



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Transporte asistido por ruido: una visión desde la teoría
de la información cuántica

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
Licenciado en Física

PRESENTA:
Pablo Reséndiz Vázquez

DIRECTOR DE TESIS:
Roberto de Jesús León Montiel

Ciudad Universitaria, Ciudad de México
2017





Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno

Reséndiz
Vázquez
Pablo
5585757967
pablolv@ciencias.unam.mx
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Licenciatura en Física
3-10304074

2. Datos del tutor

Dr.
Roberto de Jesús
León
Montiel

3. Datos del Director del jurado

Dr.
Jorge Gustavo
Hirsch
Ganievich

4. Datos del Vocal

Dr.
Saúl Noé
Ramos
Sánchez

5. Datos del Secretario

Dr.
Roberto de Jesús
León
Montiel

6. Datos del suplente 1

Dr.
Fernando
Rojas
Íñiguez

7. Datos del suplente 2

Dr.
Thomas Werner
Stegmann

8. Datos del trabajo

Transporte asistido por ruido: una visión desde la teoría de la información cuántica
101 pp.
2017

Índice general

1. Resumen	2
2. Introducción	5
3. Dinámica de sistemas cuánticos	9
3.1. Sistemas cerrados	9
3.1.1. Operador de densidad	10
3.2. Sistemas abiertos	16
3.2.1. Deducción de la ecuación maestra de Lindblad	20
3.2.2. Discusión y marco de validez de las suposiciones	23
4. Visualización gráfica de un qutrit	25
4.1. Sistemas cuánticos de dos niveles	25
4.1.1. Operadores de Pauli	26
4.1.2. Visualización de qubits en la esfera de Bloch	28
4.2. Estado general de dos qubits simétricos como un qutrit	30
4.3. Geometría de la representación	34
4.4. Interpretación de la geometría	36
5. Correlaciones cuánticas y su medición	39
5.1. Sistemas cuánticos bipartitos	39
5.2. Caracterización de correlaciones cuánticas	41
5.2.1. Cuantificación del entrelazamiento	42
5.3. Discordia cuántica	43
5.4. Incertidumbre cuántica local	45
5.4.1. Restricción a sistemas $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^d$	48
6. Transporte eficiente de energía en un qutrit	52

6.1. ENAQT	54
6.1.1. ENAQT en un qutrit	55
6.2. Visualización del qutrit asociado a la red cuántica de tres sitios	61
6.3. Incertidumbre cuántica local en la red de tres sitios	66
7. Conclusiones	75
Bibliografía	78
A. Descripción del sistema mediante el formalismo de estados vectoriales	84
B. Esquemas de representación en mecánica cuántica	88
C. Teorema de entrelazamiento de eigenvalores	92
D. Entropía de Shannon e información clásica	95
E. Entropía de Von Neumann e información cuántica	99

Capítulo 1

Resumen

La evolución de las tecnologías energéticas ha impulsado el estudio de sistemas con una mayor eficiencia en el transporte de la energía. Sin embargo, existen limitaciones que no son controlables, ya que son inherentes al sistema; una de éstas es el ruido generado por el ambiente que rodea al sistema que transporta la excitación. Debido a que el inhibe la coherencia del sistema, y por lo tanto los efectos cuánticos en el transporte, se le considera como una propiedad que perjudica la eficiencia. Este tipo de limitación, sin embargo, se encuentra en diversos sistemas, en particular en donde se llevan a cabo fenómenos fotosintéticos en forma de humedad o calor. Sorprendentemente en estos sistemas se lleva a cabo el transporte energético con una eficiencia considerablemente alta (más del 94% [1]) que sería ideal en sistemas artificiales. Por esta razón, en años recientes el transporte de excitones asistido por ruido ha atraído una gran atención [1–7] en diferentes ramas de la ciencia, desde celdas solares [8], hasta información cuántica [9].

El transporte asistido por ruido ha sido estudiado ampliamente [1, 2, 4, 10] y ha podido explicarse mediante la supresión de la localización coherente para ciertos valores de ruido. En sistemas construidos artificialmente es de interés poder obtener una caracterización del sistema en el régimen de alta eficiencia a partir de la estructura de su matriz de densidad. En este trabajo se obtiene una representación geométrica asociada al estado que nos permite determinar esta caracterización unívocamente para el complejo fotosintético [4] más simple: una red cuántica completamente conectada compuesta por tres estados, un qutrit. Esta visualización geométrica trata de recuperar la riqueza física de la esfera de Bloch, pero para un sistema de mayor dimensión. En particular se identifican las características particulares del estado final del sistema para diferentes valores de intensidad de ruido, tanto para la parte del sistema que modela a la red cuántica, como para la que muestra la colecta de la excitación después del transporte por la red.

Dada la importancia de los procesos de transporte en fenómenos de información cuántica, se estudia el efecto del ruido en la dinámica de las correlaciones cuánticas en la red mediante la cuantificación de un tipo especial de correlaciones llamado *discordia cuántica*, la cual considera el total de correlaciones no clásicas; las cuales pueden ser útiles como un recurso cuántico de información.

A pesar de que el estudio del transporte asistido por ruido ha permitido entender considerablemente bien el fenómeno, hasta el momento no existe un análisis sistemático en términos de recursos de información cuántica ni de una representación geométrica que permita caracterizar el régimen de alta eficiencia. En esta tesis, presentamos el primer estudio del transporte asistido por ruido desde el punto de vista de la teoría de la información cuántica. Aún cuando el sistema estudiado corresponde al caso más sencillo de una red cuántica (un qutrit), las herramientas desarrolladas en este trabajo constituyen, en principio, una base sólida sobre la cual podremos estudiar sistemas cuánticos más complejos.

Capítulo 2

Introducción

La luz solar es la fuente de energía renovable más importante de la actualidad, pues representa la única fuente inagotable de energía para el ser humano. El uso de dispositivos que buscan la recolección y almacenamiento de este tipo de energía ha incrementado considerablemente en los últimos años [11]. Esto ha repercutido en diferentes sectores de la sociedad mundial, principalmente en el sector energético, al decrementar el costo de la electricidad [12] *per cápita* en diversos países [13], además de incrementar la cantidad de energía almacenada en una menor cantidad de tiempo debido a la cantidad de energía solar que irradia a la Tierra cada día (alrededor de 84TW [14]) y de disminuir el impacto ecológico que tiene la generación de esta cantidad de energía eléctrica por medio de energías no renovables. Es por lo tanto de gran importancia social y económica el estudio de celdas solares eficientes y de bajo costo. Una de las propuestas de posibles dispositivos que disminuyen costos y aumentan la eficiencia está basada en uno de los fenómenos mas fundamentales en el estudio de la existencia de la vida en la Tierra: la fotosíntesis. Proceso que si bien no se encuentra totalmente explicado, últimamente se ha propuesto que puede ser entendido mediante procesos cuánticos [7], lo cual se había descartado rotundamente al sustentar que la decoherencia de cualquier sistema microscópico impide que los efectos cuánticos sean observados a escalas macroscópicas. Esta decoherencia es esencialmente causada esencialmente por las condiciones externas del sistema como la temperatura, humedad, presión atmosférica, etc. Sin embargo, recientemente se ha determinado que el ruido generado por estas condiciones no solamente no perjudica al el transporte de la excitación, sino que, para un cierto rango de intensidad de ruido, lo hace mas eficiente.

En la actualidad el transporte eficiente de energía asistido por ruido es considerado un tema de frontera en la física, ya que permite ampliar las barreras de la teoría cuántica al asociarle a efectos cuánticos la explicación de distintos fenómenos macroscópicos. De hecho, el diseño y fabricación de materiales con propiedades de transporte diferentes a las usuales, ha generado gran interés a la comunidad científica como lo justifica el reciente premio Nobel de Física otorgado “ por los descubrimientos teóricos de las transiciones de fase topológica y fases topológicas de la materia ”. Es entonces de gran interés estudiar este tipo de sistemas, tanto en la parte estructural como en la ingeniería de ambientes, pues este tipo de materiales se considera la base del desarrollo de nuevos dispositivos de captación y almacenamiento de energía solar, sensado químico y biológico e incluso para el diseño de novedosos circuitos ópticos in-

tegrados capaces de procesar y transmitir información más rápidamente que su contraparte electrónica.

La interacción de radiación con moléculas, genera que sus subsistemas pasen de un estado basal a su estado excitado. La energía capturada en este proceso se puede mover a través de la molécula como un excitón (par electrón o cualquier partícula cargada y un hueco), mediante interacciones electrostáticas dipolares que al interactuar con las fluctuaciones inducidas por el ambiente, comienzan a oscilar y por lo tanto se comportan como antenas que transmiten la excitación por el complejo. Este tipo de interacciones se presentan en complejos fotosintéticos y debido a su composición orgánica este tipo de sistemas se ven afectados por el desorden natural del organismo; lo cual da lugar a un fenómeno conocido como Localización de Anderson [15] generando que la excitación no pueda escapar de un sitio o un par de ellos. Es en este punto de la descripción en donde el ruido del ambiente entra en juego: a pesar de ser considerado como perjudicial en el transporte de la energía, en los últimos años se ha encontrado que puede ser benéfico, en un rango de intensidades, causando que la localización sea suprimida al romper la coherencia del sistema y permitir a la excitación que viaje más libremente por la red y por lo tanto incrementando la eficiencia [1].

Esta técnica ha sido implementada en la fotovoltaica con el objetivo de crear dispositivos fotosintéticos artificiales que, además de aumentar la eficiencia casi al 100 %, disminuyen los costos de fabricación al tratarse de compuestos orgánicos, así como promover el uso de recursos naturales de manera no destructiva.

El transporte asistido por ruido es un fenómeno bastante estudiado, pero en la mayoría de los estudios el efecto sólo se presenta como una mejoría en la eficiencia como función de la intensidad del ruido introducido, sin embargo hasta ahora no se ha realizado un análisis estructurado en términos de recursos cuánticos de información como correlaciones cuánticas, más aún, debido a que la coherencia del sistema es inhibida en el régimen de transporte eficiente, es necesario destacar la importancia de un estudio desde el punto de vista de recursos de información que contemplen correlaciones más allá del entrelazamiento, como lo es la *discordia cuántica*, la cual es una medida que se ha introducido recientemente en trabajos de teoría de información cuántica y cuya existencia en un sistema se asocia precisamente con procesos de optimización de alguna propiedad del mismo y que incluso se ha podido relacionar con cantidades medibles en diversos experimentos [16–18].

En el diseño y fabricación de este tipo de sistemas es de gran importancia contar con procesos de control y medición que permitan determinar el estado de transporte eficiente de manera sistemática. Por esta razón, es preciso desarrollar una herramienta simple de visualización gráfica que permita reconocer fácilmente el estado cuántico del sistema que caracteriza la máxima eficiencia en el transporte. El método presentado en este trabajo ha mostrado cumplir con estas características y ser robusto ante el efecto del ruido, logrando contener toda la información fenomenológica del transporte asistido. El proceso continuo mediante el cual se lleva a cabo la formación del estado que caracteriza al transporte asistido, también ha podido capturarse totalmente en esta representación gráfica, la cual además ha

permitido también explicar los resultados de la medición de la discordia en el proceso, concordando con las hipótesis fenomenológicas con las que diversos autores explican el fenómeno.

La estructura del trabajo está organizada del siguiente modo:

En el primer capítulo se revisan algunos conceptos básicos necesarios en el planteamiento del problema, tales como matriz de densidad de mezclas estadísticas en general y sus propiedades. Posteriormente se deduce la herramienta más importante del estudio del fenómeno: la ecuación maestra de Lindblad. Se discuten las aproximaciones consideradas en este régimen y se acotan al problema particular.

A continuación, en el capítulo 2 se presenta la visualización geométrica del qutrit asociado a la red, así como una revisión de la esfera de Bloch con el objetivo de completar el estudio de la representación. Además se discute la interpretación de la representación y se muestran algunos casos un tanto específicos, pero que capturan la esencia de esta visualización y serán de utilidad para discutir los resultados. En el siguiente capítulo se introduce la discordia cuántica y se define el cuantificador que será utilizado en este trabajo, tanto en un sistema cuántico general, como para sistemas bipartitos compuestos de un qubit y un qudit. Una parte relevante en la estructura de este capítulo se encuentra en los apéndices D y E, en los cuales se deducen cantidades importantes en la teoría de la información como la entropía de Shannon y la información mutua entre dos sistemas.

Los resultados y su análisis son presentados en el capítulo 4, así como el planteamiento general del problema a tratar, el cuál está fundamentado en artículos de investigación del asesor del proyecto y en estudios previos de este tipo de sistemas.

Finalmente en el capítulo 5, se presentan conclusiones pertinentes a los resultados presentados, así como un breve análisis del posible trabajo a futuro por el que esta investigación puede continuar.

Capítulo 3

Dinámica de sistemas cuánticos

3.1. Sistemas cerrados

El estudio de un sistema físico está determinado por mediciones de cantidades observables. El sistema y los elementos que lo componen se estudian a través de la mecánica cuántica si las mediciones afectan el estado del sistema [19]. El conocimiento de cantidades observables nos permite predecir resultados de varios experimentos y estudiar cómo éstos evolucionan en el tiempo. En aplicaciones físicas reales es común encontrarse con que el sistema en consideración se encuentra bajo la influencia de fuerzas externas como un campo magnético o eléctrico, por ejemplo. En tales casos, veremos que aún si la dinámica del sistema está formulada en términos de un Hamiltoniano dependiente del tiempo, $H(t)$, el sistema seguirá siendo *cerrado*, y si el Hamiltoniano es independiente del tiempo diremos que el sistema está *aislado*, como se muestra en la figura 3.1.

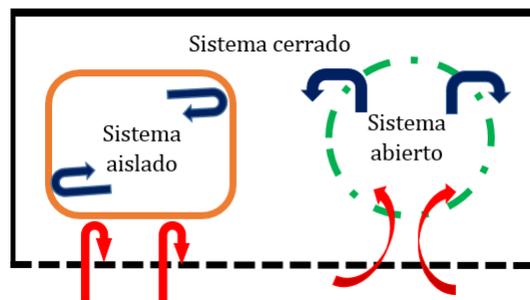


Figura 3.1: Diagrama de los tipos de sistemas. Un sistema cerrado es en el que nada puede salir de él, pero que puede estar sometido a fuerzas externas como campos electromagnéticos que oscilan en el tiempo, por ejemplo. Un sistema aislado es en el que no existe ningún tipo de interacción entre él y su alrededor,, por lo tanto su dinámica se puede describir mediante un análisis Hamiltoniano. Finalmente, un sistema abierto es aquél que puede intercambiar todo tipo de información (bidireccionalmente) con sus alrededores. Sin embargo, la dinámica del sistema abierto junto con su ambiente se describe mediante operadores Hermitianos y unitarios, como veremos después.

Cuando en mecánica clásica trabajamos con sistemas de pocas partículas, sus posiciones y momentos están definidos completamente a cualquier tiempo. Sin embargo, al trabajar en sistemas compuestos de muchas partículas se recurre a los promedios de los momentos y las posiciones de todas las partículas para definir cualquiera de estas dos cantidades en el sistema completo, y en estos casos, los métodos de la mecánica estadística deben ser utilizados. Estas mismas consideraciones se pueden aplicar a sistemas cuánticos de muchas partículas o estados, sin embargo aquí debemos considerar la imposibilidad de obtener toda la información del sistema con una incertidumbre arbitraria, aún en el caso de sistemas de pocas partículas.

Al trabajar con observables compatibles, la máxima información posible que podemos obtener al medirlos en un estado determinado, son sus valores propios. Después de haber realizado las mediciones de todos estos observables simultáneamente, podemos estar seguros de que el sistema se encuentra en el estado determinado por sus eigenvectores. De hecho, si repetimos la medición inmediatamente, podemos predecir que el sistema se encontrará en el mismo estado otra vez. En la práctica sin embargo, una preparación del sistema como esta es difícilmente lograda [20], pues normalmente los operadores no son todos compatibles y el estado del sistema no se encuentra completamente determinado. Existe un grado de ignorancia determinado por probabilidades (clásicas) de que se encuentre en distintos estados. Por lo tanto es necesario utilizar una descripción estadística del mismo modo que lo hacemos en mecánica clásica de muchos cuerpos.

Es el formalismo del operador de densidad el que nos permitirá tener esta descripción que considera tanto *ensembles* estadísticos como estados puros y por lo tanto será útil para definir y estudiar cualquier posible estado de un sistema.

El objetivo de esta sección es hacer un resumen del estudio de este tipo de sistemas en el formalismo de estados vectoriales y mencionar algunas de sus características para poder encontrar sus análogos en el formalismo de la matriz de densidad, pues éste es necesario para estudiar sistemas cuánticos abiertos.

3.1.1. Operador de densidad

Mezcla estadística de estados

El estudio de sistemas en los que el estado no se puede obtener de manera determinista ha sido abordado satisfactoriamente por la física estadística a través del concepto de probabilidad. De este modo, un sistema cuántico puede encontrarse con probabilidad p_1 en el estado $|\alpha_1\rangle$, en el estado $|\alpha_2\rangle$ con probabilidad p_2 , etc. Tal que

$$p_1 + p_2 + \dots = \sum_k p_k = 1, \quad (3.1)$$

en este caso se dice que el sistema se encuentra en una *mezcla estadística de estados* con probabilidades clásicas p_1, p_2, \dots . Esta descripción cumple con las siguientes características [21]

- Las probabilidades p_k , como en el caso clásico, expresan qué tan probable es que el sistema se encuentre en el k -ésimo estado. El sistema no se encuentra en una superposición de estados como

en el caso cuántico. De hecho, si por ejemplo, todas las probabilidades p_k son cero excepto una de ellas, entonces al medir el sistema en ese estado se encontrará siempre el mismo resultado.

- Los estados $\{|\alpha_k\rangle\}$ no son necesariamente ortogonales, pero deben ser normalizados para satisfacer la conservación de probabilidad. Por lo tanto, en el estudio de sistemas cuánticos descritos mediante el operador de densidad debemos tomar en cuenta distintas probabilidades:
 1. la probabilidad que el sistema tiene de encontrarse en los estados que conforman la mezcla estadística,
 2. la amplitud de probabilidad previamente estudiada en el caso cuántico, en la que sí podemos referirnos a una superposición de estados.
- Al no existir superposición, en una mezcla estadística no existe interferencia entre los diferentes estados.
- En una mezcla estadística de estados no podemos determinar un estado promedio en el que el sistema se encuentre, pero podemos definir un operador promedio que nos permita estudiar al sistema: el operador de densidad.

Estados puros

Teniendo claras las bases del formalismo, comencemos con el caso más simple en el que el estado del sistema está totalmente determinado, es decir, sólo una de las probabilidades p_k es distinta de cero. Este tipo de estados recibe el nombre de *estado puro*.

En este caso, conocemos la manera de obtener la información más importante del sistema: el valor esperado de cualquier operador, la normalización de amplitudes de probabilidad, o la evolución temporal del estado del sistema. Debemos por lo tanto, obtener la misma información a través de las propiedades del operador de densidad.

Posteriormente mostraremos que las propiedades del operador de densidad obtenidas para este caso son válidas para el caso general. En el apéndice A se realiza la descripción de la evolución temporal de un sistema general desde el formalismo de estados vectoriales. A continuación se describirá el formalismo del operador de densidad, posteriormente se encontrarán sus características y finalmente se mostrará que la ecuación de evolución temporal conduce a los mismos resultados que para la descripción en vectores, sin embargo para el desarrollo de sistemas generales es más útil el operador de densidad ya que permite obtener estados más generales como mezclas estadísticas, que no tienen un análogo en el caso vectorial.

Sea $\{|u_i\rangle\}$ una base ortonormal de estados, consideremos que el sistema al tiempo t se encuentra en el estado

$$|\alpha(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |u_n\rangle. \quad (3.2)$$

$|\alpha(t)\rangle$ está normalizado, por tanto, los coeficientes $c_n(t)$ satisfacen la condición:

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = 1. \quad (3.3)$$

Valor esperado y evolución temporal

Sea \mathbf{A} un observable, con elementos de matriz

$$\langle u_n | A | u_p \rangle = A_{np}. \quad (3.4)$$

El valor esperado de \mathbf{A} al tiempo t es

$$\langle A(t) \rangle = \langle \alpha(t) | A | \alpha(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np}. \quad (3.5)$$

Sabemos también que la evolución temporal del estado está determinada por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha(t)\rangle = H(t) |\alpha(t)\rangle. \quad (3.6)$$

A partir de ahora, por fines prácticos consideraremos $\hbar = 1$.

Descripción mediante el operador de densidad

Al analizar la ecuación (3.5), observamos que los coeficientes $c_n(t)$ se encuentran en el valor esperado de un operador en términos de productos del tipo $c_n^*(t)c_p(t)$. Estos números, que en general son complejos, son precisamente los elementos de matriz del operador de densidad. Definimos entonces el *operador de densidad* para el caso de un estado puro $|\alpha\rangle$, al tiempo t como

$$\rho(t) \equiv |\alpha(t)\rangle \langle \alpha(t)|. \quad (3.7)$$

Al hacerlo actuar en la base ordenada ortonormal $\{|u\rangle_i\}$, encontramos los elementos de la *matriz de densidad*

$$\rho_{pn}(t) = \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle = \langle u_p | \alpha(t) \rangle \langle \alpha(t) | u_n \rangle = c_n^*(t) c_p(t). \quad (3.8)$$

La conservación de probabilidad implica que

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = 1 = \sum_n \rho_{nn} = \text{tr}(\rho(t)), \quad (3.9)$$

esta propiedad en la descripción mediante el operador de densidad se expresa como la unitariedad de la traza de la matriz de densidad, que claramente es independiente de la base ordenada.

A partir de las ecuaciones (3.4) y (3.5) el valor esperado de un observable \mathbf{A} en términos del operador de densidad es

$$\langle A(t) \rangle = \sum_{n,p} \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle \langle u_n | A | u_p \rangle = \sum_p \langle u_p | \rho(t) A | u_p \rangle = \text{tr}\{\rho(t) A\}. \quad (3.10)$$

Finalmente, utilizando la ecuación (3.6) la evolución temporal del operador de densidad es

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) &= \left(\frac{d}{dt} |\alpha(t)\rangle \right) \langle \alpha(t)| + |\alpha(t)\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \alpha(t)| \right) = \\ &= -iH(t) |\alpha\rangle \langle \alpha| + i |\alpha\rangle \langle \alpha| H(t) = \end{aligned}$$

$$= -i[H(t), \rho(t)]. \quad (3.11)$$

Resumiendo, para cualquier tipo de estado tenemos que en términos del operador de densidad la conservación de probabilidad se escribe

$$\text{tr}(\rho(t)) = 1, \quad (3.12)$$

el valor esperado del observable A es

$$\langle A \rangle (t) = \text{tr}[\rho(t)A], \quad (3.13)$$

y la evolución temporal obedece la ecuación

$$i \frac{d}{dt} \rho(t) = [H(t), \rho(t)]. \quad (3.14)$$

Finalmente, a partir de la definición del operador (3.7) se obtienen las siguientes igualdades

$$\rho^\dagger(t) = \rho(t) \quad (3.15)$$

como en el caso del estado puro ρ es un proyector, tenemos que

$$\rho^2(t) = \rho(t) \quad (3.16)$$

por lo tanto

$$\text{tr}(\rho^2(t)) = 1. \quad (3.17)$$

Las dos últimas ecuaciones son válidas sólo en el caso puro.

Para el caso general en el que al menos dos de las probabilidades p_k son distintas de cero, el operador de densidad es

$$\rho = \sum_k p_k \rho_k, \quad (3.18)$$

donde $\rho_k = |k\rangle \langle k|$.

Propiedades del operador de densidad para el caso de una mezcla estadística de estados

La linealidad de las ecuaciones obtenidas en el caso puro nos permite generalizarlas al caso de una mezcla. Tomando en cuenta la ecuación (3.12) la traza de ρ es

$$\text{tr}(\rho) = \sum_k p_k \text{tr}(\rho_k) = \sum_k p_k = 1, \quad (3.19)$$

análogamente para el caso del valor esperado de cualquier observable y de la evolución temporal de la mezcla.

Sin embargo las ecuaciones (3.15) y (3.17) no son válidas en el caso general, pues ρ ya no es un proyector, por tanto $\rho^2 \neq \rho$ y dado que

$$\sum_n p_n^2 \leq \left(\sum_n p_n \right)^2 = 1$$

obtenemos que en general

$$\text{tr} \rho^2 \leq 1. \quad (3.20)$$

Lo cual además define el grado de mezcla del estado [22].

Discutamos ahora el significado físico de los elementos de matriz ρ_{np} en la base ordenada $\{|u\rangle_i\}$.

Consideremos un elemento de la diagonal, ρ_{nn} , que según la definición está dado por

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k [\rho_k]_{nn} = \sum_k p_k |c_n^{(k)}|^2. \quad (3.21)$$

La interpretación del sumando $|c_n^{(k)}|^2$ se obtiene de observar que si el estado del sistema es $|\alpha_k\rangle$, entonces $|c_n^{(k)}|^2$ es la probabilidad de que al realizar la medición encontremos al sistema en el estado $|u_n\rangle$. Es decir, los elementos en la diagonal de ρ representan la probabilidad promedio de encontrar al sistema en el estado $|u_n\rangle$, es por esto que ρ_{nn} es llamado la *población del estado* $|u_n\rangle$ [21].

Los elementos fuera de la diagonal, ρ_{np} , según la definición están determinados por

$$\rho_{np} = \sum_k p_k c_n^{(k)} c_p^{*(k)}. \quad (3.22)$$

El producto $c_n^{(k)} c_p^{*(k)}$ expresa la interferencia entre los estados $|u_n\rangle$ y $|u_p\rangle$. Cuando este número (que en general es complejo) es distinto de cero, se dice que el estado $|\alpha_k\rangle$ es una *superposición coherente lineal* de estos estados. Cabe mencionar que ρ_{np} puede ser cero a pesar de que ninguno de los productos $c_n^{(k)} c_p^{*(k)}$ lo sea. Si esto pasa significa que todas las interferencias de $|u_n\rangle$ y $|u_p\rangle$ se han cancelado, y si es distinto de cero significa que existe *coherencia* entre estos estados. Claramente ρ sólo puede tener coherencias entre estados cuyas poblaciones sean distintas de cero. Por lo tanto, los términos fuera de la diagonal de la matriz de densidad reciben el nombre de *coherencias*. Y los posibles valores de las coherencias y poblaciones dependen de la base en la que se exprese la matriz de densidad, por lo que al resolver un problema físico, es importante usar una sola base a lo largo de todo el análisis mediante el operador de densidad.

Supongamos que al tiempo inicial t_0 , el estado del sistema está caracterizado por la matriz de densidad

$$\rho(t_0) = \sum_n \omega_n |\alpha_n(t_0)\rangle \langle \alpha_n(t_0)|, \quad (3.23)$$

donde ω_n es el peso estadístico que denota la probabilidad (clásica) de que el sistema se encuentre en el estado $|\alpha_n(t_0)\rangle \langle \alpha_n(t_0)|$. Dado que cada uno de estos estados $|\alpha_n(t_0)\rangle$ evoluciona de acuerdo a la ecuación (A.2), el estado del sistema al tiempo t está dado por

$$\rho(t) = \sum_n \omega_n \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha_n(t_0)\rangle \langle \alpha_n(t_0)| \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) = \mathcal{U}(t, t_0) \rho(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0). \quad (3.24)$$

Al derivar la ecuación (3.24), obtenemos una expresión análoga a la evolución temporal del caso puro, (3.11), llamada ecuación de Liouville-von Neumann [20]. Y puede ser escrita como

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \mathcal{L}(t)\rho(t), \quad (3.25)$$

donde \mathcal{L} es el operador de Liouville, el cual está definido actuando sobre una matriz de densidad $\rho(t)$ como

$$\mathcal{L}(\rho(t)) \equiv -i[H(t), \rho(t)]. \quad (3.26)$$

Equivalentemente a la ecuación (3.11), la ecuación de Liouville (3.26), conduce a la expresión

$$\rho(t) = T_{\leftarrow} \exp \left[\int_{t_0}^t \mathcal{L}(s) ds \right] \rho(t_0), \quad (3.27)$$

donde T_{\leftarrow} es el operador cronológico de orden temporal, el cual ordena el producto de operadores dependientes del tiempo tal que sus argumentos temporales aumentan de derecha a izquierda como lo indica la flecha.

Si el Hamiltoniano es independiente del tiempo, entonces también lo es el operador de Liouville y por lo tanto en ese caso tenemos que la evolución del estado del sistema está dada por

$$\rho(t) = \exp[\mathcal{L}(t - t_0)]\rho(t_0). \quad (3.28)$$

Para concluir con el estudio de sistemas cerrados, a continuación describiremos su dinámica en el marco de interacción según [20], el cual nos será útil también para el estudio de sistemas abiertos.

Los esquemas de Heisenberg y Schrödinger son marcos de referencia que a pesar de capturar los mismos resultados físicos, describen el sistema de manera diferente. Hasta ahora hemos trabajado en el marco de referencia de Schrödinger, en el cual sólo los estados evolucionan en el tiempo. En contraste con el marco de Heisenberg, en el que son los operadores los que evolucionan. Una breve descripción de sus diferencias y semejanzas es presentada en el B.

Estos dos esquemas son los casos límite de otro más general llamado marco de interacción; en éste el Hamiltoniano del sistema se escribe en dos partes

$$H(t) = H_0 + H_I(t), \quad (3.29)$$

donde H_0 es, en general, la energía total del sistema compuesto, es la suma de sus energías cuando estos no interactúan, que puede ser dependiente del tiempo, pero que en este trabajo asumiremos que no lo es. Por otro lado, $H_I(t)$ es el Hamiltoniano que describe la interacción entre los subsistemas. El operador de evolución temporal del sistema en el marco de interacción es también $\mathcal{U}(t, t_0)$.

De acuerdo a la ecuación (3.13), el valor esperado de un observable en el marco de Schrödinger $\mathbf{A}(\mathbf{t})$ está dado por

$$\langle A(t) \rangle = \text{tr} \{ A(t) \mathcal{U}(t, t_0) \rho(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \}, \quad (3.30)$$

donde $\rho(t_0)$ es el estado del sistema al tiempo inicial t_0 .

Ahora definimos operadores de evolución temporal auxiliares

$$\mathcal{U}_0(t, t_0) = \exp[-iH_0(t - t_0)] \quad (3.31)$$

y

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathcal{U}(t, t_0). \quad (3.32)$$

Entonces el valor esperado (3.30), puede ser escrito como

$$\langle A(t) \rangle = \text{tr} \{ \mathcal{U}_0^\dagger(t, t_0) A(t) \mathcal{U}_0(t, t_0) \mathcal{U}_I(t) \rho(t_0) \mathcal{U}_I^\dagger(t, t_0) \},$$

si definimos el operador en el marco de interacción como

$$A_I(t) \equiv \mathcal{U}_0(t, t_0)^\dagger A(t) \mathcal{U}_0(t, t_0) \quad (3.33)$$

y $\rho_I(t)$ la matriz de densidad en el marco de interacción tenemos que

$$\rho_I(t) = \mathcal{U}_I(t, t_0) \rho(t_0) \mathcal{U}_I^\dagger(t, t_0). \quad (3.34)$$

Derivando la ecuación (3.32) respecto al tiempo obtenemos la ecuación de evolución temporal de $\mathcal{U}_I(t, t_0)$,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_I(t, t_0) = \mathcal{H}_I(t) \mathcal{U}_I(t, t_0) \quad (3.35)$$

sujeta a la condición inicial $\mathcal{U}_I(t_0, t_0) = \mathcal{I}$. Donde hemos denotado el Hamiltoniano en el marco de interacción como

$$\mathcal{H}_I(t) = \mathcal{U}_0^\dagger(t, t_0) H_I(t) \mathcal{U}_0(t, t_0). \quad (3.36)$$

Derivando la ecuación (3.34) obtenemos la ecuación de Von-Neumann en el marco de interacción

$$\frac{d}{dt} \rho_I(t) = i [\rho_I(t), H_I(t)]. \quad (3.37)$$

Habiendo descrito las ecuaciones fundamentales que describen la dinámica de un sistema cuántico cerrado, desarrollaremos ahora las nociones básicas de un sistema cuántico abierto de acuerdo a [20].

3.2. Sistemas abiertos

Un sistema cuántico abierto, en general está compuesto de dos partes, un sistema \mathcal{S} inmerso en un sistema \mathcal{B} llamado *ambiente*. El sistema total es la suma de ambos $\mathcal{S} + \mathcal{B}$ que normalmente se considera cerrado y por lo tanto sigue la dinámica Hamiltoniana descrita previamente. Como es de esperarse, describiremos la dinámica exclusivamente en el subsistema de interés \mathcal{S} , llamado el sistema reducido, ya que el ambiente puede tener un número infinito de grados de libertad, y si además las frecuencias de los modos forman un continuo, entonces tratamos con un *reservorio*). De hecho, en un problema mas general, podemos tratar con un reservorio que esté en equilibrio térmico, en este caso se llama *baño* o *baño de calor* [20].

Denotemos con $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ el espacio de Hilbert del sistema y $\mathcal{H}_\mathcal{B}$ el espacio de Hilbert del ambiente. Sabemos entonces que el espacio de Hilbert del sistema total $\mathcal{S} + \mathcal{B}$ está dado por $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\mathcal{S} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{B}$, y el Hamiltoniano total del sistema $H(t)$ es de la forma

$$H(t) = H_\mathcal{S} \otimes I_\mathcal{B} + I_\mathcal{S} \otimes H_\mathcal{B} + \hat{H}_I(t), \quad (3.38)$$

donde H_S es el Hamiltoniano del sistema abierto S , H_B es el Hamiltoniano del ambiente y $\hat{H}_I(t)$ es el Hamiltoniano de la interacción entre ambos que puede o no depender del tiempo. Una imagen que ilustra la situación que describimos se encuentra en la figura 3.2. Como se mencionaba anteriormente, es

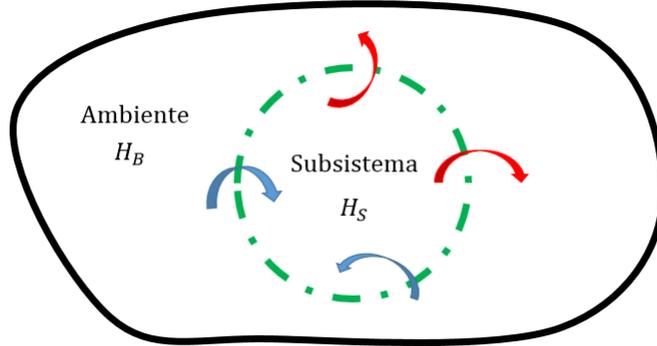


Figura 3.2: Diagrama de un sistema cuántico abierto general.

importante investigar este tipo de sistemas porque en problemas físicos como el que este trabajo trata, un modelo matemático completo del sistema entero sería demasiado complicado. Esto debido a que el ambiente puede ser un baño de calor que consiste de una cantidad infinita de grados de libertad, lo que requeriría la solución del mismo número de ecuaciones diferenciales acopladas. Y aún si la solución es conocida, uno debe de poder determinar cuáles de estos grados son relevantes para la interacción del subsistema, lo cual en general y en el problema tratado en esta tesis, es imposible, pues de hecho los grados de libertad son totalmente desconocidos.

Todos los observables \mathbf{A} que nos interesan actúan únicamente en el subsistema S , por lo que tienen la forma $A \otimes I_B$, donde I_B es la identidad en \mathcal{H}_B .

Debemos poder obtener las cantidades de interés dentro del sistema reducido, por lo que es importante definir la operación que nos permitirá hacerlo, la traza parcial de la matriz de densidad. Definida como la suma en los grados de libertad del sistema que se quiere excluir, es decir

$$\rho_A = tr_B(\rho_{AB}) = \sum_{\beta} \langle \beta | \rho_{AB} | \beta \rangle. \quad (3.39)$$

Donde ρ_{AB} es la matriz de densidad del sistema que involucra a los subsistemas A y B y $\{\beta\}$ es una base ordenada de B . Por lo tanto, el valor esperado de un observable \mathbf{A} que actúa en S , está dado por

$$\langle A \rangle = tr_S\{A\rho_S\}, \quad (3.40)$$

donde

$$\rho_S = tr_B\rho$$

es la matriz de densidad reducida del sistema abierto S . De este modo, la matriz reducida de S al tiempo t estará dada por

$$\rho_S(t) = tr_B\{\mathcal{U}(t, t_0)\rho(t_0)\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)\}, \quad (3.41)$$

donde $\mathcal{U}(t, t_0)$ es el operador de evolución temporal del sistema total. De la misma manera, la ecuación de Liouville de la matriz de densidad reducida se encuentra al tomar la traza parcial de ambos lados de la ecuación del sistema total,

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -itr_B[H(t), \rho(t)]. \quad (3.42)$$

Evolución temporal de la matriz de densidad reducida

Existen maneras mas completas de describir la evolución de un sistema abierto en las que no se hace ningún tipo de suposición de las características del sistema [20], sin embargo nosotros nos restringiremos a la más simple de ellas, que es la ecuación de Lindblad y se describe a continuación.

Los procesos cuánticos de Markov tienen una característica fundamental basada en suposiciones físicas acerca de los tiempos característicos de interacción entre el sistema y el ambiente. Esta propiedad permite la descripción de la evolución temporal mediante un formalismo de grupos con generadores independientes del tiempo. Lo cual nos permitirá deducir una ecuación de evolución temporal del sistema abierto, que si bien no es unitaria (en el sistema reducido), sí captura todas las características del sistema (bajo ciertas suposiciones que mencionaremos mas adelante) y también recupera la dinámica unitaria del sistema total.

Supongamos que a $t = 0$, el estado total del sistema es un producto de estados

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B$$

, donde $\rho_S(0)$ es el estado inicial del subsistema y ρ_B es un estado de referencia del ambiente el cuál no se modifica por la interacción con el sistema.¹ Entonces, la transformación del estado inicial al estado en algún tiempo $t > 0$, $\rho_S(t)$ está dada por algún operador $V(t)$ del siguiente modo

$$\rho_S(0) \rightarrow \rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) = tr_B\{\mathcal{U}(t,0)|\rho_S(0) \otimes \rho_B|\mathcal{U}^\dagger(t,0)\}. \quad (3.43)$$

Siempre y cuando $\rho_B(t)$ esté fijo al tiempo t . En este caso $V(t)$ es un mapeo del espacio de las matrices de densidad del sistema reducido, P_S , en sí mismo. Este tipo de mapeos se llaman mapeos dinámicos [20] y nos permitirán estudiar la evolución del sistema reducido. Ver la figura 3.3.

$$\begin{array}{ccc} \rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B & \xrightarrow{\text{unitary evolution}} & \rho(t) = U(t,0)[\rho_S(0) \otimes \rho_B]U^\dagger(t,0) \\ \text{tr}_B \downarrow & & \downarrow \text{tr}_B \\ \rho_S(0) & \xrightarrow{\text{dynamical map}} & \rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) \end{array}$$

Figura 3.3: Diagrama conmutativo de transformación del estado inicial por un mapeo dinámico y por la evolución unitaria convencional. Imagen tomada de [20].

El teorema de representación para operadores establece que una operación Φ_m es

- Completamente positivo. Es decir que Φ_m mapea operadores positivos en mapeos positivos.
- Lineal. Para cualquier colección de matrices de densidad ρ_i y números no negativos $p_i \geq 0$

$$\Phi_m \left(\sum_i p_i \rho_i \right) = \sum_i p_i \Phi_m(\rho_i).$$

¹Esta es conocida como aproximación de Born y será explicada posteriormente.

- Traza no negativa. $0 \leq \text{tr}\Phi_m(\rho) \leq 1$,

si y sólo si existe un conjunto numerable de operadores Ω_{mk} , tal que la operación puede escribirse como

$$\Phi_m(\rho) = \sum_k \Omega_{mk} \rho \Omega_{mk}^\dagger, \quad (3.44)$$

mientras que

$$\sum_k \Omega_{mk}^\dagger \Omega_{mk} \leq I. \quad (3.45)$$

La demostración de este teorema no esta dentro de los fines del presente trabajo pero puede consultarse en [20].

Si expresamos el operador de densidad reducido del ambiente en su descomposición espectral

$$\rho_B = \sum_\alpha \lambda_\alpha |\phi_\alpha\rangle \langle \phi_\alpha| \quad (3.46)$$

con $\lambda_\alpha \in \mathbb{R}$. Podemos expresar a $V(t)\rho_S$ de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} V(t)\rho_S &= \sum_{\alpha\beta} \lambda_\beta \langle \phi_\alpha | \mathcal{U}(t, 0) \rho_S(0) \otimes \rho_B \mathcal{U}^\dagger(t, 0) | \phi_\alpha \rangle = \\ &= \sum_{\alpha\beta} \sqrt{\lambda_\beta} \sqrt{\lambda_\beta} \langle \phi_\alpha | \mathcal{U}(t, 0) \rho_S(0) \otimes | \phi_\beta \rangle \langle \phi_\beta | \mathcal{U}^\dagger(t, 0) | \phi_\alpha \rangle. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Si definimos el operador $\mathcal{Z}(t)$, cuyos elementos están dados por

$$\mathcal{Z}_{\alpha\beta}(t) = \sqrt{\lambda_\beta} \langle \phi_\alpha | \mathcal{U}(t, 0) | \phi_\beta \rangle, \quad (3.48)$$

entonces,

$$V(t)\rho_S = \sum_{\alpha\beta} \mathcal{Z}_{\alpha\beta}(t) \rho_S \mathcal{Z}_{\alpha\beta}^\dagger(t). \quad (3.49)$$

De la ecuación (3.49), vemos $V(t)$ cumple la condición del teorema de representación. Además, los operadores satisfacen

$$\sum_{\alpha\beta} \mathcal{Z}_{\alpha\beta}^\dagger(t) \mathcal{Z}_{\alpha\beta}(t) = I_S,$$

de donde podemos deducir que

$$\text{tr}_S\{V(t)\rho_S\} = \text{tr}_S\rho_S = 1. \quad (3.50)$$

Por lo tanto, $V(t)$ es una operación completamente positiva, de traza preservada y lineal.

Ahora bien, si se cumplen las condiciones anteriores, decimos que el sistema es un *semigrupo dinámico*. Si además la escala de tiempo característico en el cual la función de correlación del reservorio decae es mucho más pequeña que la escala de tiempo característico de la evolución del sistema, se justifica entonces ignorar efectos de memoria del sistema reducido, es decir, que toda la dinámica al tiempo t , depende de operadores y estados en el mismo tiempo t . Posteriormente discutiremos más a fondo esta

aproximación llamada *aproximación de Markov*, la cual, en términos de operadores se expresa como la propiedad de semigrupo

$$V(t_1 + t_2) = V(t_1)V(t_2). \quad (3.51)$$

Dado un semigrupo dinámico existe un mapeo lineal \mathcal{L} que funciona como generador del semigrupo, lo cual nos permite expresar el operador $V(t)$ en forma exponencial,

$$V(t) = e^{\mathcal{L}t}. \quad (3.52)$$

Esta representación nos conduce a una ecuación diferencial de primer orden

$$\rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) = e^{\mathcal{L}t}\rho_S, \quad (3.53)$$

de donde obtenemos que

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) \quad (3.54)$$

(3.54) es conocida como la ecuación maestra de Markov.

3.2.1. Deducción de la ecuación maestra de Lindblad

A continuación, vamos a construir la forma más general del operador \mathcal{L} . Dado que en el problema planteado en esta tesis consideramos un sistema finito, deduciremos la ecuación maestra de tipo Lindblad para un sistema con espacio de Hilbert de dimensión N . Dado que la matriz de densidad de tal sistema tiene dimensión N^2 , el espacio de Liouville al que pertenece el operador \mathcal{L} tiene dimensión N^2 .

Sea $\{F_k | k = 1, \dots, N^2\}$ una base completa de operadores ortonormales tales que

$$(F_i, F_j) = \text{tr}_S\{F_i^\dagger F_j\} = \delta_{ij}. \quad (3.55)$$

Por fines prácticos consideremos un elemento de la base arbitrariamente, que sea proporcional a la identidad, $F_{N^2} = \frac{1}{\sqrt{N}}I_S$, de modo que los otros $N^2 - 1$ operadores sean de traza nula. Expresando los operadores $\mathcal{Z}(t)$ en términos de esta base tenemos

$$\mathcal{Z}(t) = \sum_{i=1}^{N^2} F_i(F_i, \mathcal{Z}(t)). \quad (3.56)$$

De modo tal que la acción del mapeo dinámico $V(t)$ se puede escribir como

$$V(t)\rho_S = \sum_{i=1}^{N^2} c_{ij}(t)F_i\rho_S F_j^\dagger, \quad (3.57)$$

donde

$$c_{ij}(t) \equiv (F_i, \mathcal{Z}(t))(F_j, \mathcal{Z}(t))^*. \quad (3.58)$$

Claramente la matriz de coeficientes c es una matriz hermitiana pues

$$(c_{ij}^*)^T = ((F_i, \mathcal{Z}(t))^*(F_j, \mathcal{Z}(t)))^T \quad (3.59)$$

$$= (F_j, \mathcal{Z}(t))(F_i, \mathcal{Z}(t))^*{}^T \quad (3.60)$$

$$= (c_{ji})^T = c_{ij}. \quad (3.61)$$

Además de ser positiva, pues para cualquier vector N^2 -dimensional tal que $\sum_{ij} v_i^* v_j = \sum_{ij} \delta_{ij}$,

$$\sum_{ij} c_{ij} v_i^* v_j = \sum_i (v_i F_i, \mathcal{Z}(t))(v_i^* F_i, \mathcal{Z}(t))^* \quad (3.62)$$

$$= \left| \sum_i (v_i F_i, \mathcal{Z}(t)) \right|^2 \geq 0. \quad (3.63)$$

Utilizando la definición (3.52), y la expansión en series de la exponencial a primer orden,

$$\mathcal{L}\rho_S = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{V(t)\rho_S - \rho_S}{t}$$

Al utilizar la ecuación (3.57) y repartiendo los sumandos en $i = j = N^2$, $i = N^2$ y $j = N^2$ tenemos que

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{V(t)\rho_S - \rho_S}{t} &= \lim_{t \rightarrow 0} \left[\sum_{i,j=1}^{N^2} c_{ij}(t) F_i \rho_S F_j^\dagger - \rho_S \right] \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \left[\frac{c_{N^2 N^2}(t) - N}{Nt} \rho_S + \left(\sum_{i=1}^{N^2-1} \frac{c_{i N^2}(t)}{t} F_i \rho_S \frac{I_S^\dagger}{\sqrt{N}} + \sum_{j=1}^{N^2-1} \frac{c_{N^2 j}(t)}{t} \frac{I_S^\dagger}{\sqrt{N}} \rho_S F_j^\dagger \right) + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} \frac{c_{ij}(t)}{t} F_i \rho_S F_j^\dagger \right], \end{aligned}$$

notamos que el segundo sumando tiene la misma estructura salvo el orden de multiplicación de los operadores, por lo que podemos homogeneizar el índice de la suma y obtener

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\rho_S &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{V(t)\rho_S - \rho_S}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \left[\sum_{i,j=1}^{N^2} c_{ij}(t) F_i \rho_S F_j^\dagger - \rho_S \right] \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \left[\frac{c_{N^2 N^2}(t) - N}{Nt} \rho_S + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} \left(\frac{c_{i N^2}(t)}{t} F_i \rho_S + \frac{c_{N^2 i}(t)}{t} \rho_S F_i^\dagger \right) + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} \frac{c_{ij}(t)}{t} F_i \rho_S F_j^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Al definir los coeficientes a_{ij} como

$$a_{N^2 N^2} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{c_{N^2 N^2}(t) - N}{Nt}, \quad (3.65)$$

$$a_{i N^2} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{c_{i N^2}(t)}{t}, \quad i = 1, \dots, N^2 - 1, \quad (3.66)$$

$$a_{ij} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{c_{ij}(t)}{t}, \quad i, j = 1, \dots, N^2 - 1, \quad (3.67)$$

podemos definir los operadores

$$F \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} a_{iN^2} F_i, \quad (3.68)$$

$$G \equiv \frac{1}{2N} a_{N^2N^2} I_S + \frac{F^\dagger + F}{2}, \quad (3.69)$$

$$H = \frac{F^\dagger - F}{2}. \quad (3.70)$$

Con estos operadores podemos reescribir el generador como

$$\mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \{G, \rho_S\} + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_i \rho_S F_j^\dagger. \quad (3.71)$$

De la ecuación (3.50), podemos ver que a $t = 0$, $\frac{d}{dt} \text{tr}_S\{\rho_S(0)\} = 0$, y como el operador \mathcal{L} preserva la traza, tenemos que para todo tiempo,

$$\text{tr}_S\{\mathcal{L}\rho_S\} = 0. \quad (3.72)$$

Por otro lado, utilizando la propiedad cíclica de la traza, tenemos que

$$\text{tr}_S\{\mathcal{L}\rho_S\} = \frac{1}{2} \text{tr}_S\{F\rho_S - F^\dagger\rho_S + \rho_S F^\dagger - \rho_S F\} + \text{tr}_S\{G\rho_S + \rho_S G + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_i \rho_S F_j^\dagger\} = \quad (3.73)$$

$$= 0 + 0 + \text{tr}_S\left\{\left(2G + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i\right)\rho_S\right\} = 0. \quad (3.74)$$

Por lo tanto tenemos que,

$$G = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_i \rho_S F_j^\dagger. \quad (3.75)$$

Lo que nos permite reescribir la ecuación (3.71) como

$$\mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left(F_i \rho_S F_j^\dagger - \frac{1}{2} \{F_j^\dagger F_i, \rho_S\} \right). \quad (3.76)$$

Dado que la matriz formada por los coeficientes a_{ij} es positiva, podemos diagonalizarla y escribir los elementos de su diagonal en la ecuación (3.76), obteniendo la forma diagonal del generador

$$\mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(A_k \rho_S A_k^\dagger - \frac{1}{2} A_k^\dagger A_k \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S A_k^\dagger A_k \right). \quad (3.77)$$

Donde hemos introducido los operadores A_k como

$$F_i = \sum_{k=1}^{N^2-1} u_{ki} A_k, \quad (3.78)$$

siendo u_{ik} los elementos de la matriz unitaria que diagonaliza la matriz a . Estos operadores son normalmente llamados operadores de Lindblad y la ecuación (3.77) es llamada *ecuación maestra de Lindblad* [20]. Observamos que las cantidades no negativas γ_i tienen dimensiones de $1/t$, ya que A_k no tiene dimensiones. Estos coeficientes serán útiles como tasas de transferencia para diferentes modos de decaimiento del sistema abierto [3].

3.2.2. Discusión y marco de validez de las suposiciones

La deducción de la ecuación (3.77) se basó fundamentalmente en tomar en cuenta dos suposiciones:

- ✓ aproximación de Born: $\rho_S(t) \propto \rho_S(0) \otimes \rho_B$ y
- ✓ aproximación de Markov: $V(t_1 + t_2) = V(t_1)V(t_2)$.

En base a ellas hemos construido la forma general del operador \mathcal{L} de Lindblad. Es importante entonces discutir el origen físico y las limitaciones de las dos.

En los sistemas abiertos se trata con procesos irreversibles, ya que se busca describir el transporte unidireccional de energía del sistema a un medio ambiente. Por lo tanto es necesario exigir algunas características tanto al sistema en estudio como al ambiente.

La primera de estas suposiciones se llama aproximación de Born y establece que \mathcal{B} tiene tantos grados de libertad que los efectos de la interacción con \mathcal{S} , se disipan rápidamente y no reaccionan de nuevo con el sistema de manera significativa, de tal modo que \mathcal{B} se puede aproximar como un estado fijo de referencia, independientemente de la energía cedida por \mathcal{S} . Es decir, se supone que la reacción de \mathcal{S} en \mathcal{B} es despreciable para todos los tiempos de interés.

La segunda suposición, llamada aproximación de Markov, está relacionada con los tiempos en los que se lleva a cabo el transporte energético. Dado que la dinámica del subsistema \mathcal{S} está modulada por el acoplamiento con el ambiente, éste perturba al sistema \mathcal{S} en todos los tiempos, tanto el tiempo presente t como tiempos anteriores $t' < t$. Por lo que la modulación destruye todo el conocimiento del comportamiento pasado de \mathcal{S} . La aproximación de Markov consiste entonces en suponer que $\frac{d}{dt}\rho_S$ depende sólo de $\rho_S(t)$ en su valor presente. En otras palabras supone que el sistema pierde toda la memoria.

Ya que el ambiente se supone mucho más grande que \mathcal{S} , de modo tal que disipa rápidamente los efectos de la interacción de \mathcal{S} con \mathcal{B} , la aproximación de Markov es consistente. De hecho, si consideramos τ el tiempo característico del ambiente, es decir el tiempo en el que el sistema cambia de un estado a otro, entonces si la dinámica de \mathcal{S} se observa en un intervalo temporal $t - t' \leq \tau$, los efectos de memoria no serán despreciables. Las interacciones entre los tiempos t y t' se vuelven progresivamente menos relacionadas para $t - t' > \tau$ y se vuelven totalmente descorrelacionadas para $t - t' \gg \tau$.

Si $\tau \ll \frac{1}{\gamma_i}$, donde $\frac{1}{\gamma_i}$ es la escala de tiempo del sistema en términos de γ_i , los coeficientes de la ecuación (3.77), entonces $\frac{d}{dt}\rho_S(t') \approx \rho_S(t)$ y la aproximación de Markov es válida.

Capítulo 4

Visualización gráfica de un qutrit

Hasta ahora hemos hablado de sistemas cuánticos de dimensión, en general, finita. Sin embargo, nos interesa estudiar sistemas únicamente de tres niveles y desarrollar en ellos nuevas herramientas que nos permitan identificar fácilmente el diseño óptimo de un complejo molecular, mediante la visualización de los estados cuánticos que puede sostener su arquitectura. Con este fin, en este capítulo nos restringiremos a sistemas cuánticos de dos y tres niveles y estudiaremos la visualización gráfica de estados de estos sistemas. Primero describiremos la representación gráfica de un sistema de dos niveles mediante la esfera de Bloch y posteriormente desarrollaremos una manera de visualizar un sistema de tres niveles en un elipsoide [23], tratando de rescatar varias características y ventajas de la esfera de Bloch.

4.1. Sistemas cuánticos de dos niveles

Cualquier sistema cuántico que sólo tenga dos estados linealmente independientes puede ser descrito con un vector en el espacio de Hilbert, \mathcal{H}_2 . Los estados de este espacio, debido a que son la unidad fundamental de la teoría de información cuántica, son llamados *quantum bits*, o bien, *qubits*. Un qubit tiene la forma general

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (4.1)$$

con $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

En donde $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ es una base ortonormal conocida comúnmente como la base computacional.

Cabe mencionar que la aplicación de qubits en sistemas físicos no sólo está presente en información cuántica, de hecho tiene una amplia gama de utilidades, como

- átomos de dos niveles. Incluso en átomos de más niveles en donde sólo dos de ellos son tomados en cuenta en un proceso en particular.
- Manejo de partículas de spin- $\frac{1}{2}$.

- Polarización de fotones individuales.
- Interferómetros de dos brazos con un fotón individual.
- Modos de un campo electromagnético en una cavidad.
- En general, cualquier sistema con dos grados de libertad.

Del mismo modo que en teoría clásica de información, en el espacio de qubits, nos interesa estudiar operaciones o determinados procesos lógicos y al mismo tiempo poder escribir cualquier observable que actúe en este espacio como combinaciones lineales de operaciones lógicas. De aquí surge la necesidad de buscar una base de operadores que permita lo mencionado. A continuación presentamos una descripción de los operadores de Pauli que nos servirán para definir esta base y para caracterizar el espacio H_2 mediante una representación gráfica: la esfera de Bloch.

4.1.1. Operadores de Pauli

En esta sección introducimos a los operadores σ_k ; con $k = 1, 2, 3$, como tres operadores Hermitianos ($\sigma_k^\dagger = \sigma_k$) que actúan en H_2 , tales que además $\sigma_k^2 = \mathbb{1}$. De estas dos propiedades obtenemos que sus eigenvalores son ± 1 y que tienen traza nula.

Deseamos obtener una base ortonormal a partir de estos operadores, por lo que es necesario saber cómo es su producto interior. Tenemos que si A y B son elementos de un espacio de operadores, \mathcal{L} , que actúan en H_2 , éste se define mediante la traza del siguiente modo

$$(A, B) \equiv \text{tr}\{A^\dagger B\}. \quad (4.2)$$

En el caso particular de las matrices de Pauli, se tiene que

$$(\sigma_i, \sigma_j) = \text{tr}\{\sigma_i^\dagger \sigma_j\} = \text{tr}[\sigma_i \sigma_j] = 2\delta_{ij}, \quad (4.3)$$

además, para que esto se cumpla, debe suceder que

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i. \quad (4.4)$$

Por lo que para tener una base completa debemos añadir a las matrices de Pauli la matriz identidad y multiplicar los operadores por un factor de $\frac{1}{\sqrt{2}}$ para normalizarlos, de modo que $\beta = \{\frac{1}{\sqrt{2}}\mathbb{1}, \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_k\}$ es una base ortonormal del espacio de operadores \mathcal{L} que actúan en H_2 (llamado espacio de Liouville).

De este modo, cualquier operador A puede ser escrito como

$$A = \frac{1}{2}\text{tr}\{A\}\mathbb{1} + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^3 \text{tr}\{A\sigma_k\}\sigma_k. \quad (4.5)$$

Definimos ahora el vector de operadores de Pauli,

$$\vec{\sigma} \equiv \sigma_x e_x + \sigma_y e_y + \sigma_z e_z.$$

Donde e_x, e_y, e_z son los vectores de la base canónica de \mathbb{R}^3 .

Y vemos que para cualesquiera dos vectores \vec{a} y \vec{b} en \mathbb{R}^3 , se cumple que

$$(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = (\vec{a} \cdot \vec{b}) + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}), \quad (4.6)$$

mientras que para vectores unitarios \vec{e} , tenemos que

$$(\vec{e} \cdot \vec{\sigma})(\vec{e} \cdot \vec{\sigma}) = 1. \quad (4.7)$$

La relevancia y utilidad de estas dos igualdades se mostrará más adelante.

Ahora bien, si consideramos la base computacional como los eigenvalores de σ_z ,

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

y

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

con $\sigma_z |0\rangle = |0\rangle$ y $\sigma_z |1\rangle = -|1\rangle$, tenemos que la representación matricial de las matrices de Pauli es

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Cuya acción en la base computacional es

$$\begin{aligned} \sigma_x |0\rangle &= |1\rangle, & \sigma_y |0\rangle &= i|1\rangle, & \sigma_z |0\rangle &= |0\rangle, \\ \sigma_x |1\rangle &= |0\rangle, & \sigma_y |1\rangle &= -i|0\rangle, & \sigma_z |1\rangle &= -|1\rangle. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Finalmente para encontrar los eigenvectores de σ_x y σ_y tenemos que

$$\begin{aligned} \sigma_x |0_x\rangle &= |0_x\rangle & \text{entonces} & & |0_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \\ \sigma_x |1_x\rangle &= |1_x\rangle & \text{entonces} & & |1_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned} \quad (4.10)$$

y

$$\begin{aligned} \sigma_y |0_y\rangle &= |0_y\rangle & \text{entonces} & & |0_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle), \\ \sigma_y |1_y\rangle &= |1_y\rangle & \text{entonces} & & |1_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Con las igualdades presentadas hasta ahora, construiremos la esfera de Bloch a partir de la forma general del operador de densidad representado en la base de Pauli.

4.1.2. Visualización de qubits en la esfera de Bloch

Si consideramos un operador de densidad arbitrario, ρ , en el espacio de los qubits, puede ser escrito, según (4.5) y las propiedades del operador, como

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}) \quad (4.12)$$

con

$$\vec{r} \equiv \text{tr}\{\rho \vec{\sigma}\}. \quad (4.13)$$

Además tenemos que

$$\begin{aligned} \text{tr}\{\rho^2\} &= \frac{1}{4} \text{tr}\{\mathbb{1} + 2\vec{r} \cdot \vec{\sigma} \mathbb{1} + \sum_{i,j=1}^3 r_i r_j \sigma_i \sigma_j\} = \\ &= \frac{1}{2}(1 + |\vec{r}|^2). \end{aligned} \quad (4.14)$$

En caso de tener un estado puro, es decir, $\rho^2 = \rho$, tenemos que $\text{tr}\{\rho^2\} = 1$, por lo tanto $|\vec{r}|^2 = 1$. Lo cual indica que en este caso, el vector \vec{r} está en la superficie de una esfera de radio 1. Si el estado es una mezcla estadística, entonces el vector estará dentro de la esfera [22].

De la ecuación (4.13) tenemos que

$$\vec{r} = \langle \psi | \vec{\sigma} | \psi \rangle, \quad (4.15)$$

por lo tanto

$$\vec{r} \cdot \langle \psi | \vec{\sigma} | \psi \rangle = \langle \psi | \vec{r} \cdot \vec{\sigma} | \psi \rangle = |\vec{r}|^2 = 1, \quad (4.16)$$

por lo que obtenemos

$$\vec{r} \cdot \vec{\sigma} = |\psi\rangle. \quad (4.17)$$

Tenemos entonces dos resultados importantes

1. Para un vector normalizado en H_2 , el valor esperado de $\vec{\sigma}$ define un vector en \mathbb{R}^3 de norma 1.
2. $|\psi\rangle$ es un eigenvector de $\vec{r} \cdot \vec{\sigma}$ con eigenvalor +1.

Concluimos que para cada $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_2$ podemos encontrar un vector $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$. Este vector es llamado vector de Bloch y en el caso de un estado puro, está en la superficie de una esfera unitaria llamada *esfera de Bloch* [22].

Dado que $\vec{r} \cdot \vec{\sigma}$ es una suma de productos escalares con operadores Hermitianos, es un operador Hermitiano, y \vec{r} es un vector normalizado, por lo tanto, la ecuación (4.7) implica que $(\vec{r} \cdot \vec{\sigma})(\vec{r} \cdot \vec{\sigma}) = 1$, entonces los eigenvalores de $\vec{r} \cdot \vec{\sigma}$ son ± 1 . Y como hemos visto, $|\psi\rangle$ corresponde al eigenvalor +1.

Debido a la hermiticidad, el eigenvector, $|\chi\rangle$, asociado al eigenvalor -1 debe ser ortogonal a $|\psi\rangle$ y debe cumplir

$$\vec{r} \cdot \vec{\sigma} |\chi\rangle = -|\chi\rangle. \quad (4.18)$$

Si nombramos r' al vector de Bloch asociado a $|\chi\rangle$, tenemos que al proyectar (4.18) sobre \vec{r}' y multiplicar por $\langle\chi|$ obtenemos

$$\vec{r}' \cdot \langle\chi|\vec{\sigma}|\chi\rangle = -1, \quad (4.19)$$

como $|\vec{r}'| = 1$, entonces $\vec{r}' = -\vec{r}$. Obtenemos que el vector de Bloch asociado al eigenvalor -1 es el vector que se encuentra al reflejar el asociado a $+1$ respecto al origen.

Otra forma de parametrizar los puntos de la esfera de Bloch es mediante la expresión de los coeficientes del estado $|\psi\rangle$ en coordenadas polares, es decir

$$|\psi\rangle = e^{-i\frac{\phi}{2}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\frac{\phi}{2}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \quad (4.20)$$

con $\phi \in [0, 2\pi]$ y $\theta \in [0, \pi]$, al encontrar el vector de Bloch según la definición (4.13), obtenemos

$$\vec{r} = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta), \quad (4.21)$$

que es el vector posición en coordenadas esféricas. En la figura 4.1 mostramos la esfera de Bloch para los vectores obtenidos en esta descripción.

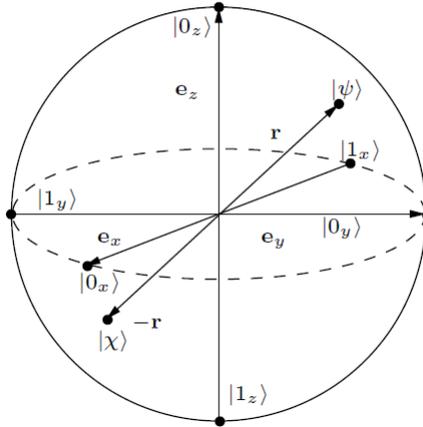


Figura 4.1: Esfera de Bloch. Podemos observar que los ejes coordenados corresponden a los eigenvectores de las matrices de Pauli y que los eigenvectores de $\vec{r} \cdot \vec{\sigma}$, $|\beta\rangle$ y $|\chi\rangle$, son colineales en sentidos opuestos. Imagen tomada de [22].

Finalmente debemos notar que un vector de Bloch definirá el estado del sistema salvo una fase, debido a la periodicidad de las funciones en la definición del estado (4.20).

4.2. Estado general de dos qubits simétricos como un qutrit

Ha habido muchos intentos de generalizar la esfera de Bloch a sistemas de mayor dimensión [24–31]. Sin embargo, después del caso más simple de dimensión 2 estas representaciones están lejos de nuestra intuición geométrica y por lo tanto no son útiles para caracterizar estados visualmente. Como hemos visto, la utilidad de la esfera de Bloch en la representación de un qubit está basada en su simplicidad, ya que el estado del qubit está completamente caracterizado por un vector tridimensional que está en la superficie de una esfera unitaria. Buscando mantener esta simplicidad y al mismo tiempo riqueza física, mostramos aquí una representación de un sistema de tres niveles (*qutrit*) cuya dimensión está dada por $d^2 - 1 = 8$, mediante un vector \vec{a} de tres dimensiones y un tensor métrico $\hat{\Gamma}$ que construiremos a continuación.

Empecemos describiendo un sistema de dos qubits mediante la representación en la base ortogonal de Schmidt formada por las matrices de Pauli aumentadas $\{\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$,

dada por la expresión

$$\rho = \frac{1}{4} \left(\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \sum_{j=x,y,z} (r_j \sigma_j \otimes \mathbb{1} + q_j \mathbb{1} \otimes \sigma_j) + \sum_{j,k=x,y,z} T_{jk} \sigma_j \otimes \sigma_k \right), \quad (4.22)$$

donde $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z)$ y $\vec{q} = (q_x, q_y, q_z)$ son los vectores de Bloch de cada qubit y $T_{jk} = \text{tr}\{\rho(\sigma_j \otimes \sigma_k)\}$ es la proyección del estado del par de qubits ρ en cada uno de los elementos de la base de Pauli.

Ahora bien, si consideramos el caso de que los qubits sean simétricos tenemos que $\vec{r} = \vec{q} \equiv \vec{a}$ y $T_{jk} = T_{kj}$.

Al identificar los operadores de dos qubits con los operadores K_j del siguiente modo

$$K_j \equiv \frac{\sigma_j \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \sigma_j}{2} \quad (4.23)$$

$$K_j^2 \equiv \frac{\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \sigma_j \otimes \sigma_j}{2} \quad (4.24)$$

$$A_k \equiv K_i K_j + K_j K_i = \frac{\sigma_i \otimes \sigma_j + \sigma_j \otimes \sigma_i}{2}, (i \neq j \neq k), \quad (4.25)$$

con la definición de valor esperado de un operador (3.13), la definición del estado (4.22) y las de los operadores (4.23)-(4.25), podemos identificar las coordenadas del vector de Bloch \vec{a} y del tensor \hat{T} como

$$\langle K_j \rangle = a_j, \quad (4.26)$$

$$\langle K_j^2 \rangle = \frac{1 + T_{jj}}{2}, \quad (4.27)$$

$$1 - \langle K_j^2 \rangle = \frac{1 - T_{jj}}{2} \equiv \omega_j, \quad (4.28)$$

$$\langle A_j \rangle = T_{kl} = T_{lk} \equiv q_j. \quad (4.29)$$

donde en la última igualdad $j \neq k \neq l$.

El número de estados posibles en un sistema de spin 1 es tres, por lo que buscamos obtener una

similitud entre las matrices de spin 1 y el subespacio de un qutrit generado por los operadores K_j definidos anteriormente.

Las matrices de spin 1 en la base estándar $\{|-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle\}$, están dadas por

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{1}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

Observamos que una propiedad interesante de estas matrices es que los operadores S_j^2 conmutan, por lo que pueden ser diagonalizados simultáneamente de la siguiente forma

$$S_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, S_y^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, S_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

En esta representación las matrices S_j correspondientes están dadas por

$$S'_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, S'_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, S'_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

En el caso en el que los dos qubits son simétricos, hemos visto que su espacio es el mismo que el de un qutrit, por lo que puede ser expresado utilizando las matrices (4.32). Además, dado que las matrices (4.23)-(4.24) en su forma canónica de Jordan se pueden ver como matrices bloque de dimensiones 3×3 y 1×1 [32], los bloques de dimensión 3×3 conforman un sistema de spin 1 y pueden ser representadas mediante las matrices (4.32), por lo que cumplirán también las relaciones (4.23)-(4.25) [23].

Otra manera de entender lo anterior es mediante suma de momento angular, si consideramos que el sistema de dos qubits simétricos con el que trabajamos se tratara, por ejemplo, de un sistema de dos partículas de spin- $\frac{1}{2}$, entonces su spin total será equivalente a tener una partícula de spin 1 y una partícula de spin 0, la primera se puede representar con las matrices S' y la segunda es un singulete de dimensión cero representado con una matriz de 1×1 que podemos despreciar.

Utilizando las definiciones (4.23), la simetría de \hat{T} y (4.25) tenemos que

$$\rho = \frac{1}{4}(\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + 2 \sum_{j=x,y,z} a_j K_j + T_{jk} \sigma_j \otimes \sigma_k + T_{jk} \sigma_k \otimes \sigma_j + T_{jj} \sigma_j \otimes \sigma_j) = \quad (4.33)$$

$$= \frac{\mathbb{1} \otimes \mathbb{1}}{4} + \frac{1}{2} \sum_{j=x,y,z} a_j K_j + T_{jj} \sigma_j \otimes \sigma_j + q_j A_j = \quad (4.34)$$

$$= \frac{\mathbb{1} \otimes \mathbb{1}}{4} + \sum_{j=x,y,z} \frac{T_{jj} \sigma_j \otimes \sigma_j}{2} + \sum_{j=x,y,z} \frac{a_j K_j + q_j A_j}{2} = \quad (4.35)$$

$$= \sum_{j=x,y,z} \omega_j \frac{\mathbb{1} \otimes \mathbb{1}}{4} + \frac{T_{jj} \sigma_j \otimes \sigma_j}{2} + \sum_{j=x,y,z} \frac{a_j K_j + q_j A_j}{2} = \quad (4.36)$$

$$= \sum_{j=x,y,z} \left(\omega_j (\mathbb{1} - K_j^2) + \frac{a_j K_j + q_j A_j}{2} \right). \quad (4.37)$$

Al hacer la sustitución $K_j \rightarrow S'_j$ obtenemos

$$\rho = \sum_{j=x,y,z} \left(\omega_j (\mathbb{1} - S_j'^2) + \frac{a_j S_j' + q_j A_j'}{2} \right). \quad (4.38)$$

En la última igualdad hemos utilizado la unitariedad de la traza de \hat{T} y la definición de K_j^2 , (4.24).

A_j' son las matrices definidas en (4.25) con la sustitución $K_j \rightarrow S'_j$ y recordamos que $q_j = \langle A_j \rangle$.

Al expandir esta expresión obtenemos su forma matricial

$$\rho = \begin{pmatrix} \omega_x & -\frac{ia_z + T_{xy}}{2} & \frac{ia_y - T_{xx}}{2} \\ \frac{ia_z - T_{yz}}{2} & \omega_y & -\frac{ia_x + T_{yz}}{2} \\ -\frac{a_y + T_{zx}}{2} & \frac{ia_x - T_{zy}}{2} & \omega_z \end{pmatrix}. \quad (4.39)$$

De donde vemos que debe cumplirse que

$$\sum_{i=x,y,z} \omega_i = 1. \quad (4.40)$$

Recordando que $q_j = T_{kl} = T_{lk}$ y que $\omega_j = \frac{1 - T_{jj}}{2}$, tenemos que

$$2Re(\rho) = \begin{pmatrix} 1 - T_{xx} & -T_{xy} & -T_{xz} \\ -T_{yx} & 1 - T_{yy} & -T_{yz} \\ -T_{zx} & -T_{zy} & 1 - T_{zz} \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

Donde $Re(\rho)$ significa la parte real de ρ . Por lo que obtenemos que \hat{T} puede ser escrito sencillamente en términos de la matriz de densidad como

$$\hat{T} = \mathbb{1} - 2Re(\rho). \quad (4.42)$$

Por simplicidad supongamos que \hat{T} es diagonal ($q_j = 0, \forall j$). En este caso tenemos una forma más sencilla de la ecuación (4.39)

$$\rho = \begin{pmatrix} \omega_x & -\frac{ia_z}{2} & \frac{ia_y}{2} \\ \frac{ia_z}{2} & \omega_y & -\frac{ia_x}{2} \\ -\frac{ia_y}{2} & \frac{ia_x}{2} & \omega_z \end{pmatrix}. \quad (4.43)$$

A continuación impondremos condiciones características de los operadores Hermitianos a la matriz de densidad, algunas de estas restricciones las encontraremos con (4.43) pero sólo por simplicidad de los cálculos, pues el contenido físico del resultado será el mismo que con la matriz completa, (4.39) ya que las expresiones que encontraremos a partir de estas restricciones tienen la misma forma que con \hat{T} no diagonal.

Imponiendo la no negatividad de la matriz de densidad

Dado que los elementos de la diagonal de ρ representan poblaciones, deben ser no negativos, es decir $0 \leq \rho_{jj} \leq 1$, lo cual implica que $-1 \leq T_{jj} \leq 1$. Por lo que si diagonalizamos \hat{T} , sus valores propios deben cumplir la desigualdad anterior.

Ahora bien, una matriz Hermitiana es semidefinida-positiva si los determinantes de todos los menores principales de la matriz son no negativos. Un menor principal es un determinante de una submatriz definida a partir de la diagonal superior de la matriz original [33]

Por lo tanto, debemos imponer esta condición a todas las submatrices de dimensión 2×2 y verificar que $\det(\rho) \geq 0$, al hacerlo encontraremos cuatro imposiciones que nos permitirán caracterizar la geometría del qutrit.

① La no negatividad del determinante del primer menor principal de (4.43) implica que

$$\omega_y \omega_z + \frac{ia_x}{2} \frac{ia_x}{2} \geq 0,$$

o bien

$$4\omega_y \omega_z \geq a_x^2. \quad (4.44)$$

② Para el segundo menor principal tenemos que

$$4\omega_x \omega_z \geq a_y^2$$

③ y análogamente para el tercer menor principal obtenemos la desigualdad

$$4\omega_x \omega_y \geq a_z^2,$$

por lo que en general se debe cumplir que

$$4\omega_j \omega_k \geq a_l^2, \quad (4.45)$$

o bien

$$(1 - T_{jj})(1 - T_{kk}) \geq a_l^2. \quad (4.46)$$

Donde en las dos últimas desigualdades $j \neq k \neq l$.

④ Finalmente de la no negatividad de $\det(\rho)$ tenemos que

$$\omega_x \left(\omega_y \omega_z - \frac{a_x^2}{4} \right) - \frac{ia_z}{2} \left(\frac{a_y a_x}{4} - \frac{ia_z \omega_z}{2} \right) + \frac{ia_y}{2} \left(\frac{a_z a_x}{4} + \frac{ia_y \omega_y}{2} \right) \geq 0$$

$$\text{es decir, } \omega_x \omega_y \omega_z - \frac{\omega_x a_x^2}{4} - \frac{\omega_z a_z^2}{4} - \frac{\omega_y a_y^2}{4} \geq 0$$

$$\text{por lo que } 4\omega_x \omega_y \omega_z \geq \omega_x a_x^2 + \omega_y a_y^2 + \omega_z a_z^2. \quad (4.47)$$

Ahora observemos la cantidad $4\det(\rho)$,

$$4\det(\rho) = 4 \begin{vmatrix} \omega_x & 0 & 0 \\ 0 & \omega_y & 0 \\ 0 & 0 & \omega_z \end{vmatrix} = 4\omega_x \omega_y \omega_z,$$

y calculemos $\vec{a} \cdot \frac{Re(\rho)}{4\det(\rho)} \cdot \vec{a}$

$$\frac{1}{4\det(\rho)} \begin{pmatrix} a_x & a_y & a_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_x & 0 & 0 \\ 0 & \omega_y & 0 \\ 0 & 0 & \omega_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} = \frac{1}{4\omega_x \omega_y \omega_z} (\omega_x a_x^2 + \omega_y a_y^2 + \omega_z a_z^2), \quad (4.48)$$

según la desigualdad (4.47)

$$\vec{a} \cdot \frac{Re(\rho)}{4\det(\rho)} \cdot \vec{a} \leq 1. \quad (4.49)$$

Definimos entonces el tensor métrico $\hat{\Gamma}$ como

$$\hat{\Gamma} \equiv \frac{Re(\rho)}{4\det(\rho)}. \quad (4.50)$$

Si se calcula el determinante de ρ sin suponer que \hat{T} es diagonal se obtiene una ecuación idéntica a (4.47) pero con términos fuera de la diagonal, pero que también puede verse como (4.49), sólo que en este caso $\hat{\Gamma}$ no será diagonal. Sin embargo, dado que tendremos una ecuación con la misma forma que (4.49), la física será totalmente equivalente [23].

4.3. Geometría de la representación

Para un $\hat{\Gamma}$ diagonal, la desigualdad (4.49) implica que existen un conjunto de vectores \vec{a} posibles restringidos a la desigualdad

$$\frac{a_x^2}{4\omega_y \omega_z} + \frac{a_y^2}{4\omega_x \omega_z} + \frac{a_z^2}{4\omega_x \omega_y} \leq 1 \quad (4.51)$$

que describe la superficie e interior de un elipsoide tridimensional con semiejes dados por

$$\varepsilon_u = \sqrt{4\omega_y \omega_z}, \quad \varepsilon_v = \sqrt{4\omega_x \omega_z}, \quad \varepsilon_w = \sqrt{4\omega_x \omega_y} \quad (4.52)$$

o bien, usando que $\omega_j = \frac{1-T_{jj}}{2}$ y que γ_j y λ_j son eigenvalores de $\hat{\Gamma}$ y \hat{T} , respectivamente, tenemos que

$$\varepsilon_j = \frac{1}{\sqrt{\gamma_j}} = \sqrt{(1-\lambda_k)(1-\lambda_l)} \quad (4.53)$$

con $j \neq k \neq l$.

Hasta ahora hemos visto que un qutrit puede ser representado por un vector \vec{a} y un tensor métrico $\hat{\Gamma}$. El primero requiere de tres parámetros, mientras que el segundo necesita cinco. Tres para los valores fuera de la diagonal ($\hat{\Gamma}$ es simétrico porque \hat{T} lo es), y otros dos para los vectores de la diagonal (no tres pues es de traza unitaria). Así que con estos parámetros podemos describir al qutrit, ya que requerimos $d^2 - 1 = 8$ para caracterizarlo totalmente.

Para un tensor métrico fijo, $\hat{\Gamma}$, la desigualdad (4.49) implica la existencia de un conjunto de vectores \vec{a} permitidos sobre la superficie de un elipsoide cuya orientación está determinada por los eigenvectores de \hat{T} y sus semiejes por las cantidades ε_j definidas en (4.53).

Ahora bien, de las igualdades (4.52) y de (4.45), tenemos que el vector \vec{a} debe estar en la superficie o en el interior del elipsoide pues

$$\varepsilon_j = \sqrt{4\omega_j\omega_k} \geq |a_j|. \quad (4.54)$$

Consideremos tres casos

1. $1 > \lambda_u \geq \lambda_v \geq \lambda_w$, entonces $\varepsilon > 0 \quad \forall j$, el elipsoide es una figura con volumen y la matriz de densidad tendrá elementos no nulos dentro y fuera de la diagonal.
2. $\lambda_u = 1$, pero $1 > \lambda_v = -\lambda_w$, entonces $\varepsilon_u > 0$ pero $\varepsilon_v = \varepsilon_w = 0$, y el elipsoide es un objeto unidimensional, un segmento de línea a lo largo del vector propio asociado a λ_u . En este caso \vec{a} es paralelo al vector asociado a λ_u por lo que ρ será una matriz de la forma

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-\lambda_u}{2} & \frac{-ia_x}{2} \\ 0 & \frac{ia_x}{2} & \frac{1+\lambda_u}{2} \end{pmatrix}$$

3. $\lambda_u = \lambda_v = -\lambda_w = 1$. En este caso $\varepsilon_j = 0 \quad \forall j$ y el elipsoide es un punto en el origen con $\vec{a} = 0$. Veamos que en este caso en particular podemos obtener corresponde a

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ya que $T_{xx} = 1, T_{yy} = 1, T_{zz} = -1$, entonces $\omega_x = \omega_y = 0$ y $\omega_z = 1$ con $\mathbf{a} = 0$. Al estos valores sustituir en (4.43) obtenemos la expresión anterior para ρ .

Para tener una visualización completa, en los casos 2 y 3 en los que los semiejes son nulos, añadimos segmentos de línea con la dirección de los eigenvectores de \hat{T} , λ_u y λ_v , para el caso 2. Uno con líneas

punteadas y el otro con líneas sólidas para diferenciarlos, como se observa en la figura 4.2.

En el caso 3, en el que todos los semiejes se anulan, ponemos los tres ejes ortogonales correspondientes a los eigenvectores de \hat{T} .

4.4. Interpretación de la geometría

Para una correcta interpretación geométrica de los estados cuánticos que se encuentren en el sistema bajo estudio, analizaremos todos los casos posibles mediante el teorema de entrelazamiento de Cauchy para valores propios, que establece que los eigenvalores de una matriz hermitiana A de orden n están entrelazados con los de cualquier submatriz de orden $n - 1$. En este caso en particular, si $\lambda_3 \geq \lambda_2 \geq \lambda_1$ son eigenvalores de ρ y $\lambda'_2 \geq \lambda'_1$ son eigenvalores de una de sus submatrices tenemos que

$$\lambda_3 \geq \lambda'_2 \geq \lambda_2 \geq \lambda'_1 \geq \lambda_1. \quad (4.55)$$

La demostración de este teorema puede ser leída en el apéndice C .

Mediante el teorema de entrelazamiento y las desigualdades (4.47) y (4.49), vamos a estudiar cada una de las posibles geometrías y sus implicaciones físicas.

- Si $\det(\rho) \neq 0$, entonces el determinante de todas sus submatrices tampoco es cero, por lo que las dos desigualdades (4.47) y (4.49) son estrictas y el elipsoide es un objeto tridimensional con \vec{a} dentro de él. En este caso, la matriz de densidad corresponde a un estado mezclado y todas sus columnas y renglones son linealmente independientes (es de rango 3). Ver figura 4.2(a).
- Si todos los determinantes de las submatrices de ρ son cero, entonces las ecuaciones (4.47) son igualdades y el vector \vec{a} está en la superficie del elipsoide. Pero entonces las desigualdades (4.54) son estrictas y por tanto todos los semiejes son mayores que cero. En este caso el estado es de rango 2, el elipsoide tiene volumen pero el vector \vec{a} está en su superficie. Ver figura 4.2(b).
Otra manera de tener una matriz de rango 2 puede suceder si tanto el determinante de ρ y dos de los determinantes de las submatrices son cero, mientras que el restante es diferente de cero. Esto implica que la ecuación (4.49) y dos de las tres ecuaciones (4.54) son igualdades. Lo que conduce a $\varepsilon_u > |a_u|$. En este caso no tendremos un objeto tridimensional, sino sólo un segmento de línea paralelo a la dirección asociada a λ_u y otros dos ejes añadidos como se mencionó anteriormente. Ver figura 4.2(b).
- Finalmente, un estado es puro sólo si uno sólo de los eigenvalores de ρ es distinto de cero. En este caso tenemos que todos los determinantes de las submatrices son nulos, por lo que tanto (4.47) y (4.49) son igualdades, pero para que se cumplan ambas condiciones al mismo tiempo necesitamos que dos o tres de los productos $4\omega_i\omega_j$ sean cero. En el primer caso (dos productos son cero), obtendremos un segmento de línea tal que $\varepsilon_u = |\vec{a}|$ y en el segundo (los tres son nulos) solamente un punto, el origen, cumplirá las dos condiciones simultáneamente. Ver figura 4.2(c). Debe mencionarse que en este último caso, es necesario que sólo uno de los ω_i sea distinto de cero para seguir cumpliendo tanto la unitariedad de la traza como las condiciones anteriores.

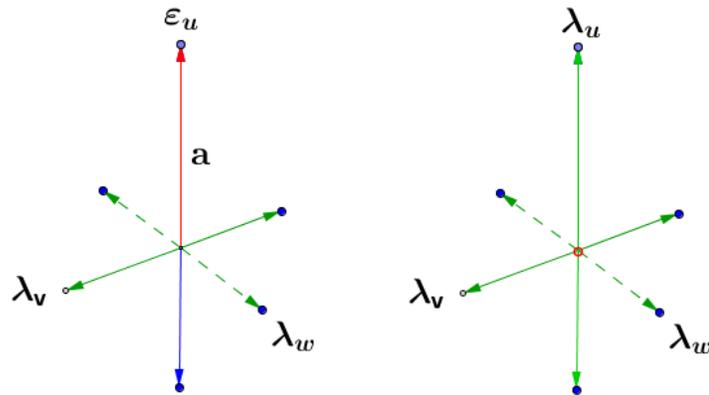
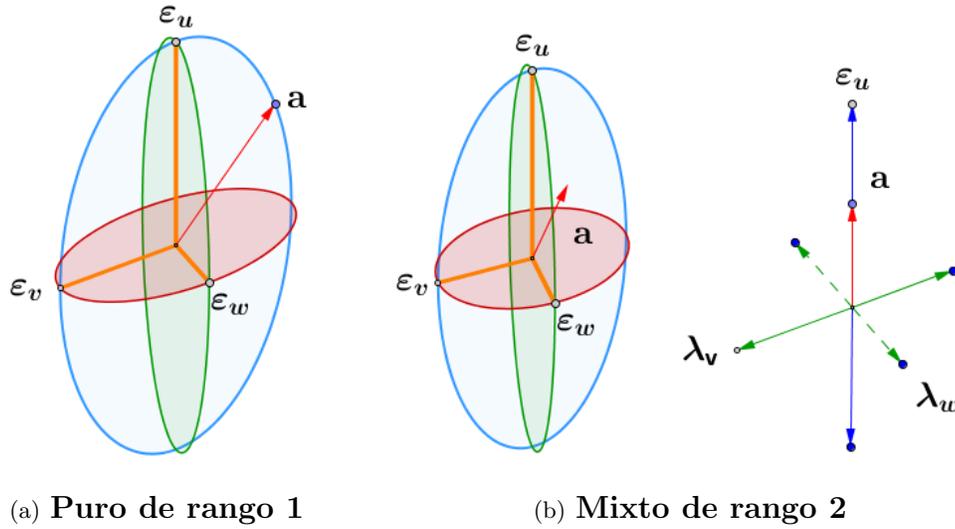


Figura 4.2: Representación gráfica de un qutrit para estados puros y mixtos de diferentes rangos. Las líneas naranjas denotan los semiejes dados por ε_j , las líneas rojas denotan el vector \mathbf{a} y las líneas verdes sólidas (punteadas) denotan las direcciones asociadas al vector propio del valor λ_v (vector propio del valor λ_w).

Capítulo 5

Correlaciones cuánticas y su medición

En los capítulos anteriores hemos estudiado sistemas compuestos por dos o más partes. En particular en el capítulo 4, empezamos trabajando con un sistema de dos qubits y posteriormente vimos que en caso de que fueran simétricos, el análisis es equivalente al del sistema de un qutrit.

Debido a que nos interesa estudiar las correlaciones cuánticas en subsistemas bipartitos de un sistema de tres sitios, es importante establecer las bases de la descripción de este tipo de sistemas cuánticos. Esto con el fin de motivar la definición de algunos cuantificadores de correlaciones cuánticas algunas de sus características.

Dentro de los diferentes cuantificadores de correlaciones cuánticas, estudiaremos un tipo de correlación cuántica que ha sido presentada recientemente [34, 35] llamada *discordia cuántica*. Básicamente este tipo de correlación considera todas las correlaciones debidas a efectos cuánticos en el sistema (no-clasicidad del sistema) y que no necesariamente involucran entrelazamiento [34].

La razón por la cual se ha decidido estudiar este tipo de correlaciones es que la discordia ha sido interpretada como un recurso para llevar a cabo algún proceso en un sistema cuántico [36]. Un hecho importante a resaltar, es que la discordia cuántica ha demostrado ser muy útil para describir el comportamiento de las correlaciones cuánticas en sistemas disipativos, Markovianos y no-Markovianos. Más importante aún, se ha mostrado que esta medida muestra una mayor robustez que las medidas que se usan típicamente, como por ejemplo la concurrencia [37, 38].

5.1. Sistemas cuánticos bipartitos

Un sistema compuesto es aquél en el que se pueden distinguir dos o más subsistemas, a los cuales se puede acceder de forma independiente, es decir, podemos realizar mediciones locales. Al restringirnos a sistemas bipartitos (compuestos por dos subsistemas), encontramos algunos ejemplos físicos como un

sistema en el que se estudia la interacción entre un fotón y un átomo de dos niveles, o un sistema de dos electrones que interactúan y que posteriormente se separan espacialmente. Aunque dos subsistemas no necesariamente se encuentran separados en el espacio, un sistema bipartito puede estar constituido por un grado de libertad externo (un orbital electrónico de un átomo, por ejemplo) y uno interno (el spin del electrón).

El producto tensorial \mathcal{H}_{AB} de dos espacios de Hilbert \mathcal{H}_A y \mathcal{H}_B ,

$$\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B, \quad (5.1)$$

es también un espacio de Hilbert y tiene dimensión $\dim(\mathcal{H}_A) \times \dim(\mathcal{H}_B)$. Para cada par de vectores $|\psi\rangle_A \in \mathcal{H}_A$ y $|\phi\rangle_B \in \mathcal{H}_B$, existe un vector producto, $|\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B \in \mathcal{H}_{AB}$, que se puede escribir de diferentes maneras

$$|\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B \equiv |\psi\rangle_A |\phi\rangle_B \equiv |\psi, \phi\rangle.$$

El producto escalar en \mathcal{H}_{AB} se define espacio a espacio, utilizando que el vector dual de un vector en \mathcal{H}_{AB} , $|\chi, \eta\rangle$, es $\langle \chi, \eta |$, como

$$\langle \chi, \eta | \psi, \phi \rangle = \langle \chi | \psi \rangle \langle \eta | \phi \rangle.$$

Tenemos que si consideramos una base $\{|a\rangle^A\}$ de \mathcal{H}_A y una base $\{|b\rangle^B\}$ de \mathcal{H}_B , entonces

$$\{|a\rangle^A \otimes |b\rangle^B\} \quad (5.2)$$

es una base ortonormal de \mathcal{H}_{AB} si

$$\langle a, b | a', b' \rangle = \delta_{aa'} \delta_{bb'},$$

es decir, si ambas bases son ortonormales en sus respectivos espacios.

Antes de describir a los operadores en espacios bipartitas, definamos un tipo de estados interesantes. Considerando (5.2), un estado arbitrario $|\psi\rangle^{AB}$ puede escribirse como suma de elementos de esa base, es decir

$$|\psi\rangle^{AB} = \sum_{ab} \alpha_{ab} |a, b\rangle. \quad (5.3)$$

Cualquier estado en \mathcal{H}_{AB} puede ser escrito de este modo, o sea como superposición de estados producto, en particular existe un tipo de estados que puede ser escrito como un producto *separable* de dos estados, $|\psi\rangle^{AB} = |\psi\rangle^A \otimes |\psi\rangle^B$. Sin embargo, no todos los estados son separables; en particular existen estados tales que no pueden escribirse como producto de dos estados, éstos reciben el nombre de estados *entrelazados*. Sin embargo, en términos generales es difícil saber cuándo dos sistemas están entrelazados sólo en términos de su descomposición (5.3). Por lo tanto, es necesario definir medidas que nos permitan determinar el grado de entrelazamiento, usando otras propiedades de los estados bajo estudio. Posteriormente mencionaremos un criterio para decir con certeza cuando el estado se

encuentra entrelazado.

Por lo pronto, introducimos los siguientes cuatro vectores, los cuales forman una base del espacio $\mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_2$, y que nos serán de utilidad posteriormente.

$$|\phi_{\pm}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (5.4)$$

$$|\psi_{\pm}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle). \quad (5.5)$$

Estos son llamados estados de Bell, y en la siguiente sección mostraremos que están máximamente entrelazados.

5.2. Caracterización de correlaciones cuánticas

En general, determinar si un estado es clásico o cuántico es una tarea complicada. A simple vista, resulta natural considerar que los sistemas entrelazados presenten correlaciones que no pueden explicarse mediante un análisis probabilístico basado en teorías clásicas, y por tanto definir a un estado cuántico como aquél que no sea separable. Sin embargo, existen ciertos estados que a pesar de ser separables, exhiben un comportamiento no clásico [39], contrario a lo que se creía anteriormente. En protocolos de *Quantum Information Processing*, se ha demostrado que el comportamiento no clásico proviene del total de las correlaciones no clásicas del sistema, para las que el entrelazamiento es sólo un subconjunto del total de las correlaciones [40].

En los inicios de la primer década del 2000, surgieron trabajos de diversos grupos de investigación [34, 35], y en éstos se presentaron los primeros indicios que mostraban que el entrelazamiento no es el único recurso para la computación cuántica, y por lo tanto no toma en cuenta todas las correlaciones cuánticas posibles.

Es en estos trabajos en donde surge la discordia cuántica (*quantum discord*-QD), cuyo fundamento consiste en restar las correlaciones clásicas obtenidas a través de mediciones¹, al monto total de las correlaciones de un estado, de tal forma que sólo obtengamos correlaciones cuánticas.

La definición conceptual del QD, lo coloca en mayor jerarquía en la cuantificación de las correlaciones, pues toma en cuenta todas las correlaciones no clásicas y por tanto sitúa al entrelazamiento como sólo una de las expresiones de la no clasicidad que existen [41]. Para medir la QD surgen diversos cuantificadores, en particular la Incertidumbre Cuántica Local (*local quantum uncertainty*-LQU), la cuál se describirá a detalle en la siguiente sección.

En este trabajo medimos la QD de un sistema de tres sitios y su evolución en el tiempo para diferentes regímenes de *dephasing*, lo que es necesario para evaluar sus características no clásicas y distinguir su utilidad como recurso en el transporte eficiente de energía en una red cuántica.

¹mediciones no selectivas, las cuales básicamente consisten en no condicionar al estado en un resultado en particular, sino considerar la mezcla estadística de todos los resultados posibles de la medición cada uno pesado con su probabilidad correspondiente.

5.2.1. Cuantificación del entrelazamiento

La cuantificación de entrelazamiento en sistemas bipartitos, conocido como problema de separabilidad [42], es un problema que ha recibido gran atención durante varios años [43]. Para entender el proceso de cuantificación de entrelazamiento, consideremos un estado puro expresado en términos de una base ortogonal como en (5.3). Sabemos que se puede escribir en términos de otra base ortogonal de Schmidt [22], como

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i^A\rangle \otimes |\phi_i^B\rangle \quad (5.6)$$

donde $|\phi_i^{A(B)}\rangle$ son estados ortonormales de los subsistemas A y B respectivamente. Para saber si el estado se encuentra o no entrelazado y en qué medida lo está, debemos definir una métrica adecuada, la cual, como se indica en [44], debe cumplir las siguientes características

- no debe incrementar bajo operaciones locales y comunicación clásica (LOCC) como se definen en [43],
- debe ser nula para estados separables.

Se ha demostrado que la entropía de Von Neumann (desarrollada en el apéndice E), para cualquiera de los dos subsistemas definida por,

$$S(\rho_{AB}) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - MI(\rho_{AB}) \quad (5.7)$$

Donde la información mutua (MI), como veremos en la siguiente sección, es una cantidad no negativa que cuantifica qué tanta información se pierde al medir la entropía en el sistema completo comparada con la suma de la entropía en cada uno de los subsistemas [41]. Esta métrica cumple con todas las características. Sin embargo es siempre nula para estados puros, mientras que para estados mixtos expresada en descomposición de estados de la forma ψ_j

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|, \quad (5.8)$$

depende de la descomposición escogida, y por lo tanto es necesario encontrar una minimización de todas las descomposiciones [45]. La caracterización del entrelazamiento de este modo es en general un problema no trivial, de hecho fue objeto de estudio durante varios años y fue hasta 1997 cuando se obtuvo una expresión para un sistema de dos qubits [46], dada por

$$S(C) = h\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}\right), \quad (5.9)$$

donde $h(x) = -x \log_2 x - (1-x) \log_2 (1-x)$ es la entropía de Shannon (explicada en el apéndice D) y C es un parámetro llamado *Concurrencia*. Si observamos la ecuación (5.9), podemos notar que $S(C)$ es monótona para $0 \leq C \leq 1$, por lo que C puede utilizarse como una medida de entrelazamiento por sí misma. De hecho, es la métrica más utilizada para un par de qubits [41].

La concurrencia para un estado mixto de dos qubits se define como

$$C(\rho) = \text{máx}\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (5.10)$$

donde λ_i son los eigenvalores en orden creciente de una matriz auxiliar $\rho\tilde{\rho}$, con $\tilde{\rho} \equiv (\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$. Donde ρ^* es el complejo conjugado de cada elemento de ρ .

Esta es una medida general, y en particular, para estados puros expresados de la forma $|\psi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle$, con $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, se puede mostrar que

$$C(\rho) = 2|ad - bc|. \quad (5.11)$$

En particular para los estados que forman la base de Bell, todos cumplen con $C=1$, por lo que se encuentran máximamente entrelazados.

Aún cuando la concurrencia es muy útil para definir el grado de entrelazamiento entre dos sistemas, existen medidas más completas y robustas para caracterizar el total de correlaciones, clásicas y cuánticas, presentes en un sistema, como por ejemplo la Discordia cuántica que definiremos en la siguiente sección.

5.3. Discordia cuántica

Como una medida de correlaciones no clásicas más allá del entrelazamiento, la discordia ha sido de interés en años recientes [35,39,47]. En diversos lugares de la literatura se pueden encontrar discusiones a cerca de su rol tanto en computación cuántica como en procesos de teoría de información [48–50], preparación remota de estados [40,51], distribución de entrelazamiento [52,53], clasificación de estados de dos qubits [54] y criptografía cuántica [55]. De hecho, se ha desarrollado un modo experimental de medir la discordia mediante un método operacional [56] y se ha obtenido una relación entre la potencia interferométrica y la cantidad de discordia en un sistema [57].

La discordia cuántica toma en consideración el total de las correlaciones que no pueden explicarse clásicamente en un sistema, ha sido identificada como la primera de las medidas de correlaciones cuánticas, ya que considera todos los diferentes tipos de correlaciones cuánticas además del entrelazamiento [44]. Para definir el *quantum discord*-(QD), es necesario describir la definición de información mutua en sistemas clásicos.

Clásicamente, la información mutua, *mutual information*-(MI), de un sistema bipartito, el cual se describe mediante dos variables aleatorias, una para cada subsistema, permite cuantificar el grado de independencia mutua entre las variables. Es decir, cuantifica el monto de información que se puede inferir de una variable conociendo la otra. Esta se puede definir de dos formas equivalentes [58,59]

$$H(X : Y) \equiv H(X) + H(Y) - H(X, Y) \quad (5.12)$$

y

$$J(X : Y) \equiv H(X) - H(X|Y). \quad (5.13)$$

Donde $H(X)$ es la entropía de Shannon como se define en (D.4), para la variable X, $H(X, Y)$ es la entropía conjunta definida en (E.7) y $H(X|Y)$ es la entropía condicional dada por

$$H(X|Y) \equiv \sum_y p_y H(X|y), \quad (5.14)$$

es decir, es la entropía de la variable X dado que se obtuvo el valor y en la variable Y. Mediante el teorema de Bayes, podemos mostrar que

$$H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y) \quad (5.15)$$

por lo que $J(X : Y) \equiv H(X : Y)$.

Análogamente a los sistemas clásicos, en un sistema cuántico se puede definir la información mutua mediante

$$MI(\rho^{AB}) \equiv S(\rho^A) + S(\rho^B) - S(\rho^{AB}), \quad (5.16)$$

como se ilustra en la figura 5.1, donde S es la entropía de Von Neumann, como se define en (E.6).

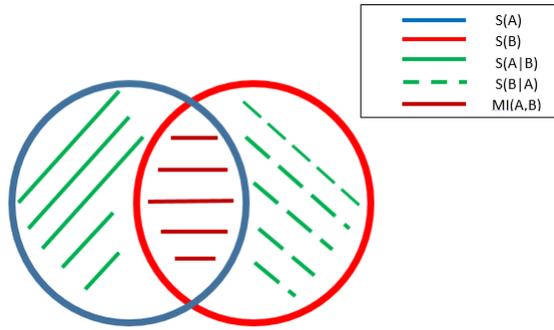


Figura 5.1: Información mutua y entropía en un sistema cuántico bipartito.

Sin embargo MI y J ya no son equivalentes en el caso cuántico. La dificultad surge del término condicional de J en sistemas cuánticos, ya que la entropía cuántica implica realizar una medición en uno de los subsistemas para así obtener información en el otro, lo cual no necesariamente nos dará el mismo resultado si lo hacemos al revés. Podemos definir entonces la entropía condicional de A dado que se ha medido B con un operador no selectivo, mediante [35]

$$S(\rho_{\Pi_i^B}^A)(A|B) \equiv \sum_i p_i S(\rho_i^A), \quad (5.17)$$

donde Π_i^B son los operadores no selectivos aplicados sobre el sistema B. De este modo, se puede obtener J como

$$J_{class}(A|B) \equiv S(\rho^A) - S(\rho_{\Pi_i^B}^A)(A|B). \quad (5.18)$$

Debemos notar que el subíndice *class* en J_{class} se refiere a que a pesar de que esta cantidad se ha definido para sistemas cuánticos, la información obtenida de las mediciones en uno de los subsistemas

está totalmente relacionada con las correlaciones que surgen de forma clásica puesto que sólo éstas se relacionan con una medición y sus posibles resultados los cuales también son clásicos.

Sin embargo, J_{class} depende de las mediciones elegidas, por lo que para obtener el discord debemos encontrar las mediciones que maximicen las correlaciones clásicas en el sistema. Por lo tanto, podemos definir a la discordia cuántica considerando un proceso de optimización en las mediciones en B

$$D_B(\rho^{AB}) \equiv MI(\rho^{AB}) - \text{máx} J_{class}(A|B). \quad (5.19)$$

Este es el discord de B a A y no necesariamente es el mismo que de A a B. Al sustituir la definición de información mutua (5.16) en la definición (5.19)

$$D_B(\rho^{AB}) = S(\rho^B) - S(\rho^{AB}) + \min_{\Pi_i} \{S(\rho_{\Pi_i^A}^A)(A|B)\}. \quad (5.20)$$

Es importante mencionar que el discord cuántico es equivalente al entrelazamiento en sistemas puros [39].

Dado que esta definición de discordia contiene una optimización, la cual en general es complicada para sistemas de muchas dimensiones, debemos encontrar otros estimadores de la discordia que puedan definirse de manera que sean operables. Según [44], un estimador de correlaciones no clásicas debe cumplir las siguientes características

- debe ser nulo para estados factorizables y estados clásicos,
- debe ser invariante ante transformaciones unitarias locales y
- debe ser no negativo.

Un cuantificador que cumple con estas características es la Incertidumbre Cuántica Local (*Local Quantum Uncertainty*-LQU) y es presentado a continuación. Su operación en el sistema se encuentra determinada por la medición en uno sólo de los subsistemas, y su funcionamiento se basa en calcular la mínima de las incertidumbres obtenida al medir un conjunto de operadores. Posteriormente se definirá este cuantificador en el caso de un sistema cuyos subsistemas tienen dimensión 2 y d , respectivamente, lo cual nos permitirá calcular la discordia en los subsistemas del qutrit que se estudia en este trabajo.

5.4. Incertidumbre cuántica local

Las mediciones, en general perturban un estado cuántico. En contraste con la teoría clásica en donde cualesquiera dos observables pueden ser medidos con una precisión arbitraria. La teoría cuántica, mediante el principio de incertidumbre de Heisenberg, establece que no se pueden obtener valores simultáneos de dos observables que no conmuten entre sí con una cantidad arbitraria de incertidumbre. No es el caso, sin embargo para la medición de un sólo observable, pues en existen algunos sistemas

en los que sí se puede determinar el valor de una medición local con precisión infinita[referencia], sin embargo existen estados en los cuales una incertidumbre cuántica se presenta ineludiblemente al medir algún observable. En un estado cuántico, la incertidumbre surge debido a su grado de mezcla o debido a su no conmutatividad con el observable medido. Esto sucede en el caso de que el sistema contenga correlaciones cuánticas de tipo discordia [60], Girolami et al. [60] introdujeron el concepto de LQU como una medida de la mínima incertidumbre en la medición de un observable local en un estado cuántico. Esta cantidad identifica la cantidad total del error debido a la no clasicidad del sistema que surge de la no conmutatividad entre el estado y el observable y que es invariante ante mezclas clásicas. Ver figura 5.2.

De acuerdo al trabajo de Girolami et al. [60], la incertidumbre cuántica local se puede entender como una evidencia de que la coherencia cuántica se manifiesta en la indeterminación de los resultados de una medición debido a correlaciones cuánticas. De esto modo, podemos definir a las correlaciones no clásicas en un sistema bipartito como un grado de coherencia irreducible al medir observables locales. De esta discusión podemos ver que este importante resultado relaciona una propiedad local como lo es la incertidumbre cuántica, con una característica global como lo son las correlaciones cuánticas.

Para cuantificar este tipo de correlaciones supongamos que medimos un observable representado como un operador Hermitiano no degenerado, con descomposición espectral

$$A = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i|. \quad (5.21)$$

La información acerca de la medición de A en un estado ρ puede medirse al comparar el cambio del estado después de la medición con el estado previo [60].

Asumiendo que el estado después de la medición se puede expresar como

$$\rho \longrightarrow \rho' = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| \rho |a_i\rangle \langle a_i|,$$

vemos que $\rho = \rho'$ si y sólo si A conmuta con ρ . Lo cual sólo puede suceder si y sólo si el estado es un eigenestado o una mezcla de eigenestados del observable, $\rho = \sum_i p_i |a_i\rangle \langle a_i|$. Es decir, si y sólo si el estado es incoherente en la base del observable [60]. Si esto sucede, la incertidumbre en la medición sólo se deberá a la falta de conocimiento del estado, lo cual es una fuente de correlaciones clásicas.

En el caso de un estado general con coherencia, entonces la incertidumbre en la medición se debe tanto a las correlaciones clásicas como a un término adicional que está relacionado con la no clasicidad del sistema.

Existen varias maneras de cuantificar la incertidumbre en una medición. La varianza es útil para este fin, sin embargo, a pesar de ser un indicador de incertidumbre, no es útil para nuestro propósito pues no es invariante bajo mezcla de estados y no se anula aún si el observable y el estado conmutan. Una manera de resolver este problema es dividir la varianza en su contribución clásica y cuántica, $V = V_q + V_c$ [60]. Una medida de varianza o incertidumbre cuántica V_q debe ser nula si y sólo si el estado y el observable conmutan. Así mismo, una medida de incertidumbre cuántica debe ser no creciente bajo una mezcla clásica de estados. Una norma arbitraria del conmutador no es del todo útil para nuestro fin, pero en 1963 Wigner-Yanase [61] definieron la *skew information* mediante

$$\mathcal{I}(\rho, K) := -\frac{1}{2} \text{tr}\{[\rho^{1/2}, K]^2\}, \quad (5.22)$$

la cual cumple todas las características necesarias [60], además de ser relativamente fácil de calcular. La *skew information* está acotada superiormente por la varianza total, siendo igual a la varianza total únicamente para estados puros y cero para estados máximamente mezclados [60].

Examinemos ahora la incertidumbre cuántica de un estado de Bell, $|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ al

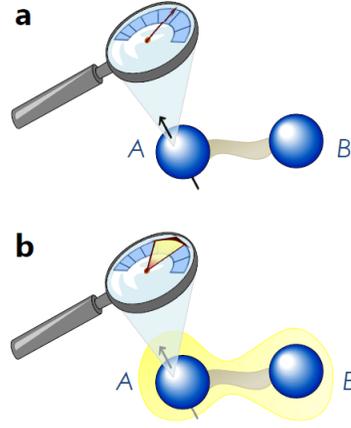


Figura 5.2: Mediciones locales en sistemas clásica y cuánticamente correlacionados. Supongamos que tenemos un sistema bipartito descrito por ρ_{AB} . Tenemos un medidor de correlaciones que afecta al sistema A. Si el sistema no está correlacionado con B o sólo clásicamente, entonces el medidor puede medir un observable sin una incertidumbre cuántica intrínseca como se ilustra en la figura (a). Un estado con cero incertidumbre implica la existencia de un observable local con certeza cuántica total (conmutatividad con el estado). Tanto estados entrelazados, como estados mixtos separables pueden tener incertidumbre en algún operador. La única clase de estados que permanecen invariantes bajo mediciones locales son los estados CQ (5.24). En contraste, en la figura (b) consideramos un sistema que se encuentra correlacionado cuánticamente, ya sea por entrelazamiento o por cualquier correlación de tipo discord. En este caso, cualquier medición de un observable en A, es afectada por una incertidumbre cuántica. La mínima cantidad de incertidumbre cuántica asociada a la medición se utiliza para cuantificar el grado de discordia cuántica en el sistema ρ percibida por el subsistema A. Imagen tomada de [60].

realizar la medición del observable $\sigma_z \otimes \sigma_z$. Claramente es un eigenestado del observable, por lo que la incertidumbre será nula. Sin embargo, si realizamos cualquier otra medición de spin en otra dirección, la incertidumbre no será cero. De hecho, en general sólo estados separables puedan ser eigenestados de observables locales.

Si ahora analizamos el caso de un estado mezclado, es claro que no queremos asociar una incertidumbre cuántica al grado de mezcla. Dada una medición local, requerimos que el estado permanezca invariante si y sólo si conmuta con el observable. Si consideramos que la medición es realizada en el subsistema A, sin pérdida de generalidad, esto significa que el estado debe escribirse como

$$\rho_{AB} = \sum_{ij} p_i |i\rangle \langle i|_A \otimes |\psi_{ij}\rangle \langle \psi_{ij}|_B, \quad (5.23)$$

donde $|i\rangle$ forman una base ortonormal de A.

Si consideramos que en general $|\psi_{ij}\rangle\langle\psi_{ij}|_B$ es un operador en B , entonces debe poder escribirse como combinación lineal de σ_B^i , por lo que en general el estado puede escribirse como

$$\rho_{AB} = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|_A \otimes \sigma_B^i. \quad (5.24)$$

Tales matrices de densidad se llaman estados clásico-cuánticos (*classical-quantum-CQ*), y son precisamente los estados con discordia cero [60]. Esto se debe a que para cualquier CQ, existe al menos una medición local, la cual no altera el estado y por tanto su incertidumbre será cero. Por lo tanto, la mínima de las incertidumbres en mediciones locales es un cuantificador de correlaciones cuánticas.

Es adecuado entonces introducir la definición de incertidumbre cuántica local (LQU), como la mínima *skew information* entre el estado del sistema y una observable local [60].

Consideremos un conjunto de observables hermitianos con respecto a Λ , $\{K_A^\Lambda := K_A^\Lambda \otimes \mathbb{1}_B\}$, no degenerado. Entonces la LQU está dada por

$$\mathcal{U}_A^\Lambda(\rho_{AB}) := \min_{K_A^\Lambda} \mathcal{I}(\rho_{AB}, K_A^\Lambda), \quad (5.25)$$

donde la optimización es sobre el conjunto de observables locales, cuyo espectro está dado por $K_A^\Lambda = U_\Lambda \text{diag}(\Lambda) U_\Lambda^\dagger$, con $U_\Lambda \in SU(d)$, donde $d = \dim(A)$ y $\text{diag}(\Lambda)$ es una matriz diagonal cuyas entradas son los eigenvalores del observable U_Λ . La minimización es entonces sobre todas las transformaciones unitarias U_A . Sabemos que la elección de cualquier espectro está relacionada con medidas diferentes de correlaciones en el sistema. Sin embargo gracias a la optimización, la LQU es independiente de la base en la que se represente el operador.

Algunas características de la LQU son:

- es cero si y sólo si el estado es de la forma CQ,
- es invariante bajo transformaciones unitarias,
- es monótona decreciente bajo operadores que conservan la traza y son completos positivos y
- se reduce al entrelazamiento para estados puros.

estas propiedades son demostradas por Girolami et al. [60]. Dado que la expresión (5.25) no es una ecuación que sea útil para operar en un sistema determinado, es importante encontrar una expresión particular para el sistema de nuestro interés, el cual consiste de tres sitios o qubits y en donde nos interesa obtener la LQU en sistemas de dimensión $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}$. En la siguiente sección obtendremos una forma de la LQU para sistemas formados por un qubit y, en general, para un qudit, el cual es una unidad de información cuántica consistente de d niveles o estados.

5.4.1. Restricción a sistemas $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^d$

Ahora obtendremos la LQU en un sistema bipartito compuesto por un *qubit* y un *qudit*. El objetivo es encontrar una expresión operable de la LQU para este caso.

Antes debemos notar que, dado que el sistema A es un *qubit*, todas las transformaciones unitarias que dependen del espectro en la que se descompongan, son equivalentes salvo un factor multiplicativo. Esto se debe a que un observable local K_A^Λ con un espectro no degenerado, $\Lambda = \{\lambda_1, \lambda_2\}$ puede ser parametrizado en la base de las matrices de Pauli como

$$K_A^\Lambda = U_A \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} \sigma_{zA} + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \mathbb{1}_A \right) U_A^\dagger = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} \mathbf{n} \cdot \sigma_A + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \mathbb{1}_A, \quad (5.26)$$

y al obtener la *skew information* observamos que

$$\mathcal{I}(\rho_{AB}, K_A^\Lambda) = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)^2}{4} \mathcal{I}(\rho_{AB}, \mathbf{n} \cdot \sigma_A). \quad (5.27)$$

Esto se obtiene al observar que el lado izquierdo de la igualdad (5.27), utilizando la definición (5.22), la propiedad cíclica de la traza y la definición de conmutador se convierte en

$$\frac{(\lambda_1 - \lambda_2)^2}{4} \text{tr}[\rho^{1/2}(\mathbf{n} \cdot \sigma_A)^2 \rho^{1/2} - \rho(\mathbf{n} \cdot \sigma_A)^2], \quad (5.28)$$

lo que es igual a

$$\frac{(\lambda_1 - \lambda_2)^2}{4} \mathcal{I}(\rho_{AB}, \mathbf{n} \cdot \sigma_A). \quad (5.29)$$

Por lo tanto, para sistemas de esta dimensionalidad la elección del espectro no afecta la cuantificación de las correlaciones cuánticas, por lo que sin pérdida de generalidad supondremos que el operador con el que vamos a trabajar es de la forma $K_A = \mathbf{n} \cdot \sigma_A$.

Entonces utilizando la definición de la LQU (5.25) tenemos que

$$-\frac{1}{2} \min_{\mathbf{n}} \text{tr}[\rho^{1/2}, \mathbf{n} \cdot \sigma_A]^2 = \min_{\mathbf{n}} \{ \text{tr}[\rho^{1/2}(\mathbf{n} \cdot \sigma_A)^2 \rho^{1/2}] - \frac{1}{2} [\rho^{1/2}(\mathbf{n} \cdot \sigma_A) \rho^{1/2}(\mathbf{n} \cdot \sigma_A) + (\mathbf{n} \cdot \sigma_A) \rho^{1/2}(\mathbf{n} \cdot \sigma_A) \rho^{1/2}] \}. \quad (5.30)$$

Ahora bien, el término $\text{tr}[\rho^{1/2}(\mathbf{n} \cdot \sigma_A)^2 \rho^{1/2}]$ es igual a

$$\text{tr}[\rho^{1/2}(n_x^2 \sigma_x^2 + n_y^2 \sigma_y^2 + n_z^2 \sigma_z^2) \rho^{1/2} + \rho^{1/2} \sum_{i \neq j} (n_i n_j \sigma_i \sigma_j) \rho^{1/2}]. \quad (5.31)$$

Aplicando las reglas de multiplicación de las matrices de Pauli, $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$, obtenemos que

$$\text{tr}[\rho^{1/2}(\mathbf{n} \cdot \sigma_A)^2 \rho^{1/2}] = \text{tr}[\rho] = 1. \quad (5.32)$$

Sustituyendo en (5.30) y aplicando la propiedad cíclica de la traza

$$\text{tr}\{ABC\} = \text{tr}\{CAB\},$$

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2} \min_{\mathbf{n}} \text{tr}[[\rho^{1/2}, \mathbf{n} \cdot \sigma_{\mathbf{A}}]^2] &= 1 - \max_{\mathbf{n}} \sum_{ij} \text{tr}[n_i \rho_{AB}^{1/2} (\sigma_{iA} \otimes \mathbf{1}_B) \rho_{AB}^{1/2} (\sigma_{jA} \otimes \mathbf{1}_B) n_j] \\
&\equiv 1 - \max_{\mathbf{n}} \left[\sum_{ij} n_i W_{ij} n_j \right] = 1 - \lambda_{\max}(W_{AB}).
\end{aligned} \tag{5.33}$$

Donde definimos los elementos de matriz

$$(W_{ij})_{AB} := \text{tr}[\rho^{1/2} (\sigma_{iA} \otimes \mathbf{1}_B) \rho^{1/2} (\sigma_{jA} \otimes \mathbf{1}_B)]. \tag{5.34}$$

Por lo tanto, la expresión de la LQU respecto al subsistema A, para sistemas de dimension $2 \otimes d$ está dada por

$$\mathcal{U}_A(\rho_{AB}) = 1 - \lambda_{\max}(W_{AB}). \tag{5.35}$$

En donde hemos supuesto (sin pérdida de generalidad) que A es un qubit y B es un qudit.

La ecuación (5.35) es de suma importancia, pues nos permitirá caracterizar las correlaciones cuánticas presentes en nuestro sistema modelo, y, más importante aún, nos permitirá identificar cómo estas influyen en la eficiencia de transporte de energía.

Capítulo 6

Transporte eficiente de energía en un qutrit

Después de haber consolidado la base teórica que nuestra investigación requiere en los capítulos anteriores, en este capítulo plantaremos el problema y mostraremos los resultados obtenidos.

Los fenómenos de transporte cuántico han sido estudiados en diversos sistemas físicos, en particular ha sido de interés el entendimiento de los procesos fundamentales que rodean el transporte de energía en complejos fotosintéticos. Esto debido a que este tipo de sistemas pueden lograr una eficiencia en el transporte hasta del 90 % en ambientes naturales a temperaturas y condiciones climáticas normales para el ser humano [3]. Es, por lo tanto, de gran importancia su entendimiento, ya que desde el punto de vista tecnológico pueden ser las bases para el diseño de nuevas nanoestructuras que sirvan para construir celdas solares de alta eficiencia mediante transporte cuántico. Así mismo, se ha considerado que el entendimiento de este fenómeno puede permitir dar un paso más en el procesamiento y transferencia de información cuántica, ya que en años recientes se han realizado estudios experimentales en sistemas fotosintéticos [62–64]. Además de observar el fenómeno, se han buscado explicaciones teóricas a tal efecto [2]. Se ha propuesto que el transporte eficiente es debido a una interacción entre una evolución coherente y el ruido inducido por el ambiente, un efecto llamado transporte cuántico asistido por el ambiente *Environment Assisted Quantum Transport*-(ENAQT), o transporte asistido por *dephasing* [1].

En sistemas coherentes, el desorden estático además de la coherencia entre los sitios, dan lugar a un acotamiento de la amplitud de probabilidad, fenómeno conocido como Localización de Anderson [15]. Este fenómeno causa que el excitón se localice en la red y por lo tanto, inhibe el transporte. En ese caso, el ENAQT puede ser entendido como una supresión de la localización coherente mediante ruido, lo que ayuda a la excitación a moverse por el complejo desordenado de moléculas fotosintéticas hacia el centro de reacción (RC) [3], donde la energía es recolectada para propiciar las primeras reacciones químicas de la fotosíntesis.

Los complejos recolectores de energía están típicamente constituidos de muchos cromóforos [1], los cuales transforman fotones en excitones (pares electrón-hueco) y los transportan a un centro de reacción

que llamaremos RC en nuestro sistema. Consideramos los complejos como sitios, cada uno conectado entre sí y uno de ellos al RC. Debido a que el tiempo de decoherencia del excitón es mucho más grande que el tiempo de transferencia por la red, la suposición del subespacio de una sola excitación por sitio está justificada. La dinámica de este complejo será modelada con un Hamiltoniano que describe el intercambio coherente de excitaciones entre sitios y tres términos de tipo Lindblad que toman en cuenta el *dephasing* y la disipación causada por el ruido del ambiente.

Como sistemas, estudiaremos una parte del complejo de *Fenna-Matthews-Olson* (FMO), de la bacteria verde del azufre el cual está compuesto por siete moléculas (pigmentos) *Bacteriochlorofil-a* (BChl-a). Ver figura 6.1. En particular, en este trabajo estudiaremos una sub-unidad del FMO compuesta por tres moléculas (trímero), en las que el acoplamiento entre dos de ellas es muy fuerte, mientras que el acoplamiento de una tercera a éstas es muy débil.

Describimos al sistema de los cromóforos mediante el Hamiltoniano *tight-binding* [65]

$$H_S = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i<j}^N V_{ij} (|i\rangle \langle j| + |j\rangle \langle i|), \quad (6.1)$$

donde ε_i es la energía de excitación del sitio $|i\rangle$ y V_{ij} el acoplamiento entre los sitios $|i\rangle$ y $|j\rangle$.

Denotaremos el estado vacío, en el que no hay excitones como $|g\rangle$ y al centro de reacción como $|RC\rangle$. Ninguno de estos dos estados están acoplados a los sitios mediante H_S .

La interacción de los sitios con el ambiente la describiremos con una ecuación de Lindblad, pues a pesar de ser una suposición fuerte sobre las características del sistema, logra mostrar las propiedades cualitativas del transporte [3]. Asumimos entonces que la dinámica de excitaciones en el trímero puede ser modelada con la ecuación maestra dada por [3]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H_S, \rho] + \mathcal{L}_{deph}[\rho] + \mathcal{L}_{diss}[\rho] + \mathcal{L}_{RC}[\rho], \quad (6.2)$$

donde \mathcal{L} son superoperadores no unitarios de tipo Lindblad, como se dedujeron en el capítulo 3 que actúan en la matriz de densidad ρ y servirán para modelar los diferentes tipos de interacción entre el sistema y su ambiente como se describe a continuación.

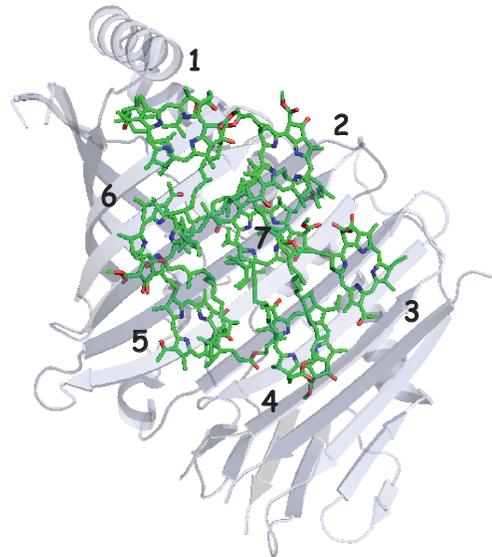


Figura 6.1: Distribución de moléculas de *Bacteriochlorofil-a* de una unidad del complejo *Fenna-Matthews-Olson* (FMO). Imagen tomada de [3].

▪

$$\mathcal{L}_{deph} = \sum_i^N 2\gamma_i \left(|i\rangle \rho_{ii} \langle i| - \frac{1}{2} \{ |i\rangle \langle i|, \rho \} \right), \quad (6.3)$$

describe un proceso de *dephasing* puro que disminuye la coherencia entre los sitios la cual está representada por los elementos fuera de la diagonal de la matriz de densidad, escrita en la base de sitios. Esta disminución ocurre a una tasa γ_i para cada sitio $|i\rangle$ y puede ser pensada como la acción que tienen las fluctuaciones inducidas por el ambiente en las energías de sitio [65]. En esta ecuación $\{\dots\}$ es el anticonmutador.

▪

$$\mathcal{L}_{diss} = \sum_i^N 2\Gamma_i \left(|g\rangle \rho_{ii} \langle g| - \frac{1}{2} \{ |i\rangle \langle i|, \rho \} \right), \quad (6.4)$$

describe la pérdida de la energía de la excitación al medio ambiente debido a una posible recombinación del excitón entre los sitios.

▪

$$\mathcal{L}_{RC} = 2\Gamma_{RC} \left(|RC\rangle \rho_{kk} \langle RC| - \frac{1}{2} \{ |k\rangle \langle k|, \rho \} \right), \quad (6.5)$$

describe la transferencia unidireccional de la excitación del sitio $|k\rangle$ al RC, donde la energía es utilizada para impulsar las primeras reacciones químicas de la fotosíntesis.

En este trabajo estudiamos la interacción entre el ruido del ambiente provocado por el *dephasing*, la disipación de la excitación al ambiente y al centro de reacción con la dinámica coherente, lo cual resulta en un incremento en la eficiencia del transporte, la cual está dada por

$$\eta = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle RC | \rho | RC \rangle. \quad (6.6)$$

6.1. ENAQT

Cuando la luz interactúa con un sistema molecular, promueve a sus subsistemas de su estado basal a su estado excitado. Esta energía, capturada en forma de excitaciones, se puede mover a través del complejo molecular mediante interacciones electrostáticas entre los dipolos de los subsistemas que constituyen al organismo o material. Estas excitaciones, o excitones, son *cuasipartículas* asociadas al transporte de energía en sistemas naturales fotosintéticos. Desafortunadamente, unas de las más grandes desventajas de estos sistemas orgánicos, es que el transporte eficiente de excitones se ve rápidamente afectado por el desorden inherente del organismo. Este desorden estático da lugar a un efecto conocido como la localización de Anderson [15] en el que la interferencia destructiva de las posibles trayectorias del excitón, acota la amplitud de probabilidad y causa que la excitación se quede "atrapada" en algunos sitios [1].

El ruido en sistemas coherentes de redes cuánticas desordenadas es comúnmente considerado como perjudicial para el transporte eficiente de energía, sin embargo, se ha encontrado que para ciertos valores de intensidad de ruido (*dephasing*), la localización de Anderson es suprimida y por lo tanto la

eficiencia incrementa. Esto se explica al considerar que la coherencia es la principal causante de que la excitación se localice y por lo tanto se genere interferencia destructiva. El ruido tiene el efecto de romper esta coherencia en el sistema y por tanto de disminuir la localización [1].

Cuando el *dephasing* es muy grande, el transporte se ve afectado por el efecto Zenón, pues un ruido muy grande en el sistema es equivalente a una medición repetida en la base de los sitios [1], lo cual no permite que el excitón evolucione del estado inicial.

6.1.1. ENAQT en un qutrit

El qutrit se encuentra formado por los tres sitios por los que la excitación se transporta coherentemente con el Hamiltoniano

$$H_S = \sum_{i=1}^3 \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i<j}^3 V_{ij} (|i\rangle \langle j| + |j\rangle \langle i|). \quad (6.7)$$

Mientras que la interacción con el ambiente y el RC se modela con los operadores de Lindblad (6.3)-(6.5). La dinámica del excitón en la red de tres sitios depende totalmente del acoplamiento entre los sitios, de las energías de sitio y de las tasas de decaimiento en los operadores de Lindblad. Estos valores han sido tomados como en el trímero de un complejo FMO, en éste el sitio 3 es el más cercano al centro de reacción, por lo que asumimos que es éste el que mas aporta energía al RC [3] por lo que entonces $k = 3$. La tasa de transferencia de energía del sitio 3 al RC es considerada como $\Gamma_3 = 1ps^{-1}$, mientras que las tasas de decaimiento de los demás sitios tienen el valor $\Gamma_i = 5 \times 10^{-4}ps^{-1}$ y consideramos a las tasas de *dephasing* iguales para todos los sitios, $\gamma_i = \gamma$ valor que tomamos como un parámetro variable. La distribución de energías de sitio y de acoplamientos del Hamiltoniano H_S están dadas por las tablas 2 y 4 de [66]:

$$H_S = \begin{pmatrix} 215 & -104,1 & 5,1 \\ -104,1 & 220 & 32,6 \\ 5,1 & 32,6 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.8)$$

los cuales se encuentran en unidades de cm^{-1} .

Consideramos el estado inicial del sistema como una excitación localizada en un solo sitio, el cual ha sido estudiado así en diversos estudios de transferencia de excitones y ENAQT [1-3, 10].

En la base de sitios llamamos al primero de ellos como $|1\rangle$, de manera que el estado inicial es

$$\rho_{t=0} = |1\rangle \langle 1|. \quad (6.9)$$

En la figura 6.2 se muestra la eficiencia como función de la intensidad de ruido (*dephasing*) para un tiempo de 10 ps. Podemos observar que a $\gamma = 15,46ps^{-1}$ el transporte asistido por ruido tiene lugar, mientras que a regímenes con valores menores o mayores la excitación se localiza, en el primer caso debido a la evolución coherente del sistema y en el segundo debido al efecto Zenón, como se ilustra en las figuras de poblaciones y coherencias (figuras 6.4 y 6.5). Como se mencionaba anteriormente, en

un sistema cuántico desordenado la localización disminuye el transporte a bajos niveles de ruido. En contraste, cuando la intensidad de ruido es grande, la decoherencia produce un tipo de efecto Zeno en el sistema, lo cual también disminuye el transporte. Sin embargo, a niveles intermedios de ruido la coherencia y decoherencia pueden colaborar para producir una alta eficiencia en el transporte. En esta investigación buscamos observar este fenómeno en la red de FMO compuesta por tres cromóforos.

Debemos mencionar que en el complejo de FMO este modelo es altamente ideal, ya que ignora la propagación y regreso del excitón, así como las correlaciones temporales de largo alcance de la red con el ambiente. Sin embargo, bajo estas limitaciones aún podemos observar las características cualitativas del transporte asistido.

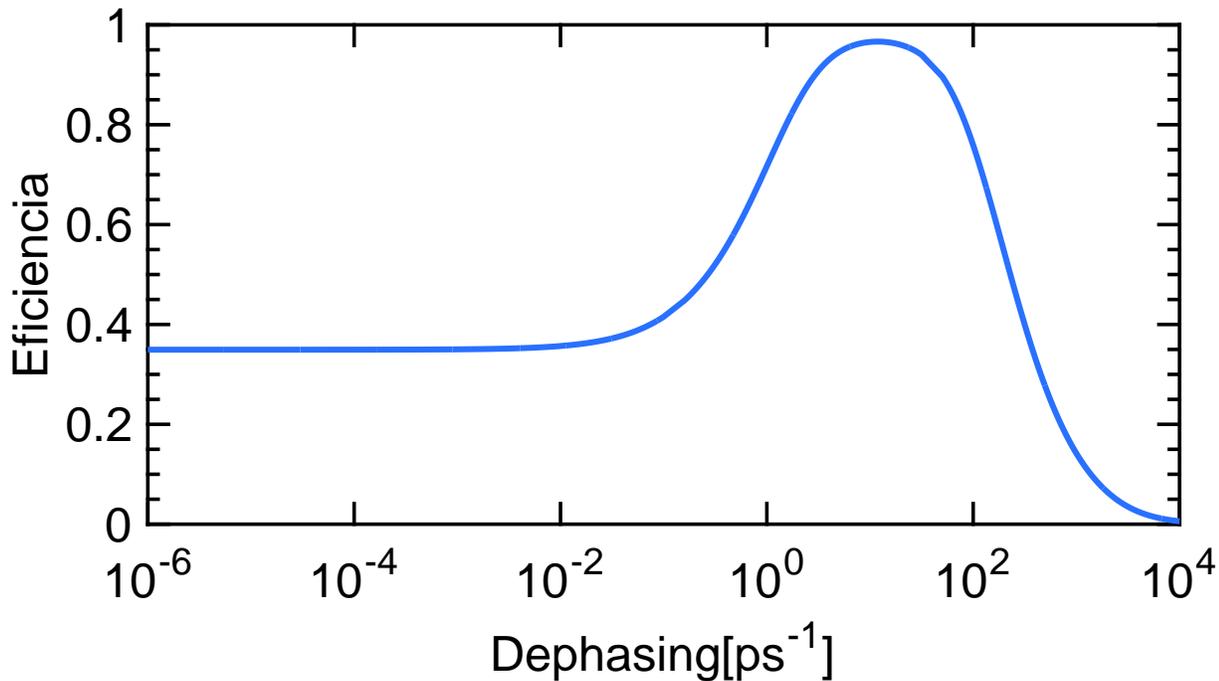


Figura 6.2: Eficiencia como función de la intensidad de ruido en escala logarítmica. Observamos que cuando el dephasing es pequeño, la evolución del sistema en el régimen coherente muestra localización de la excitación, lo que causa que la eficiencia sea de aproximadamente 30 %. Al incrementar el dephasing la localización es suprimida y la eficiencia se encuentra cerca del 97 %, lo que distingue al ENAQT. Para un ruido grande el transporte de energía es suprimido por el efecto Zenón y la eficiencia se vuelve cero, el mismo valor que la cantidad inicial de población del centro de reacción.

En la figura 6.3 se muestra la población del RC cuando el sistema se encuentra sin ruido, cuando el ruido se encuentra en el régimen de máxima eficiencia y cuando el valor de ruido es máximo. Se observa el ENAQT en comparación con los otros dos regímenes, el aumento de la eficiencia para el ruido crítico es de aproximadamente 65 % para el caso sin ruido y de casi 97 % para el régimen de ruido saturado.

En la figura 6.4 se muestra la evolución de las poblaciones en las diferentes regiones de la gráfica de eficiencia como función del ruido. En la gráfica 6.4(a) podemos observar que las poblaciones se encuentran mayormente concentradas en los sitios 1 y 2 (línea azul y roja respectivamente, mientras que la

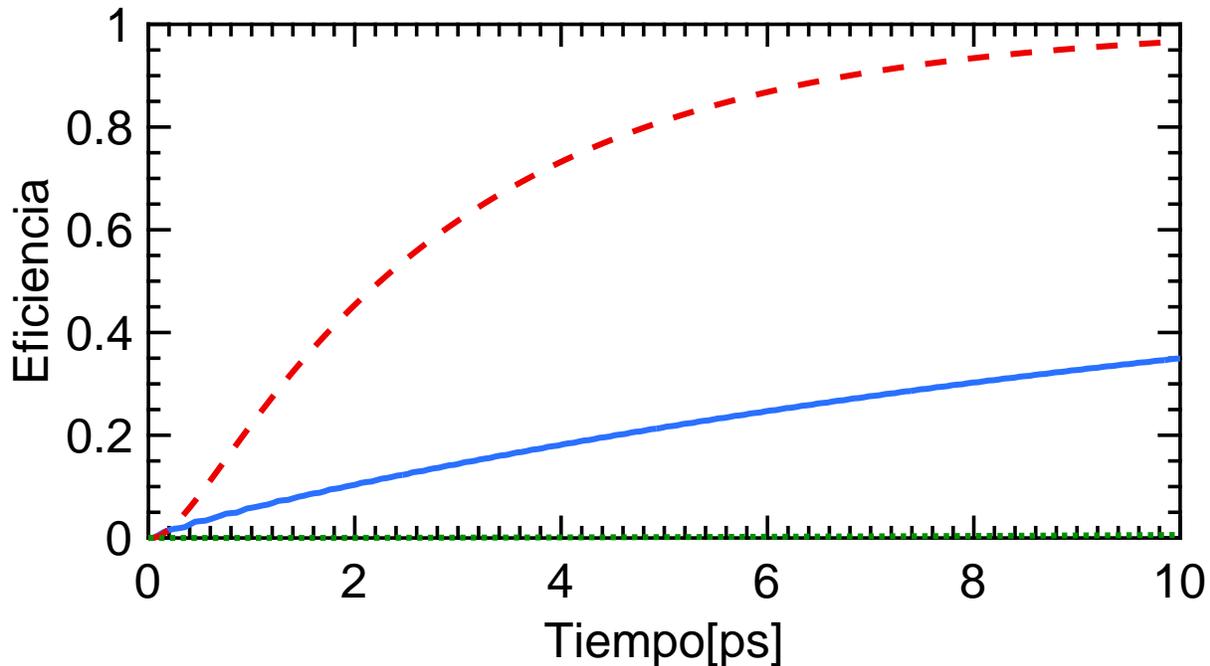


Figura 6.3: Población del centro de reacción en el tiempo para el caso del ruido correspondiente al régimen de máxima eficiencia $\gamma = 12,46\text{ps}^{-1}$ (línea roja discontinua), sin ruido (línea azul sólida) y con el valor máximo de ruido $\gamma = 1 \times 10^4\text{ps}^{-1}$ (línea verde punteada). Observamos que en el caso de máxima eficiencia, prácticamente toda la población se transporta al centro de reacción. El transporte de la población total al centro de reacción ocurrirá conforme $t \rightarrow \infty$. Con el ruido óptimo, la eficiencia incrementa en aproximadamente 65 % respecto a la dinámica coherente (línea azul sólida) y en aproximadamente 97 % respecto al ruido máximo.

población del sitio 3 (línea verde) mantiene un valor que decae lentamente a cero, mostrando que casi toda la población que llega a este sitio es transmitida al centro de reacción (línea negra), el cual incrementa su población con una eficiencia de aproximadamente 35 %. En la figura 6.4(b) las poblaciones de los sitios 1 y 2 decrecen más rápidamente, podemos notar que su decaimiento es acotado por una función envolvente continua y que tiende a cero en infinito más rápidamente que respecto a la figura anterior, mientras que la población del sink aumenta hasta un 40 % aproximadamente respecto a la su población inicial. En la figura 6.4(c) se puede notar que el transporte de la excitación al sink ocurre en mayor parte en los primeros 5ps, teniendo una interacción coherente en el primer picosegundo que es debilitada notoriamente por el ruido. La eficiencia con la que se obtiene la población final del sink es de aproximadamente 97 %. Las poblaciones de los demás sitios decaen asintóticamente a cero y de manera paralela en los sitios 1 y 2. En la subgráfica ampliamos la figura principal en la región en la que podemos observar el proceso de fluctuación de las poblaciones de los sitios 1 y 2, que ocurre de manera mucho más acotada respecto al proceso con *dephasing* menor (entre 0.3 y 0.6) y en los primeros 0.5 ps. En la figura 6.4(d) las poblaciones decaen en los primeros 2 ps y continúan disminuyendo linealmente, proceso que se encarga de transportar el resto de población al sink con una eficiencia de 20 % aproximadamente, sin embargo, a tiempo final la población total se encuentra con mayor probabilidad

en los sitios 1 y 2.

En la figura 6.4(e) notamos que las poblaciones ya no varían periódicamente como en los casos anteriores, de hecho comienzan a formar una brecha de probabilidad, en la cual el sitio 1 permanece con un valor mayor que el 2, y por lo tanto la excitación comienza a localizarse en éste, ya que el exceso de ruido no permite que el sink ni el sitio 2 se poblen. Finalmente, en la figura 6.4(f) la población del sitio 1(2) decae (aumenta) asintóticamente a un valor fijo que es mayor (menor) que 0.6, lo cual concuerda con la localización de la excitación en el sitio 1 causada por el efecto Zenón.

En la figura 6.5 se muestra la evolución de las coherencias en el tiempo para los mismos regímenes que en la figura 6.4. Podemos observar que las hipótesis fenomenológicas que discutimos anteriormente son correctas, ya que para el caso de ruido pequeño (figura 6.5(a)), las coherencias entre los sitios 1 y 2 (línea azul) se mantienen acotadas por aproximadamente 0.5, lo cual esperábamos, ya que estos sitios comparten las poblaciones de manera periódica y acotada, mientras que las coherencias correspondientes a los sitios 1 y 3 (línea verde) y 2 y 3 (línea roja) se mantienen acotadas por 0.2 y 0.25 respectivamente, lo cual se atribuye a que las poblaciones son transportadas con una eficiencia aproximada de 38 % del sitio 3 al RC, causando una interacción de baja intensidad entre los sitios 1-3 y 2-3 que es pequeña comparada con la interacción que existe entre los sitios 1 y 2. En la gráfica 6.5(b) se observan las coherencias para $\gamma = 2,2\text{ps}^{-1}$, las cuales repiten el proceso de oscilación para las tres líneas, como el de la figura anterior, sin embargo el ruido ha disminuido el tiempo que en que este proceso se lleva a cabo, así como los valores entre los que las coherencias se acotan, en la subfigura se observa que el decaimiento es continuo y describe la forma de una función envolvente que en el caso de las coherencias entre los sitios 2 y 3 (línea roja) decae más lento a cero después de 1 ps, esto se explica porque la interacción entre estos sitios ha aumentado debido a que la excitación ha comenzado a poblar el sitio 3 una vez que la coherencia del sitio 1 y 2 ha disminuido.

En la figura 6.5(c) observamos que las coherencias han disminuido casi a su totalidad, esta situación contrasta con el fenómeno observado en la figura 6.4(c), en la cual las poblaciones de los sitios son casi nulas debido al ruido de ambiente. Esta relación entre la coherencia y el ruido, se ve reflejada en la supresión de la localización, lo que permite que la excitación llegue con una eficiencia cercana al 97 % al centro de reacción(ENAQT). En la subfigura se observa que al inicio del transporte, la coherencia de los sitios 1 y 2 es grande, pero decae rápidamente mucho antes de 0.5 ps, ya que el ruido ha favorecido que la excitación se distribuya fácilmente del sitio 2 al 3, y por lo tanto sus coherencias también hayan aumentado.

Cuando el *dephasing* es más grande que el crítico, las coherencias de todos los sitios han sido disminuidas casi a su totalidad, permaneciendo únicamente las relacionadas a los sitios 2 y 3 ya que el excitón aún tiene probabilidad de llegar al sitio 2.

Finalmente, en la figura 6.5(e) se puede notar que las coherencias son totalmente suprimidas, del mismo modo que las poblaciones de los sitios 2 y 3. Ver figura 6.4(f). Esto se debe a que el exceso de ruido no permite que la excitación deje el estado inicial, causando una localización análoga a la causada

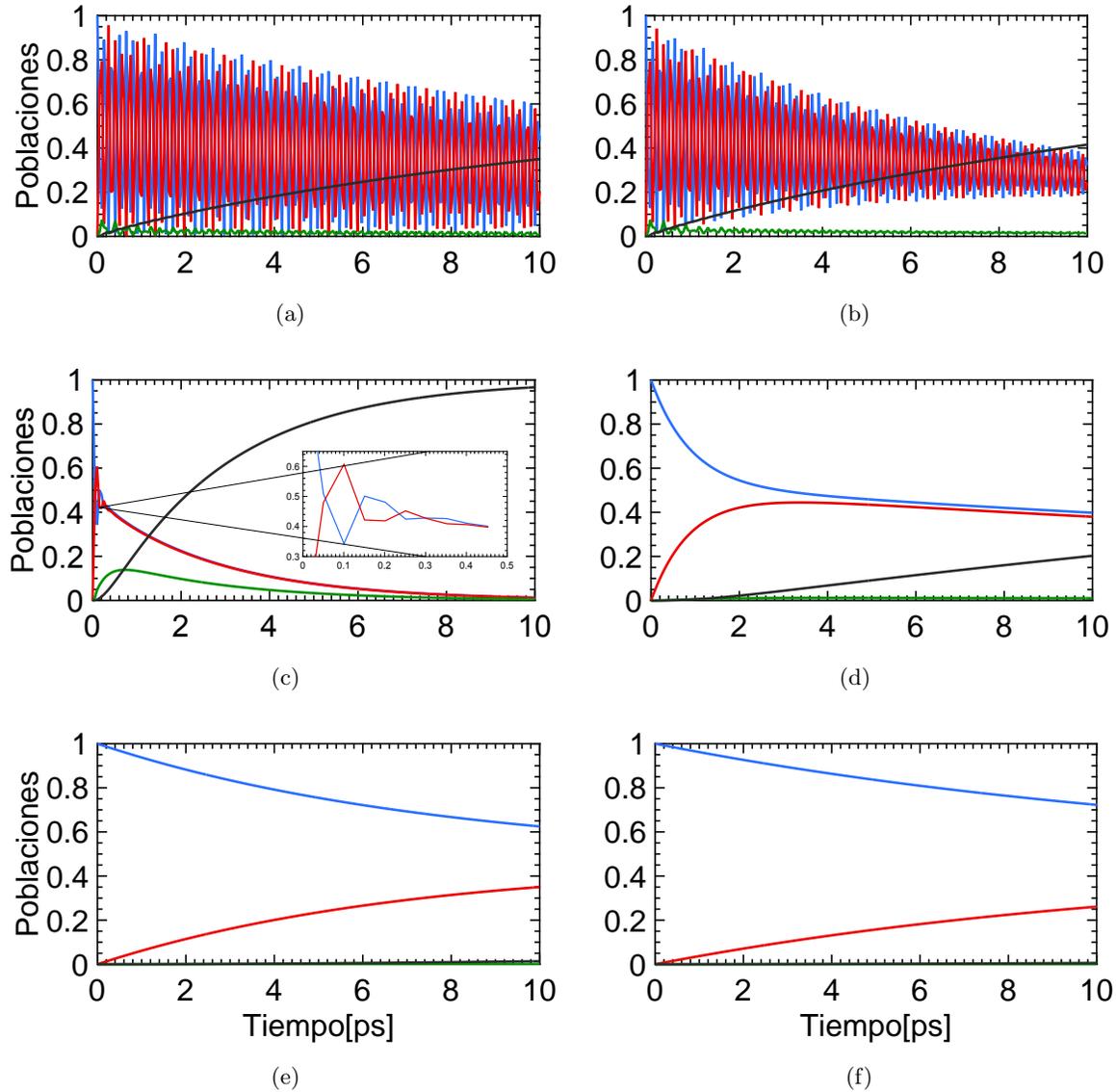


Figura 6.4: Poblaciones en los sitios para diferentes valores de dephasing. Población del sitio 1 línea azul, población del sitio 2 línea roja, población del sitio 3 línea verde y población del sink, línea negra. (a) En esta figura se muestra la evolución de las poblaciones para $\gamma = 1 \times 10^{-6} \text{ps}^{-1}$. (b) Evolución del sistema para $\gamma = 0,1 \text{ps}^{-1}$. (c) En esta gráfica se muestra la evolución de las poblaciones para el máximo valor de eficiencia que corresponde a $\gamma = 12,46 \text{ps}^{-1}$. Este es el resultado principal de esta sección, pues se puede distinguir el transporte cuántico asistido por ruido. (d) Conforme el ruido aumenta, la excitación vuelve a localizarse en los sitios 1 y 2, gráfica con $\gamma = 698,6 \text{ps}^{-1}$. (e) Caso de ruido $\gamma = 5,87 \times 10^3 \text{ps}^{-1}$, en donde podemos notar que el efecto Zenón comienza a dominar la dinámica. (f) Caso de máximo ruido, donde la eficiencia es nula, $\gamma = 1 \times 10^4 \text{ps}^{-1}$, la población se encuentra localizada en el sitio 1 con una probabilidad de aproximadamente 70 %.

por el efecto Zenón [1]. Lo que genera que haya una transición de caminata aleatoria cuántica a una caminata aleatoria clásica, en la que la probabilidad de que la excitación se mantenga en su estado

inicial es máxima y la probabilidad de moverse a otra posición es pequeña y sigue una distribución Gaussiana [3].

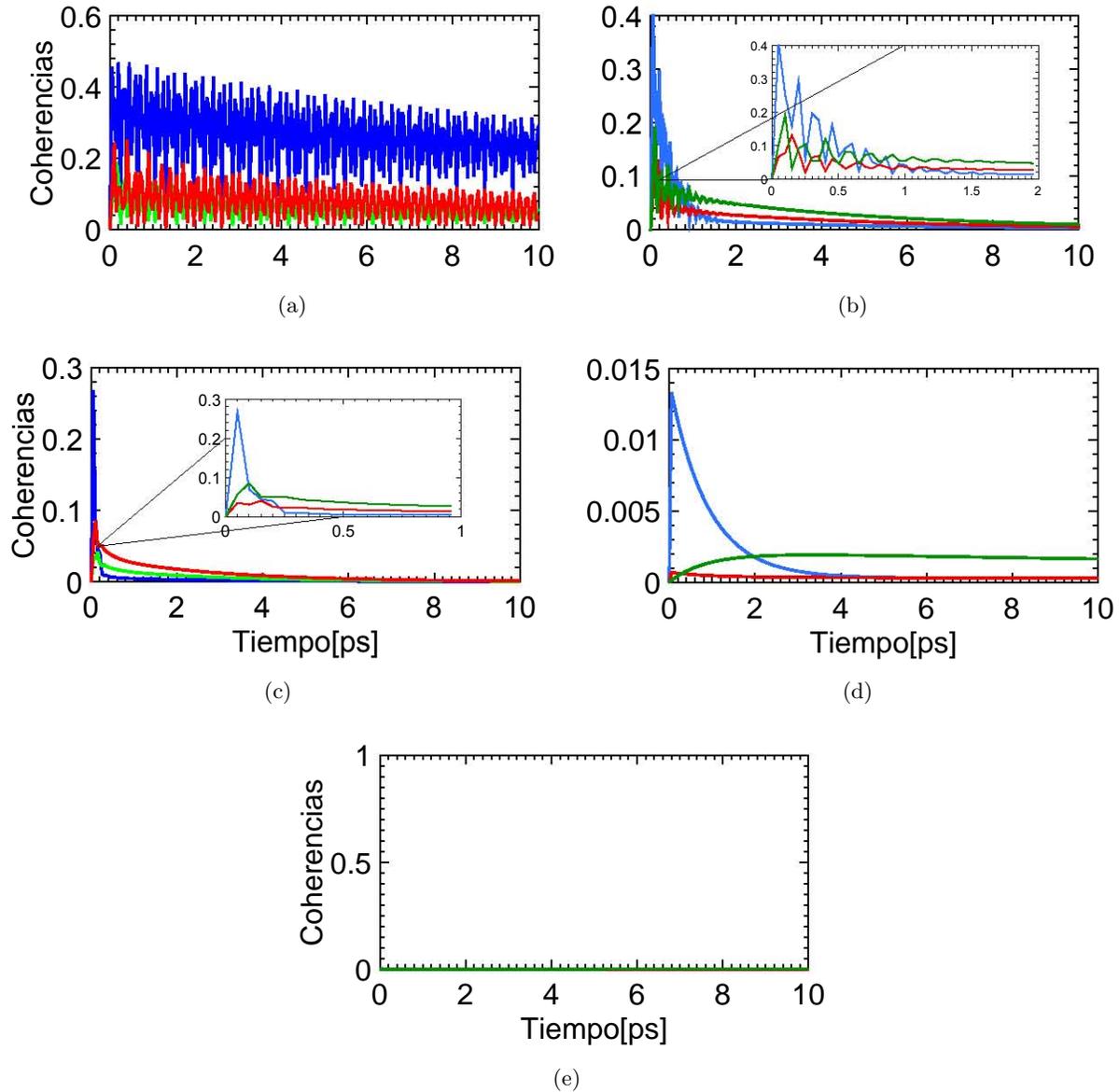


Figura 6.5: Parte real de las coherencias en los sitios para diferentes valores de dephasing. Coherencias entre los sitios 1 y 2 línea azul, coherencias entre los sitios 1 y 3 línea verde y coherencias entre los sitios 2 y 3 línea roja. En la figura (a) se grafican las coherencias para $\gamma = 1 \times 10^{-6} \text{ ps}^{-1}$. (b) Coherencias para un régimen de dephasing en el que la dinámica coherente aún gobierna el sistema, $\gamma = 2.2 \text{ ps}^{-1}$. (c) Coherencias para el régimen en el que el ENAQT se presenta, a $\gamma = 12.46 \text{ ps}^{-1}$. (d) Coherencias para $\gamma = 698.6 \text{ ps}^{-1}$, cuando el efecto Zenón comienza a presentarse. (e) Régimen de ruido saturado con $\gamma = 1 \times 10^4 \text{ ps}^{-1}$. El efecto Zenón gobierna totalmente la dinámica del sistema.

6.2. Visualización del qutrit asociado a la red cuántica de tres sitios

Con el propósito de tener una caracterización gráfica del estado del sistema y de observar el efecto del ruido en él, realizamos la visualización del qutrit correspondiente en primera instancia a los sitios $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ y posteriormente a los estados $\{|1\rangle, |2\rangle, |RC\rangle\}$, como se describió en el capítulo 4. Esto con el fin de visualizar tanto el flujo de la excitación del sitio 3 hacia el RC para el primer caso, como el aumento de la población en el RC para el segundo en los diferentes regímenes de ruido de ambiente. Es importante mencionar que dado que el sistema es abierto y no consideramos el estado base acoplado a los demás sitios, la matriz de densidad total no será un operador Hermitiano, lo cual solucionamos considerando la descomposición

$$\rho = \frac{1}{2}(\rho_{Herm} + \rho_{anti-Herm}), \quad (6.10)$$

en donde ρ_{herm} es la parte Hermítica del operador de densidad, dada por

$$\rho_{herm} = \frac{1}{2}(\rho + \rho^\dagger), \quad (6.11)$$

mientras que ρ_{aherm} es la parte Antihermitiana de la matriz dada por

$$\rho_{aherm} = \frac{1}{2}(\rho - \rho^\dagger). \quad (6.12)$$

Donde ρ^\dagger es la matriz adjunta de ρ .

Cabe mencionar que a pesar de que podría pensarse que la visualización del estado es incompleta al considerar por un lado la parte Hermitiana y por otro la Antihermitiana, esto se contrarresta al notar que toda la información acerca del vector \vec{a} se obtiene sólo de la parte Antihermitiana, mientras que las direcciones preferenciales y los semiejes del elipsoide se encuentran únicamente en la parte Hermítica. Lo que hace que la visualización del estado ρ esté completamente representada por el elipsoide y el vector \vec{a} correspondiente.

Primero mostramos la visualización del estado del sistema de los tres sitios, $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ a $t = 10\text{ps}$ en los tres regímenes en la figura 6.6.

En la figura 6.6(a) se muestra la visualización del estado final del sistema para $\gamma = 1 \times 10^{-4}\text{ps}^{-1}$. La dirección preferencial del elipsoide se encuentra dirigida en mayor proporción a la dirección asociada al vector propio λ_3 , el cual es paralelo al vector propio de ρ asociado al estado $|3\rangle$. De acuerdo a la relación entre \hat{T} y ρ , (4.42), notamos que la longitud del semieje ε_3 es cercana a 1 debido a que la población final del sitio $|3\rangle$ es mucho menor que las poblaciones del sitio 1 y 2 (ver figura 6.4(a)), lo cual también permite explicar que los semiejes asociados a estos sitios sean pequeños en comparación al 3. Efecto que está totalmente relacionado a la localización de la excitación en estos sitios, como se comprueba en la figura 6.6(c), en la cual se visualiza el estado en el régimen de transporte eficiente y se observa que dado que la localización es suprimida, casi toda la población se encuentra en el sink a tiempo final, lo

que se refleja en que la longitud de los tres semiejes del elipsoide sea similar y en que por tanto éste no muestre ninguna dirección preferencial. Finalmente en la figura 6.6(f) se muestra la visualización en el régimen de ruido saturado la cual muestra un elipsoide tridimensional con direcciones preferenciales asociadas a los sitios 2 y 3, mientras que el semieje asociado al sitio 1 está notoriamente disminuido. Lo que concuerda totalmente con la relación de las poblaciones de los sitios (ver figura 6.4(f)), como en los casos anteriores. En los tres casos observamos que el vector \vec{a} se encuentra dentro de la superficie del elipsoide, lo que significa que en los tres regímenes se obtiene un estado mixto a tiempo final.

Para completar la caracterización gráfica del sistema, implementamos la visualización del qutrit formado por dos sitios y el sink $\{|1\rangle, |2\rangle, |RC\rangle\}$, considerando estados normalizados de la forma

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) & 0 \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) & 0 \\ 0 & 0 & RC(t)^2 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

donde $RC(t)^2 \equiv |\langle RC(t)|RC(t)\rangle|^2$. Los resultados se muestran en la figura 6.7. En la figura 6.7(a) notamos que no existe una dirección preferencial en el elipsoide y que los tres semiejes tienen longitudes similares, lo cual se explica viendo la figura 6.4(a) en donde se observa que la población del sink es de aproximadamente 0.3, mientras que la población media de los sitios 1 y 2 es de aproximadamente 0.4. En la figura 6.7(c) se muestra el resultado principal de esta sección: la visualización del qutrit en el régimen de transporte eficiente, la cual nos permite identificar totalmente el estado del sistema cuando este fenómeno se presenta. La longitud del semieje ϵ_3 está dada por $\epsilon_3 = \sqrt{(1 - \lambda_1)(1 - \lambda_2)}$ y dado que $tr\{\hat{T} = 1\}$, la población del sink es inversamente proporcional a ϵ_3 (ver Tabla 6.1), de modo que cuando $t \rightarrow \infty$ la figura será un disco plano de radio 1 centrado en el origen. Finalmente, en la figura 6.7(f) observamos que la mayor cantidad de población se concentra en los sitios 1 y 2, lo cual concuerda con la gráfica 6.4(f). Podemos notar que entre los regímenes de alta eficiencia (figura 6.7(c)) y baja eficiencia (figuras 6.7(a) y 6.7(f)), la diferencia básica entre las representaciones se encuentra en que para el primero, el elipsoide tiene una dirección casi totalmente suprimida, la cual está asociada al sink, mientras que para el otro caso esto no sucede, ya que las poblaciones no se transportan al sink. Por lo tanto, la distinción entre las visualizaciones de los distintos regímenes de ruido es clara y nos permite caracterizar totalmente el estado del sistema. Este efecto nos permitiría, además, monitorear las propiedades de transporte de un sistema fotosintético construido artificialmente.

	λ_i	ϵ_i
ρ_{11}	$1 - 2\rho_{11}$	$2\sqrt{\rho_{22}\rho_{33}/\rho_{sink}}$
ρ_{22}	$1 - 2\rho_{22}$	$2\sqrt{\rho_{11}\rho_{33}/\rho_{sink}}$
ρ_{33}/ρ_{sink}	$1 - 2\rho_{33}/\rho_{sink}$	$2\sqrt{\rho_{11}\rho_{22}}$

Tabla 6.1: Semiejes del elipsoide correspondiente al qutrit con estado ρ considerando la aproximación de que la matriz \hat{T} es diagonal, en función de las poblaciones de los diferentes sitios o sink. En la tercera columna se obtienen las longitudes de los semiejes a partir de la relación (4.53).

Una vez que hemos caracterizado el estado del sistema visualmente y logrado identificar los diferentes

regímenes de ruido de ambiente, nos preguntamos cuál sería el efecto del ruido en las correlaciones cuánticas de la red de sitios. Es importante señalar que el espacio de Hilbert en el que estamos trabajando forma parte del espacio de sitios y es de hecho un subespacio particular, el cual se distingue por permitir la existencia de una sola excitación como fue mencionado anteriormente, restringiendo al espacio total (en el que puede haber mas de una excitación por sitio) al espacio en el que dado un sitio $|i\rangle$, éste se encuentra en su estado excitado $|e\rangle_i$, o bien en su estado base $|g\rangle_i$, es decir, cada sitio puede pensarse como un qubit, y consecuentemente tenemos un conjunto de tres qubits con la restricción de que sólo uno de ellos puede estar en su estado excitado.

En la siguiente sección presentamos la medición de la LQU en distintos subsistemas bipartitos compuestos por un qubit y un par de qubits.

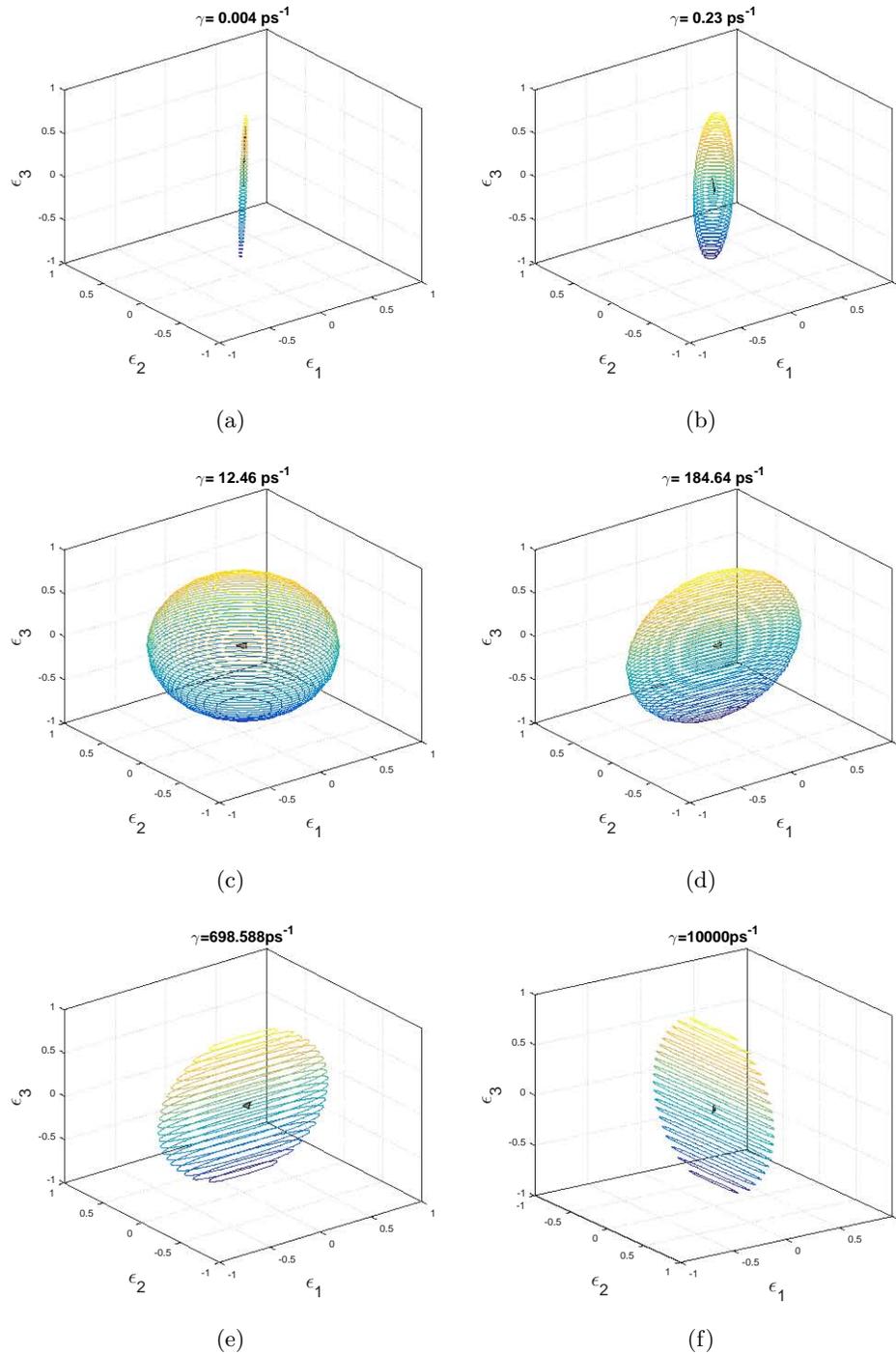


Figura 6.6: Visualización del qutrit formado por los tres sitios en los diferentes regímenes a tiempo $t = 10 \text{ ps}$. En la figura (a) se muestra el elipsoide correspondiente al estado final del sistema con $\gamma = 0,004 \text{ ps}^{-1}$, en la figura (b) se ilustra el caso con $\gamma = 0,23 \text{ ps}^{-1}$. El caso de transporte asistido se muestra en la figura (c), dos casos intermedios con $\gamma = 184,64 \text{ ps}^{-1}$ y $\gamma = 698,6 \text{ ps}^{-1}$ se muestran en las figuras (d) y (e) respectivamente, mientras que el régimen de ruido saturado, con $\gamma = 1 \times 10^4 \text{ ps}^{-1}$ se observa en la figura (f).

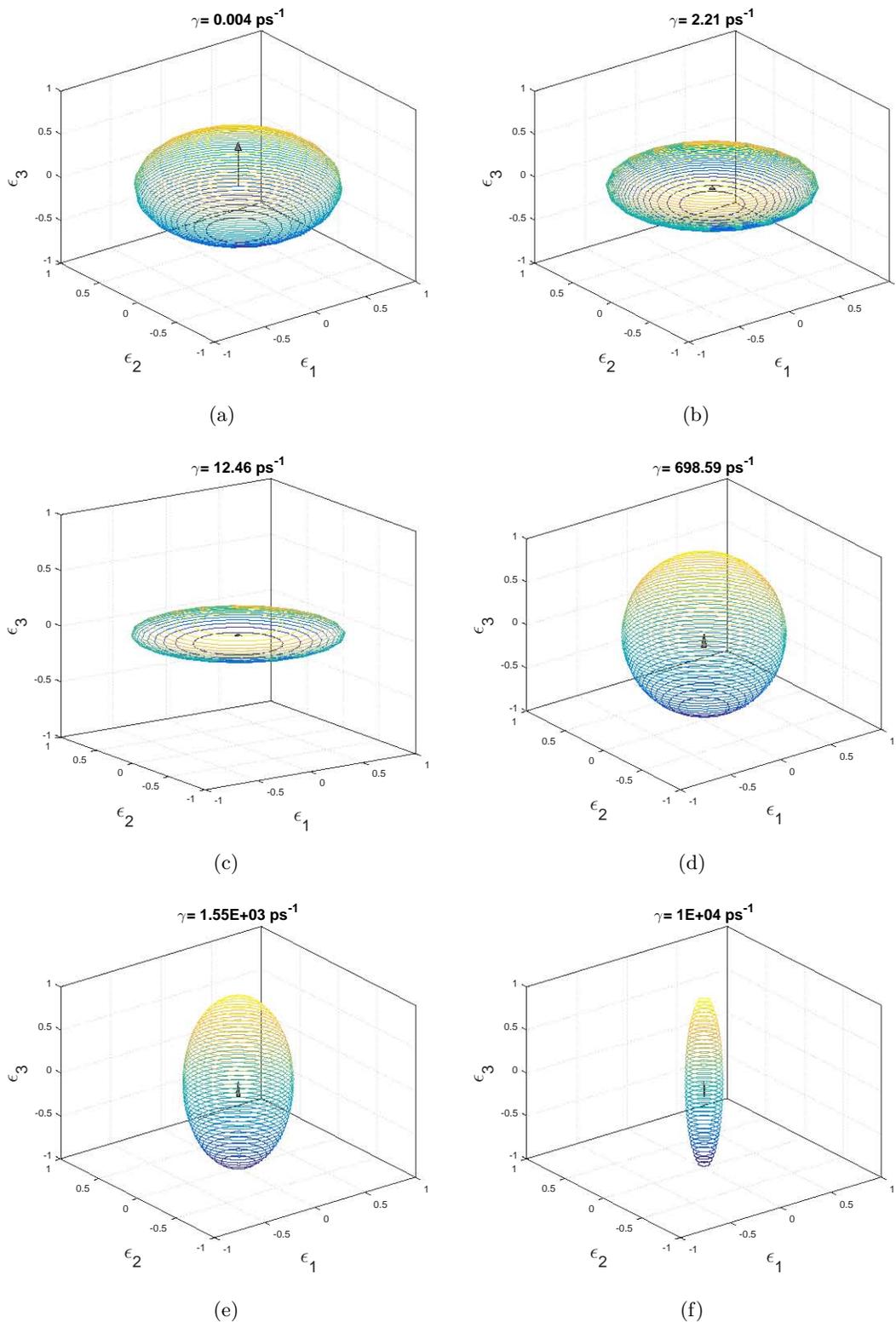


Figura 6.7: Visualización del qutrit formado por los tres sitios en los diferentes regímenes de la figura 6.6 a tiempo $t = 10 \text{ ps}$. En las figuras (a), (c) y (f) se muestran los casos de mínimo, crítico y máximo dephasing, mientras que en las figuras (b), (d) y (e) se ilustran casos intermedios con $\gamma = 2,21 \text{ ps}^{-1}$, $\gamma = 698,59 \text{ ps}^{-1}$ y $\gamma = 1,55 \times 10^3 \text{ ps}^{-1}$, respectivamente.

6.3. Incertidumbre cuántica local en la red de tres sitios

El espacio en el que mediremos las correlaciones cuánticas está constituido únicamente por $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, donde cada estado lo representamos en la base computacional, por lo que puede escribirse como

$$\begin{aligned} |1\rangle &\equiv |100\rangle \\ |2\rangle &\equiv |010\rangle \\ |3\rangle &\equiv |001\rangle. \end{aligned} \tag{6.14}$$

Ahora bien, la LQU como se definió en (5.35) requiere encontrar el máximo eigenvalor de la matriz W , y según la ecuación (5.34), los sus elementos de matriz están dados por

$$(W_{ij})_{AB} := \text{tr}[\rho^{1/2}(\sigma_{iA} \otimes \mathbf{1}_B)\rho^{1/2}(\sigma_{jA} \otimes \mathbf{1}_B)]. \tag{6.15}$$

Mediremos la LQU presente en los dos binomios \mathcal{A} y \mathcal{B} conformados de la siguiente manera.

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \{\{|1\rangle\}, \{|2\rangle, |3\rangle\}\} \\ \mathcal{B} &= \{\{|3\rangle\}, \{|1\rangle, |2\rangle\}\}. \end{aligned} \tag{6.16}$$

Se analizan estos subsistemas ya que es donde la excitación comienza a distribirse (\mathcal{A}) y donde fluye hacia el sink (\mathcal{B}) y por lo tanto es en estos sitios donde las correlaciones cuánticas pueden contribuir directamente al fenómeno de transporte.

Para encontrar la matriz W es necesario mostrar la acción de los operadores de Pauli extendidos en los elementos del espacio de sitios. Según las ecuaciones (4.9), para el operador σ_x , ésta es

$$\begin{aligned} \sigma_x^A \otimes \mathbf{1}_B |100\rangle &= |000\rangle, \\ \sigma_x^A \otimes \mathbf{1}_B |010\rangle &= |110\rangle, \\ \sigma_x^A \otimes \mathbf{1}_B |001\rangle &= |101\rangle. \end{aligned}$$

Mientras que para el operador σ_y

$$\begin{aligned} \sigma_y^A \otimes \mathbf{1}_B |100\rangle &= -i |000\rangle, \\ \sigma_y^A \otimes \mathbf{1}_B |010\rangle &= i |110\rangle, \\ \sigma_y^A \otimes \mathbf{1}_B |001\rangle &= i |101\rangle. \end{aligned}$$

Y para el operador σ_z la acción correspondiente es

$$\begin{aligned} \sigma_z^A \otimes \mathbf{1}_B |100\rangle &= - |100\rangle, \\ \sigma_z^A \otimes \mathbf{1}_B |010\rangle &= |010\rangle, \\ \sigma_z^A \otimes \mathbf{1}_B |001\rangle &= |001\rangle. \end{aligned}$$

Observamos que de los estados resultantes, únicamente los correspondientes a σ_z se encuentran en el espacio de una sola excitación. Si ahora escribimos a la matriz de densidad en su forma diagonal como

$$\rho = \sum_l \lambda_l |v_l\rangle \langle v_l|, \quad (6.17)$$

Donde λ_l es un eigenvalor de ρ y $|v_l\rangle$ es su eigenvector correspondiente. Al ser un operador Hermitiano, sus vectores propios son ortogonales, es decir $\langle v_l | v_{l'} \rangle = \delta_{ll'}$.

En términos de esta descomposición, la raíz cuadrada del operador está dada por

$$\rho^{1/2} = \sum_l \lambda_l^{1/2} |v_l\rangle \langle v_l|. \quad (6.18)$$

Si escribimos los eigenvectores de ρ en descomposición de la base de sitios,

$$|v_l\rangle = v_l^1 |100\rangle + v_l^2 |010\rangle + v_l^3 |001\rangle, \quad (6.19)$$

podemos encontrar los elementos de la matriz W de una manera simple, ya que entonces sólo el elemento W_{zz} es no nulo.

Desarrollando la ecuación (5.35) obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{AB} &= 1 - \text{tr} \left[\sum_{l,m=1}^3 \lambda_l^{1/2} \lambda_m^{1/2} |v_l\rangle \langle v_l| \sigma_z^A \otimes \mathbb{1}_B |v_m\rangle \langle v_m| \sigma_z^A \otimes \mathbb{1}_B \right] \\ &= 1 - \text{tr} \left[\sum_{l,m=1}^3 \lambda_l^{1/2} \lambda_m^{1/2} \langle v_l | \sigma_z^A \otimes \mathbb{1}_B | v_m \rangle |v_l\rangle \langle v_m| \sigma_z^A \otimes \mathbb{1}_B \right], \end{aligned}$$

dado que la traza es la misma sin importar en qué base la calculemos, lo hacemos en la de vectores propios de la matriz de densidad,

$$= 1 - \sum_{l=1}^3 \left[\sum_{m=1}^3 \lambda_l^{1/2} \lambda_m^{1/2} \langle v_l | v_l \rangle \langle v_l | \sigma_z^A \otimes \mathbb{1}_B | v_m \rangle \langle v_m | \sigma_z^A \otimes \mathbb{1}_B | v_l \rangle \right].$$

Al simplificar esta expresión, obtenemos la forma final de la LQU en la red de tres sitios,

$$\mathcal{U}_{FMO} = 1 - \sum_{l,m=1}^3 \lambda_l^{1/2} \lambda_m^{1/2} |\langle v_l | \sigma_z^A \otimes \mathbb{1}_B | v_m \rangle|^2. \quad (6.20)$$

Al calcular la LQU mediante la ecuación (6.20) en la parte Hermítica y normalizada de la matriz ρ , obtenemos la evolución temporal en los diferentes regímenes de ruido (figuras 6.8 y 6.9).

En lo que respecta al primer grupo de gráficas (la figura 6.8) podemos notar que en el régimen de localización coherente (antes del valor crítico de γ), la LQU aumenta al final del proceso conforme la

intensidad de ruido incrementa (figuras 6.8(b)-6.8(e)), esto se lo atribuimos a que el transporte del excitón en el complejo ocurre en este lapso de tiempo, causando que las correlaciones cuánticas entre los sitios 1 y 3 aumenten, lo que se debe también a la trayectoria del transporte de la excitación, cuya condición inicial fue el sitio 1 y conforme el ruido se lo permitió, ésta se deslocalizó al tercero para llegar finalmente al sink. En el régimen de ruido previo al valor crítico (figuras 6.8(a)-6.8(d)), la LQU oscila entre aproximadamente 0.05 y 1, (intervalo que decrece conforme el *dephasing* incrementa), es decir el estado oscila entre muy cercano al tipo CQ (discordia cero), y un estado de máxima discordia, lo que puede ser entendido a través de la interacción entre los sitios 1 y 2, los cuales comparten la probabilidad de ocupación. Cuando el excitón está deslocalizado únicamente entre estos dos sitios debido a la evolución coherente del sistema, la LQU es máxima; y es mínima cuando ésta se encuentra con mayor probabilidad en uno solo de estos. Conforme el *dephasing* aumenta, el excitón se deslocaliza decoherentemente sobre toda la red, lo que nos permite explicar que cuando el sistema se encuentra en el régimen del ENAQT (figura 6.8(f)), la LQU es máxima. Este máximo lo alcanza oscilando durante un período corto de tiempo como se observa en la subgráfica y posteriormente convergiendo a él de manera continua y acotada inferiormente. Como hemos mostrado anteriormente, es en este régimen en donde el transporte al sink es máximamente eficiente, y que la no clasicidad del sistema también sea máxima, dada la naturaleza del tipo de correlación que medimos (discordia), esto nos permite inferir que el proceso de transporte asistido se lleva a cabo en un régimen de alta correlación de tipo no-entrelazamiento ya que las coherencias en este régimen son muy pequeñas (ver figura 6.4(d)), y por lo tanto no contribuyen a la LQU en gran cantidad, en contraste con el grado de no clasicidad restante que sabemos que está cuantificado por la discordia cuántica.

Conforme el *dephasing* sigue aumentando, la excitación vuelve a localizarse, pero ahora en un solo sitio (el estado inicial), y por lo tanto la LQU comienza a decrecer continuamente (figuras 6.8(f)-6.8(h)), hasta un valor asintótico de aproximadamente 0.3 (figura 6.8(h)), lo que reafirma nuestra hipótesis de que a pesar de que no existe entrelazamiento en el sistema (pues las coherencias han decaído totalmente en este régimen, ver figura 6.5(e)), o es muy pequeño, la discordia cuántica entre los sitios sigue existiendo. Esto puede ser atribuido a que la probabilidad de que la excitación se encuentre en el sitio 2 no es cero, de hecho también se encuentra acotada (ver figura 6.4(f)). Lo cual puede verse analizarse desde el punto de vista de las energías de sitio, cuyas las brechas energéticas son expandidas por el ruido [10] y pueden coincidir, generando una interacción entre los sitios, aunque el excitón no pueda transportarse por la red.

Al medir la LQU en el binomio \mathcal{B} , se obtuvieron las gráficas de la figura 6.9. Análogamente al caso del binomio \mathcal{A} , notamos que aumenta conforme la intensidad de ruido incrementa, sin embargo podemos observar que en este caso, el crecimiento de la LQU es uniforme en el tiempo (figuras 6.9(a)-6.9(f)) y en todos estos casos es siempre oscilatoria aunque la amplitud de oscilación también disminuye en función del *dephasing*. Este fenómeno se le puede atribuir a la composición bioquímica del complejo FMO, es decir a las energías de sitio y de acoplamiento (6.8), cuyos valores determinan la dinámica del excitón en el sistema. Debido a que la energía del acoplamiento entre el sitio 1 con 2 es mucho mayor (en valor absoluto) que la que existe entre los sitios 2 y 3, la interacción del primer elemento de este binomio será menos fuerte que en el caso del binomio \mathcal{A} , y por tanto las correlaciones también se verán disminuidas. Sin embargo, cualitativamente el fenómeno se preserva, aunque en menor proporción (ver

figura 6.9(g)); en el régimen de *dephasing* crítico, el valor máximo de la LQU es de 0.6, valor que se alcanza también con oscilaciones previas del máximo y que posteriormente se mantiene constante. Es también interesante observar que el tamaño y cantidad de las oscilaciones disminuye conforme el excitón llega al sink eficientemente(ENAQT), es decir, conforme la deslocalización coherente aumenta, lo que puede ser explicado al notar que las tasas de decaimiento de los sitios a la recombinación y del sitio 3 al sink difieren por 6 órdenes de magnitud, es decir, una vez que la excitación llega al sitio 3, ésta fluirá mucho más rápido al sink (aumentando rápidamente la decoherencia) que lo que tardó en transportarse a través de la red, y por lo tanto las correlaciones en la red incrementarán de manera más rápida al máximo y las oscilaciones desaparecerán. Finalmente, una vez que el *dephasing* comienza a incrementar hacia el régimen de saturación, la LQU comienza a disminuir continuamente y sin oscilaciones, pues la excitación ya no se propaga de los sitios 1 y 2 debido al exceso de ruido de ambiente; por lo tanto las correlaciones son idénticas a las del binomio \mathcal{A} en este régimen (ver figura 6.8(h)). Esta simetría ratifica la explicación mediante la coincidencia de las brechas energéticas de cada sitio.

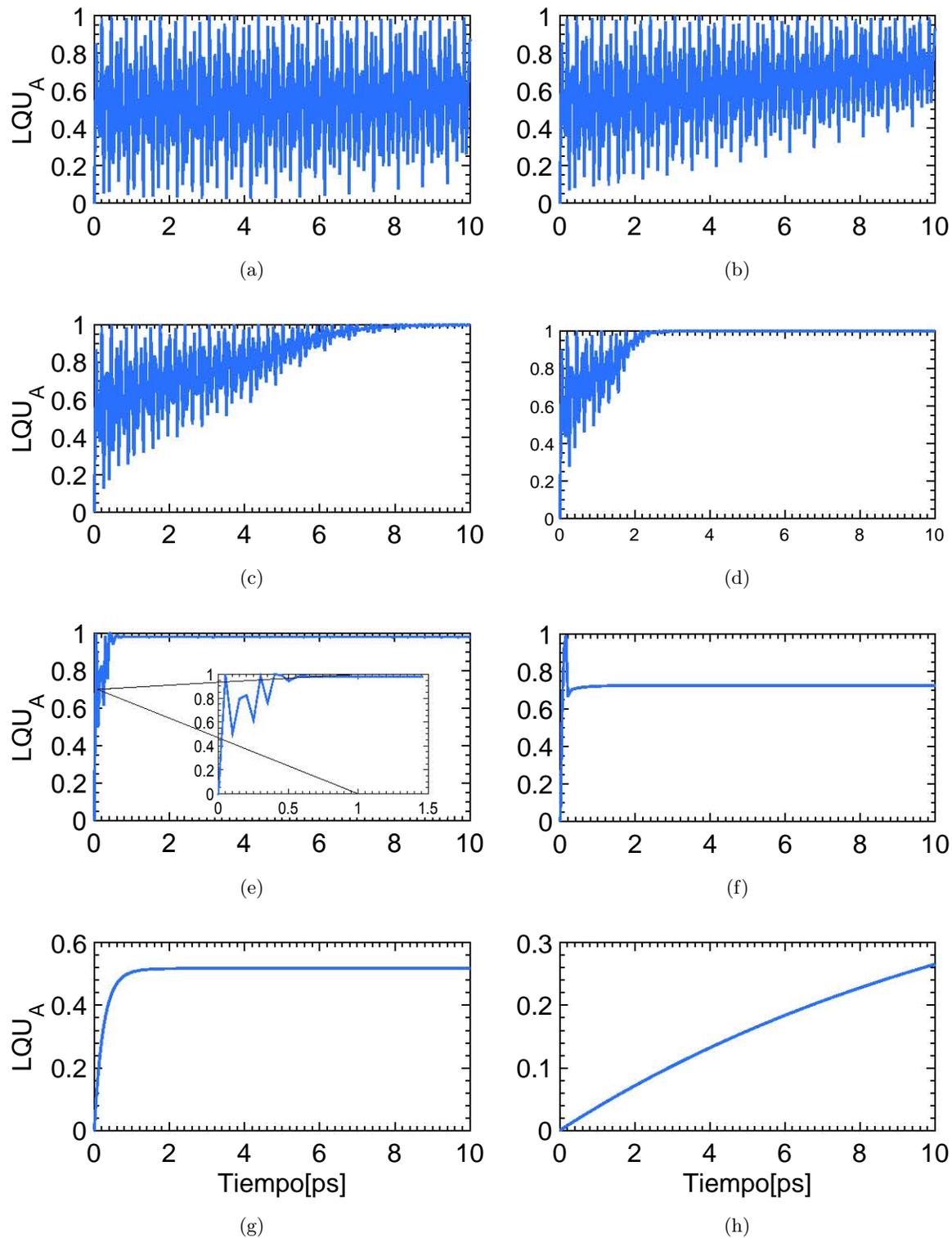


Figura 6.8: Evolución temporal de la incertidumbre cuántica local (LQU) en el binomio \mathcal{A} para diferentes valores de dephasing. (a) $\gamma = 1 \times 10^{-6} ps^{-1}$. (b) $\gamma = 0,1 ps^{-1}$. (c) $\gamma = 0,58 ps^{-1}$. (d) $\gamma = 2,21 ps^{-1}$. (e) $\gamma = 12,46 ps^{-1}$. (f) $\gamma = 31,62 ps^{-1}$. (g) $\gamma = 184,64 ps^{-1}$. (h) $\gamma = 1 \times 10^4 ps^{-1}$.

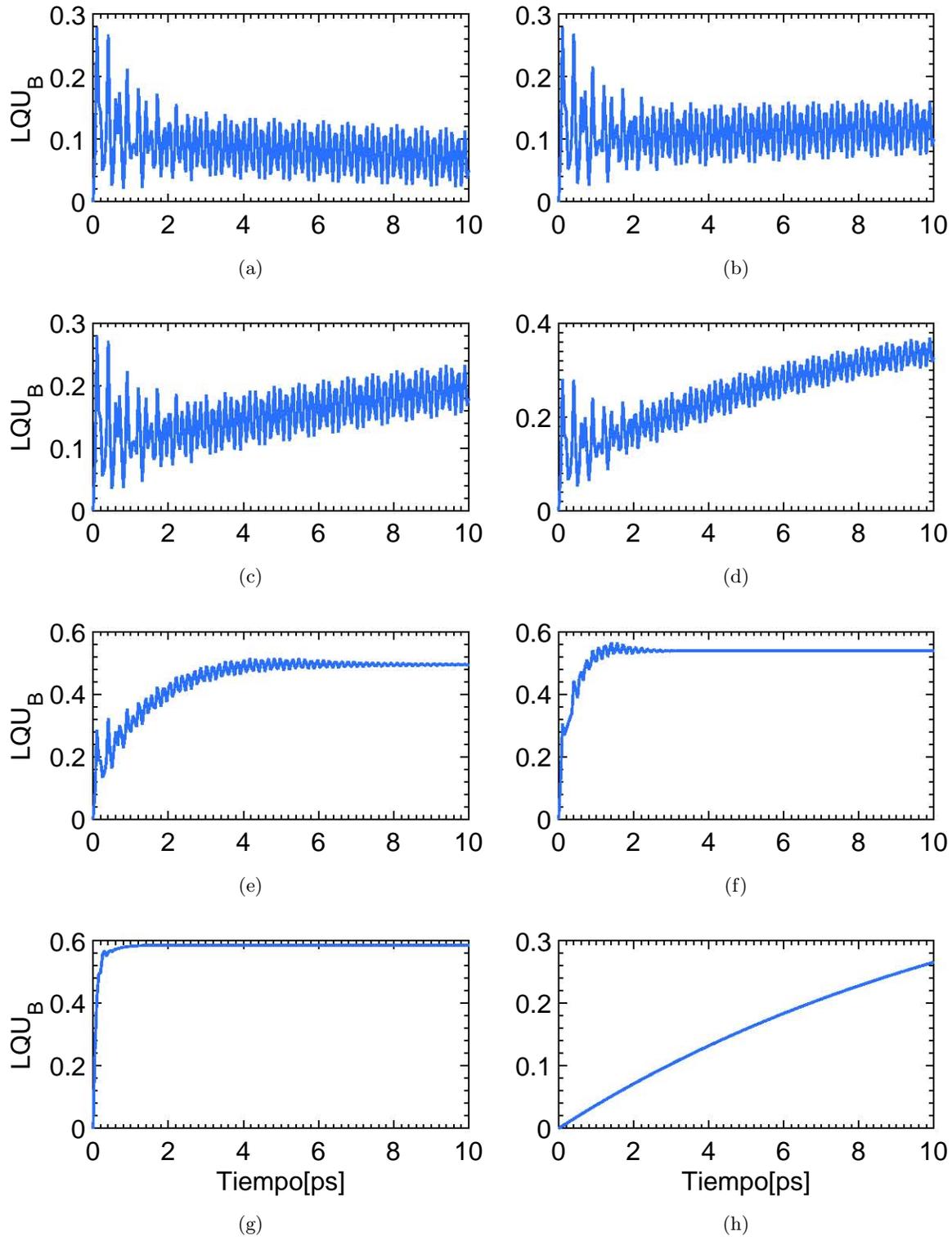


Figura 6.9: Evolución temporal de la incertidumbre cuántica local (LQU) en el binomio \mathcal{B} para diferentes valores de dephasing. (a) $\gamma = 1 \times 10^{-6} ps^{-1}$. (b) $\gamma = 0,01 ps^{-1}$. (c) $\gamma = 0,03 ps^{-1}$. (d) $\gamma = 0,1 ps^{-1}$. (e) $\gamma = 0,58 ps^{-1}$. (f) $\gamma = 2,21 ps^{-1}$. (g) $\gamma = 12,46 ps^{-1}$. (h) $\gamma = 1 \times 10^4 ps^{-1}$.

Al notar que la LQU también alcanza su máximo para algún valor de *dephasing* intermedio entre los dos regímenes de localización, buscamos demostrar una relación, al menos cualitativa, entre la eficiencia y la LQU acumulada del binomio \mathcal{A} , es decir su valor final en función del *dephasing*. Elegimos este binomio para hacer este análisis ya que es el que, debido a la configuración del complejo, nos permite notar la diferencia en los regímenes de ruido. El obtener un comportamiento similar de ambas cantidades nos permitiría inferir que el fenómeno de transporte asistido se da cuando existe una cantidad de discordia dada en el sistema, y que por lo tanto que ésta pueda ser un recurso para originar el fenómeno. Para completar el análisis se calculó el tiempo de transferencia del excitón al sitio 3 mediante la relación [1]

$$\tau = \frac{2}{\eta} \Gamma_{RC} \int_0^{\infty} t \langle 3 | \rho(t) | 3 \rangle dt. \quad (6.21)$$

Los resultados se muestran en la figura 6.10.

En los resultados anteriores podemos observar que el transporte de energía forma un estado colectivo no clásico, y debido a la diferencia en las energías de acoplamiento entre diferentes sitios este estado es diferente para cada binomio. Del mismo modo pudimos observar una distinción entre la discordia de cada binomio, y específicamente para un valor de *dephasing* del mismo orden en el que sucede el transporte asistido, notamos que la LQU alcanza su valor máximo. Si bien no podemos concluir que exista una relación lineal entre ambas en términos cuantitativos, sí podemos establecer que la medida de correlación nos permite inferir un grado de eficiencia en el sistema, que en los tres regímenes que fueron estudiados se comportan similarmente (ver figura 6.10). El ruido de ambiente que afecta al sistema, da lugar a una acumulación de LQU que tiene como resultado el proceso de transporte asistido en la red cuántica, por lo que este tipo de correlaciones cuánticas pueden ser un potencial recurso para que el fenómeno tenga lugar.

Una vez presentados y analizados los resultados obtenidos en este trabajo, concluiremos con mencionar algunos aspectos generales observados en este tipo de sistemas, así como su posible utilidad en tecnologías cuánticas. Esta tesis está lejos de completar el estudio del transporte asistido por ruido, por lo que en el siguiente capítulo mencionamos el posible trabajo futuro que puede realizarse así como el potencial uso que algunas de las herramientas aquí desarrolladas puedan tener en éste.

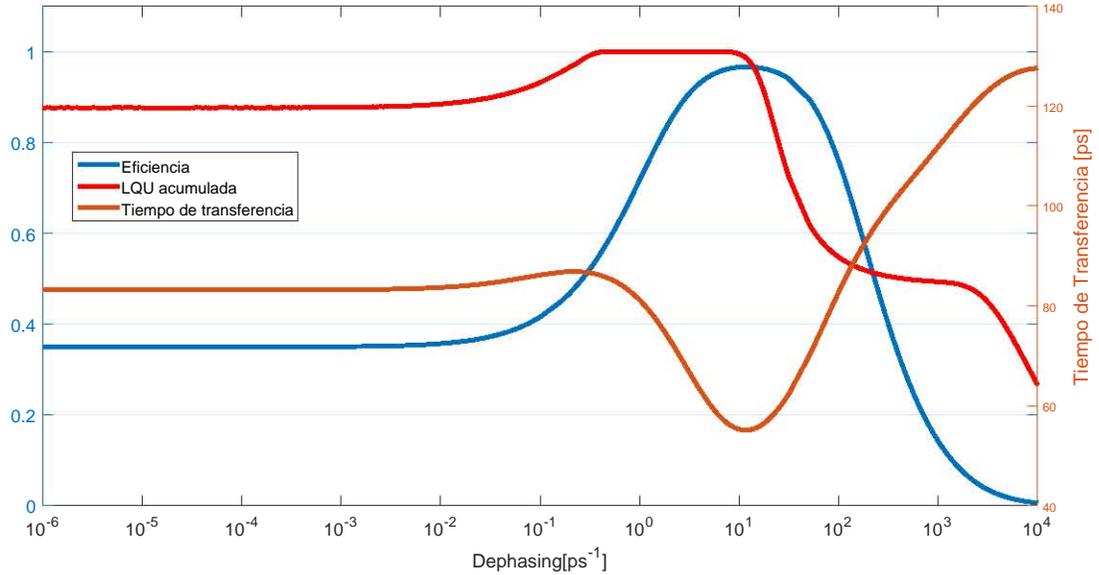


Figura 6.10: Eficiencia (línea azul), acLQU acumulada en el binomio A (línea roja) y tiempo de transferencia de la excitación (línea naranja) como función de la intensidad de ruido en escala logarítmica. Observamos que del mismo modo que la eficiencia, cuando el dephasing es pequeño, la LQU acumulada tiene un valor aproximado de 0.85, y conforme el ruido aumenta, tanto la eficiencia como la LQU acumulada permanecen constantes. Cambiando sus valores para $\gamma \approx 1 \times 10^{-2} \text{ps}^{-1}$, sin embargo la LQU alcanza un valor máximo constante en $\gamma \approx 1 \times 10^{-1} \text{ps}^{-1}$, mientras que la eficiencia alcanza un máximo (que también se mantiene constante por algunos valores de dephasing), en $\gamma = 15,46 \times 10^{-2} \text{ps}^{-1}$ y posteriormente vuelve a disminuir hasta converger monótonamente a 0. Comportamiento que cualitativamente es el mismo que para la LQU acumulada, pero no cuantitativamente, pues ésta última tiene un punto de inflexión y posteriormente también decae monótonamente a cero en el régimen de ruido saturado. Por completez, se calculó el tiempo promedio de transferencia del excitón al RC con la ecuación (6.21). Podemos observar que en el dephasing óptimo el tiempo que tarda el excitón en llegar al RC se reduce considerablemente (55 ps), una consecuencia de la alta eficiencia del transporte. Mientras que en el régimen de localización coherente, el tiempo de transferencia es de aproximadamente 83 ps, lo que contrasta con la localización por efecto Zenón, donde el excitón tarda al rededor de 130 ps.

Capítulo 7

Conclusiones

En el presente trabajo de investigación se ha estudiado teóricamente el transporte asistido por ruido en una red completamente conectada de tres sitios, los cuales están en un ambiente modelado mediante operadores tipo Lindblad que simulan los grados de libertad del baño los cuales perturban unidireccionalmente el transporte de la excitación, así como un proceso de *dephasing* puro, el cuál genera pérdidas en las coherencias del sistema y de este modo simula la decoherencia que un ambiente en general induce a un sistema cuántico. El efecto de transporte asistido se modeló con ayuda de un estado auxiliar llamado RC, cuya utilidad fue almacenar y cuantificar la energía transportada por la red, la cual caracterizamos en función del *dephasing*. Posteriormente se realizó el desarrollo de una caracterización geométrica del efecto mediante la visualización del qutrit asociado al sistema, obteniendo resultados sistemáticos en función de la intensidad de ruido tanto para el qutrit asociado a los tres sitios, como para el qutrit de dos sitios y el sink. Las características geométricas concuerdan con la fenomenología del transporte y más aún, nos permiten predecir la posible forma del estado del sistema bajo características particulares de ruido.

Debido a que en los resultados del ENAQT pudimos observar que en el régimen de transporte asistido las coherencias son notablemente disminuidas, decidimos explorar, en modo de investigación, la posible existencia de correlaciones cuánticas en el sistema mediante una herramienta utilizada en teoría de información cuántica, la cual cuantifica la no clasicidad del sistema. Los resultados de esta investigación nos permitieron concluir que la eficiencia está estrechamente relacionada con la discordia en el sistema, además de que el régimen transporte asistido se da en un contexto de máxima discordia acumulada, lo que nos permite señalar que este tipo de correlaciones son un recurso necesario en el transporte eficiente de excitones por la red. Esta conclusión se ve fortalecida al observar el comportamiento de la discordia en el régimen de ruido saturado, en el cual ésta decae de la misma manera que lo hace la eficiencia.

Las principales conclusiones y contribuciones de este trabajo se enumeran a continuación:

- El ENAQT es un efecto fundamental en el entendimiento del transporte en redes cuánticas. Dado que el *dephasing* destruye las coherencias y por lo tanto el entrelazamiento, es común pensar que

el transporte de información es también inhibido. Sin embargo, en este trabajo se ha reproducido el resultado de varias investigaciones [1–4, 6] en el que se observa un incremento notable en la eficiencia del transporte, corroborando las evidencias experimentales en las que, al menos en el complejo FMO, se encuentra esta eficiencia.

- Como se menciona en [2], en este fenómeno, el entrelazamiento no parece ser importante en la transferencia de excitaciones, por lo que se puede concluir que en este tipo de sistemas, el entrelazamiento no es necesario como un recurso para aumentar la eficiencia. Sin embargo, en este trabajo se presentó una de las primeras evidencias de que a través de medidas que se utilizan en teoría de la información cuántica, como la discordia, se pueden cuantificar las correlaciones que sí son un recurso en el transporte eficiente. Este resultado puede atraer atención en la comunidad ya que el ENAQT es un fenómeno fundamental que se ha observado en una amplia variedad de sistemas tanto cuánticos como clásicos en los que se busca mejorar el transporte [3, 67–69].
- En el caso del subcomplejo del FMO que se ha estudiado, hemos encontrado que el régimen de transporte crítico se alcanza cuando el *dephasing* tiene el mismo orden de magnitud que las energías que caracterizan la evolución coherente. Es importante mencionar que en estudios previos, en particular en [1], se ha encontrado que el transporte máximo ocurre aproximadamente a temperatura ambiente, por lo que no parece muy lejano a la realidad consolidar tecnología inspirada en efectos cuánticos aprovechados de la manera en que la naturaleza lo hace.
- Para poder establecer un entendimiento del fenómeno que nos permita este salto tecnológico, es importante estudiarlo mediante modelos más avanzados como dinámicas no Markovianas [70], lo cual nos permita estar un paso más cercanos a la realidad. A pesar de que este tipo de modelos son más complicados de resolver, los resultados cualitativos son análogos a los aquí presentados [3], además de que (para redes totalmente conectadas de tres sitios), la visualización gráfica que se desarrolló en este trabajo será también de utilidad para caracterizar el fenómeno en este tipo de modelos.
- Los resultados aquí obtenidos muestran que es posible que la naturaleza utilice características fundamentales de sistemas cuánticos y su sensibilidad al ruido; además, la manera en que las aprovecha, parece ser robusta en las propiedades de la red [4]. Lo cual nos permite inferir que esta cualidad de la naturaleza puede ser de gran utilidad en la descripción de diferentes procesos de transporte en redes y por lo tanto permitir explotar los beneficios del transporte asistido por ruido en la transferencia de información en redes artificiales nanoestructuradas mediante el uso de recursos de información cuántica que logren explotar las correlaciones cuánticas presentes en el sistema.

Bibliografía

- [1] P. Rebentrost, M. Mohseni, I. Kassal, S. Lloyd, and A. Aspuru-Guzik, “Environment-assisted quantum transport,” *New Journal of Physics*, vol. 11, no. 3, p. 033003, 2009.
- [2] M. B. Plenio and S. F. Huelga, “Dephasing-assisted transport: quantum networks and biomolecules,” *New Journal of Physics*, vol. 10, no. 11, p. 113019, 2008.
- [3] R. d. J. Leon-Montiel, I. Kassal, and J. P. Torres, “Importance of excitation and trapping conditions in photosynthetic environment-assisted energy transport,” *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 118, no. 36, pp. 10588–10594, 2014.
- [4] F. Caruso, A. W. Chin, A. Datta, S. F. Huelga, and M. B. Plenio, “Highly efficient energy excitation transfer in light-harvesting complexes: The fundamental role of noise-assisted transport,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 131, no. 10, p. 09B612, 2009.
- [5] M. Walschaers, J. F.-d.-C. Diaz, R. Mulet, and A. Buchleitner, “Optimally designed quantum transport across disordered networks,” *Physical review letters*, vol. 111, no. 18, p. 180601, 2013.
- [6] L. Contreras-Pulido, M. Bruderer, S. Huelga, and M. Plenio, “Dephasing-assisted transport in linear triple quantum dots,” *New Journal of Physics*, vol. 16, no. 11, p. 113061, 2014.
- [7] P. Ball, “Physics of life: The dawn of quantum biology,” *Nature News*, vol. 474, no. 7351, pp. 272–274, 2011.
- [8] J. Nelson, *The physics of solar cells*. World Scientific Publishing Co Inc, 2003.
- [9] D. Burgarth and S. Bose, “Perfect quantum state transfer with randomly coupled quantum chains,” *New Journal of Physics*, vol. 7, no. 1, p. 135, 2005.
- [10] S. F. Huelga and M. B. Plenio, “Vibrations, quanta and biology,” *Contemporary Physics*, vol. 54, no. 4, pp. 181–207, 2013.
- [11] E. Economics, “Statistical review of world energy.”
- [12] D. Wöhrle and D. Meissner, “Organic solar cells,” *Advanced Materials*, vol. 3, no. 3, pp. 129–138, 1991.
- [13] O. energy corporation, “Average electricity prices.”

- [14] O. University.
- [15] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” in *A Career In Theoretical Physics*, pp. 79–93, World Scientific, 2004.
- [16] F. A. Domínguez-Serna, F. J. Mendieta-Jimenez, and F. Rojas, “Relationship between the field local quadrature and the quantum discord of a photon-added correlated channel under the influence of scattering and phase fluctuation noise,” *Quantum Information Processing*, vol. 16, no. 10, p. 255, 2017.
- [17] N. Behzadi, E. Faizi, and O. Heibat, “Quantum discord protection of a two-qutrit v-type atomic system from decoherence by partially collapsing measurements,” *arXiv preprint arXiv:1701.08278*, 2017.
- [18] D. Girolami, A. M. Souza, V. Giovannetti, T. Tufarelli, J. G. Filgueiras, R. S. Sarthour, D. O. Soares-Pinto, I. S. Oliveira, and G. Adesso, “Quantum discord determines the interferometric power of quantum states,” *Physical Review Letters*, vol. 112, no. 21, p. 210401, 2014.
- [19] P. A. M. Dirac, *The principles of quantum mechanics. Chapter 1*. No. 27, Oxford university press, 1981.
- [20] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The theory of open quantum systems. Chapter 3*. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [21] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, and B. Crasemann, “Quantum mechanics. volume 2. eiii.” 1998.
- [22] J. Audretsch, *Entangled systems: new directions in quantum physics. Chapter 3*. John Wiley & Sons, 2008.
- [23] P. Kurzyński, A. Kołodziejcki, W. Laskowski, and M. Markiewicz, “Three-dimensional visualization of a qutrit,” *Physical Review A*, vol. 93, no. 6, p. 062126, 2016.
- [24] G. Kimura, “The bloch vector for n-level systems,” *Physics Letters A*, vol. 314, no. 5, pp. 339–349, 2003.
- [25] R. A. Bertlmann and P. Krammer, “Bloch vectors for qudits,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 41, no. 23, p. 235303, 2008.
- [26] G. Kimura and A. Kossakowski, “The bloch-vector space for n-level systems: the spherical-coordinate point of view,” *Open Systems & Information Dynamics*, vol. 12, no. 03, pp. 207–229, 2005.
- [27] I. P. Mendaš, “The classification of three-parameter density matrices for a qutrit,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 39, no. 36, p. 11313, 2006.
- [28] S. Kryszewski, “Alternative representation of $n \times n$ density matrix,” 2006.

- [29] L. Jakóbczyk and M. Siennicki, “Geometry of bloch vectors in two-qubit system,” *Physics Letters A*, vol. 286, no. 6, pp. 383–390, 2001.
- [30] S. K. Goyal, B. N. Simon, R. Singh, and S. Simon, “Geometry of the generalized bloch sphere for qutrits,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 49, no. 16, p. 165203, 2016.
- [31] A. Asadian, P. Erker, M. Huber, and C. Klöckl, “Heisenberg-weyl observables: Bloch vectors in phase space,” *Physical Review A*, vol. 94, no. 1, p. 010301, 2016.
- [32] S. H. Friedberg, A. J. Insel, and L. E. Spence, *Linear Algebra: Pearson New International Edition. Chapter 7*. Pearson Higher Ed, 2013.
- [33] S. H. Friedberg, A. J. Insel, and L. E. Spence, *Linear Algebra: Pearson New International Edition. Chapter 3*. Pearson Higher Ed, 2013.
- [34] L. Henderson and V. Vedral, “Classical, quantum and total correlations,” *Journal of physics A: mathematical and general*, vol. 34, no. 35, p. 6899, 2001.
- [35] H. Ollivier and W. H. Zurek, “Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations,” *Physical review letters*, vol. 88, no. 1, p. 017901, 2001.
- [36] W. H. Zurek, “Quantum discord and maxwell’s demons,” *Physical Review A*, vol. 67, no. 1, p. 012320, 2003.
- [37] F. Fanchini, T. Werlang, C. Brasil, L. Arruda, and A. Caldeira, “Non-markovian dynamics of quantum discord,” *Physical Review A*, vol. 81, no. 5, p. 052107, 2010.
- [38] B. Wang, Z.-Y. Xu, Z.-Q. Chen, and M. Feng, “Non-markovian effect on the quantum discord,” *Physical Review A*, vol. 81, no. 1, p. 014101, 2010.
- [39] K. Modi, A. Brodutch, H. Cable, T. Paterek, and V. Vedral, “The classical-quantum boundary for correlations: discord and related measures,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 84, no. 4, p. 1655, 2012.
- [40] B. Dakić, Y. O. Lipp, X. Ma, M. Ringbauer, S. Kropatschek, S. Barz, T. Paterek, V. Vedral, A. Zeilinger, Č. Brukner, *et al.*, “Quantum discord as resource for remote state preparation,” *Nature Physics*, vol. 8, no. 9, pp. 666–670, 2012.
- [41] F. A. D. Serna, *Procesamiento de información cuántica con estados coherentes con fotones agregados*. PhD thesis, 2016.
- [42] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, “Quantum entanglement,” *Reviews of modern physics*, vol. 81, no. 2, p. 865, 2009.
- [43] M. B. Plenio and S. Virmani, “An introduction to entanglement measures,” *arXiv preprint quant-ph/0504163*, 2005.

- [44] A. Streltsov, “Quantum correlations beyond entanglement,” in *Quantum Correlations Beyond Entanglement*, pp. 17–22, Springer, 2015.
- [45] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu, and B. Schumacher, “Concentrating partial entanglement by local operations,” *Physical Review A*, vol. 53, no. 4, p. 2046, 1996.
- [46] S. Hill and W. K. Wootters, “Entanglement of a pair of quantum bits,” *Physical review letters*, vol. 78, no. 26, p. 5022, 1997.
- [47] B. Dakić, V. Vedral, and Č. Brukner, “Necessary and sufficient condition for nonzero quantum discord,” *Physical review letters*, vol. 105, no. 19, p. 190502, 2010.
- [48] V. Madhok and A. Datta, “Interpreting quantum discord through quantum state merging,” *Physical Review A*, vol. 83, no. 3, p. 032323, 2011.
- [49] B. Lanyon, M. Barbieri, M. Almeida, and A. White, “Experimental quantum computing without entanglement,” *Physical review letters*, vol. 101, no. 20, p. 200501, 2008.
- [50] G. Passante, O. Moussa, and R. Laflamme, “Measuring geometric quantum discord using one bit of quantum information,” *Physical Review A*, vol. 85, no. 3, p. 032325, 2012.
- [51] G. L. Giorgi, “Quantum discord and remote state preparation,” *Physical Review A*, vol. 88, no. 2, p. 022315, 2013.
- [52] T. Chuan, J. Maillard, K. Modi, T. Paterek, M. Paternostro, and M. Piani, “Quantum discord bounds the amount of distributed entanglement,” *Physical review letters*, vol. 109, no. 7, p. 070501, 2012.
- [53] A. Streltsov, H. Kampermann, and D. Bruß, “Quantum cost for sending entanglement,” *Physical review letters*, vol. 108, no. 25, p. 250501, 2012.
- [54] M. Okrasa and Z. Walczak, “On two-qubit states ordering with quantum discords,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 98, no. 4, p. 40003, 2012.
- [55] S. Pirandola, “Quantum discord as a resource for quantum cryptography,” *Scientific reports*, vol. 4, 2014.
- [56] M. Gu, H. M. Chrzanowski, S. M. Assad, T. Symul, K. Modi, T. C. Ralph, V. Vedral, and P. K. Lam, “Observing the operational significance of discord consumption,” *Nature Physics*, vol. 8, no. 9, pp. 671–675, 2012.
- [57] D. Girolami, A. M. Souza, V. Giovannetti, T. Tufarelli, J. G. Filgueiras, R. S. Sarthour, D. O. Soares-Pinto, I. S. Oliveira, and G. Adesso, “Quantum discord determines the interferometric power of quantum states,” *Physical Review Letters*, vol. 112, no. 21, p. 210401, 2014.
- [58] T. M. Cover and J. A. Thomas, *Elements of information theory*. John Wiley & Sons, 2012.

- [59] K. Modi, T. Paterek, W. Son, V. Vedral, and M. Williamson, “Unified view of quantum and classical correlations,” *Physical review letters*, vol. 104, no. 8, p. 080501, 2010.
- [60] D. Girolami, T. Tufarelli, and G. Adesso, “Characterizing nonclassical correlations via local quantum uncertainty,” *Physical review letters*, vol. 110, no. 24, p. 240402, 2013.
- [61] E. P. Wigner and M. M. Yanase, “Information contents of distributions,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 49, no. 6, pp. 910–918, 1963.
- [62] J. K. Douglass, L. Wilkens, E. Pantazelou, F. Moss, *et al.*, “Noise enhancement of information transfer in crayfish mechanoreceptors by stochastic resonance,” *Nature*, vol. 365, no. 6444, pp. 337–340, 1993.
- [63] K. Wiesenfeld and F. Moss, “Stochastic resonance and the benefits of noise: from ice ages to crayfish and squids,” *Nature*, vol. 373, no. 6509, pp. 33–36, 1995.
- [64] Y. Shang, A. Claridge-Chang, L. Sjulson, M. Pypaert, and G. Miesenböck, “Excitatory local circuits and their implications for olfactory processing in the fly antennal lobe,” *Cell*, vol. 128, no. 3, pp. 601–612, 2007.
- [65] V. May *et al.*, *Charge and energy transfer dynamics in molecular systems*. John Wiley & Sons, 2008.
- [66] J. Adolphs and T. Renger, “How proteins trigger excitation energy transfer in the fmo complex of green sulfur bacteria,” *Biophysical journal*, vol. 91, no. 8, pp. 2778–2797, 2006.
- [67] R. d. J. León-Montiel and J. P. Torres, “Highly efficient noise-assisted energy transport in classical oscillator systems,” *Physical review letters*, vol. 110, no. 21, p. 218101, 2013.
- [68] R. d. J. León-Montiel, M. A. Quiroz-Juárez, R. Quintero-Torres, J. L. Domínguez-Juárez, H. M. Moya-Cessa, J. P. Torres, and J. L. Aragón, “Noise-assisted energy transport in electrical oscillator networks with off-diagonal dynamical disorder,” *Scientific reports*, vol. 5, 2015.
- [69] R. d. J. León-Montiel and P. A. Quinto-Su, “Noise-enabled optical ratchets,” *Scientific Reports*, vol. 7, p. srep44287, 2017.
- [70] A. W. Chin, A. Datta, F. Caruso, S. F. Huelga, and M. B. Plenio, “Noise-assisted energy transfer in quantum networks and light-harvesting complexes,” *New Journal of Physics*, vol. 12, no. 6, p. 065002, 2010.

Apéndice A

Descripción del sistema mediante el formalismo de estados vectoriales

Operador de evolución temporal

En mecánica cuántica, t es un parámetro o etiqueta que se relaciona con la evolución temporal de un sistema físico. Supongamos que el sistema al tiempo t_0 se encuentra en el estado

$$|\alpha\rangle \equiv |\alpha, t_0\rangle.$$

Nos interesa conocer el estado $|\alpha, t_0; t\rangle$ con $t \geq t_0$, definido tal que

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha, t_0\rangle. \quad (\text{A.1})$$

Deseamos entonces encontrar un *operador* que nos permita obtener un estado a partir del otro, es decir un operador $\mathcal{U}(t, t_0)$ tal que

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Este operador recibe el nombre de operador de evolución temporal, y requerimos que tenga las siguientes propiedades

- **Unitariedad.** Supongamos que $|\alpha\rangle$ se expande en la base propia de un operador arbitrario \mathbf{A} , $|a_i\rangle$,

$$|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\alpha\rangle = \sum_a c_a(t_0) |a\rangle.$$

Por lo tanto

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_a c_a(t) |a\rangle.$$

En general esperamos que $c_a(t) \neq c_a(t_0) \forall t$. Y de la conservación de probabilidad sabemos que

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = \sum_a \sum_{a'} \langle a|c_a^*(t_0)c_{a'}(t_0)|a'\rangle = \sum_a \sum_{a'} c_a^*(t_0)c_{a'}(t_0) \langle a|a'\rangle = \sum_a |c_a(t_0)|^2 = 1.$$

Del mismo modo tenemos que

$$\langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = \sum_a |c_a(t)|^2 = 1.$$

Por otra parte,

$$\langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \alpha, t_0 | \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathcal{U}(t, t_0) | \alpha, t_0 \rangle \stackrel{!}{=} 1,$$

por lo tanto

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathcal{U}(t, t_0) = 1. \quad (\text{A.3})$$

- **Composición temporal.** Debido a que el parámetro t es continuo, es natural exigir que el operador de evolución temporal sea componible, es decir

$$\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1) \mathcal{U}(t_1, t_0), t_0 < t_1 < t_2. \quad (\text{A.4})$$

- **Forma infinitesimal.** El operador de evolución debe ser tal que

$$|\alpha, t_0, t_0 + dt\rangle = \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) |\alpha, t_0\rangle$$

es decir,

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1. \quad (\text{A.5})$$

Estas propiedades son satisfechas por el *ansatz*

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt. \quad (\text{A.6})$$

De la unitariedad tenemos que

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^\dagger(t_0 + dt, t_0) \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) &= 1 + i(\Omega^\dagger - \Omega)dt + \mathcal{O}(dt^2) \rightarrow 0 \\ &\Rightarrow \Omega^\dagger \stackrel{!}{=} \Omega, \end{aligned}$$

Ω debe ser un operador hermitiano y la dependencia segundo orden en el tiempo debe ser despreciable. Notamos que también se satisface la composición temporal

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0 + dt_1) \mathcal{U}(t_0 + dt_1, t_0) &= (1 - i\Omega dt_2)(1 - i\Omega dt_1) = 1 - i\Omega(dt_1 + dt_2) + \mathcal{O}(dt^2) \rightarrow 0 \\ &= \mathcal{U}(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0). \end{aligned}$$

De la definición del (A.6) observamos que Ω debe tener unidades de frecuencia, además debe ser hermitiano y dado que está asociado a la evolución temporal del sistema, inferimos heurísticamente¹ que

$$\Omega = H. \quad (\text{A.7})$$

De la definición del operador de evolución (A.6), tenemos que

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) = \mathcal{U}(t + dt, t) \mathcal{U}(t, t_0) = (1 - iH dt) \mathcal{U}(t, t_0)$$

¹Se puede justificar esta inferencia a partir de la relación de energía de Planck: $E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \stackrel{\hbar=1}{=} E$.

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \mathcal{U}(t+dt, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0) = -iHdt\mathcal{U}(t, t_0) \\
&\Rightarrow i \frac{\mathcal{U}(t+dt, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0)}{dt} = H\mathcal{U}(t, t_0) \\
&\Leftrightarrow i \frac{\partial \mathcal{U}(t, t_0)}{\partial t} = H\mathcal{U}(t, t_0). \tag{A.8}
\end{aligned}$$

Concluimos que el operador de evolución temporal también cumple con la ecuación de Schrödinger. Ahora bien, suponiendo que toda la información temporal del sistema se encuentra en $\mathcal{U}(t, t_0)$, tenemos que

- si H es independiente del tiempo (aislado),

$$\mathcal{U}(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)}. \tag{A.9}$$

- si H es dependiente del tiempo, tenemos dos casos

1. Si $[H(t), H(t')] = 0 \forall t' \in [t_0, t]$,

$$\mathcal{U}(t, t_0) = e^{-i \int_{t_0}^t H(t') dt'}. \tag{A.10}$$

2. Si $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$, de la ecuación (A.8),

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(t, t_0) \Big|_{t_0}^t &= -i \int_{t_0}^t H(dt') \mathcal{U}(t', t_0) \\
\mathcal{U}(t, t_0) &= 1 - i \int_{t_0}^t H(dt') \mathcal{U}(t', t_0) = \\
&= 1 - i \int_{t_0}^t dt' H(t') [1 - i \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t'') \mathcal{U}(t'', t_0)] = \\
&= 1 - i \int_{t_0}^t dt' H(t') + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t') H(t'') \mathcal{U}(t'', t_0) = \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n). \tag{A.11}
\end{aligned}$$

La última igualdad es llamada Serie de Dyson y los tiempos son tales que $t_0 < t_n < t_{n-1} < \dots < t_1 < t$.

Apéndice B

Esquemas de representación en mecánica cuántica

Los operadores unitarios en general son importantes como generadores del grupo de transformaciones de los estados y al actuar del mismo modo sobre todos los estados (o sea que su expresión no depende del estado), tenemos que un estado arbitrario $|\alpha\rangle$ bajo la acción de un operador unitario \mathcal{U} se transforma,

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{U}|\alpha\rangle$$

,
mientras que el traslape de cualesquiera dos estados no:

$$\langle\beta|\alpha\rangle \rightarrow \langle\beta|\mathcal{U}^\dagger\mathcal{U}|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$$

,
debido a la unitariedad del operador $\mathcal{U}^\dagger\mathcal{U} = 1$. Sin embargo, el valor esperado de una observable arbitraria \mathbf{A} sí puede cambiar, ya que

$$\langle A \rangle = \langle\alpha|A|\alpha\rangle \rightarrow \left(\langle\alpha|\mathcal{U}^\dagger\right)A(\mathcal{U}|\alpha\rangle) = \langle\alpha|\mathcal{U}^\dagger A\mathcal{U}|\alpha\rangle.$$

Observamos que la última igualdad es equivalente a $\langle\alpha|A|\alpha\rangle$ sólo cuando $[A, \mathcal{U}] = 0$, lo cual no sucede en general.

Estas igualdades permiten tener dos interpretaciones

S. $|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{U}|\alpha\rangle$ el estado cambia, pero \mathbf{A} no cambia.

H. $|\alpha\rangle$ no cambia, pero $A \rightarrow \mathcal{U}^\dagger A\mathcal{U}$ el observable sí cambia.

La primera interpretación es el esquema con el que hemos trabajado hasta ahora, el esquema de Schrödinger, mientras que la segunda es el esquema de Heisenberg. A partir de ahora usaremos subíndices S o H para referirnos a la representación en la que estudiamos el objeto, Schrödinger o Heisenberg, respectivamente.

A continuación analizaremos las diferencias y semejanzas de las dos representaciones, aunque debe quedar claro que ambas conducen a los mismos resultados como veremos después.

Dado que estamos interesados en observar la evolución temporal del sistema en ambos marcos, elijamos $\mathcal{U} = \mathcal{U}(t, t_0 = 0)$, el operador de evolución temporal con $t_0 = 0$. Entonces el observable arbitrario \mathbf{A} evoluciona en el marco de Heisenberg de acuerdo a

$$A_H(t) = \mathcal{U}^\dagger(t, 0)A_S(t)\mathcal{U}(t, 0). \quad (\text{B.1})$$

Vemos que en $t = 0$

$$A_H(0) = A_S(0). \quad (\text{B.2})$$

Y que

$$|\alpha, 0\rangle_S = |\alpha, t\rangle_H = |\alpha\rangle \forall t. \quad (\text{B.3})$$

Como habíamos visto antes, los valores esperados coinciden en ambos esquemas. Ahora bien, recordando que se cumple

$$i\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = H\mathcal{U},$$

al derivar respecto al tiempo ambos lados de la ecuación (B.1), tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{dA_H}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} A_S \mathcal{U} + \mathcal{U}^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} \mathcal{U} + \mathcal{U} A_S \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} \\ &= i\mathcal{U}^\dagger H A_S \mathcal{U} + -i\mathcal{U}^\dagger A_S H \mathcal{U} + \mathcal{U}^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} \mathcal{U} \\ &= -i\left(\mathcal{U}^\dagger A_S \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} - \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger A_S \mathcal{U}\right) + \mathcal{U}^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} \mathcal{U} \\ &= -i[A_H, H_H] + \mathcal{U}^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} \mathcal{U}. \\ \Rightarrow \frac{dA_H}{dt} &= -i[A_H, H_H] + \mathcal{U}^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} \mathcal{U}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Esta ecuación es conocida como la Ecuación de Heisenberg.

Cuando A_S no depende explícitamente de t , tenemos que

$$\frac{dA_H}{dt} = -i[A_H, H_H].$$

Si consideramos el Hamiltoniano convencional compuesto por una parte de energía cinética y otra de energía potencial, $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, entonces

$$[x, H] = \frac{ip}{m} = i\frac{dx}{dt} \Leftrightarrow m\frac{dx}{dt} = p.$$

Además,

$$[p, H] = [p, V(x)] = -i\frac{\partial V(x)}{\partial x} \Leftrightarrow \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \Leftrightarrow m\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}.$$

Donde hemos utilizado las igualdades

$$[x_i, F(\vec{p})] = i \frac{\partial F}{\partial p_i} \quad (\text{B.5})$$

$$[p_i, G(\vec{x})] = -i \frac{\partial G}{\partial x_i}. \quad (\text{B.6})$$

Y si ahora tomamos los valores esperados de los operadores en la expresión anterior para el caso vectorial, obtenemos

$$\frac{m d^2 \langle \vec{x} \rangle}{dt^2} = - \langle \nabla V(\vec{x}) \rangle \quad (\text{B.7})$$

Esta ecuación es conocida como el Teorema de Ehrenfest y en general establece que la variación temporal del valor esperado de un observable $A_S(t)$ es igual al valor esperado de la derivada temporal del observable en el marco de Heisenberg, $A_H(t)$.

Debemos mencionar que todas las ecuaciones que hemos descrito en esta sección son válidas también para la descripción con el operador de densidad. De hecho, en ese caso el Teorema de Ehrenfest se puede escribir utilizando la ecuación (3.13), como

$$\frac{d}{dt} \langle A_S(t) \rangle = \left\langle \frac{d}{dt} A_H(t) \right\rangle = \text{tr} \left\{ \left(-i [A_H(t), H_H(t)] + \frac{\partial A_H(t)}{\partial t} \right) \rho_H(t_0) \right\}. \quad (\text{B.8})$$

Y la equivalencia entre ambas descripciones es evidente al observar que, en términos de la matriz de densidad, los valores esperados son iguales, pues

$$\begin{aligned} \langle A_S(t) \rangle &= \text{tr} \{ A_S(t) \rho(t) \} = \text{tr} \{ A_S(t) \mathcal{U}(t, t_0) \rho(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \} \\ &= \text{tr} \{ \rho(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) A(t) \mathcal{U}(t, t_0) \} = \text{tr} \{ \rho(t_0) A_H(t) \} \\ &= \text{tr} \{ A_H \rho(t_0) \} \equiv \langle A_H(t) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

en donde en la penúltima y última igualdad hemos utilizado la propiedad cíclica de la traza $\text{tr} \{ AB \} = \text{tr} \{ BA \}$.

Apéndice C

Teorema de entrelazamiento de eigenvalores

Teorema de entrelazamiento de eigenvalores

A continuación enunciaremos y demostraremos el teorema de entrelazamiento de Cauchy.

Teorema. Sean $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ una matriz Hermitiana simétrica y $B \in \mathbb{C}^{m \times m}$ con $m < n$ una submatriz principal de A , la cual es obtenida al quitar la columna y el renglón i de A . Supongamos que A tiene eigenvalores $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ y B tiene eigenvalores $\beta_1 \leq \dots \leq \beta_m$, entonces

$$\lambda_k \leq \beta_k \leq \lambda_{k+n-m} \quad \text{para } k=1,2,\dots,m. \quad (\text{C.1})$$

Antes de demostrar este teorema enunciaremos el **principio de mínimos y máximos**.

Sea A una matriz Hermitiana de dimensión $n \times n$ con eigenvalores

$$\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_k \leq \dots \leq \lambda_n,$$

entonces

$$\lambda_k = \min_U \{ \max_x \{ R_A(x) \mid x \in U \text{ y } x \neq 0 \} \mid \dim(U) = k \}$$

y

$$\lambda_k = \max_U \{ \min_x \{ R_A(x) \mid x \in U \text{ y } x \neq 0 \} \mid \dim(U) = n - k + 1 \}.$$

Donde $R_A(x) \equiv \frac{x^T A x}{|x|^2}$.

Ahora bien, para comenzar la demostración del teorema de entrelazamiento, supongamos que la matriz A tiene la forma $A = \begin{pmatrix} B & X^T \\ X & Z \end{pmatrix}$ donde X y Z son matrices de dimensión $n-m \times n-m$. Sean $\{x_1, \dots, x_n\}$ eigenvectores de A y $\{y_1, \dots, y_m\}$ eigenvectores de B . Definamos los siguientes espacios vectoriales

$$V \equiv \langle x_k, \dots, x_n \rangle, \quad W \equiv \langle y_1, \dots, y_m \rangle, \quad \tilde{W} \equiv \left\{ \begin{pmatrix} \omega \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega \in W \right\}.$$

Dado que $\dim(V) = n - k + 1$ y $\dim(\tilde{W}) = \dim(W) = k$, entonces su intersección no es vacía, es decir, existe $\tilde{w} \in V \cap \tilde{W}$, tal que $\tilde{w} = \begin{pmatrix} \omega \\ 0 \end{pmatrix}$ para algún $\omega \in W$. Entonces

$$\tilde{w}^T A \tilde{w} = \begin{pmatrix} \omega^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B & X^T \\ X & Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \\ 0 \end{pmatrix} = \omega^T B \omega.$$

Utilizando el principio de mínimos y máximos tenemos que

$$\lambda_k = \min_{x \in V} \frac{x^T A x}{|x|^2}$$

y

$$\beta_k = \max_{x \in W} \frac{x^T B x}{|x|^2}.$$

Por lo que

$$\lambda_k \leq \frac{\tilde{w}^T A \tilde{w}}{|\tilde{w}|^2} = \frac{\omega^T B \omega}{|\omega|^2} \leq \beta_k.$$

Para probar la otra desigualdad ahora definimos los espacios vectoriales

$$V \equiv \langle x_1, \dots, x_{n+k-m} \rangle, \quad W \equiv \langle y_k, \dots, y_m \rangle, \quad \tilde{W} \equiv \left\{ \begin{pmatrix} \omega \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega \in W \right\}.$$

Dado que $\dim(V) = n + k - m$ y $\dim(\tilde{W}) = \dim(W) = m - k + 1$, existe $\tilde{w} \in V \cap \tilde{W}$, tal que $\tilde{w} = \begin{pmatrix} \omega \\ 0 \end{pmatrix}$ para algún $\omega \in W$. Del mismo modo que en la desigualdad anterior tenemos que $\tilde{w}^T A \tilde{w} = \omega^T B \omega$. Y utilizando de nuevo el principio de mínimos y máximos tenemos

$$\lambda_{k+n-m} = \max_{x \in V} \frac{x^T A x}{|x|^2} \geq \frac{\tilde{w}^T A \tilde{w}}{|\tilde{w}|^2} = \frac{\omega^T B \omega}{|\omega|^2} \geq \min_{x \in W} \frac{x^T B x}{|x|^2} = \beta_k.$$

□

Apéndice D

Entropía de Shannon e información clásica

Un entendimiento intuitivo de la entropía en teoría de la información, relaciona la cantidad de incertidumbre acerca de un evento asociado con una distribución de la probabilidad.

Si consideramos el ejemplo de un texto en español, por ejemplo, al calcular la probabilidad de encontrar las palabras “que”, “con”, o “a”, y de las palabras “perro”, “universidad” o “Xochimilco”, notaremos que la probabilidad será mucho más alta en las primeras que en las segundas. Por lo que si quitamos algunas de estas palabras en el texto, no afectará tanto a la comprensión del mismo como si quitamos una de las segundas palabras. Esto podemos interpretarlo al pensar que las primeras palabras aportan menos información al texto que las otras. De este modo, la entropía de la palabra “que” debe ser mucho mas pequeña que la de la palabra “universidad”. Cuando todos los símbolos son igualmente posibles, todos aportan información igual de relevante al texto, y por tanto la entropía será máxima.

Otro ejemplo ilustrativo es considerar la clásica caja llena de pelotas de diferentes colores. Si todas las pelotas tienen colores diferentes, entonces la incertidumbre al adivinar el color al sacar una de las bolas es máxima. Si por otro lado, la caja contiene mas bolas rojas que de otro color, entonces existe menos incertidumbre en el caso anterior. Si todas las bolas fueran del mismo color, entonces tendremos incertidumbre nula al adivinar el color de la siguiente pelota, y por lo tanto la cantidad de información contenida en esa bola es cero.

La entropía de Shannon mide la cantidad de información media contenida en un resultado de un proceso aleatorio determinado.

Deducción de la entropía de Shannon

Se imprimen secuencias de N letras diferentes de longitud n , teniendo un total de N^n secuencias diferentes. Si n es un número largo, entonces es probable que muchas de estas secuencias comiencen a reflejar ciertas probabilidades p_i de que el carácter x_i sea obtenido, es decir la letra x_i , se obtiene con frecuencia $n_i = np_i$ en algún lugar de la secuencia. Cuando n es grande, el receptor del mensaje puede estar seguro que recibirá secuencias que contienen todas las letras x_i con su correspondiente

frecuencia. Entonces, ¿cuántas secuencias diferentes de este tipo podemos obtener?. Existen $n!$ maneras de acomodar n caracteres, ya que permutaciones de este tipo de letras entre ellas mismas conducen a la misma secuencia. De modo que para cada letra x_i , tenemos $n_i!$ permutaciones posibles, por lo tanto tenemos

$$Z_n = \frac{n!}{n_1! \dots n_N!} \quad (\text{D.1})$$

secuencias, con $n = \sum_i^N n_i$.

Ahora, si consideramos el caso de un texto infinitamente largo, es decir $n \rightarrow \infty$, $n_i \rightarrow \infty$, entonces usando que $p_i = \frac{n_i}{n}$ y la fórmula de Stirling,

$$\log(n!) \approx n \log n - n, \quad (\text{D.2})$$

al sustituir en (D.1), obtenemos

$$\begin{aligned} \log(Z_n) &\rightarrow n \log n - \sum_{i=1}^N n_i \log n_i \\ &= n(\log n - \sum_{i=1}^N p_i \log n_i) \\ &= -n \sum_{i=1}^N p_i \log \left(\frac{n_i}{n} \right) \\ &= -n \sum_i^N p_i \log p_i. \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Si dividimos el $\log(Z_n)$ por n , o sea tomamos el promedio de secuencias de este tipo, obtenemos la entropía de Shannon, $H(\tilde{p})$ de la distribución de probabilidades $\{p_i, i = 1, \dots, N\}$, definida como

$$H(\tilde{p}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log Z_n = - \sum_{i=1}^N p_i \log p_i \geq 0, \quad (\text{D.4})$$

con $0 \leq p_i \leq 1$ y cuya unidad es el *bit*.

Para el caso particular de sistemas bipartitos, ($N = 2$), con un parámetro p tal que $p_1 = p$ y $p_2 = 1 - p$, con $0 \leq p \leq 1$, la entropía de Shannon es la que se muestra en la ecuación (D.5).

$$H(p) = -p \log p - (1 - p) \log(1 - p). \quad (\text{D.5})$$

Un sistema clásico de dos estados tiene una cantidad máxima de información cuando $p = \frac{1}{2}$,

$$H(p = \frac{1}{2}) = 1 \text{bit},$$

como podemos observar en la figura D.1.

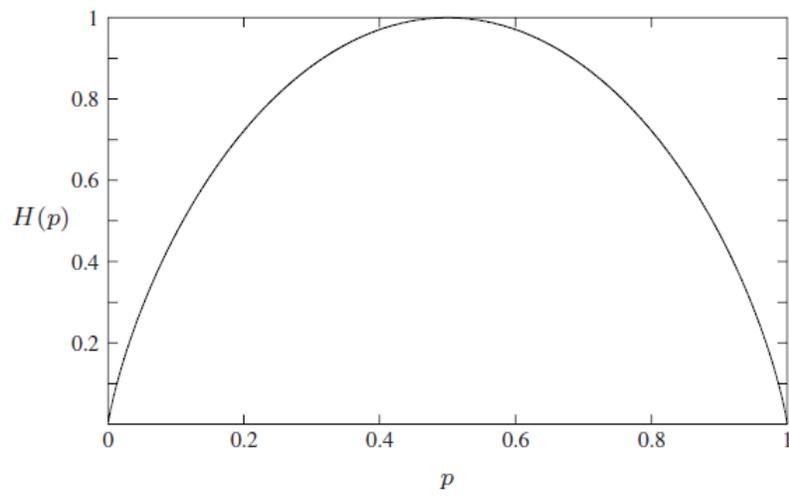


Figura D.1: Entropía de Shannon para un sistema clásico bipartito.

Apéndice E

Entropía de Von Neumann e información cuántica

Con el objetivo de encontrar una medición de la entropía en el caso cuántico, describimos un proceso de transporte de información clásica codificada en sistemas cuánticos.

Consideremos una fuente de información clásica, que genera letras aleatorias y las acomoda en una cadena de caracteres como en el apéndice anterior. Como hemos visto, la señal de la fuente está descrita por el conjunto $\{x_i, p_i\}$ con $i = 1, \dots, N$. Deseamos mandar esta cadena por un mensaje un receptor que se encuentra en otra localización espacial. El mensaje será transmitido por medio de un *canal cuántico*, el cual tiene algunas características que más adelante serán evidentes. En este caso, objetos cuánticos idénticos de dos niveles, como fotones o partículas de spin- $\frac{1}{2}$, serán los encargados llevar la información de las señales alfabéticas. Para cada caracter x_i , el aparato con índice i genera un sistema cuántico en el estado $|\psi_i\rangle$. Una vez que todo el mensaje se ha codificado en estados cuánticos, se produce una señal en forma de una mezcla estadística

$$\rho = \sum_{i=1}^d p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (\text{E.1})$$

De donde debemos exigir que el canal cuántico no perturbe al sistema y que además lo aisle completamente del exterior.

Posteriormente, en la localización del receptor, se lee la información por medio de mediciones proyectivas. Un detector D , representado por su observable correspondiente, es medido en el estado (E.1), que tiene estados y valores propios

$$D |d_m\rangle = d_m |d_m\rangle. \quad (\text{E.2})$$

La probabilidad de medir d_m está dada por $p(d_m)$.

Dado que la señal de entrada es clásica, podemos obtener la información de ésta mediante la entropía clásica de Shannon, como se define en la ecuación (D.5). Finalmente, consideramos la descomposición

espectral de (E.1),

$$\rho = \sum_i^d \lambda_m |m\rangle \langle m|, \quad \langle m|m'\rangle = \delta_{mm'}, \quad (\text{E.3})$$

donde $|m\rangle$ son los eigenvectores correspondientes a los eigenvalores λ_m de ρ .

Si consideramos la situación especial en la que la dimensión del espacio de Hilbert del sistema cuántico, \mathcal{H}_d es la misma que el número de caracteres posibles en la señal clásica, $d = N$, tenemos que para cada letra x_i , se obtiene una medición del eigenestado $|d_i\rangle$,

$$\rho = \sum_i^N \lambda_i |i\rangle \langle i| = \sum_i p_i |d_i\rangle \langle d_i|, \quad (\text{E.4})$$

en este caso tenemos que $p_i = \lambda_i$ y $|d_i\rangle = |i\rangle$, y que además $p(d_i) = p_i = \lambda_i$. Por lo que en este caso particular podemos asociar al sistema una entropía cuántica de la forma $S(\lambda)$, con el mismo valor que la entropía de Shannon

$$S(\lambda) = - \sum_{i=1}^N \lambda_i \log(\lambda_i) \geq 0, \quad (\text{E.5})$$

de donde obtenemos

$$S(\rho) = -\text{tr}\{\rho \log \rho\} \geq 0, \quad (\text{E.6})$$

la famosa entropía de Von Neumann del estado ρ . Esta fórmula, a pesar de haber sido deducida para un caso especial, es útil para cualquier tipo de estado cuántico[referencia].

En contraste con la entropía de Shannon, las unidades de esta entropía son los qubits.

Qubits como unidades de información cuántica

La meta de la QIS es transmitir una secuencia de estados cuánticos $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$, por medio de comprimir esa información en la menor cantidad de estados posibles. Con este propósito, los sistemas de qubits son empleados como sistemas de transporte de información.

Para una óptima compresión de información, la cantidad promedio de qubits requeridos por señal, está dada por la entropía de Von Neumann.

Mostraremos que la información cuántica es más útil para transmitir un mensaje que la comunicación clásica.

Utilicemos los estados $|\psi_0\rangle = |0\rangle$ de la base computacional y $|\psi_1\rangle = |0_x\rangle$ el eigenvalor de σ_x como se define en (4.10). Con las probabilidades $p_0 = p_1 = \frac{1}{2}$.

Clásicamente necesitamos $H(p_1, p_2) = 1$ bit para mandar un estado, y por lo tanto n bits para n estados.

Donde

$$H(X, Y) \equiv - \sum_{x,y} p(x, y) \log p(x, y) \quad (\text{E.7})$$

es la probabilidad conjunta del par de resultados $\{x, y\}$.

Al medir la entropía de Von Neumann, encontramos que si

$$\rho = p_0 |\psi_0\rangle \langle \psi_0| + p_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad (\text{E.8})$$

diagonalizando esta matriz de densidad obtenemos $S(\rho) = 0,601$ qubits. Es decir, necesitamos menos de un qubit para transportar un estado mediante un canal cuántico.