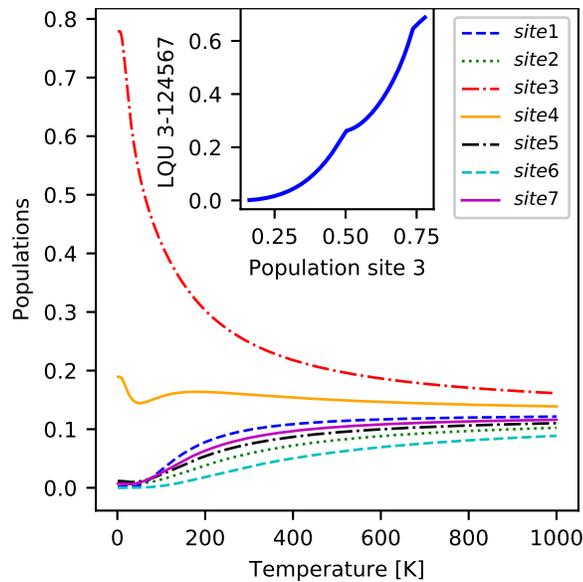


**Figura 11.** Valores altos de LQU entre los cromóforos  $\{C_r\}$  y  $\{C_s, C_t\}$  para el estado termal como función de la temperatura (a) y de la coherencia (b)



**Figura 12.** Valores bajos de LQU entre los cromóforos  $\{C_r\}$  y  $\{C_s, C_t\}$  para el estado termal como función de la temperatura (a) y de la coherencia (b)

y un par de cromóforos **Subsistema B<sub>3</sub>** es función de la temperatura (a) y de la coherencia (b). La Figura 11 muestra los conjuntos de cromóforos con valores altos de LQU ( $\{C_4, C_3, C_7\}$ ,  $\{C_3, C_2, C_4\}$ , y  $\{C_4, C_3, C_5\}$ ) y la Figura 12 muestra los conjuntos con valores bajos de LQU ( $\{C_5, C_4, C_6\}$ ,  $\{C_2, C_1, C_3\}$ , y  $\{C_4, C_5, C_7\}$ ). Las correlaciones cuánticas de los conjuntos en la Figura 11 (a) son funciones estrictamente decrecientes de la temperatura mientras que los conjuntos en la Figura 12 (a) tienen correlaciones cuánticas que primero disminuyen, luego aumentan, y finalmente disminuyen otra vez al aumentar la temperatura. A bajas temperaturas, la LQU de las triadas en la Figura 11 es un orden de magnitud mayor que para las triadas en la Figura 12. Una vez más, la razón de esto es el alto valor de LQU tanto para el estado base como para el primer estado excitado en estas asociaciones. Esta conducta también se presentó en las asociaciones más cuánticamente correlacionadas en las familias  $f_1$  y  $f_2$ .



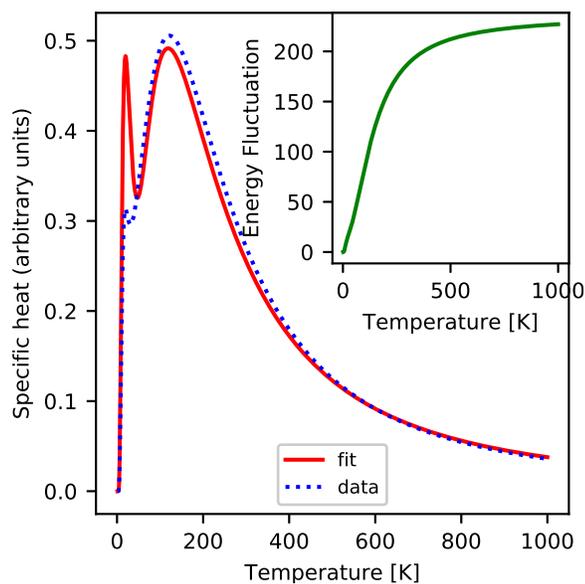
**Figura 13.** El panel principal muestra las poblaciones de los siete sitios como función de la temperatura. El inset muestra la LQU entre  $C_3$  y el resto de la red como función de la población del sitio 3.

Con respecto a las curvas paramétricas de LQU contra coherencia, los resultados muestran que las triadas de cromóforos con los valores más alto de LQU,  $\{C_4, C_3, C_7\}$ ,  $\{C_3, C_2, C_4\}$ , y  $\{C_4, C_3, C_5\}$ , muestran una relación funcional con su coherencia. Una función monótonamente creciente también estaba presente en las asociaciones más fuertes de cromóforos en las familias  $f_1$  y  $f_2$ . En contraste, la LQU de las triadas con asociaciones más débiles,  $\{C_5, C_4, C_6\}$ ,  $\{C_2, C_1, C_3\}$ , and  $\{C_4, C_5, C_7\}$ , no tiene una relación unívoca con su coherencia.

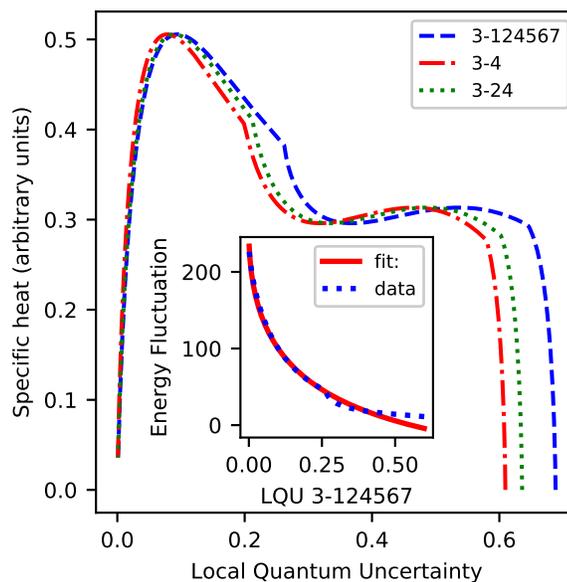
La robustez del método LQU permite la cuantificación de correlaciones cuánticas que no habían sido estudiado antes, la identificación de las correlaciones más fuertes en redes de qubits y una posible implementación en modelos dinámicos para estudiar caminos eficientes de transporte de energía.

### 3.1.4. Subconjuntos cuanticamente correlacionados dentro del contexto físico del sistema FMO en equilibrio térmico

La proteína FMO transfiere la energía de excitación del clorosoma al centro de reacción. Los cromóforos 3 y 4 son los pigmentos que enlazan el complejo FMO con el centro de reacción. Usamos el estado en equilibrio termodinámico para calcular la dependencia funcional de las poblaciones respecto a la temperatura (Figura 13). A bajas temperaturas y cuando se ha alcanzado el estado de equilibrio térmico, la mayor probabilidad es encontrar al sistema en el estado localizado  $|3\rangle$  segui-



**Figura 14.** El panel principal muestra el calor específico a volumen constante como función de la temperatura. El inset muestra la fluctuación de la energía del sistema  $\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$  como función de la temperatura.



**Figura 15.** El panel principal muestra el calor específico a volumen constante como función del LQU asociado a los subconjuntos de cromóforos más correlacionados, es decir,  $C_3$  con el resto de la red,  $C_3$  con  $C_4$ , y  $C_3$  con  $\{C_2, C_4\}$ . El inset muestra la fluctuación del sistema  $\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$  como función del LQU entre  $C_3$  y el resto de la red.

do por  $|4\rangle$ . A medida que se incrementa la temperatura, los siete sitios son igualmente probables de estar excitados.

Evaluamos la relación entre los conjuntos de cromóforos más correlacionados y la población del sitio 3, el pigmento más probable de encontrarse excitado cuando se alcanza el equilibrio térmico. En el inset de la Figura 13 mostramos una curva paramétrica del LQU entre el sitio 3 y el resto de la red contra la población del sitio 3, es decir,  $(\rho_{33}(T), LQU(T))$ . Estos resultados muestran una correlación positiva entre carga en el sitio que reparte energía al centro de reacción y no clasicidad, medida por la LQU, como función de la temperatura. La relación entre los sitios de transferencia y correlaciones cuánticas específicas también está presente al analizar los caminos eficientes de transporte.

Como un paso intermedio, antes de buscar relacionar no clasicidad con una magnitud macroscópica medible, evaluamos la fluctuación de la energía  $\langle(\Delta H)^2\rangle = \langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2$  en el contexto del ensemble canónico. En el inset de la Figura 14, mostramos la dependencia funcional de la varianza estadística  $\langle(\Delta H)^2\rangle$  respecto a la temperatura para mostrar que un indicador de incertidumbre asociado a la medición de energía aumenta con la temperatura. Debido al incremento de temperatura el sistema pierde coherencia, el mezclado aumenta y la contribución a la varianza viene principalmente de incertidumbre clásica.

Con este resultado ahora podemos evaluar la relación entre varianza, que da cuenta de incertidumbre clásica y cuántica, y el LQU, un cuantificador de la contribución cuántica a la incertidumbre. En el inset de la Figura 15, mostramos una curva paramétrica de la fluctuación de la energía contra el LQU del cromóforo  $C_3$  con el resto de la red, es decir,  $(LQU(T), \langle(\Delta H)^2\rangle(T))$ . Se puede ver que mientras la temperatura aumenta, hay una correlación inversa entre la incertidumbre total asociada a la medición de la energía y la mínima contribución cuántica a la incertidumbre. En el inset de la Figura 15, también se muestra un ajuste exponencial para la fluctuación de la energía como función de la LQU:  $\langle(\Delta H)^2\rangle = \alpha \exp(-bLQU^{1/2}) + c$ . Los parámetros óptimos son  $\alpha = 327.2$ ,  $b = 2.0$  y  $c = -71.4$ . Este ajuste muestra el tipo de relación funcional que existe entre incertidumbre de fuentes tanto clásicas como cuánticas y la mínima ignorancia cuántica.

Para evaluar la relación entre no clasicidad y una magnitud macroscópica medible comenzamos por analizar la relación funcional del calor específico a volumen constante respecto a la temperatura  $C_v = \langle(\Delta H)^2\rangle/kT^2$  (Fig. 14). Escogemos mediciones de calor específico porque constituyen una técnica esencial para caracterizar excitaciones fundamentales involucradas en transicio-

nes de fase.

El sistema presenta una anomalía tipo Schottky en el calor específico como función de la temperatura. La anomalía Schottky se manifiesta como un máximo en el calor específico cuando la brecha de energía  $\Delta_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$  de un sistema de dos niveles está fija Souza (2016).

Un sistema multinivel puede presentar múltiples picos en el calor específico que corresponden tanto a las brechas discretas de energía  $\Delta_n = \varepsilon_n - \varepsilon_0$  que se vuelven accesibles al aumentar la temperatura como a la degeneración de cada nivel Souza (2016).

En un modelo para un sistema multinivel en equilibrio térmico sin degeneración, el calor específico  $C_V$  es:

$$C_V = \frac{((\Delta_1(\Delta_1 - \Delta_2) + \Delta_2(\Delta_2 - \Delta_1)) \exp(-(\Delta_2 + \Delta_1)/KT))}{(KT)^2 (1 + \exp(-\Delta_1/KT) + \exp(-\Delta_2/KT))} + \frac{\exp(-\Delta_1/KT)(\Delta_1^2) + \exp(-\Delta_2/KT)(\Delta_2^2)}{(KT)^2 (1 + \exp(-\Delta_1/KT) + \exp(-\Delta_2/KT))} \quad (155)$$

donde  $\Delta_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$  y  $\Delta_2 = \varepsilon_2 - \varepsilon_0$  Souza (2016). En el Hamiltoniano FMO no hay degeneración, así que la estructura con dos picos que aparece en el calor específico de la Figura 14 está asociada a que las brechas de energía  $\Delta_1$  y  $\Delta_2$  se vuelven accesibles.

Para investigar la relación entre no clasicidad y una magnitud macroscópica medible, en Figura 15 presentamos una gráfica paramétrica de calor específico contra el LQU de las asociaciones más fuertes:  $(LQU(T), C_V(T))$ . En la Figura 15, se puede ver claramente que se conserva la estructura de dos picos del calor específico.

El pico de la derecha en el calor específico, asociado a la prevalencia de los niveles energéticos  $\varepsilon_0$  y  $\varepsilon_1$ , muestra que mientras la temperatura aumenta de 0 a  $\sim 50$  K, la LQU es constante, presenta valores altos, y el calor específico aumenta rápidamente de 0 a 0.3. El análisis de eigenvalores muestra que cuando el sistema tiene acceso a los niveles energéticos más bajos  $\varepsilon_0$  y  $\varepsilon_1$ , el sistema presenta características no clásicas con los valores más altos. Por lo tanto, a bajas temperaturas, el rápido incremento en la capacidad del sistema para absorber energía calorífica está relacionado a la presencia de correlaciones no clásicas específicas. A medida que la temperatura aumenta y la LQU disminuye de 0.6 a  $\sim 0.3$  el calor específico se mantiene constante. El pico de la izquierda en el calor específico, asociado a la disponibilidad de la brecha de energía  $\Delta_2 = \varepsilon_2 - \varepsilon_0$ , muestra que cuando los valores de LQU son marginales en amplitud ( $LQU < 0.1$ ) la capacidad calorífica disminuye de su valor máximo alrededor de 0.5 a 0. Por lo tanto, al acceder a niveles energéticos

mayores, el segundo pico en el calor específico no está asociado a valores altos de correlaciones cuánticas. El análisis de la curva paramétrica de la Figura 15 muestra que la disponibilidad de niveles energéticos determinada por el aumento de temperatura dicta la relación entre calor específico (una magnitud macroscópica medible) y LQU (un cuantificador de la naturaleza no clásica de la red FMO)

## 3.2. Transporte-LQU

La estrategia que se seguirá para investigar la posible relación entre la transmisión de energía cuántica y correlaciones no clásicas en el complejo FMO consiste en: (1) presentar un modelo dinámico para el transporte de energía en la red de cromóforos, (2) identificar las condiciones bajo las cuales se presenta el transporte asistido por ruido, (3) implementar el método LQU en el modelo dinámico.

### 3.2.1. Modelo dinámico del transporte de energía

La ecuación maestra de Lindblad 133 proporciona el esquema que determina la evolución dinámica del complejo FMO:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_- + D(\rho) \quad (156)$$

donde  $\rho$  es la matriz densidad,  $H$  es el Hamiltoniano excitónico definido en 137 y  $D$  es el disipador que da cuenta de las interacciones de los cromóforos con el ambiente. En la base de sitio, la matriz densidad  $\rho$  se expresa de la siguiente forma:

$$\rho = \sum_{k,l} \rho_{kl} |k\rangle \langle l| \quad (157)$$

donde  $\rho_{kl}$  son los elementos de la matriz densidad  $\rho$  en la base de sitio 135. El disipador  $D$  es la suma de tres operadores de la forma 134 que dan cuenta del desfaseamiento, disipación y pérdida al centro de reacción (sink):

$$D(\rho) = D_{deph}(\rho) + D_{diss}(\rho) + D_{sink}(\rho) \quad (158)$$

donde los operadores de Lindblad para el operador  $D_{deph}$  son  $L_k = |k\rangle\langle k|$ , para el operador  $D_{diss}$  son  $L_k = |g\rangle\langle k|$  y para el operador  $D_{sink}$  es  $L = |s\rangle\langle 3|$ . El estado  $|g\rangle$  son todos los cromóforos están en el estado base, el estado  $|k\rangle$  representa al sitio  $k$  en estado excitado mientras que el resto de sitios está en estado base, el estado  $|s\rangle$  corresponde a la energía en el centro de reacción (sink) y el estado  $|3\rangle$  corresponde a la energía en el sitio 3 (Plenio y Huelga, 2008; Caruso *et al.*, 2009; Chin *et al.*, 2010).

En forma explícita, los operadores que forman el disipador son:

$$D_{deph}(\rho) = \alpha \sum_k 2\langle k|\rho|k\rangle|k\rangle\langle k| - [ |k\rangle\langle k|, \rho ]_+ \quad (159)$$

$$D_{diss}(\rho) = \beta \sum_k 2\langle k|\rho|k\rangle|g\rangle\langle g| - [ |k\rangle\langle k|, \rho ]_+ \quad (160)$$

$$D_{sink}(\rho) = 2\gamma\langle 3|\rho|3\rangle|s\rangle\langle s| - \gamma [ |3\rangle\langle 3|, \rho ]_+ \quad (161)$$

El desfaseamiento es la disminución de la coherencia en la eigenbase de energía del sistema y en este modelo se caracteriza por la tasa de desfaseamiento  $\alpha$ . El proceso de disipación transfiere energía de la red de cromóforos al ambiente, perdiéndose esa energía. La tasa de disipación está dada por el factor  $\beta$ . El operador  $D_{sink}$  transfiere energía del tercer cromóforo al centro de reacción (sink), que toma el lugar de un sitio más en la matriz densidad. La pérdida al sink la determina el factor  $\gamma$ . Si la Ecuación 156 se escribe usando la base de sitio  $\{|k\rangle\}$  se obtiene el elemento de matriz  $\dot{\rho}_{ij}$ :

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{ij} = & -\frac{i}{\hbar} \sum_l H_{il} \rho_{lj} + \frac{i}{\hbar} \sum_l \rho_{il} H_{lj} \\
& + 2\alpha \rho_{ii} \delta_{ij} - 2\alpha \rho_{ij} \\
& + 2\beta \left( \sum_k \rho_{kk} \right) \delta_{ig} \delta_{gj} - 2\beta \rho_{ij} \\
& + 2\gamma \rho_{33} \delta_{is} \delta_{sj} - \gamma \rho_{3j} \delta_{i3} - \gamma \rho_{i3} \delta_{3j}
\end{aligned} \tag{162}$$

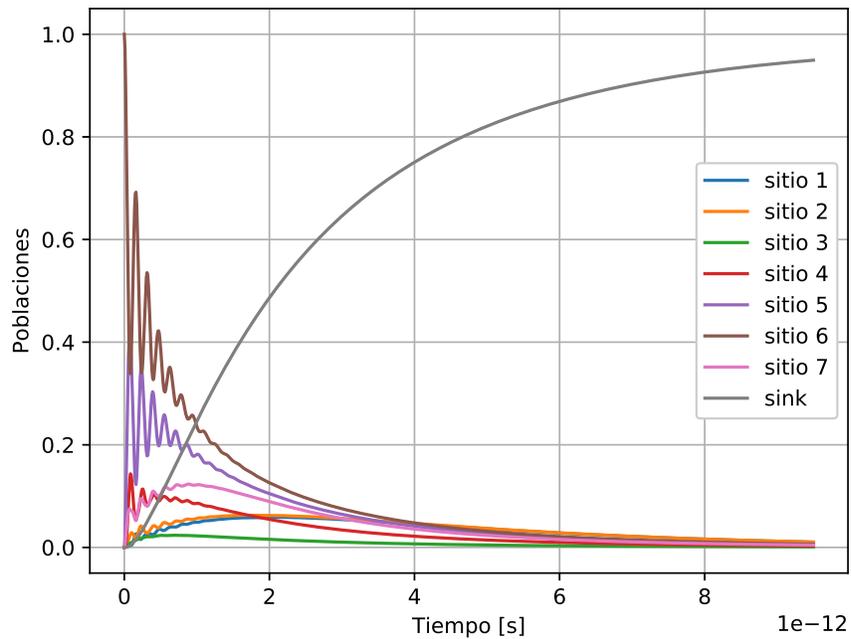
El modelo se completa introduciendo una medida de la eficiencia del transporte de la red: la población transferida al sink  $\rho_{ss}(t)$ , la cual tiene la forma:

$$\rho_{ss}(t) = 2\gamma \int_0^t \rho_{33}(t') dt' \tag{163}$$

De acuerdo a los trabajos que estudian el transporte electrónico en el complejo FMO (Plenio y Huelga, 2008; Rebentrost *et al.*, 2009; Caruso *et al.*, 2009), el tiempo de transferencia al centro de reacción es de alrededor de 1 ps, esto determina el factor  $\gamma$ ; el tiempo de vida del excitón es de alrededor de 1 ns, esto determina el factor  $\beta$ . En el modelo dinámico que se presenta, con una tasa de desfaseamiento  $\alpha$  alrededor de  $10^{12}$  se obtienen oscilaciones coherentes que duran alrededor de 1 ps (Figura 16), que es consistente con el tiempo experimentalmente observado de coherencia. La Figura 16 muestra la evolución de las poblaciones de los sitios así como la población transferida al sink.

### 3.2.2. Transporte asistido por ruido

Se han desarrollado diferentes marcos teóricos para estudiar el papel de la coherencia cuántica en el altamente eficiente transporte de energía a través de sistemas fotosintéticos como el complejo FMO (Olaya-Castro *et al.*, 2008; Mohseni *et al.*, 2008; Plenio y Huelga, 2008; Rebentrost *et al.*, 2009; Caruso *et al.*, 2009; Chin *et al.*, 2010). De acuerdo a los estudios, la alta eficiencia en el transporte es el resultado de una interacción constructiva entre la evolución coherente del sistema fotosintético y la acción incoherente introducida por su ambiente. El fenómeno se conoce como transporte cuántico asistido por el ambiente, transporte de energía asistido por desfaseamiento o transporte asistido por ruido. En el transporte asistido por ruido, la eficiencia en la transferencia



**Figura 16.** Poblaciones de los sitios versus tiempo (en segundos)

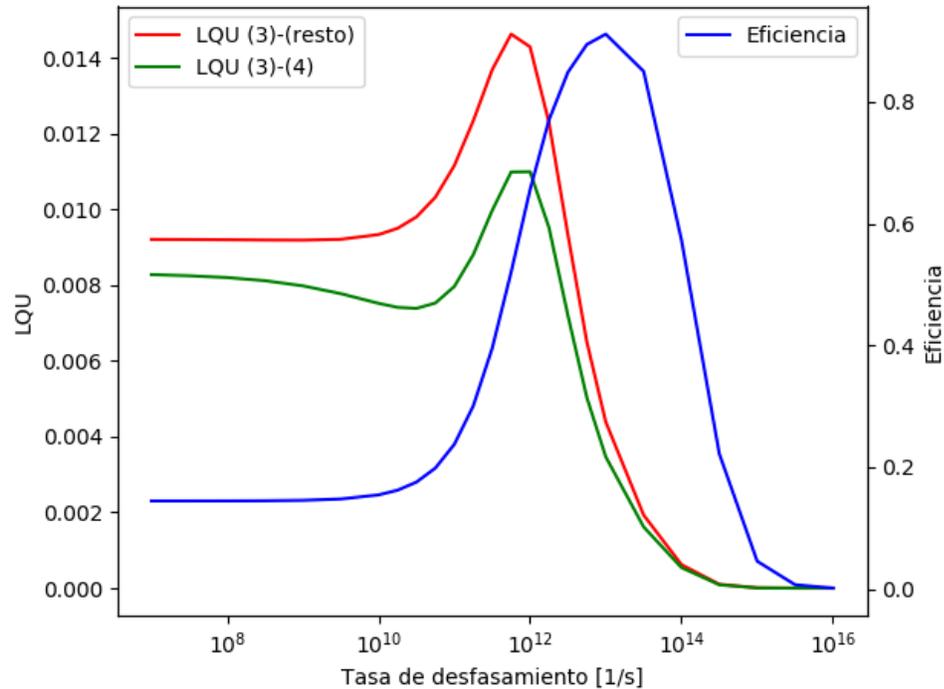
(Ecuación 163) se incrementa a más del 90 % al aumentar la tasa de desfase pero al continuar aumentando el desfase lleva a una pérdida completa de la eficiencia. Esta caracterización se usará como referencia para implementar el modelo de la Sección 3.2.1 en la identificación de las condiciones bajo las cuales se presenta el transporte asistido por ruido.

Se evaluó el transporte asistido por ruido después de 5, 7.5 y 10 ps de evolución temporal para el rango  $\alpha = [10^7 - 10^{16}]$  1/s.

### 3.2.3. Eficiencia y LQU

Para analizar la relación entre correlaciones cuánticas y el transporte de energía en la red de cromóforos se realiza una comparación entre  $LQU_{acumulada}$  y eficiencia (Ecuación 163). La  $LQU_{acumulada}$  es la cantidad del recurso cuántico LQU que el sistema ha consumido después de un tiempo  $t$ :

$$LQU_{acumulada}(t) = \frac{1}{t} \int_0^t LQU(t') dt' \quad (164)$$



**Figura 17.** Eficiencia del transporte energético y  $LQU_{acumulada}$  para  $C_3$  con el resto de la red y para  $C_3$  con  $C_4$  después de 5 ps de evolución

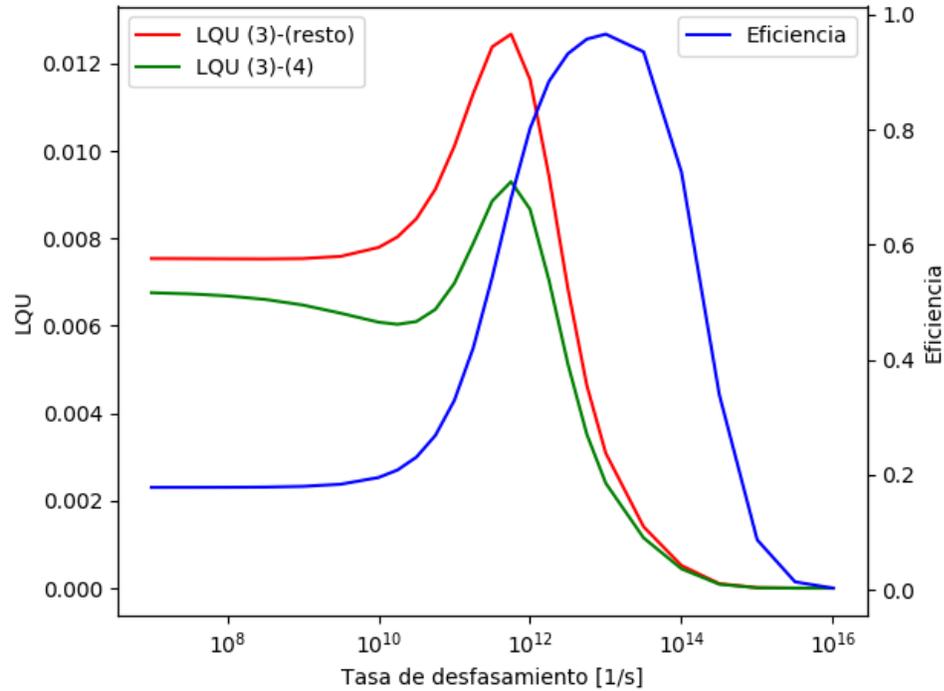
La comparación entre eficiencia y  $LQU_{acumulada}$  se calcula como función del desfaseamiento  $\alpha$  en el rango de valores donde se presenta el transporte asistido por ruido.

La implementación del método LQU en el modelo dinámico tiene por objetivo buscar las asociaciones de cromóforos cuya  $LQU_{acumulada}$  no es una función monótonamente decreciente del desfaseamiento para comparar su comportamiento con la eficiencia.

La primera parte de la búsqueda es con la familia  $f_1$ , esto para obtener una perspectiva general del comportamiento individual de los cromóforos. Los resultados muestran que sólo la asociación entre el cromóforo  $C_3$  con el resto de la red no es una función monótonamente decreciente del desfaseamiento.

La segunda parte de la búsqueda involucra las asociaciones entre pares de la familia  $f_2$ . Las correlaciones cuánticas de la familia  $f_2$  son para conocer qué cromóforos específicos se asocian con  $C_3$  para promover el transporte electrónico. Los resultados muestran que sólo la asociación entre los cromóforos  $C_3$  y  $C_4$  tiene  $LQU_{acumulada}$  que no es una función monótonamente decreciente del desfaseamiento.

Las Figuras 17, 18 y 19 son una comparación entre la  $LQU_{acumulada}$  que no decrece monó-



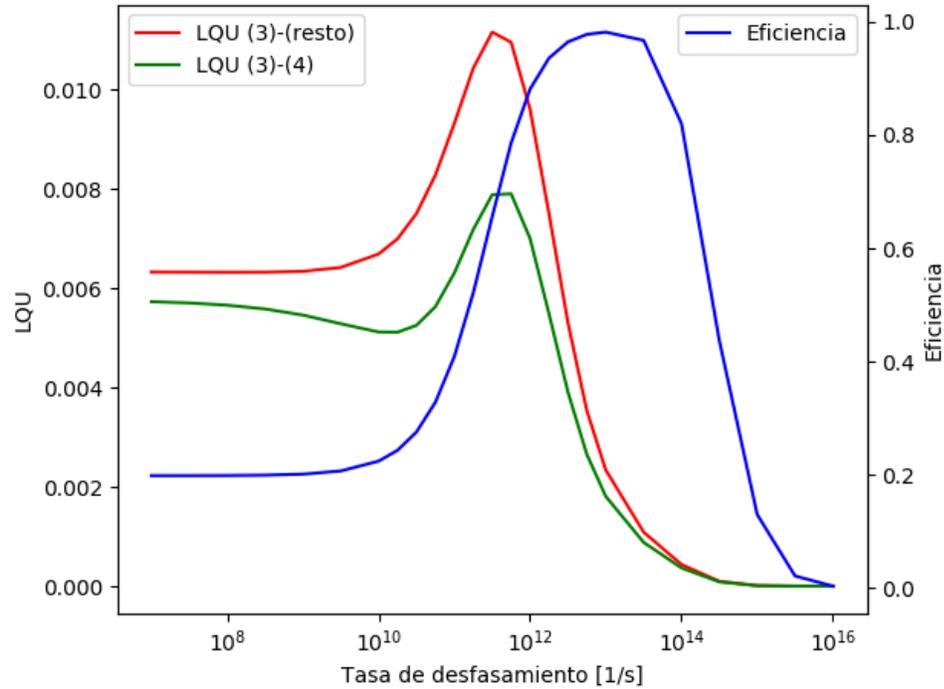
**Figura 18.** Eficiencia del transporte energético y  $LQU_{acumulada}$  para  $C_3$  con el resto de la red y para  $C_3$  con  $C_4$  después de 7.5 ps de evolución

tonamente con el desfaseamiento y la eficiencia del transporte energético en el rango donde se presenta el transporte asistido por ruido.

La Figura 17 muestra la eficiencia y la  $LQU_{acumulada}$  después de 5 ps de evolución temporal. Esta figura tiene los valores más altos de  $LQU_{acumulada}$  porque la decoherencia causada por el ambiente aún no elimina las correlaciones cuánticas. La eficiencia alcanza un valor máximo alrededor del 90 %.

La Figura 18 compara la eficiencia con las correlaciones cuánticas medidas por la LQU cuando han pasado 7.5 ps. En esta figura se observa que el régimen del transporte asistido por ruido ocurre en un mayor intervalo del parámetro de desfaseamiento que en la Figura 17, esto probablemente se deba a que un mayor tiempo de evolución asegura un mejor transporte.

En la Figura 19 aparecen las curvas de  $LQU_{acumulada}$  y eficiencia para 10 ps de evolución. En esta figura, la eficiencia es mayor y más robusta ante el desfaseamiento porque con mayor tiempo de evolución aumenta la probabilidad de transporte. La  $LQU_{acumulada}$  es menor, debido a que la decoherencia ha actuado por más tiempo, pero conserva el comportamiento que presentó a tiempos menores.



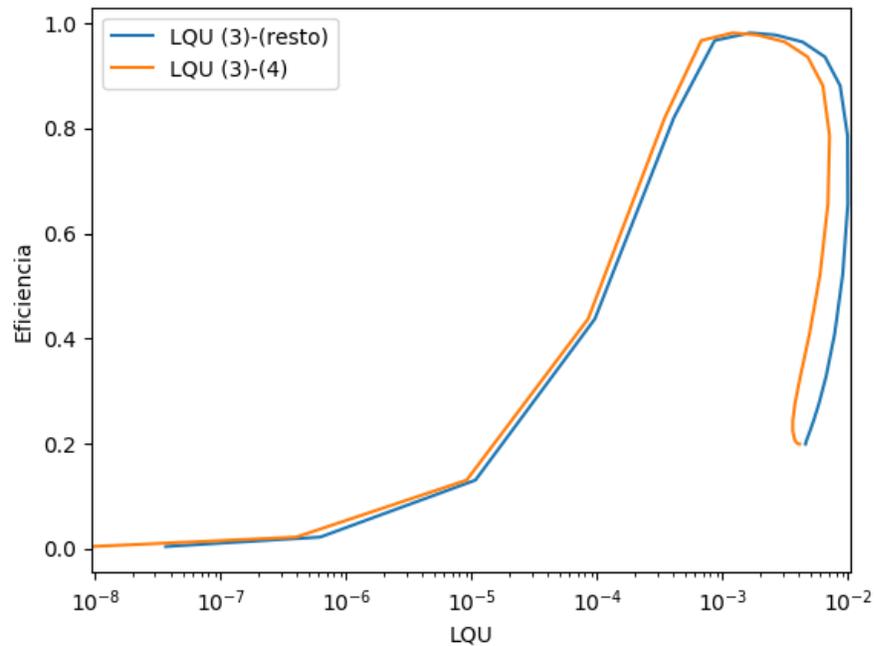
**Figura 19.** Eficiencia del transporte energético y  $LQU_{acumulada}$  para  $C_3$  con el resto de la red y para  $C_3$  con  $C_4$  después de 10 ps de evolución

Las Figuras 17, 18 y 19 muestran que la  $LQU_{acumulada}$  de  $C_3$  con el resto de la red y la de  $LQU_{acumulada}$  de  $C_3$  con  $C_4$  tienen el mismo comportamiento que la eficiencia: en el régimen de mayor coherencia la  $LQU_{acumulada}$  tiene un valor limitado, con el aumento del desfaseamiento se alcanza un máximo y finalmente, en el régimen clásico, la  $LQU_{acumulada}$  desaparece. Además de la similitud en el comportamiento general entre  $LQU_{acumulada}$  y eficiencia, las tres figuras muestran una cercanía notable entre el máximo de  $LQU_{acumulada}$  y el máximo de eficiencia. Otra característica que comparten las tres figuras es que la mayor parte de la correlación entre  $C_3$  con el resto de la red es aportación de la asociación entre  $C_3$  y  $C_4$ .

Para conocer la región donde existe una correlación entre eficiencia y correlaciones cuánticas cuantificadas por  $LQU_{acumulada}$  se presenta una gráfica paramétrica del tipo

$$(EFICIENCIA(DEFASAMIENTO), LQU_{acumulada}(DEFASAMIENTO)) \quad (165)$$

después de 10 ps de evolución dinámica. En la figura 20 se usa el desfaseamiento como parámetro para obtener curvas de eficiencia contra  $LQU_{acumulada}$ . La comparación facilitada por la figura 20 permite ver donde la pendiente de la curva es positiva, ya que en dicha región existe correlación entre eficiencia y  $LQU_{acumulada}$ .

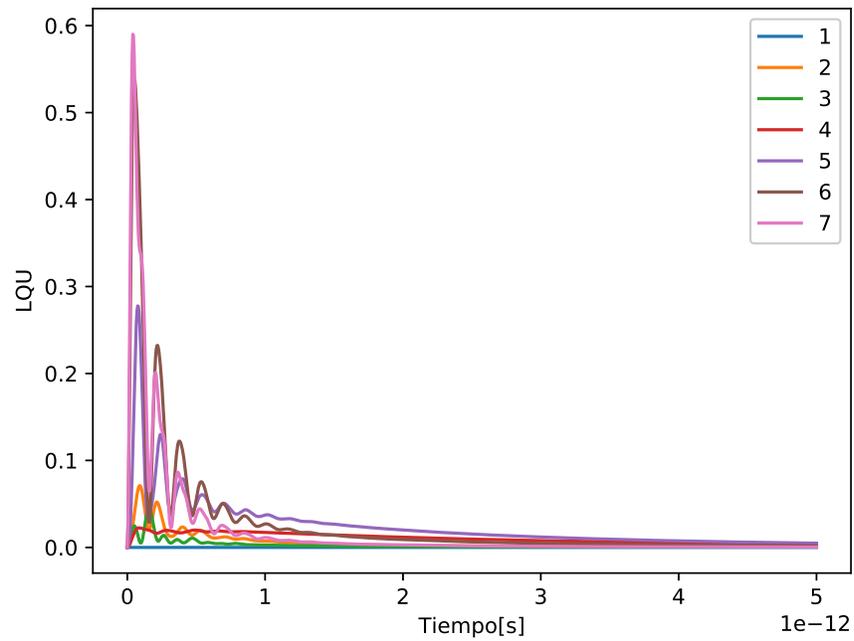


**Figura 20.** Gráfica paramétrica (EFICIENCIA (DEFASAMIENTO),  $LQU_{acumulada}$  (DEFASAMIENTO)) para  $C_3$  con el resto de la red y para  $C_3$  con  $C_4$ , después de 10 ps de evolución dinámica

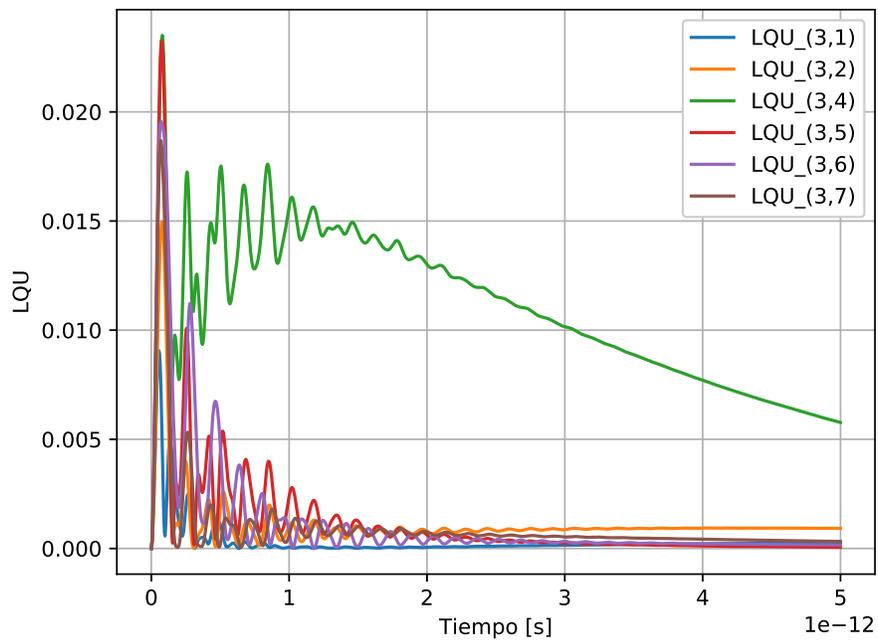
Para estudiar las correlaciones de  $C_3$  con el resto de la red y la de  $C_3$  con  $C_4$  se presenta su evolución dinámica usando el factor de desfase alrededor del máximo de la  $LQU_{acumulada}$  ( $\alpha = 10^{12}$ ).

En la Figura 21 se muestra la LQU entre un cromóforo  $\{C_r\}$  y el resto de la red, con  $r = 1, 2, 3, \dots, 7$ . Las oscilaciones en LQU duran alrededor de 1 ps y los mayores valores en LQU corresponden a los cromóforos  $C_5$ ,  $C_6$  y  $C_7$ . La LQU de  $C_3$  con el resto de la red no presenta los valores más altos, sin embargo la correlación cuántica  $(C_3)$ -(resto) se distingue de las demás correlaciones en que durante el primer picosegundo esta asociación oscila sin decrecer en amplitud. El comportamiento distintivo de la asociación  $(C_3)$ -(resto) también se vio reflejado en las Figuras 17, 18 y 19 de  $LQU_{acumulada}$  versus desfase.

Las correlaciones cuánticas a pares de  $C_3$  con  $C_s$  (para  $s = 1, 2, 3, \dots, 7$ ) se presentan en la figura 22. Las oscilaciones en LQU duran alrededor de 3 ps y los mayores valores en LQU corresponden a los pares  $(C_3, C_5)$ ,  $(C_3, C_6)$  y  $(C_3, C_7)$ . La LQU de  $(C_3, C_4)$  no presenta los valores más altos, sin embargo el comportamiento de este par es notablemente distinto a las demás correlaciones ya que durante el primer picosegundo oscila aumentando su amplitud. El comportamiento distintivo de la asociación  $(C_3, C_4)$  también se vio reflejado en las Figuras 17, 18 y 19 de  $LQU_{acumulada}$



**Figura 21.** LQU entre un cromóforo  $\{C_r\}$  y los 6 cromóforos restantes  $\{C_s, C_t, C_t \dots\}$  durante los primeros 5ps para  $r = 1, 2, 3, \dots, 7$



**Figura 22.**  $LQU_{acumulada}$  como función del tiempo para los pares  $\{C_3, C_r\}$ , con  $r = 1, 2, 4, 5, 6, 7$

versus desfasamiento.

## Capítulo 4. Discusión

---

En la primera parte de los resultados 3.1 se presenta un método sistemático basado en la LQU dirigido a examinar la estructura de las correlaciones cuánticas en complejos pigmento-proteína. Para lograr esto, se calcularon LQU, concurrencia y coherencia en subsistemas de estados puros y mixtos del complejo FMO proveniente de la bacteria verde del azufre.

El método LQU consiste en seleccionar familias de particiones del sistema, determinar el estado cuántico y calcular la LQU entre subsistemas. Las particiones se seleccionan para definir dos subsistemas donde uno es un qubit y el otro es un qudit (en el complejo FMO el qubit corresponde a un sólo sitio y el qudit puede ser cualquier número de sitios). La determinación de los estados cuánticos se consigue calculando la correspondiente traza parcial a la matriz densidad del sistema completo. El cálculo de LQU se logra al seleccionar el mayor eigenvalor de una matriz  $3 \times 3$ . La información de entrada al método LQU es un estado cuántico de excitones de sitio por lo tanto se puede implementar fácilmente en modelos dinámicos.

Para mostrar la versatilidad del método LQU, se calcularon correlaciones cuánticas entre subsistemas que nunca habían sido considerados es decir, LQU entre cromóforos individuales y los 6 cromóforos restantes (familia  $f_1$ ). Las correlaciones de la familia  $f_1$  presentan una perspectiva general de la participación individual de los cromóforos. Los resultados de la familia  $f_1$  muestran que los cromóforos  $C_3$  y  $C_4$  son los más cuánticamente correlacionados con el resto de la red. En particiones subsecuentes, la robustez de la LQU permite encontrar las asociaciones de cromóforos específicas que sostienen las correlaciones cuánticas de los cromóforos  $C_3$  y  $C_4$ .

Para validar la LQU como un cuantificador tipo discordia se comparó con un cuantificador válido del entrelazamiento de dos qubits (concurrencia). La comparación LQU-concurrencia se realizó usando el estado en equilibrio térmico para todas las combinaciones de dos cromóforos (familia  $f_2$ ). De acuerdo a los resultados de la familia  $f_2$ , las correlaciones cuánticas de los cromóforos  $C_3$  y  $C_4$  con el resto de la red provienen principalmente de los siguientes pares de cromóforos:  $\{C_3, C_4\}$ ,  $\{C_4, C_5\}$ ,  $\{C_4, C_7\}$  y  $\{C_2, C_3\}$ .

La LQU entre los cromóforos  $C_3$  y  $C_4$  es un orden de magnitud mayor que para cualquier otro par pero, como lo sugiere la relación entre pares, al añadir un tercer sitio específico la asociación se fortalece incluso más. Las asociaciones sugeridas por la familia  $f_2$  son confirmadas por los resultados de la familia  $f_3$  que muestran que las triadas más fuertemente correlacionadas son:  $C_3$

con  $\{C_2, C_4\}$ ,  $C_4$  con  $\{C_3, C_5\}$  y  $C_4$  con  $\{C_3, C_7\}$ .

Se encontraron tres resultados adicionales: (1) Al comparar el enfoque LQU con las técnicas basadas en entrelazamiento en pares de cromóforos se probó que el primero es un cuantificador válido de correlaciones cuánticas tipo discordia. (2) Cuando se calcularon correlaciones cuánticas usando los eigenestados se encontró que algunos subsistemas tienen altos valores de LQU en el estado base y en el primer estado excitado. Al considerar el estado de estos subsistemas en equilibrio térmico se encontró que tienen un notablemente alto LQU a bajas temperaturas. Esta relación está presente en las tres familias. (3) Se presenta una función monótonamente creciente entre dos recursos cuánticos, coherencia y correlaciones cuánticas, en las asociaciones más correlacionadas de las familias  $f_1$  y  $f_3$ ; y en todas las asociaciones de la familia  $f_2$ .

Uno de los problemas más interesantes en biología cuántica es averiguar si las correlaciones cuánticas en complejos colectores de luz desempeñan un papel funcional mejorando la eficiencia del transporte de energía. Las investigaciones que abordan esta cuestión no encontraron resultados concluyentes (Caruso *et al.*, 2010; Fassioli y Olaya-Castro, 2010) o fueron sujetos a críticas (Scholak *et al.*, 2011). En la primera parte de los resultados 3.1 se cuantificaron recursos cuánticos en un sistema que permanece en el mismo estado mientras transcurre el tiempo: el sistema está en estado estacionario o en equilibrio térmico. En esta parte no se trabajó con un modelo dinámico así que estos resultados no se pueden relacionar directamente con la eficiencia en el transporte de la excitación. Sin embargo, hay una relación previamente reportada entre los subconjuntos de la red de cromóforos más cuánticamente correlacionados y los dos caminos de transporte de energía en la proteína FMO (Zhu *et al.*, 2012; Chanda *et al.*, 2014; Skochdopole y Mazziotti, 2011).

En el complejo FMO, la excitación se mueve coherentemente a través de dos caminos alternativos de transferencia de energía dependiendo del sitio que está inicialmente excitado (Cho *et al.*, 2005; Brixner *et al.*, 2005; Ishizaki y Fleming, 2009). Cuando el cromóforo  $C_1$  es el pigmento inicialmente excitado, la excitación se propaga a través del camino  $A$ :  $C_1 \rightarrow C_2 \rightarrow C_3 \rightarrow C_4$  y cuando el pigmento inicialmente excitado es el cromóforo  $C_6$ , la excitación se transfiere a través del camino  $B$ :  $C_6 \rightarrow C_5, C_7 \rightarrow C_4 \rightarrow C_3$ . En la presente investigación se encontró que en equilibrio térmico las asociaciones no clásicas más fuertes son  $C_3$  con  $\{C_2, C_4\}$ ,  $C_4$  con  $\{C_3, C_5\}$  y  $C_4$  con  $\{C_3, C_7\}$ . Las correlaciones cuánticas de  $C_3$  con  $\{C_2, C_4\}$  involucran a los cromóforos del camino  $A$ :  $C_3$  conecta a  $C_2$  de la etapa inicial con  $C_4$  de la etapa final. Las correlaciones cuánticas de  $C_4$  con  $\{C_3, C_5\}$  y  $C_4$  con  $\{C_3, C_7\}$  involucran a los cromóforos del camino  $B$ :  $C_4$  conecta  $C_5/C_7$  de la etapa inicial con  $C_3$  de la etapa final. Así que una vez que se alcanza el equilibrio térmico, los

subconjuntos de cromóforos con las correlaciones cuánticas más fuertes constituyen la etapa final de los dos caminos de transporte de energía en el complejo FMO. La relación entre fuertes correlaciones cuánticas y caminos de transporte de energía es consistente con investigaciones previas de entrelazamiento multipartita en la proteína FMO (Zhu *et al.*, 2012; Chanda *et al.*, 2014; Skochdopole y Mazziotti, 2011).

La no clasicidad del sistema, representada por la LQU de los subconjuntos de cromóforos más cuánticamente correlacionados, se puede usar para analizar propiedades físicas como poblaciones, fluctuación de energía, y calor específico. Al aumentar la temperatura, el número de estados accesibles se incrementa y la estructura de doble pico que aparece en el calor específico refleja la disponibilidad de las brechas de energía  $\Delta_1$  y  $\Delta_2$ . El primer pico, donde sólo prevalecen los estados  $\epsilon_0$  y  $\epsilon_1$ , muestra una correspondencia entre un rápido incremento de la capacidad calorífica y LQU constante. Para el segundo pico, donde ya están disponibles los estados  $\epsilon_0$ ,  $\epsilon_1$ , y  $\epsilon_2$ , las propiedades cuánticas del sistema son marginales y la capacidad calorífica comienza a disminuir. De esta forma, la accesibilidad de los niveles energéticos, mapeada por el calor específico, define la relación entre una cantidad macroscópica medible y recursos no clásicos.

La discusión de la primera parte de los resultados 3.1 ha mostrado que la LQU es una métrica promisoría, con potencial implementación en sistemas dinámicos; además, el análisis sugiere una conexión entre subconjuntos de cromóforos altamente correlacionados y caminos de transferencia de energía.

En la segunda parte de los resultados 3.2 se implementa el método LQU en un modelo dinámico para investigar la posible relación entre la transmisión de energía cuántica y las correlaciones no clásicas en el complejo FMO. Para lograr esto, se realiza una comparación entre  $LQU_{acumulada}$  y eficiencia en el transporte de energía.

La estrategia para evaluar si hay correlaciones cuánticas que desempeñen un papel funcional en la transmisión de energía en el complejo FMO consiste en: (1) presentar un modelo dinámico para identificar las condiciones bajo las cuales se presenta el transporte asistido por ruido y (2) implementar el método LQU en el modelo dinámico para identificar las asociaciones de cromóforos cuya  $LQU_{acumulada}$  aumenta con la eficiencia en el transporte de energía.

El modelo dinámico definido por la Ecuación 162 define 162 ecuaciones diferenciales acopladas para la matriz densidad  $\rho$  que se integran hasta el tiempo  $t$  con un programa escrito en *python* usando el comando *odeint* de la librería *scipy.integrate* o, de forma alternativa, usando *QuTip*, un

software de código abierto para simular la dinámica de sistemas cuánticos abiertos.

En el transporte asistido por ruido, la eficiencia en la transferencia de energía mantiene valores limitados mientras la decoherencia tiene valores bajos, al aumentar la decoherencia la eficiencia se incrementa a más del 90 % hasta alcanzar un máximo global y con la pérdida completa de la coherencia la eficiencia también desaparece. En el complejo FMO, el transporte asistido por ruido se presenta después de 5 ps pero alcanza mayores valores de eficiencia en 7.5 y 10 ps de evolución. En este modelo dinámico la decoherencia en la eigenbase de energía, desfaseamiento, se debe a la acción de un Lindbladiano con tasa de decoherencia  $\alpha$  en el rango  $[10^7 - 10^{16}]$  1/s.

La versatilidad del enfoque LQU permite realizar una búsqueda diferente a la de la primera parte 3.1, donde se buscaron las asociaciones más fuertes de cromóforos. En la segunda parte de los resultados 3.2 el método LQU se implementa para buscar las asociaciones de cromóforos cuya  $LQU_{acumulada}(t)$ , con  $t = 5, 7.5, 10$  ps, no es una función monótonamente decreciente del desfaseamiento  $\alpha$ . Para el estudio de la LQU dinámica se usan las mismas familias definidas en 3.1.2.

Lo más sobresaliente de la segunda parte de los resultados 3.2 es la existencia de una correlación entre la eficiencia en el transporte de energía y correlaciones cuánticas específicas. Esta correlación sugiere que en la red de cromóforos, correlaciones cuánticas específicas funcionan como un recurso para promover el transporte eficiente de la excitación electrónica. En la familia  $f_1$ , la única asociación de cromóforos cuya  $LQU_{acumulada}$  presenta este comportamiento es la de  $C_3$  con el resto de la red. A continuación se usó la familia  $f_2$  para conocer qué cromóforos específicos se asocian con  $C_3$  para promover el transporte electrónico. La única asociación de cromóforos cuya  $LQU_{acumulada}$  se incrementa con la eficiencia como función del desfaseamiento es  $\{C_3, C_4\}$ . Los resultados muestran que la mayor contribución a la correlación cuántica de  $C_3$  con el resto de la red viene de la asociación  $\{C_3, C_4\}$ . En este caso los resultados de la familia  $f_2$  no sugieren un fortalecimiento sustancial de las correlaciones cuánticas en las asociaciones tripartitas.

Un efecto inherente a la decoherencia es la pérdida de las correlaciones cuánticas a medida que evoluciona el sistema cuántico abierto, esto se manifiesta en la disminución progresiva de la  $LQU_{acumulada}(t)$  con los valores  $t = 5, 7.5, 10$  ps. Los resultados muestran que la eficiencia toma valores más altos y es más robusta ante el desfaseamiento con el paso del tiempo, esto se debe a que la probabilidad de la transferencia de energía aumenta con mayor tiempo de evolución.

## Capítulo 5. Conclusiones

---

Se introdujo un método de información cuántica basado en la incertidumbre local cuántica para caracterizar exhaustivamente las correlaciones no clásicas en subsistemas del complejo FMO.

Los beneficios del enfoque LQU sobre otras técnicas son: (1) siendo LQU un cuantificador tipo discordia es más general que las técnicas basadas en entrelazamiento, (2) LQU es fácil de calcular porque el proceso de minimización inherente asociado con la discordia se reduce a encontrar el máximo eigenvalor de una matriz  $3 \times 3$ , (3) LQU permite la caracterización de correlaciones que no habían sido estudiadas (familia  $f_1$  y  $f_3$ ), (4) el método LQU revela las asociaciones más fuertes en redes de qubits, y (5) la técnica LQU se puede implementar fácilmente en sistemas dinámicos.

Los subconjuntos de cromóforos con las correlaciones cuánticas más fuertes,  $C_3$  con  $\{C_2, C_4\}$ ,  $C_4$  con  $\{C_3, C_5\}$  y  $C_4$  con  $\{C_3, C_7\}$ , constituyen la etapa final de los dos caminos de transporte de energía en el complejo FMO. La identificación de los subsistemas más correlacionados cuánticamente con los caminos de energía revela un mapa detallado de la excepcionalmente eficiente estructura del complejo FMO.

La principal limitación del enfoque LQU es que es un cuantificador bipartito así que no puede ofrecer un medida global de las correlaciones cuánticas.

La implementación del enfoque LQU en un modelo dinámico del complejo FMO permitió realizar una búsqueda sistemática de las correlaciones cuánticas específicas que no decrecen monótonamente con el desfaseamiento. La  $LQU_{acumulada}$  de  $C_3$  con el resto de la red y la eficiencia en el transporte de energía se incrementan, alcanzan un máximo global y desaparecen simultáneamente como función del desfaseamiento. La asociación de  $C_3$  con  $C_4$  representa la mayor contribución a las correlaciones de  $C_3$  con el resto de la red. Estos hallazgos son un indicio sugerente de que correlaciones cuánticas específicas funcionan como un recurso para promover el transporte eficiente de la excitación electrónica.

El estudio de recursos cuánticos en redes biológicas tiene aplicaciones potenciales en la construcción de dispositivos cuánticos naturalmente robustos.

## Literatura citada

- Adolphs, J. y Renger, T. (2006). How Proteins Trigger Excitation Energy Transfer in the FMO Complex of Green Sulfur Bacteria. *Biophysical Journal*, **91**(8): 2778–2797.
- Audretsch, J. (2007). *Entangled Systems: new directions in quantum physics*, Vol. 1. pp. 1–331.
- Baumgratz, T., Cramer, M., y Plenio, M. B. (2014). Quantifying coherence. *Physical Review Letters*, **113**(14): 1–5.
- Brádler, K., Wilde, M. M., Vinjanampathy, S., y Uskov, D. B. (2010). Identifying the quantum correlations in light-harvesting complexes. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **82**(6): 1–12.
- Brixner, T., Stenger, J., Vaswani, H. M., Cho, M., Blankenship, R. E., y Fleming, G. R. (2005). Two-dimensional spectroscopy of electronic couplings in photosynthesis. *Nature*, **434**(7033): 625–628.
- Camara-Artigas, A., Blankenship, R. E., y Allen, J. P. (2003). The structure of the FMO protein from *Chlorobium tepidum* at 2.2 Å resolution. *Photosynthesis Research*, **75**(1): 49–55.
- Caruso, F., Chin, A. W., Datta, A., Huelga, S. F., y Plenio, M. B. (2009). Highly efficient energy excitation transfer in light-harvesting complexes: The fundamental role of noise-assisted transport. *Journal of Chemical Physics*, **131**(10).
- Caruso, F., Chin, A. W., Datta, A., Huelga, S. F., y Plenio, M. B. (2010). Entanglement and entangling power of the dynamics in light-harvesting complexes. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **81**(6): 1–8.
- Chanda, T., Mishra, U., De, A. S., y Sen, U. (2014). Time dynamics of multiparty quantum correlations indicate energy transfer route in light-harvesting complexes. p. 12.
- Chin, A. W., Datta, A., Caruso, F., Huelga, S. F., y Plenio, M. B. (2010). Noise-assisted energy transfer in quantum networks and light-harvesting complexes. *New Journal of Physics*, **12**.
- Cho, M., Vaswani, H. M., Brixner, T., Stenger, J., y Fleming, G. R. (2005). Exciton Analysis in 2D Electronic Spectroscopy. *J.Phys. Chem. B*, **109**(110): 18230–18236.
- Coulamy, I. B., Warnes, J. H., Sarandy, M. S., y Saguia, A. (2016). Scaling of the local quantum uncertainty at quantum phase transitions. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, **380**(20): 1724–1728.
- Dakić, B., Lipp, Y. O., Ma, X., Ringbauer, M., Kropatschek, S., Barz, S., Paterek, T., Vedral, V., Zeilinger, A., Brukner, Č., y Walther, P. (2012). Quantum discord as resource for remote state preparation. *Nature Physics*, **8**(9): 666–670.
- Datta, A., Shaji, A., y Caves, C. M. (2008). Quantum discord and the power of one qubit. **0001**(3): 1–4.
- Engel, G. S., Calhoun, T. R., Read, E. L., Ahn, T.-K., Mančal, T., Cheng, Y.-C., Blankenship, R. E., y Fleming, G. R. (2007). Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems. *Nature*, **446**(7137): 782–786.
- Fassioli, F. y Olaya-Castro, A. (2010). Distribution of entanglement in light-harvesting complexes and their quantum efficiency. *New Journal of Physics*, **12**.
- Fernandes Fanchini, F., Soares Pinto, D. d. O., y Adesso, G. (2017). *Lectures on General Quantum Correlations and their Applications*. p. 542.

- Ferraro, A., Aolita, L., Cavalcanti, D., y Cucchietti, F. M. (2010). Almost all quantum states have non-classical correlations. *Phys. Rev. A*, **81**(052318): 1–6.
- Girolami, D., Tufarelli, T., y Adesso, G. (2013). Characterizing nonclassical correlations via local quantum uncertainty. *Physical Review Letters*, **110**(24): 1–5.
- Girolami, D., Souza, A. M., Giovannetti, V., Tufarelli, T., Filgueiras, J. G., Sarthour, R. S., Soares-Pinto, D. O., Oliveira, I. S., y Adesso, G. (2014). Quantum discord determines the interferometric power of quantum states. *Physical Review Letters*, **112**(21).
- Hayes, D. y Engel, G. S. (2011). Extracting the excitonic Hamiltonian of the Fenna-Matthews-Olson complex using three-dimensional third-order electronic spectroscopy. *Biophysical Journal*, **100**(8): 2043–2052.
- Ishizaki, A. y Fleming, G. R. (2009). Theoretical examination of quantum coherence in a photosynthetic system at physiological temperature. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **106**(41): 17255–17260.
- Ishizaki, A. y Fleming, G. R. (2010). Quantum superpositions in photosynthetic light harvesting: delocalization and entanglement. *New Journal of Physics*, **12**(5): 055004.
- Li, Y.-F., Zhou, W., Blankenship, R. E., y Allen, J. P. (1997). Crystal structure of the bacteriochlorophyll a protein from *Chlorobium tepidum*. *Journal of Molecular Biology*, **271**(3): 456–471.
- Luo, S. (2004). Wigner-Yanase skew information vs. quantum Fisher information. *Proceedings of the American Mathematical Society*, **132**(3): 885–890.
- Merali, Z. (2011). Quantum computing: The power of discord. *Nature*, **474**(7349): 24–26.
- Modi, K., Brodutch, A., Cable, H., Paterek, T., y Vedral, V. (2012). The classical-quantum boundary for correlations: Discord and related measures. *Reviews of Modern Physics*, **84**(4).
- Mohseni, M., Rebentrost, P., Lloyd, S., y Aspuru-Guzik, A. (2008). Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer. *Journal of Chemical Physics*, **129**(17).
- Mohseni, M., Omar, Y., Engel, G. S. E., y Plenio, M. B. (2014). *Quantum effects in biology*. Cambridge University Press.
- Nielsen, M. A. y Chuang, I. L. (2010). *Quantum Computation and Quantum Information*. p. 702.
- Olaya-Castro, A., Lee, C. F., Olsen, F. F., y Johnson, N. F. (2008). Efficiency of energy transfer in a light-harvesting system under quantum coherence. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, **78**(8): 1–7.
- Panitchayangkoon, G., Hayes, D., Fransted, K. A., Caram, J. R., Harel, E., Wen, J., Blankenship, R. E., y Engel, G. S. (2010). Long-lived quantum coherence in photosynthetic complexes at physiological temperature. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **107**(29): 12766–12770.
- Panitchayangkoon, G., Voronine, D. V., Abramavicius, D., Caram, J. R., Lewis, N. H. C., Mukamel, S., y Engel, G. S. (2011). Direct evidence of quantum transport in photosynthetic light-harvesting complexes. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **108**(52): 20908–20912.
- Park, J. J., Kim, K. H., Sagawa, T., y Kim, S. W. (2013). Heat engine driven by purely quantum information. *Physical Review Letters*, **111**(23): 1–5.
- Petrucione, F. y Breuer, H.-P. (2002). *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press.

- Pirandola, S. (2014). Quantum discord as a resource for quantum cryptography. *Scientific Reports*, **4**: 1–5.
- Plenio, M. B. P. y Huelga, S. F. (2008). Dephasing-assisted transport: quantum networks and biomolecules. *New J. Phys.*, **10**(113019).
- Rafsanjani, S. M. H. y Agarwal, S. (2012). X-matrices provide a lower bound of concurrence. **1**(4): 1–4.
- Rebentrost, P., Mohseni, M., Kassar, I., Lloyd, S., y Aspuru-Guzik, A. (2009). Environment-assisted quantum transport. *New Journal of Physics*, **11**.
- Sales, J. S., Cardoso, W. B., Avelar, A. T., De Almeida, N. G., Almeida, N. G. D., y De Almeida, N. G. (2015). Dynamics of nonclassical correlations via local quantum uncertainty for atom and field interacting into a lossy cavity QED. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **443**: 399–405.
- Sarovar, M., Ishizaki, A., Fleming, G. R., y Whaley, K. B. (2009). Quantum entanglement in photosynthetic light harvesting complexes. *Nature Physics*, **6**(6): 462–467.
- Schlosshauer, M. (2007). *Decoherence and the quantum-to-classical transition*.
- Scholak, T., De Melo, F., Wellens, T., Mintert, F., y Buchleitner, A. (2011). Efficient and coherent excitation transfer across disordered molecular networks. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, **83**(2): 2–5.
- Skochdopole, N. y Mazziotti, D. A. (2011). Functional subsystems and quantum redundancy in photosynthetic light harvesting. *Journal of Physical Chemistry Letters*, **2**(23): 2989–2993.
- Souza, M.d., P. R. S. A. (2016). Specific Heat Anomalies in Solids Described by a Multilevel Model. *Braz J Phys*, **46**: 206–212.
- Streltsov, A., Adesso, G., y Plenio, M. B. (2016). Quantum Coherence as a Resource. *arXiv*, pp. 1–29.
- Thilagam, A. (2012). Multipartite entanglement in the Fenna-Matthews-Olson (FMO) pigment-protein complex. *Journal of Chemical Physics*, **136**(17).
- Werlang, T., Souza, S., y Fanchini, F. F. (2012). Robustness of quantum discord to sudden death. *Chinese Phys. B*, **21**(040302): 2–5.
- Whaley, K. B., Sarovar, M., y Ishizaki, A. (2011). Quantum entanglement phenomena in photosynthetic light harvesting complexes. *Procedia Chemistry*, **3**(1): 152–164.
- Winter, A. y Yang, D. (2016). Operational Resource Theory of Coherence. *Physical Review Letters*, **116**(12): 1–6.
- Wootters, W. K. (1998). Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Physical Review Letters*, **80**(10): 2245–2248.
- Zhu, J., Kais, S., Aspuru-Guzik, A., Rodrigues, S., Brock, B., y Love, P. J. (2012). Multipartite quantum entanglement evolution in photosynthetic complexes. *Journal of Chemical Physics*, **137**(7).