

Trabajo de Fin de Máster

Construcción computacional de puertas lógicas cuánticas mediante
la teoría de control óptimo

Autor

ADRIÁN GARCÍA CARRIZO

Dirigido por

ALBERTO CASTRO BARRIGÓN

Resumen

Hemos estudiado, mediante técnicas computacionales, la implementación de puertas lógicas cuánticas sobre nanoimanes moleculares. En concreto, hemos trabajado sobre un modelo para el sistema experimental descrito en [Jenkins et al., Phys. Rev. B **95**, 064423 (2017)]. Se trata de un sistema de 8 niveles, que puede ser considerado equivalente a un sistema de 3 q-bits acoplados. Sobre este sistema, hemos analizado las transiciones a niveles vecinos utilizando el método habitual (pulsos- π), y la mejora que sobre ese método supone el uso de pulsos obtenidos mediante técnicas de control óptimo. De esta manera, se pueden obtener pulsos más cortos y de mayor fidelidad. Finalmente, también utilizando estas técnicas de control óptimo, se han obtenido los pulsos necesarios para que el proceso resultante, pasado un tiempo característico menor que el tiempo de coherencia, sea equivalente a la aplicación de una puerta lógica cuántica. En concreto, se ha obtenido la puerta de Toffoli, universal para sistemas de 3 bits en computación clásica, y una serie de puertas de Deutsch, que generalizan el concepto de la puerta de Toffoli, y que son universales en computación cuántica.

Índice

1. Introducción: breve resumen de teoría de computación cuántica	1
2. Objetivos	6
3. Descripción del sistema	6
3.1. Sistema experimental	7
3.2. Modelo teórico	9
4. Metodología	14
4.1. Introducción a QOCT	14
4.2. Parametrización del pulso	19
5. Transiciones entre estados vecinos	20
5.1. Transiciones con pulsos- π	20
5.2. Transiciones calculadas con QOCT	22
6. Realización de puertas lógicas cuánticas con pulsos no monocromáticos	23
6.1. Puerta de Toffoli	26
6.2. Puerta de Deutsch	27
7. Conclusiones	28
Bibliografía	31
Anexo: Ocupación de cada nivel en las transiciones fundamentales usando QOCT	33

1. Introducción: breve resumen de teoría de computación cuántica

Comenzamos con una breve introducción a los conceptos de la teoría de información cuántica que han sido necesarios para la elaboración de este trabajo – una introducción completa al tema puede consultarse en la Ref. [1].

La computación clásica se basa en la manipulación de la unidad mínima de información, el bit, que solo puede tomar dos valores, por ejemplo, 0 o 1. La computación cuántica utiliza el concepto de q-bit (*quantum bit*). Un q-bit puede entenderse como un sistema cuántico de dos estados, que denotaremos como $|0\rangle$ y $|1\rangle$. La diferencia principal entre los bits y los q-bits es el hecho de que los q-bits pueden estar en cualquier combinación lineal de $|0\rangle$ o $|1\rangle$. Así, una forma general de escribir cualquier posible estado de un q-bit es la siguiente:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} \text{ t.q. } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (1.1)$$

El estado del q-bit está determinado por lo tanto por ψ , la denominada función de onda. A esta posibilidad de combinación lineal de estados también se la llama normalmente *superposición*. Al usar q-bits en lugar de bits, nos adentramos en el mundo cuántico y por lo tanto nos enfrentamos a los problemas que este mundo puede presentar. Así, por ejemplo, a diferencia de los bits, cuyo estado puede determinarse directamente, los sistemas físicos cuánticos, y por tanto los q-bits, están afectados por el llamado *problema de la medida*. Este problema consiste en el hecho de que el proceso de medición altera inevitablemente la evolución del sistema de forma que la función de onda tras la medida es distinta a la que era en el instante anterior a la medida. De esta forma, si partimos del estado que aparece en la ecuación (1.1), las leyes de la mecánica cuántica nos dicen que tendremos una probabilidad $|\alpha|^2$ de medir el sistema en el estado $|0\rangle$ y una probabilidad $|\beta|^2$ de medirlo en el estado $|1\rangle$ (es por ello que se impone la condición de normalización, pues la probabilidad total no debe superar la unidad). Una vez hecha la medida, el sistema *colapsa* al estado que se ha observado en la medición. Así pues, el estado final tras la medida siempre va a ser uno de los dos posibles estados $|0\rangle$ o $|1\rangle$ discriminados por nuestro aparato de medición (solo antes de que se realice dicha medida el sistema está en una superposición cuántica de esos estados).

La mayor libertad que presentan los q-bits frente a los bits clásicos permite que algunos algoritmos clásicos cuyo tiempo de cálculo crece exponencialmente con el número de bits de entrada, pasen a tener tiempos de cálculo que crecen solo potencialmente. Un ejemplo es el algoritmo de Deutsch-Jozsa^[2].

La manipulación de la información en computación clásica se realiza mediante las llamadas *puertas lógicas*, que toman un número de bits de entrada, y producen unos bits de salida de acuerdo con reglas predefinidas. Análogamente, existen puertas lógicas cuánticas que toman el estado de uno o varios q-bits y los alteran de cierta forma, siendo las puertas más sencillas aquellas que tienen un único q-bit de entrada.

Tomemos por ejemplo una de las puertas más sencillas que existe en computación clásica: la puerta NOT. Esta puerta viene definida como aquella que para un bit en el estado 0 le asocia un valor 1 y viceversa. Uno puede preguntarse si existe una puerta análoga a la puerta NOT en computación cuántica. Es decir, aquella que tome el estado $|0\rangle$ y lo lleve al estado $|1\rangle$ y que al estado

$|1\rangle$ lo lleve al estado $|0\rangle$. La respuesta es que, efectivamente, esta puerta existe, y se denomina puerta σ_X (o *bit-flip*). Podemos compilar el comportamiento de cualquier puerta lógica de un 1 q-bit como una matriz 2x2 unitaria definida sobre la base ortonormal $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, a veces denominada base computacional, tal que:

$$\begin{aligned} |0\rangle &\longrightarrow |1\rangle \\ |1\rangle &\longrightarrow |0\rangle \end{aligned} \quad \text{---} \boxed{X} \text{---} \quad U_{\sigma_X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

donde hemos incluido también el símbolo que suele utilizarse en la representación de circuitos lógicos. Viendo la representación matricial de esta puerta cobra sentido su nombre pues, más formalmente, aplica la matriz de Pauli σ_X al estado inicial. De la misma forma existen las puertas σ_Y y σ_Z .

Lo más relevante de esta definición de puerta cuántica como operador lineal unitario es que, a diferencia de las puertas lógicas clásicas, las cuánticas no solo actúan sobre los estados base $|0\rangle$ o $|1\rangle$, sino que pueden actuar sobre cualquier estado superposición. Así, por ejemplo, si introducimos como estado de entrada $|\varphi_1\rangle = |0\rangle - i|1\rangle$ tendremos que se obtendrá como estado final $U_{\sigma_X} |\varphi_1\rangle = |1\rangle - i|0\rangle$. Esto implica que, a diferencia del caso clásico, donde solo existe una puerta lógica no trivial con un único q-bit de entrada, en el caso cuántico toda matriz unitaria 2x2 puede definir una transformación válida para ser considerada una puerta lógica cuántica – independientemente de si representa alguna operación útil en el tratamiento de la información cuántica, o si es realizable desde el punto de vista experimental.

Otra puerta muy utilizada es la puerta de Hadamard que, aplicada a los estados de la base, devuelve una superposición de estados:

$$\begin{aligned} |0\rangle &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \\ |1\rangle &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned} \quad \text{---} \boxed{H} \text{---} \quad U_{\text{Hadamard}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Para poder construir circuitos cuánticos útiles, sin embargo, uno debe poder trabajar con sistemas de más de un q-bit. En el caso clásico, un sistema de dos bits clásicos tiene $2^2 = 4$ posibles estados: 00, 01, 10, 11. De la misma forma, para describir un sistema de 2 q-bits necesitamos un espacio de Hilbert de cuatro dimensiones. Este espacio de Hilbert es el producto tensorial de los dos espacios de Hilbert bidimensionales asociados a los q-bits iniciales, \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 : $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Por definición, y para simplificar la notación, tomamos:

$$|ij\rangle = |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2. \quad (1.2)$$

El subíndice en los kets es el indicador del q-bit al que se refiere el estado. De esta forma, el primer q-bit del sistema se define sobre la base de \mathcal{H}_1 ($\{|0\rangle_1, |1\rangle_1\}$) y el segundo sobre la de \mathcal{H}_2 ($\{|0\rangle_2, |1\rangle_2\}$). Así, automáticamente hemos definido una base ortonormal del espacio $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ (la llamada “base computacional”^[1]). Cualquier estado de un sistema de 2 q-bits se puede expresar como combinación

lineal de estos cuatro posibles estados:

$$|\psi\rangle = k_1 |00\rangle + k_2 |01\rangle + k_3 |10\rangle + k_4 |11\rangle . \quad (1.3)$$

Es por ello que se dice que este sistema es equivalente a un sistema cuántico de cuatro niveles y, a veces, para simplificar aún más la notación suele reescribirse la base como $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$. Generalmente se trabaja con estados normalizados, $\sum_{i=1}^4 |k_i|^2 = 1$.

En un sistema de varios q-bits podemos elegir medir sobre observables que afectan a todos los q-bits, o individualmente sobre uno de ellos. Si, por ejemplo, medimos solo sobre el primer q-bit y obtenemos que está en el estado $|1\rangle_1$, el estado al que el sistema colapsa tras la medida será:

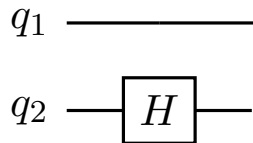
$$|\psi'\rangle = \frac{k_3 |10\rangle + k_4 |11\rangle}{\sqrt{|k_3|^2 + |k_4|^2}} . \quad (1.4)$$

En esta ecuación hemos impuesto la renormalización de la función de onda. Como no hemos medido todos los q-bits del sistema, el estado resultante sigue siendo una superposición de varios estados de la base completa.

De la misma forma que hemos hecho antes, podemos construir puertas lógicas cuánticas pero esta vez con dos q-bits de entrada. Una puerta especialmente relevante de dos q-bits es la puerta CNOT (“Controlled” NOT), que actúa de la siguiente forma: si el primer q-bit está en estado $|0\rangle_1$ no realiza ningún cambio en ningún q-bit, pero si está en $|1\rangle_1$, aplica σ_X al segundo q-bit. Así:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |00\rangle \longrightarrow |00\rangle = |0\rangle \\ |1\rangle &= |01\rangle \longrightarrow |01\rangle = |1\rangle \\ |2\rangle &= |10\rangle \longrightarrow |11\rangle = |3\rangle \\ |3\rangle &= |11\rangle \longrightarrow |10\rangle = |2\rangle \end{aligned} \quad \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \oplus \end{array} \quad U_{\text{CNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Donde se ha incluido, de nuevo, el símbolo que suele utilizarse en la representación de circuitos lógicos cuánticos. La puerta así definida cumple la condición de unitariedad ($U_{\text{CNOT}}^\dagger U_{\text{CNOT}} = \mathbb{I}$). Otra forma de generar puertas de dos q-bits es a partir de puertas de un q-bit. Por ejemplo, podemos preguntarnos como es la representación matricial de la siguiente puerta:



Es decir, aquella que deja invariante el primer q-bit, y aplica la puerta de Hadamard al segundo. Un método directo consiste en construir la tabla de verdad y escribir a mano la matriz asociada a ésta. Otra forma, más sencilla y elegante, consiste en entender que esta puerta consiste en el producto de dos puertas que actúan independientemente sobre cada uno de los q-bits (la identidad sobre el primero, y la puerta de Hadamard sobre el segundo). Por lo tanto, la puerta resultante es

el producto tensorial de las mismas:

$$U = \mathbb{I}_1 \otimes U_{\text{Hadamard}, 2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Uno puede comprobar que, efectivamente, esta representación es correcta pues:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |00\rangle \longrightarrow |0\rangle_1 \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_2 + |1\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \\ |1\rangle &= |01\rangle \longrightarrow |0\rangle_1 \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_2 - |1\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |01\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \\ |2\rangle &= |10\rangle \longrightarrow |1\rangle_1 \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_2 + |1\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle) \\ |3\rangle &= |11\rangle \longrightarrow |1\rangle_1 \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_2 - |1\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle) \end{aligned} \quad (1.6)$$

Si aplicamos sucesivamente dos puertas lógicas distintas, podemos calcular la representación matricial de la operación resultante mediante la multiplicación estándar de matrices. Una sucesión de puertas cuánticas es lo que se denomina un *circuito*. Se puede llegar al mismo circuito final acoplando distintas puertas: es decir, combinando distintas puertas lógicas podemos encontrar circuitos que son equivalentes entre si o equivalentes a otra puerta ya conocida.

La existencia de estas equivalencias nos lleva a preguntarnos si existen conjuntos de puertas que puedan considerarse *universales*, es decir, puertas con cuya composición pueda construirse cualquier circuito. En computación clásica existe el concepto análogo: se dice que un conjunto de puertas lógicas clásicas es universal si puede construirse cualquier función que actúa sobre los bits utilizando únicamente combinaciones de dichas puerta. Este es el ejemplo de la puerta NAND por si sola, pues cualquier otra puerta (NOT, AND, OR, XOR, NOR, XNOR) puede construirse con distintas combinaciones de puertas NAND (y, por tanto, se puede construir cualquier circuito lógico únicamente con puertas NAND). Esto mismo ocurre en la computación cuántica. se dice que un conjunto de puertas lógicas es universal si es posible reproducir cualquier operación unitaria a una exactitud arbitraria mediante un circuito lógico cuántico que utilice únicamente las puertas de dicho conjunto. El conjunto de puertas {Hadamard, phase, CNOT, $\pi/8$ }^[2], por ejemplo, presenta este tipo de universalidad. Esto es así porque, con combinaciones de este tipo de puertas, es posible construir cualquier tipo de operación unitaria en un espacio de n q-bits. Además, cualquier matriz unitaria arbitraria en un espacio de Hilbert de cualquier dimensión puede escribirse como producto de matrices unitarias de dos niveles (es decir, matrices que solo actúan de forma no trivial sobre dos de los vectores componente).

Una puerta importante, que utilizaremos más adelante, es la puerta de Toffoli, con tres q-bits de entrada (y tres de salida). Se puede comprobar que la versión clásica de esta puerta es universal. Es decir, cualquier operación puede construirse mediante alguna combinación de puertas de Toffli. Como la puerta de Toffoli es reversible puede ser implementada mediante computación cuántica (este hecho implica el importante resultado teórico de que un ordenador cuántico puede

implementar cualquier posible operación clásica). Ahora bien, la puerta de Toffoli no es universal para las operaciones de computación cuántica; únicamente podemos construir un conjunto universal añadiendo alguna puerta extra (por ejemplo, la puerta de Hadamard).

Si queremos construir puertas lógicas en las que intervengan un mayor número de q-bits podemos usar procedimientos similares a los anteriores para obtener la representación matricial, teniendo en cuenta que el tamaño de la matriz crece exponencialmente con el número de q-bits (como 2^n). Así, si queremos trabajar con más q-bits y sus representaciones matriciales necesitamos definir claramente una generalización de la base para un sistema de N niveles. Al igual que hicimos para el caso de dos q-bits, para un sistema de n q-bits primero definimos una base para cada uno de los q-bits individuales, sobre su espacio de Hilbert, de forma que la base del sistema completo vendrá dada como el producto tensorial de los elementos que forman cada una de las bases individuales. La base resultante se denomina base computacional e incluye todas las posibles combinaciones de estados de cada q-bit. Como se ha dicho anteriormente, para simplificar la notación, denominaremos al ket que representa cada estado de la base con el número que representa en base decimal. Así, cada uno de los estados de la base puede escribirse como:

$$|a_N\rangle_N \otimes |a_{N-1}\rangle_{N-1} \otimes \cdots \otimes |a_1\rangle_1 = |a_N a_{N-1} \cdots a_1\rangle = |c\rangle, \quad (1.7)$$

donde $c = a_N 2^{N-1} + a_{N-1} 2^{N-2} + \cdots + a_1$. Así, la base (ortonormal) se expresará como $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |2^N - 1\rangle\}$ y cualquier estado se podrá formar mediante una combinación lineal de los kets que la forman.

Formalmente, como ya hemos visto, una puerta cuántica no es más que un operador unitario U . En las realizaciones físicas de los sistemas de computación cuántica, estas puertas no son más que operadores evolución temporal, $U(T, 0)$: son los operadores que generan la transformación del estado del sistema desde el tiempo $t = 0$ hasta $t = T$, transformación que está gobernada por la ecuación de Schrödinger. Los sistemas cuánticos, sin embargo, están sujetos a perturbaciones externas incontrolables, ya que en la práctica no podemos aislarlos totalmente de su entorno. Esto implica que el comportamiento *coherente* determinado por la ecuación de Schrödinger, se deteriora con el tiempo. Para que podamos asumir un comportamiento coherente, es necesario que los tiempos de decoherencia típicos del sistema sean lo más largos posibles, o alternatively, que los tiempos de operación T sean cortos. El objetivo de este trabajo es, de hecho, estudiar la forma de reducir estos tiempos de actuación, buscando maneras *óptimas* de diseñar las puertas cuánticas. Para ello utilizamos la teoría de control óptimo cuántico (QOCT).

La motivación de este trabajo nace en el proyecto SUMO (“Scaling Up quantum computation with MOlecular spins”), dirigido por el investigador F. Luis, en el Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA). En este proyecto se realiza un montaje experimental que trata de crear puertas cuánticas con moléculas magnéticas. Se enfrenta precisamente al problema de los cortos tiempos de decoherencia, y es por ello que una solución puede ser la aplicación de la QOCT para acelerar las puertas cuánticas.

En la sección 2 resumimos los objetivos del trabajo. La sección 3 presenta el sistema físico sobre el que hemos trabajado, así como el modelo que hemos usado para realizar las simulaciones. La sección 4 está dedicada a las ecuaciones fundamentales de la teoría de control óptimo cuántico, que

hemos utilizado para buscar los pulsos de control. Las secciones 5 y 6 presentan los resultados: las optimizaciones de las transiciones estado a estado, y el diseño mediante control óptimo de puertas cuánticas. Finalmente, en la sección 7 están las conclusiones del trabajo. En todo este trabajo se utilizará el sistema de unidades atómicas de Hartree, tal que $m_e = e = \hbar = 1$, es decir, tomamos la masa del electrón, su carga, y la constante de Planck reducida, como la unidad.

2. Objetivos

La implementación de una puerta cuántica en un sistema físico susceptible de ser interpretado como un sistema de q-bits consiste en la aplicación de un operador perturbativo externo que se añade al Hamiltoniano no perturbado que describe el sistema. El operador evolución resultante debe ser igual (o equivalente) al operador que define la puerta cuántica. En este trabajo, hemos puesto nuestra atención en el sistema experimental descrito en la Ref. [3], que está siendo desarrollado por el grupo del investigador Fernando Luis en el Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón. Este sistema se describirá brevemente en la sección 3.

Las puertas cuánticas tradicionalmente se diseñan concatenando pulsos sencillos, monocromáticos, que realizan transiciones entre estados utilizando las frecuencias de resonancia. Esta forma de diseñar pulsos puede implicar tiempos largos, mayores que los característicos de la decoherencia del sistema. Es por ello que nuestro objetivo es tratar de encontrar pulsos más complejos, mediante la teoría de control óptimo cuántico (QOCT), que hagan el mismo trabajo en menos tiempo. Formalmente se trata de expresar la perturbación en función de una serie de parámetros, y encontrar, computacionalmente, los parámetros óptimos que generan ese comportamiento deseado.

En suma, los principales objetivos de este trabajo han sido:

1. Entender las propiedades que debe poseer un sistema cuántico para poder realizar computación cuántica sobre él.
2. Implementar un código que realice los cálculos de QOCT para el tipo de sistema y perturbación con el que nos enfrentamos.
3. Comprobar los beneficios que suponen el uso de pulsos generados mediante QOCT, en lugar de los métodos habituales (pulsos- π).
4. Ejecutar cálculos de optimización para la implementación de puertas lógicas de 3 q-bits (Toffoli y Deutsch).

3. Descripción del sistema

En computación cuántica, para trabajar con un único q-bit nos bastaría con el espín de un electrón o el estado de polarización de un fotón (cualquier sistema de dos niveles). Sin embargo, los sistemas verdaderamente útiles consisten en más de un q-bit. Para conseguir sistemas de este tipo, se pueden acoplar varios q-bits, o alternatively, trabajar con un sistema de 2^n niveles, reinterpretándolo como un sistema de n q-bits acoplados. A continuación describiremos el sistema

molecular experimental concreto que se ha utilizado para este trabajo. Se trata de un sistema de ocho niveles, que puede reinterpretarse como un sistema de tres q-bits. Asimismo, describiremos el modelo teórico que hemos empleado para simular su comportamiento. Este sistema está detallado en las Refs. [3] y [4].

3.1. Sistema experimental

Unos sistemas que se están proponiendo recientemente como sistemas de q-bits son los denominados *molecular nanomagnets* o nanoimanes moleculares. Se trata de un tipo de moléculas artificiales que, básicamente, consisten en uno o varios núcleos magnéticos rodeados de ligandos no magnéticos. La estructura de niveles de espín de este tipo de moléculas puede utilizarse como sistema cuántico sobre el que realizar los cálculos de computación cuántica.

El principal problema es encontrar un núcleo magnético apropiado. Existen muchas opciones, porque aunque la propuesta de uso de los nanoimanes moleculares es reciente en el contexto de la computación cuántica, se llevan utilizando durante varias décadas para la investigación de fenómenos magneto-cuánticos como el *spin tunneling* [5] o el *spin entanglement* [6]. Por ejemplo, una molécula muy utilizada, y por tanto, muy conocida, es el Mn_{12} , representada en la Fig. 3.1a. En su estado fundamental tiene un espín de $S = 10$. Sin embargo, suele presentar tiempos de coherencia muy cortos y, en determinadas condiciones, no es posible separar cada una de las transiciones entre sí.

Otra posibilidad sería utilizar nanoimanes basados en un único ion lantánido (*single-ion magnets*), que presentan tiempos de coherencia más largos. Ahora bien, la interacción con el resto de átomos del cristal suele producir una separación de niveles a campo nulo que, a veces, puede ser lo suficientemente grande como para que solo los dobletes electrónicos más bajos sean experimentalmente accesibles. Un ion que no presenta este problema es el ion de gadolinio (Gd^{3+}). Su estructura electrónica es $4f^7$, cuenta con un momento angular orbital L nulo, pero con el mayor espín posible ($S = 7/2$) para un único átomo. Esto implica que el espín electrónico del Gd^{3+} puede entenderse como un qudit con $d = 8$ o, como hemos dicho antes, un sistema de tres q-bits.

El ion de Gd^{3+} no está libre, sino inserto en una estructura más compleja que puede verse en la Fig. 3.1b. Al conjunto, los autores de esta síntesis lo abrevian como GdW_{30} [4]. Para poder construir puertas cuánticas, se requiere de la existencia de transiciones coherentes capaces de conectar dos estados cualquiera arbitrarios. Para ello se necesitan anisotropías magnéticas lo suficientemente grandes como para hacer que cada una de las transiciones posibles sea independiente de las otras, pero asimismo lo suficientemente débiles como para que las distintas frecuencias de transición sean accesibles al aparato experimental, que funciona en el rango de microondas.

Las principales fuentes de ruido magnético que provocan la decoherencia en este tipo de sistemas, provienen de (1) los acoplos hiperfinos a los espines nucleares; y (2) el acoplo dipolar a otros espines electrónicos. Es posible minimizar este segundo efecto diluyendo el sistema en una matriz diamagnética. De hecho, es así como se procede para realizar los distintos experimentos de medida del tiempo de decoherencia y de la estructura de niveles. Se prepara un cristal en el que el GdW_{30} está “disuelto” en una matriz de YW_{30} , que, al ser diamagnética, reduce las interacciones dipolares. La expresión química completa de la estructura cristalina puede escribirse como $[\text{Gd}_x\text{Y}_{1-x}(\text{H}_2\text{O})\text{P}_5\text{W}_{30}\text{O}_{110}]^{12-}$ aunque normalmente se abrevia como $\text{Y}_{1-x}\text{Gd}_x\text{W}_{30}$ siendo x muy

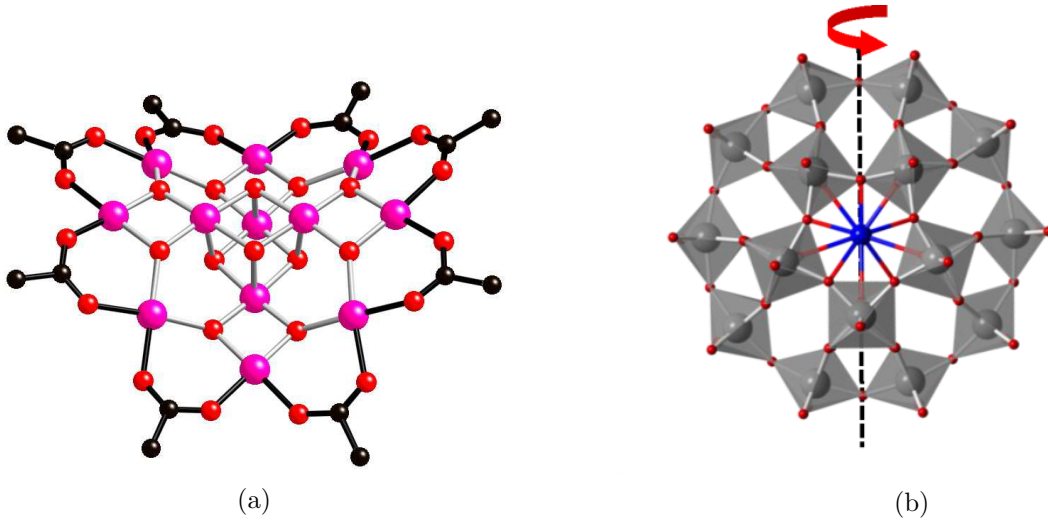


Figura 3.1: Estructura de distintos nanoimanes magnéticos: **(a)** $\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}(\text{CH}_3\text{COO})_{16}(\text{H}_2\text{O})_4$, abreviada Mn_{12} . Los 8 manganesos externos tienen una configuración d^4 que aporta un $S = 2$ cada uno. Los 4 internos tienen una configuración d^4 que aporta un $S = 3/2$ cada uno. Dada la configuración antiferromagnética de la molécula, el estado fundamental del sistema total tiene $S = 10$. **(b)** [3] $[\text{Gd}(\text{H}_2\text{O})\text{P}_5\text{W}_{30}\text{O}_{110}]^{12-}$. El núcleo magnético es el ion Gd^{3+} , con configuración $4f^7$, y tiene espín $S = 7/2$.

pequeño (del orden de 10^{-2}) pues la concentración de los iones de gadolinio debe ser baja.

La medida de los tiempos de coherencia, T_2 , se realiza utilizando esta mezcla con $x = 0.01$ y mediante la técnica de “espín echo”. Este método es uno de los procedimientos habituales de la técnica de resonancia paramagnética electrónica (EPR) [7]. Esta es una técnica experimental similar a la resonancia magnética nuclear (NMR), excepto que en lugar de utilizar espines nucleares como en NMR, se utilizan espines electrónicos. Como el momento magnético es inversamente proporcional a la masa, las técnicas basadas en EPR utilizan frecuencias varios órdenes de magnitud mayores que las utilizadas en NMR (del orden de MHz, rango de las radiofrecuencias, pasamos a GHz, rango de las microondas).

La EPR no solo sirve para comprobar la existencia de los distintos niveles energéticos que presenta el sistema GdW_{30} , ver Ref. [3], sino que, como se ha dicho anteriormente, también permite medir los tiempos de coherencia de fase usando la técnica del espín echo. Esta técnica, usada también en NMR, requiere de la aplicación de un campo magnético inicial, que alinea los espines. El proceso para medir este tiempo de decoherencia se basa en la secuencia de Hahn [8] (en honor a Erwin Hahn): primero, aplicamos un campo magnético que alinea todos los espines, de forma que el momento magnético medio es paralelo a la dirección del campo magnético aplicado (por ejemplo, el eje z). Hecho esto, se apaga el campo magnético y se aplica un pulso de microondas que rota los momentos magnéticos 90° . Debido a las inhomogeneidades magnéticas de la red, los distintos momentos magnéticos se van desfasando y el momento magnético medio va disminuyendo. El tiempo característico en el que ocurre esto se suele denominar T_2^* . En este momento, se aplica otro pulso de microondas que rota los momentos 180° , haciendo que las mismas inhomogeneidades que original-

mente destruían la imanación ahora la recompongan, alcanzándose un nuevo máximo ligeramente menor que al principio del experimento. Esta rotación de 180° puede repetirse varias veces y, en cada iteración, el nuevo máximo del valor medio de la magnetización será menor. Este decaimiento ocurre a un ratio de tiempo característico T_2 , también denominado tiempo de coherencia. Si se vuelve a aplicar el campo magnético, para que se alineen otra vez los momentos, puede medirse el tiempo de relajación T_1 . Tanto T_2 como T_1 son característicos de cada una de las transiciones. Los resultados obtenidos en [3] muestran que las siete transiciones presentan valores de T_2 del orden de $0.5 \mu s$ y del orden de $2 \mu s$ para T_1 .

3.2. Modelo teórico

Necesitamos ahora una forma de poder describir el GdW_{30} mediante un modelo matemático sobre el que experimentar con las distintas perturbaciones. Este tipo de sistemas se puede describir con bastante precisión mediante los llamados *Hamiltonianos de espín*. Para el GdW_{30} en concreto, usaremos el siguiente Hamiltoniano (ver Ref. [9] y Ref. [10]):

$$\hat{H} = D \left[\hat{S}_z^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] + E \left(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2 \right) - g\mu_B \hat{\vec{S}} \cdot \vec{H}, \quad (3.1)$$

siendo $D = 1281 \text{ MHz}$ y $E = 294 \text{ MHz}$. Estas componentes se corresponden con los términos anisotrópicos de segundo orden y su valor se determina mediante ajuste experimental usando experimentos de EPR. $g = 2$ es la razón giromagnética, $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ es el operador vector de espín, referido a los ejes anisotrópicos, μ_B el magnetón de Bohr y $S = 7/2$. El sistema puede estar sometido a un campo magnético externo \vec{H} .

Tal como se ha dicho antes, para poder asignar a cada transición entre niveles una frecuencia característica diferente, es necesario que exista esta anisotropía magnética ($D \neq E$). De lo contrario aparecen degeneraciones entre niveles, y frecuencias iguales. Esta anisotropía debe ser sin embargo lo suficientemente débil como para que las transiciones sean accesibles a experimentos de EPR en banda-X (9.48 GHz). A pesar de la ruptura de la simetría inducida por la anisotropía, en ausencia del último término en la Eq. (3.1), todavía existen frecuencias degeneradas dos a dos (dobletes). Para romper la degeneración de estos dobletes se aplica un campo magnético \vec{H} orientado a lo largo del eje “duro” de la molécula (eje z , perpendicular al plano de la Fig. 3.1b). Escogiendo la intensidad de este campo magnético externo puede regularse, hasta cierto punto, la distribución de las frecuencias de transición. Este hecho está representado en la Fig. 3.2, que muestra el espectro de energías en función del campo magnético externo. Hemos implementado este modelo de Hamiltoniano de espín sobre el código qutip [11, 12]; la figura 3.2 la hemos obtenido de esta manera, y es una réplica de la Fig. 3(b) de la Ref. [3]. La situación de estos niveles respecto al montaje experimental puede ser contrastada mediante la obtención del espectro EPR del sistema. Dado que la interpretación de estos espectros no es trivial, suele compararse con un espectro obtenido a partir del modelo teórico. Tal como se muestra en [3] ambos resultados son compatibles.

Otra forma que tenemos de comparar el modelo teórico con los resultados experimentales es mediante procesos de evolución temporal del sistema sujeto a una perturbación, tomando medidas de algún observable. Para poder modelar este tipo de procesos, no es suficiente, en general, considerar

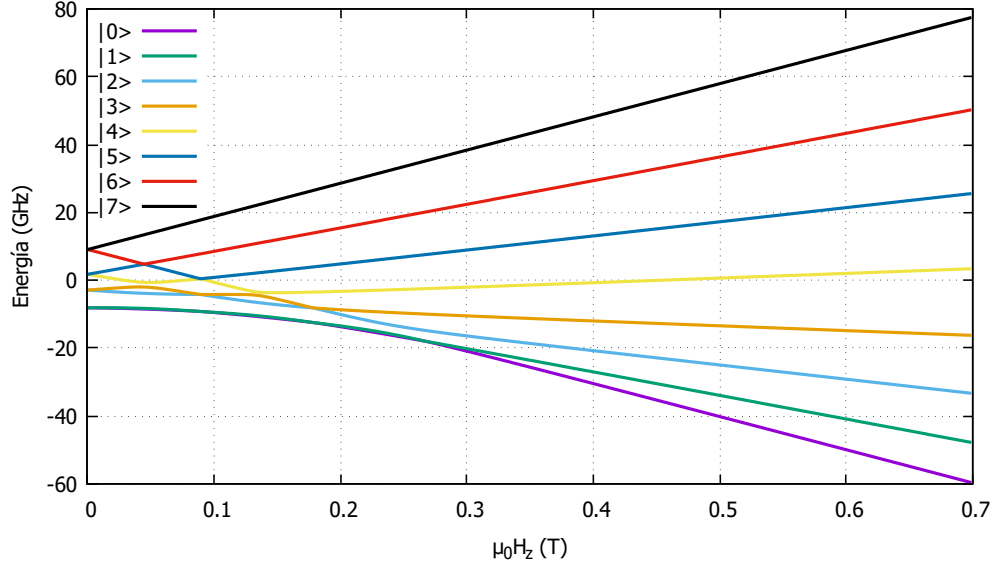


Figura 3.2: Diagrama Zeeman de los niveles de energía del sistema GdW_{30} en función del campo magnético \vec{H} , que se ha elegido en dirección z .

la ecuación de Schrödinger asociada al Hamiltonian (3.1). En la práctica, el sistema magnético no está aislado de interacciones externas. Para poder modelizar este tipo de interacciones externas se utiliza la teoría de sistemas cuánticos abiertos. Esta teoría se basa en el formalismo de la matriz densidad que resumiremos aquí brevemente; una introducción completa puede encontrarse en la Ref. [13].

Cuando nuestro conocimiento del sistema a estudio es completo, podemos asignarle un estado $|\psi\rangle$ que lo describe completamente (salvo una fase global). A estos estados los denominamos *estados puros*. Sin embargo, las condiciones experimentales no suelen permitir un conocimiento completo: en la mayoría de casos, solo sabremos que el sistema puede estar en una determinada mezcla estadística de estados $\{|\psi_i\rangle\}$ con probabilidades p_i tal que $\sum_i p_i = 1$, es decir, una mezcla de estados puros normalizados y no necesariamente ortogonales. De esta forma, si más de un p_i es distinto de 0, el estado dejará de ser llamado estado puro y pasará a denominarse *estado mezcla*. La herramienta matemática que describe el conocimiento de este tipo de sistemas es el operador densidad (o *matriz densidad*), definido como:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| . \quad (3.2)$$

Las matrices densidad son operadores hermíticos de traza unidad y semidefinidas positivas, es decir, que $\forall |\psi\rangle$, se cumple que $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$. Cualquier operador que satisfaga estas dos propiedades puede considerarse un operador densidad, capaz de describir un sistema cuántico estadístico (también denominado *ensemble*). El uso de las matrices densidades fue por primera vez propuesto por von Neumann [14].

Dada la matriz densidad es fácil determinar si se trata de un estado puro o mezcla pues, para un estado puro, tendremos que $\text{Tr}[\rho^2] = \text{Tr}[\rho] = 1$. Si $\text{Tr}[\rho^2] < 1$ el sistema está en un estado mezcla. La

cantidad $\text{Tr}[\rho^2]$ se denomina pureza del estado y satisface que $\frac{1}{d} \leq \text{Tr}[\rho^2] \leq 1$, siendo d la dimensión del espacio de Hilbert. Por último, es fácil demostrar que dado un operador cualquiera, A , el valor esperado puede calcularse como:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}[A\rho]. \quad (3.3)$$

Pasemos ahora a tratar la evolución temporal de los estados mezcla. Sabemos que la evolución de los estados puros en un sistema cerrado, dado un Hamiltoniano \hat{H} , viene dada por la ecuación de Schrödinger:

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (3.4)$$

La resolución formal de esta ecuación conduce a la definición del operador evolución, que es lineal y unitario y, por tanto, preserva la norma de los estados. Utilizando la definición de la matriz densidad (3.2) y la ecuación de Schrödinger se puede probar que la evolución de los estados mezcla viene dada por la ecuación de von Neumann (o ecuación Liouville–von Neumann):

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] \equiv \mathcal{L}\rho, \quad (3.5)$$

donde se ha utilizado el conmutador, definido como $[A, B] = AB - BA$, y se ha definido \mathcal{L} , denominado *Liouvillian superoperator*. Es fácil probar que esta dinámica hamiltoniana conserva la pureza del sistema.

Ahora bien, como hemos dicho antes, nuestro sistema no está completamente aislado del exterior, y estas ecuaciones solo son válidas para un sistema aislado. Para describir sistemas abiertos, se empieza por considerar un nuevo sistema cerrado, formado por el sistema a estudio en el que estamos interesados y un sistema acoplado a él llamado *entorno*. De esta forma, el espacio de estados del sistema completo compuesto se podrá definir como el producto tensorial del espacio de estados de cada componente, es decir, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{sys} \otimes \mathcal{H}_{env}$. Nosotros queremos centrarnos en el subsistema original, asumiendo que la descripción completa es imposible. La herramienta para intentar esta descripción parcial es la matriz densidad reducida: Sea un sistema compuesto tal que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$, si el estado completo está definido por una matriz densidad ρ , definimos la matriz densidad reducida del subsistema a como:

$$\rho_a = \text{Tr}_b[\rho], \quad (3.6)$$

donde Tr_b es la traza parcial sobre el subsistema b , definida como:

$$\text{Tr}_b \left[\sum_{i,j,k,l} |a_i\rangle \langle a_j| \otimes |b_k\rangle \langle b_l| \right] \equiv \sum_{i,j} |a_i\rangle \langle a_j| \text{Tr} \left[\sum_{k,l} |b_k\rangle \langle b_l| \right], \quad (3.7)$$

siendo $\{|a_i\rangle\}$ y $\{|b_i\rangle\}$ bases ortonormales de \mathcal{H}_a y \mathcal{H}_b , respectivamente. Así, la matriz densidad reducida del sistema inicial que interacciona con el entorno será $\rho_{sys} = \text{Tr}_{env}[\rho]$.

Debe establecerse ahora cuál es la ecuación que describe la evolución de un subsistema que forma parte de un sistema mayor más grande, es decir, la evolución de esta matriz densidad reducida. Para ello deben aplicarse una serie de pasos y aproximaciones que no presentaremos aquí; una posible solución al problema es la ecuación maestra de Lindblad, o ecuación GKSL (Gorini – Kossakowski

– Sudarshan – Lindblad) [15, 16]. Esta es la ecuación maestra Markoviana¹ más general posible para la evolución de matrices densidad, de forma que preserve las leyes de la mecánica cuántica, (es una transformación completamente positiva y conserve la traza independientemente de la condición inicial). Sendas demostraciones pueden ser encontradas en Ref. [17] y Ref. [18]. Esta ecuación tiene la siguiente forma:

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H, \rho] + \sum_k \Gamma_k \left(L_k \rho L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_k L_k^\dagger, \rho \} \right), \quad (3.8)$$

siendo L_k los denominados *jump operators* (o *Lindblad operators*) y Γ_k un conjunto de constantes que modulan el ratio de acoplo del sistema con el entorno. Los *collapse operators* se definen como $C_k = \sqrt{\Gamma_k} L_k$. La ecuación maestra de Lindblad tiene algunas propiedades interesantes que merece la pena comentar. Por ejemplo, se puede demostrar que la pureza de un sistema que sigue esta dinámica cumple que $\frac{d}{dt}(\text{Tr}[\rho^2]) \leq 0$, es decir, que la pureza del estado siempre disminuye. De esta forma, si preparamos el sistema inicial en un estado puro acabaremos obteniendo estados mezcla. Además, la ecuación maestra de Lindblad es invariante bajo transformaciones unitarias de los operadores de colapso por lo que, sin pérdida de generalidad, siempre es posible encontrar operadores de colapso de traza nula.

El objetivo de este trabajo es, en realidad, conseguir pulsos lo suficientemente cortos como para que la evolución del sistema sea coherente. Es decir, trabajar en un régimen en el que la influencia del entorno es pequeña, de manera que basta con la ecuación de Schrödinger, y no se precisa de la ecuación de Lindblad o similares. Sin embargo, hemos realizado una simulación a tiempos largos con está última para valorar si el comportamiento del modelo es consistente con los medidas experimentales obtenidas por el grupo de F. Luis en el ICMA.

Así, utilizando como modelo el Hamiltoniano mostrado en la ecuación (3.1), introducimos una perturbación sinusoidal dependiente del tiempo. De esta forma, el Hamiltoniano perturbado puede escribirse como:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + 2\lambda \cos(\omega t) \hat{V} \quad (3.9)$$

siendo \hat{H}_0 el Hamiltoniano (3.1) y

$$\hat{V} = -g\mu_B \hat{S} \cdot \vec{H}_m. \quad (3.10)$$

En el Hamiltoniano (3.1) habíamos introducido un campo magnético estático \vec{H} que, en la medida experimental concreta que queremos aproximadamente simular, se aplica en dirección del eje z con un valor de 615 mT. En estas condiciones, la primera transición (del estado fundamental al primer excitado) tiene una frecuencia de resonancia de 9.468 GHz. Ahora, añadimos un campo magnético variable \vec{H}_m que se aplica en la dirección del eje x . La amplitud de oscilación $\lambda \approx 0.163$ mT también se ha escogido de forma que corresponde con las condiciones experimentales. Por último ω se elige de forma que el pulso introducido esté en resonancia con la primera transición del sistema, es decir, $\omega = 9.47$ GHz.

Usando la ecuación maestra de Lindblad podemos calcular como varían los valores esperado de

¹Decimos que la ecuación es Markoviana porque induce una dinámica Markoviana en el sistema. Esto es, que la derivada de la matriz densidad depende solo del estado actual, y no de los estados pasados, lo cual es cierto cuando la dinámica del entorno es lo suficientemente rápida como para que la correlación del sistema con el baño se pierda también rápidamente.

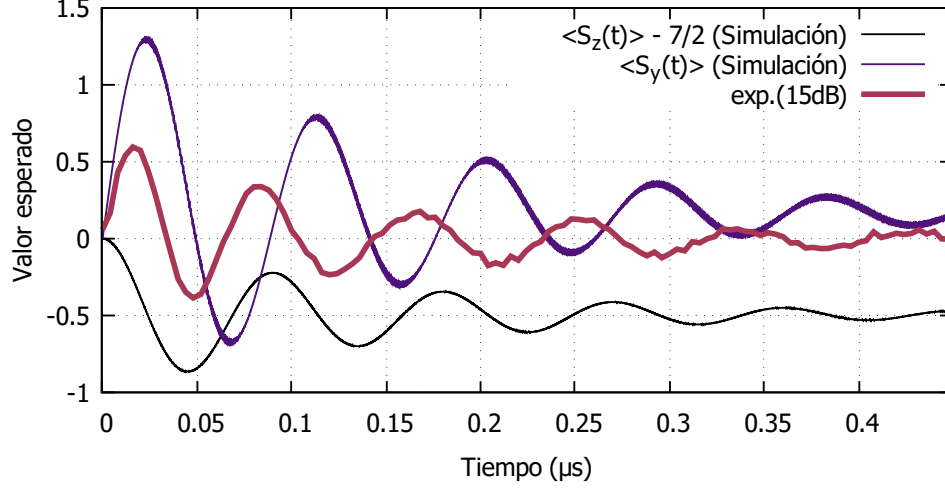


Figura 3.3: Valor esperado de S_y y S_z obtenidos usando el modelo dado por las ecuaciones (3.9) y (3.10), comparándolo con los resultados obtenidos experimentalmente para S_y . Los datos experimentales han sido obtenidos de la Ref. [3], donde también pueden consultarse los resultados para el resto de transiciones.

los observables de espín con el tiempo. Así, en la Fig. 3.3 hemos mostrado estos valores esperados para S_y y S_z . Ahora bien, cabe destacar que los observables se calculan en un marco de referencia en rotación (*rotating frame*), dado que esta es la situación que se considera en el experimento: el sistema está rotando en torno al eje z , a la frecuencia característica de la cavidad ω_0 , acoplada a la primera transición del sistema. La transformación necesaria está dada por:

$$\hat{S}_y^r(t) = e^{i\omega_0 t \hat{S}_z} \hat{S}_y e^{-i\omega_0 t \hat{S}_z}. \quad (3.11)$$

Advertir que, bajo esta transformación, \hat{S}_z permanecerá inalterado.

En la Fig. 3.3 hemos puesto también resultados de una medida experimental. Vemos que hay una discrepancia entre los resultados experimentales y los valores obtenidos teóricamente. Esto se debe a que lo que realmente se mide no es exactamente lo que hemos calculado: los cálculos teóricos se corresponden con la evolución temporal de los observables bajo la actuación de la perturbación dada por la Eq. (3.9); en el caso experimental, se trata del valor de S_y como función del tiempo de actuación del primer pulso en un experimento de *spin echo*. Por desgracia no hemos podido modelizar exactamente este tipo de experimentos. Sin embargo, la superposición de ambos resultados experimentales y computacionales, si bien inconsistentes, sí que permiten asignar al menos cualitativamente la magnitud de los efectos de disipación.

Lo más relevante que podemos deducir de estos resultados, por lo tanto, es que el decaimiento obtenido es del mismo orden que el medido experimentalmente, utilizando para los cálculos teóricos $\hat{S}^+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$ como jump operator y $\Gamma = \sqrt{0.2}$ como el valor del parámetro de acoplo con el entorno. Recordemos que los tiempos de coherencia de las transiciones fundamentales son cercanos a los $0.5 \mu s$ por lo que, si queremos evitar el problema de la decoherencia, tendremos que utilizar pulsos que actúen en tiempos menores. En concreto, siempre que sea posible, intentaremos trabajar

con tiempos de propagación de, al menos, uno o dos ordenes de magnitud menor, de forma que nos movamos en el rango de unos pocos nanosegundos.

4. Metodología

Una vez conocido el sistema y el modelo matemático usado para describirlo, vamos a ver en qué consisten los cálculos que nos permitirán obtener los pulsos óptimos: aquellos que permiten inducir una determinada transición, o bien que generan una determinada evolución temporal o puerta cuántica. Este planteamiento encaja con el tipo de problemas estudiado por la teoría de control óptimo cuántico (QOCT), y es por ello que dedicamos esta sección a exponer las bases de la QOCT que hemos necesitado para el desarrollo de este trabajo.

4.1. Introducción a QOCT

Partimos del Hamiltoniano \hat{H}_0 de un sistema de N niveles. En nuestro caso \hat{H}_0 será el hamiltoniano de $N = 8$ niveles, descrito en la ecuación (3.1). Los cálculos de computación cuántica se harán sobre los niveles de energía de este hamiltoniano, así que trabajaremos en la base de autoestados de \hat{H}_0 , de forma que su representación matricial sea diagonal. Al Hamiltonian \hat{H}_0 le añadimos una perturbación dependiente del tiempo, $f(\{u_i\}, t)\hat{V}$, donde \hat{V} está definido por la Eq. (3.10), de forma que la ecuación de Schrödinger que rige la evolución temporal es:

$$i\frac{d}{dt}|c(t)\rangle = [\hat{H}_0 + f(\{u_i\}, t)\hat{V}]|c(t)\rangle \quad (4.1a)$$

$$|c(0)\rangle = |c_0\rangle. \quad (4.1b)$$

Los parámetros $\{u_i\}$ controlan la forma de la perturbación, y se denominan parámetros de control (para simplificar la notación, a partir de ahora escribiremos $u = \{u_i\}$). \hat{V} es el operador de acoplo que conecta distintos niveles del sistema. En general, las componentes predominantes de \hat{V} son aquellas que conectan niveles contiguos, siendo el resto de acoplos muy pequeños, o nulos. La forma analítica de $f(u, t)$ puede ser completamente arbitraria aunque, obviamente, habrá elecciones más adecuadas que otras. Más adelante se explicitará la utilizada en este trabajo.

La ecuación de Schrödinger implica una transformación lineal $|c(0)\rangle \rightarrow |c(t)\rangle$, que puede expresarse también definiendo el operador evolución:

$$|c(t)\rangle = \hat{U}(t, t')|c(t')\rangle. \quad (4.2)$$

Para simplificar la notación podemos tomar el tiempo inicial de la propagación como $t = 0$, de forma que $\hat{U}(t, 0) = \hat{U}(t)$ y siendo $\hat{U}(0) = \mathbb{I}$. La ecuación que determina la evolución del propio operador evolución es:

$$i\frac{d}{dt}\hat{U}(t) = [\hat{H}_0 + f(u, t)\hat{V}]\hat{U}(t) \quad (4.3a)$$

$$\hat{U}(0) = \mathbb{I}. \quad (4.3b)$$

Hay no obstante una manera alternativa de escribir estas ecuaciones: la representación de interacción [frente a la representación de Schrödinger, que es la usada en las Eqs. (4.1) y (4.3)]. En la representación de interacción se atribuye dependencia temporal tanto a las funciones de onda como a los operadores, definiendo las transformaciones:

$$\hat{\tilde{O}}(t) = e^{it\hat{H}_0} \hat{O} e^{-it\hat{H}_0} \quad (4.4a)$$

$$|\tilde{c}(t)\rangle = e^{it\hat{H}_0} |c(t)\rangle. \quad (4.4b)$$

Podemos definir también un operador evolución en la representación de interacción:

$$|\tilde{c}(t)\rangle = \hat{\tilde{U}}(t, t') |\tilde{c}(t')\rangle. \quad (4.5)$$

Las Eqs. (4.1) y (4.3) se transforman en:

$$i \frac{d}{dt} |\tilde{c}(t)\rangle = f(u, t) \hat{\tilde{V}}(t) |\tilde{c}(t)\rangle \quad (4.6a)$$

$$|\tilde{c}(0)\rangle = |\tilde{c}_0\rangle \quad (4.6b)$$

y

$$i \frac{d}{dt} \hat{\tilde{U}}(t) = f(u, t) \hat{\tilde{V}}(t) \hat{\tilde{U}}(t) \quad (4.7a)$$

$$\hat{\tilde{U}}(0) = \mathbb{I}. \quad (4.7b)$$

Numéricamente, con lo que realmente trabajaremos será con las coordenadas de $|c(t)\rangle$, que denominaremos $\mathbf{c}(t)$, y las representaciones matriciales de \hat{H}_0 , \hat{V} y $\hat{U}(t)$, que escribiremos como \mathbf{H}_0 , \mathbf{V} y $\mathbf{U}(t)$, y no con los estados y operadores en abstracto. Hemos utilizado siempre la base de autoestados de \hat{H}_0 .

Independientemente de si propagamos la función de onda o el operador evolución, son los parámetros de control los que dictan la evolución del sistema, por lo que podemos escribir tanto la matriz que representa el operador evolución, como las coordenadas de la función de onda, como función de estos parámetros: $\mathbf{c}(t) = \mathbf{c}[u](t)$ y $\mathbf{U}(t) = \mathbf{U}[u](t)$. Así, nuestro objetivo será buscar el valor de los parámetros de control tal que o bien la función de onda o bien el operador evolución, para un tiempo característico, T , tenga un comportamiento *óptimo*. Por ejemplo, podríamos querer que la función de onda al final del proceso sea una superposición de estados concreta, o que el operador evolución generado sea equivalente a la representación matricial de una puerta lógica. Por lo general, este tiempo característico T nos interesará que sea lo más pequeño posible, para que el proceso no se vea afectado por la decoherencia cuántica.

La búsqueda del valor óptimo de los parámetros de control se llevará a cabo mediante la teoría de control óptimo^[19]. Esta es la aplicación al mundo cuántico de la teoría de control óptimo más general, aplicable, en principio, a cualquier tipo de sistema y proceso^[20]. Antes de continuar debemos

distinguir entre dos problemas diferentes: (1) la optimización del comportamiento del sistema, es decir, el control de la función de onda dado un estado inicial particular; y (2) la optimización del operador evolución completo, sea cual sea el estado inicial. Las expresiones resultantes son ligeramente diferentes en función del objetivo deseado. Veamos cada uno de los casos.

■ Función de onda

En primer lugar, es necesario codificar cuál es el objetivo que queremos que cumpla el sistema, definiendo una función del mismo cuya maximización implique el cumplimiento de ese objetivo. Así, por ejemplo, podemos pretender la maximización de un determinado observable al final de la propagación:

$$J_1(\mathbf{c}) = \mathbf{c}^\dagger(T) \mathbf{O} \mathbf{c}(T), \quad (4.8)$$

donde \mathbf{O} y $\mathbf{c}(T)$ son las representaciones del observable y de la función de onda en la base escogida. Es posible que sea conveniente añadir una función opcional que penaliza determinadas regiones del espacio de parámetros, $J_2(u)$, de forma que tome valores bajos para pulsos que no sean experimentalmente convenientes o posibles. Por ejemplo, se pueden evitar amplitudes muy grandes definiendo:

$$J_2(u) = -\alpha \int_0^T f^2(u, t) dt, \quad (4.9)$$

para un cierto $\alpha > 0$.

Dado que la evolución del sistema está determinada por los parámetros u , el problema finalmente se reduce a la maximización de una función:

$$G(u) = J_1(\mathbf{c}[u]) + J_2(u) \quad (4.10)$$

En los casos que veremos más adelante, el objetivo será la población de un estado final objetivo, de forma que \mathbf{O} es la representación matricial de la matriz densidad asociada a ese estado. De esta forma, J_1 toma su valor máximo, 1, cuando el estado final del sistema y el estado objetivo son equivalentes (solo difieren en una fase constante global).

Lo único que falta es un algoritmo de optimización que, como mínimo, necesitará un procedimiento para calcular $G(u)$ y, en algunos casos, una forma de calcular el gradiente de $G(u)$ en función de los parámetros de control pues su uso permite acelerar la eficiencia de la optimización. La QOCT nos proporciona la siguiente expresión^{[19],[21]} para el gradiente:

$$\frac{\partial G(u)}{\partial u_m} = 2\text{Im} \left[\int_0^T dt \frac{\partial f(u, t)}{\partial u_m} \mathbf{d}[u](t) \mathbf{V} \mathbf{c}[u](t) \right] + \frac{\partial J_2(u)}{\partial u_m}. \quad (4.11)$$

En esta ecuación se utiliza el denominado *coestado* $\mathbf{d}[u](t)$, que está definido mediante las siguientes ecuaciones del movimiento:

$$i \frac{d}{dt} \mathbf{d}[u](t) = \mathbf{H}^\dagger(u, t) \mathbf{d}[u](t) \quad (4.12a)$$

$$\mathbf{d}[u](T) = \frac{\partial J_1}{\partial \mathbf{c}^\dagger[u](T)}. \quad (4.12b)$$

$\mathbf{H}(u, t)$ es la representación matricial del hamiltoniano total. Estas ecuaciones tienen similitud con las mostradas en la expresión (4.1): se trata de una ecuación de Schrödinger en la que la condición inicial, en lugar de darse a tiempo 0 se da a tiempo T , el tiempo total de propagación. Dada la definición de J_1 [Eq. (4.8)], esta condición *final* está dada por:

$$\mathbf{d}[u](T) = \mathbf{Oc}[u](T). \quad (4.13)$$

Esta expresión depende de las coordenadas del estado final en el tiempo T .

Dadas estas ecuaciones, para poder calcular el gradiente, tendrán que realizarse dos propagaciones; la primera para obtener como varían las coordenadas del estado del sistema a lo largo del tiempo, y su valor en T , y una segunda propagación *hacia atrás* para obtener las del coestado. Hecho esto, es posible computar el gradiente y, mediante un algoritmo de optimización, modificar los parámetros de control de forma que nos acerquemos al valor óptimo.

■ Operador evolución

Si lo que se pretende es optimizar el comportamiento del operador evolución, el proceso es bastante similar al ya visto en el caso anterior. Partimos sin embargo de la definición de una función objetivo J_1 que dependerá de \mathbf{U} y no de \mathbf{c} . Por ejemplo, en nuestro caso pretendemos que $\mathbf{U}[u](T)$ sea equivalente a un cierto operador predefinido – la puerta cuántica buscada \mathbf{U}_{target} . Para conseguirlo, definimos esta función como el módulo al cuadrado del producto de Fröbenius entre $\mathbf{U}[u](T)$ y el operador objetivo, donde el producto de Fröbenius entre dos operadores A y B viene definido como:

$$A \cdot B = \frac{1}{d} \text{Tr}[A^\dagger B], \quad (4.14)$$

siendo d la dimensión de las correspondientes representaciones matriciales. De esta forma:

$$J_1(\mathbf{U}[u]) = |\mathbf{U}[u](T) \cdot \mathbf{U}_{target}|^2. \quad (4.15)$$

Para operadores unitarios, este producto no puede tomar valores mayores que uno, y valdrá uno cuando los operadores sean equivalentes, es decir, que se diferencien únicamente en un factor de fase global, e. g.: $\mathbf{U}[u](T) = e^{i\theta} \mathbf{U}_{target}$:

$$|\mathbf{U}[u](T) \cdot \mathbf{U}_{target}|^2 = |e^{-i\theta} \mathbf{U}_{target}^\dagger \cdot \mathbf{U}_{target}|^2 = \frac{|e^{-i\theta}|^2}{d^2} \text{Tr}[I]^2 = 1. \quad (4.16)$$

El problema se reduce nuevamente a la optimización de una función $G(u) = J_1(\mathbf{U}[u]) + J_2(u)$. En este caso, la expresión del gradiente está dada por:

$$\frac{\partial G(u)}{\partial u_m} = 2\text{Im} \left[\int_0^T dt \frac{\partial f(u, t)}{\partial u_m} \mathbf{B}[u](t) \cdot (\mathbf{V} \mathbf{U}[u](t)) \right] + \frac{\partial J_2(u)}{\partial u_m}. \quad (4.17)$$

Ahora, es $\mathbf{B}[u](t)$ a lo que llamaremos coestado, y está determinado por las siguientes ecuaciones

del movimiento:

$$i \frac{d}{dt} \mathbf{B}[u](t) = \mathbf{H}^\dagger(u, t) \mathbf{B}[u](t) \quad (4.18a)$$

$$\mathbf{B}[u](T) = \frac{\partial J_1}{\partial \mathbf{U}^\dagger[u](T)}. \quad (4.18b)$$

De nuevo, esta ecuación es similar a la Eq. (4.3), salvo que, igual que ocurría para la ecuación análoga de control óptimo para funciones de onda, la condición inicial es en realidad *final*, se da para $t = T$. Dada la definición de J_1 en (4.15), el estado final del coestado está dado por:

$$\mathbf{B}[u](T) = (\mathbf{U}_{target}(T) \cdot \mathbf{U}[u](T)) \mathbf{U}_{target}(T) \quad (4.19)$$

Este mismo proceso puede realizarse partiendo de las ecuaciones del movimiento en la representación de interacción en lugar de en la representación de Schrödinger. De hecho, se obtienen ecuaciones análogas, sustituyendo las expresiones matriciales de los operadores en la representación de Schrödinger por las correspondientes en la representación de interacción. La única excepción son las ecuaciones del movimiento de los coestados, pues ahora partimos de (4.6) y (4.7) en vez de (4.1) y (4.3). Así, las ecuaciones del coestado en la representación de interacción serán:

$$i \frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{d}}[u](t) = f(u, t) \tilde{\mathbf{V}}^\dagger(t) \tilde{\mathbf{d}}[u](t) \quad (4.20a)$$

$$\tilde{\mathbf{d}}[u](T) = \frac{\partial J_1}{\partial \tilde{\mathbf{c}}^\dagger[u](T)} \quad (4.20b)$$

para el caso de la función de onda y

$$i \frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{B}}[u](t) = f(u, t) \tilde{\mathbf{V}}^\dagger(t) \tilde{\mathbf{B}}[u](t) \quad (4.21a)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}[u](T) = \frac{\partial J_1}{\partial \tilde{\mathbf{U}}^\dagger[u](T)}. \quad (4.21b)$$

para el operador evolución. Para la realización de los cálculos numéricos puede utilizarse cualquiera de las dos representaciones, aunque normalmente la representación de interacción es más conveniente, ya que desaparecen las frecuencias naturales del sistema.

En cualquier caso, independientemente de si trabajamos con operadores o con funciones de onda hemos reducido el problema a la búsqueda del máximo de una función. Para el proceso de optimización hemos utilizado la librería Nlopt^[22], que incluye diversos algoritmos de optimización, tanto globales como locales. En general es preferible utilizar un algoritmo basado en el gradiente pues convergen más rápido en espacios de optimización de alta dimensión. Por ello, para la mayoría de los cálculos que se presentan a continuación se ha utilizado el algoritmo SLSQP (Sequential Least Squares Programming)^[23], un algoritmo de optimización local basado en el gradiente. Cabe destacar que se ha escogido este algoritmo en concreto por ser el único de todos los incluidos en NLopt que se basa en el cálculo del gradiente y que, al mismo tiempo, permite el uso de restricciones arbitrarias en la función a optimizar. Más adelante veremos por qué esto es importante. Este algoritmo se basa

en un método iterativo donde el problema pasa a tratarse como la optimización de una secuencia de subproblemas en los que se linealizan las restricciones. Cada uno de estos problemas se resuelve mediante el algoritmo BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)^[24], también local y basado en el gradiente.

4.2. Parametrización del pulso

Hasta aquí, hemos presentado la función que describe la forma temporal del pulso, $f(u, t)$, como una función genérica. Describimos aquí la forma concreta que hemos utilizado, y cómo está parametrizada en función de u . Utilizaremos pulsos basados en la transformada de Fourier, aunque adaptados para facilitar su realización experimental. Así, podemos escribir un pulso genérico que se aplica un tiempo T de la siguiente forma:

$$f(u, t) = \frac{1}{\sqrt{T}}u_0 + \frac{2}{\sqrt{T}} \sum_{k=1}^M u_{2k} \cos \omega_k t + \frac{2}{\sqrt{T}} \sum_{k=1}^M u_{2k+1} \sin \omega_k t. \quad (4.22)$$

Vemos que, efectivamente, no es otra cosa que la expansión en serie de Fourier, por lo que, por definición $\omega_k = 2\pi k/T$, siendo T el tiempo de propagación de la perturbación. Así, el número total de parámetros de control dependerá del valor máximo M que escojamos para k (*cutoff*). En general debemos elegir el valor del cutoff de manera que incluyamos todas las frecuencias relevantes, que estarán en el rango de las frecuencias características del sistema.

Esta parametrización también permite calcular de forma sencilla la derivada del pulso en función de los parámetros de control:

$$\frac{\partial f(u, t)}{\partial u_m} = f(e_m, t), \quad (4.23)$$

donde e_m es el conjunto de parámetros de control donde todos tienen valor nulo excepto el parámetro m -ésimo, que valdrá 1.

En la práctica, debemos asegurarnos de que el pulso empiece y termina en cero, $f(u, 0) = f(u, T) = 0$. La librería Nlopt, utilizada para los cálculos de optimización, permite incluir restricciones: así, podemos exigir que el valor del pulso en 0 y T sea nulo. Más concretamente, partiendo de la expresión (4.22), como sabemos que $\sin(\omega_n 0) = \sin(\omega_n T) = 0$ y $\cos(\omega_n 0) = \cos(\omega_n T) = 1$, se exige que:

$$u_0 + 2 \sum_{k=1}^M u_{2k} = 0. \quad (4.24)$$

Asimismo, forzando que $u_0 = 0$ imponemos el hecho de que la amplitud media, $\int_0^T f(u, t) dt$, también sea nula. En resumen, añadimos al proceso de optimización las siguientes restricciones:

$$g_1(u) = \sum_{k=1}^M u_{2k}, \quad (4.25a)$$

$$g_2(u) = u_0, \quad (4.25b)$$

de forma que el proceso de optimización intentará que tanto $g_1(u)$ como $g_2(u)$ sean nulas (con una

determinada tolerancia).

No podemos tampoco admitir soluciones que tengan una amplitud muy alta, no realizable experimentalmente. Es por ello que definimos finalmente una serie de restricciones en forma de desigualdad:

$$g^{[k]}(u) = u_k^2 - \kappa^2 \leq 0. \quad (4.26)$$

con $\kappa = u_{max}\sqrt{T}/2$. Esta restricción limita el espacio de soluciones a aquellas que no contengan parámetros de control que hayan tomado valores superiores a u_{max} , limitando de esta manera la amplitud del pulso final.

5. Transiciones entre estados vecinos

Aunque el objetivo del trabajo es el diseño de pulsos capaces de generar puertas cuánticas, en esta sección vamos a comenzar por estudiar un problema más sencillo: transiciones entre estados. Comenzaremos por realizar estas transiciones mediante pulsos simples monocromáticos, los llamados pulsos- π . Las puertas cuánticas tradicionalmente se generan concatenando este tipo de pulsos monocromáticos. La limitación de esta técnica es que para que estos pulsos realicen las transiciones buscadas con fidelidad alta, deben ser lentos. En esta sección mostraremos como la QOCT permite acelerar estas transiciones.

5.1. Transiciones con pulsos- π

Los pulsos- π son un tipo de perturbación que permite manipular la ocupación de los diferentes estados. Por ejemplo, si partimos de un sistema de dos niveles (equivalente a un 1 q-bit), y los niveles no están degenerados, el sistema puede pasar del estado fundamental al estado excitado, de mayor energía, si aplicamos una perturbación resonante, por ejemplo, fotones con esa frecuencia específica. Eventualmente, el sistema volverá al estado fundamental, donde podrá reabsorber otro fotón y volver al estado excitado, reiniciando el ciclo. Este ciclo, denominado ciclo de Rabi, muestra oscilaciones en la probabilidad de encontrar el estado en el nivel excitado.

Más concretamente, consideremos el Hamiltoniano de un sistema de dos niveles ($\{|0\rangle, |1\rangle\}$), tipo $H_0 = -\omega_0\sigma_Z/2$, en el que introducimos una perturbación oscilante $\mu_0 \cos(\omega t + \psi)\sigma_X$ siendo

$$\sigma_Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \sigma_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Es posible demostrar que, bajo cierta aproximación que comentaremos más adelante, la probabilidad de encontrar el sistema en el estado excitado, $|1\rangle$, (suponiendo que inicialmente parte del estado fundamental, $|0\rangle$), viene dada como:

$$P_{0 \rightarrow 1}(t) = \left(\frac{\mu_0}{\mu}\right) \sin^2\left(\frac{\mu t}{2}\right) \quad \text{siendo } \mu = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \mu_0^2}. \quad (5.2)$$

Esta expresión se denomina fórmula de Rabi^[25] y a μ se le denomina, por tanto, frecuencia de Rabi. Así, vemos como, efectivamente, aparece una oscilación en la probabilidad de encontrar el sistema

en el nivel excitado.

La transición perfecta con probabilidad 1 solo puede ocurrir si $\mu = \mu_0$ que, a su vez, solo se cumple si $\omega = \omega_0$. Esto se denomina condición de resonancia e implica que la frecuencia de la perturbación coincide con la frecuencia característica del sistema (diferencia de energía entre los dos niveles). De esta forma, periódicamente, se logrará invertir la ocupación inicial. La primera vez que ocurre esta inversión es en $t = t_\pi = \frac{\pi}{\mu_0}$ (de ahí el nombre de pulso π). Así, si detenemos la aplicación del pulso en t_π diremos que la perturbación resultante es un pulso- π que habrá invertido la población inicial (equivale a una rotación de π en la esfera de Bloch). De hecho, esta es una forma sencilla de generar la puerta σ_X mencionada en la introducción, pues la representación matricial en base de autoestados de H_0 del operador evolución en $t = t_\pi$, es equivalente a la matriz σ_X .

No obstante, para llegar a este resultado debe asumirse la llamada *rotating wave approximation*^[25] (o RWA), que solo es válida cuando el campo que estamos aplicando está cerca de la resonancia y la amplitud μ_0 es baja. Este hecho implica que para que las transiciones realmente sean completas se necesiten largos tiempos de propagación. Esto resulta inconveniente, pues interesa realizar estas transiciones en los tiempos más pequeños posibles pues, de otra forma, nos arriesgamos a acercarnos demasiado al tiempo de coherencia. Así, debemos encontrar un equilibrio entre la amplitud (tiempo de aplicación) del pulso y la fidelidad de la transición: si intentamos una transición rápida mediante una amplitud grande, la *fidelidad* de la transición (ocupación del estado objetivo), será menor.

Hemos asumido sistemas de dos niveles, pero el concepto de pulso- π puede extenderse a sistemas más grandes, con más niveles, siempre que cada transición esté caracterizada por una frecuencia distinta. Esta propiedad la cumple el sistema de ocho niveles que hemos descrito en el apartado 3.2, cuyo Hamiltoniano aparece en la expresión (3.1). Así, si introducimos un pulso- π en el sistema, podemos definir un nuevo hamiltoniano perturbado dependiente del tiempo como:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + f_\pi(t)\hat{V}, \quad (5.3)$$

siendo \hat{H}_0 el hamiltoniano (3.1). En los cálculos descritos a continuación, el campo estático \vec{H} se aplica en el eje x , con un valor de 150 mT, y \hat{V} es el operador que conecta distintos niveles del sistema, dado por la expresión (3.10). Este campo oscilante \vec{H}_m se aplicará en el eje y , por ello en ocasiones nos referiremos a él como H_y . En la base de autoestados de \hat{H}_0 , \hat{V} conecta principalmente niveles vecinos, siendo el resto de términos de menor orden. Por último, $f_\pi(t)$ se trata de un pulso- π :

$$f_\pi(t) = \begin{cases} A \sin(\omega_{i,i+1}t) & \text{si } t_0 \leq t \leq t_f = t_0 + \frac{\pi}{A|\mu_{i,i+1}|} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (5.4)$$

donde $\omega_{i,i+1}$ es la frecuencia de transición entre el nivel i y el $i + 1$, A la amplitud del pulso, $\mu_{i,i+1}$ la amplitud de interacción debido a \hat{V} (que no tiene porque coincidir para distintas transiciones) y t_0 el tiempo inicial de aplicación que, por lo general, se tomará como $t_0 = 0$.

Hemos aplicado sistemáticamente este tipo de pulsos para todas las transiciones del sistema, con el objeto de estudiar como varía la fidelidad de las distintas transiciones en función de la amplitud (y en consecuencia, del tiempo total de aplicación) del pulso- π . Los resultados obtenidos se muestran

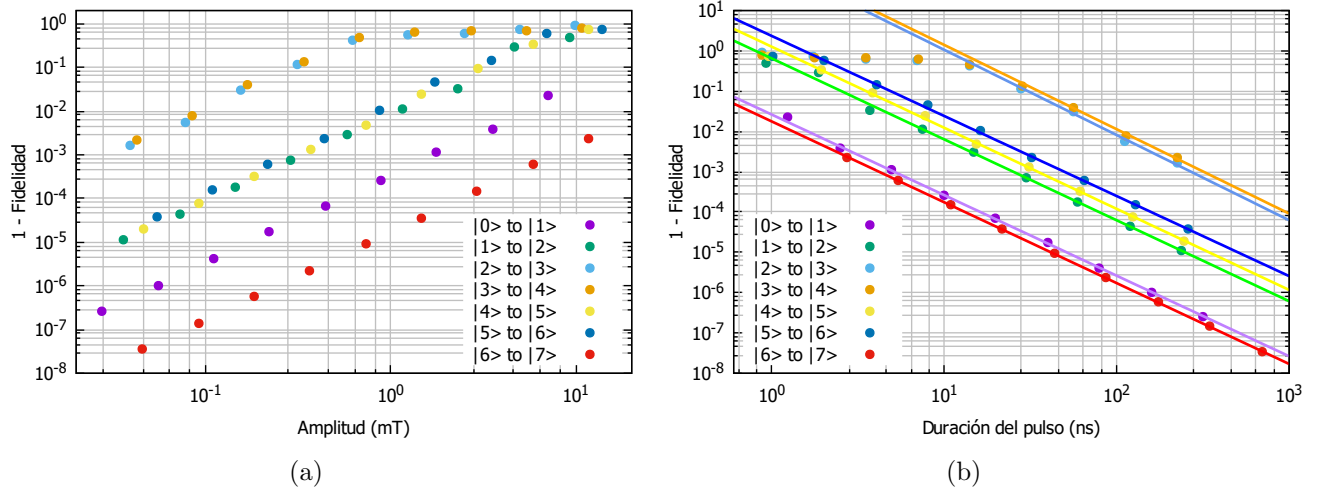


Figura 5.1: Representación gráfica de la fidelidad en función de distintos parámetros del pulso- π , en concreto: **(a)** 1 – Fidelidad frente a la amplitud y **(b)** 1 – Fidelidad frente al tiempo de propagación. En esta última se incluye un ajuste lineal en escala logarítmica para bajas amplitudes (tiempos de propagación largos).

en la Fig. 5.1, donde la fidelidad se ha calculado como la probabilidad de medir el sistema en el estado $|i + 1\rangle$: $|\langle i + 1 | \psi(T) \rangle|^2$, partiendo inicialmente de $|i\rangle$. La Fig. 5.1a muestra esta fidelidad en función de la amplitud del pulso- π y la Fig. 5.1b en función del tiempo de propagación. Como es de esperar, la fidelidad aumenta según se reduce la amplitud, o equivalentemente se aumenta el tiempo de propagación, ya que son las condiciones necesarias para que la RWA sea buena.

Viendo estas gráficas, se aprecia una dependencia lineal para amplitudes pequeñas. Por ello, en la Fig. 5.1b hemos marcado también un ajuste lineal, encontrando una pendiente de valor 2: se puede concluir que el error de la RWA es de orden dos en el valor de la amplitud del pulso. Estos resultados muestran cómo, para obtener una determinada fidelidad en las transiciones utilizando un pulso- π , es necesario un tiempo de propagación correspondiente. Cabe preguntarse entonces si es posible realizar transiciones más rápidas utilizando QOCT.

5.2. Transiciones calculadas con QOCT

Partamos de las soluciones obtenidas con pulsos- π . Usando el ajuste lineal anteriormente comentado, podemos calcular el tiempo de propagación necesario para que un pulso- π provoque la transición buscada con una fidelidad de, al menos, 0.999. Estos valores se muestran en la tabla 5.1. En esta sección nos preguntamos si es posible, mediante QOCT, obtener un pulso que logre la misma fidelidad (o mayor), en un tiempo por ejemplo 10 veces menor.

Para ello utilizaremos la parametrización del pulso incluida en la expresión (4.22), usando las restricciones no lineales ya comentadas para limitar la amplitud inicial y final, y las ecuaciones de *optimal control* para funciones de onda, expresiones (4.8), (4.11) y (4.12), fijando los tiempos totales de propagación a 1/10 de los tiempos necesarios para obtener fidelidad de 0.999 con los pulso- π . Los resultados se resumen en la tabla 5.2. En esa tabla se muestran las fidelidades obtenidas con pulsos π , y con pulsos obtenidos mediante QOCT. Vemos que para todos los casos es posible, mediante

Transición	Frecuencia [MHz]	Tiempo [ns]	Amplitud [mT]	$(1 - \text{Fidelidad}) \cdot 10^{-3}$
$ 0\rangle \rightarrow 1\rangle$	4093	6.48	1.349	1.17
$ 1\rangle \rightarrow 2\rangle$	5394	31.35	0.273	0.63
$ 2\rangle \rightarrow 3\rangle$	5723	346.73	0.025	0.85
$ 3\rangle \rightarrow 4\rangle$	5693	413.23	0.023	3.12
$ 4\rangle \rightarrow 5\rangle$	5185	43.13	0.263	1.63
$ 5\rangle \rightarrow 6\rangle$	4963	63.44	0.221	5.29
$ 6\rangle \rightarrow 7\rangle$	1848	5.45	5.813	1.58

Tabla 5.1: Fidelidad de las transiciones a nivel superior del sistema GdW_{30} usando pulsos- π

Transición	Tiempo [ns]	1 – Fidelidad (pulso- π)	1 – Fidelidad (QOCT)
$ 0\rangle \rightarrow 1\rangle$	0.65	0.120	$5.50 \cdot 10^{-5}$
$ 1\rangle \rightarrow 2\rangle$	3.13	0.059	$5.30 \cdot 10^{-6}$
$ 2\rangle \rightarrow 3\rangle$	34.67	0.051	$1.26 \cdot 10^{-3}$
$ 3\rangle \rightarrow 4\rangle$	41.32	0.046	$1.16 \cdot 10^{-2}$
$ 4\rangle \rightarrow 5\rangle$	4.31	0.055	$1.20 \cdot 10^{-4}$
$ 5\rangle \rightarrow 6\rangle$	6.34	0.061	$4.37 \cdot 10^{-4}$
$ 6\rangle \rightarrow 7\rangle$	0.54	0.067	$1.95 \cdot 10^{-4}$

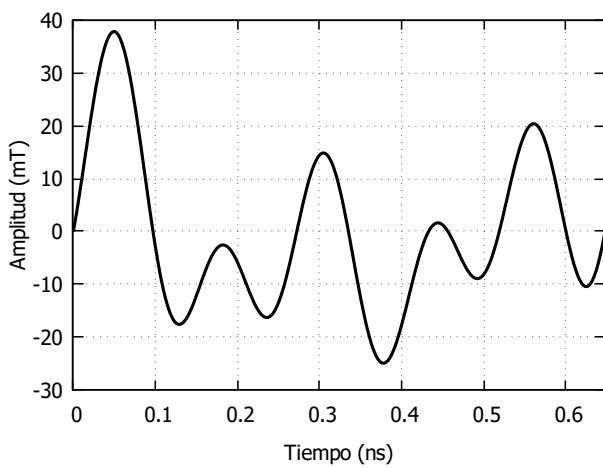
Tabla 5.2: Fidelidad de las transiciones a nivel superior del sistema GdW_{30} usando pulsos- π con tiempos de aplicación 10 veces menor que el necesario para obtener una fidelidad de, al menos, 0.999 y usando pulsos generados con QOCT para el mismo tiempo.

QOCT, obtener pulsos que den lugar a transiciones con una fidelidad bastante mayor que la obtenida con pulsos- π de igual tiempo total de aplicación, tal y como queríamos comprobar.

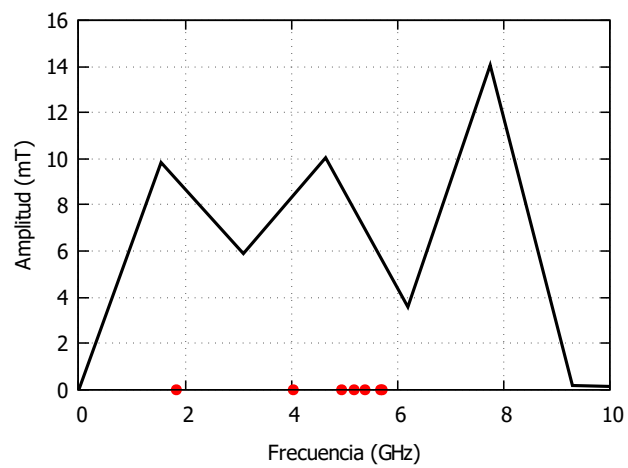
Los pulsos específicos obtenidos, así como su transformada de Fourier, pueden verse en la Fig. 5.2. De la misma forma, la Fig. 7.1, incluida en el Anexo, muestra la ocupación de cada estado en función del tiempo para cada una de estas transiciones utilizando los pulsos correspondientes. Cabe destacar que, dado que los tiempos de propagación son bastante menores, la amplitud de los pulsos obtenidos es mayor: cuanto más corto es el pulso, necesariamente la amplitud debe ser mayor para que pueda ejecutar la transición requerida. Es por ello que es necesario fijar, como hemos hecho, restricciones a las amplitudes en el algoritmo de optimización.

6. Realización de puertas lógicas cuánticas con pulsos no monocromáticos

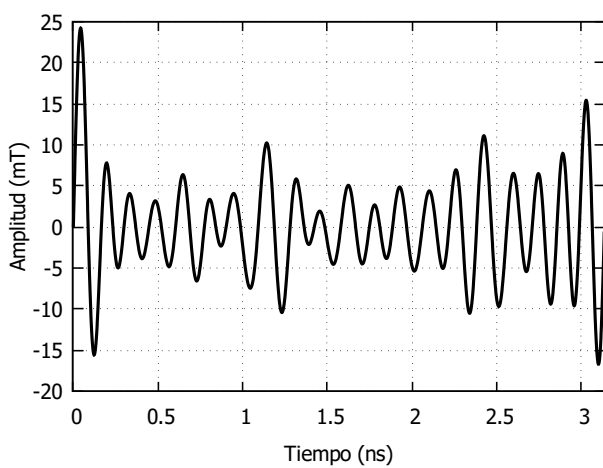
Para terminar, describimos los resultados que constituyen el objetivo último de este trabajo: el uso de QOCT para el diseño de puertas lógicas cuánticas. Para ello, pasaremos a utilizar las ecuaciones de *optimal control* correspondientes a operadores, expresiones (4.15), (4.17) y (4.18), pero manteniendo la misma parametrización del pulso usada en el estudio de las transiciones mostrado en la sección anterior. A continuación mostramos los resultados obtenidos para distintos tipos de puertas de tres q-bits.



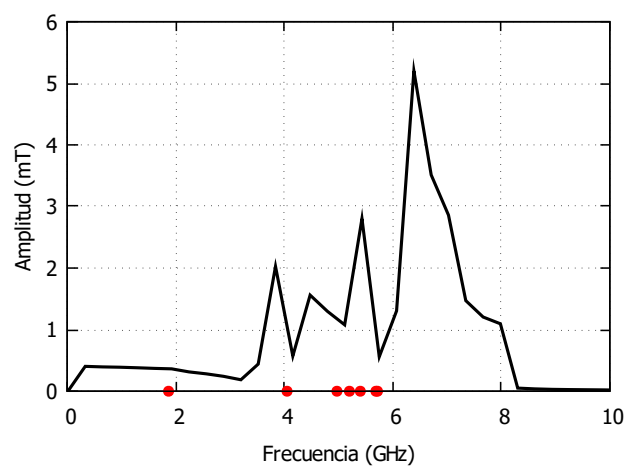
(a)



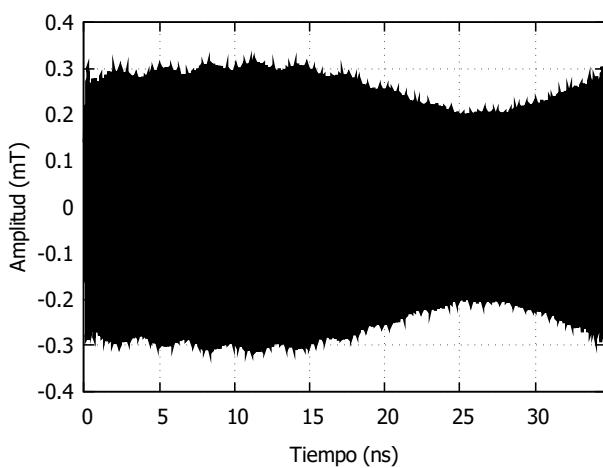
(b)



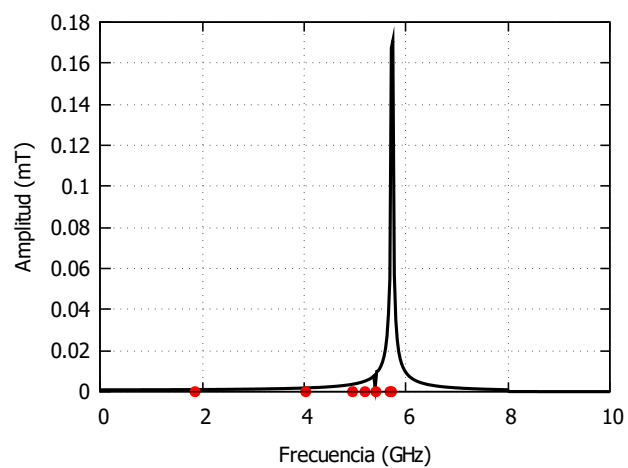
(c)



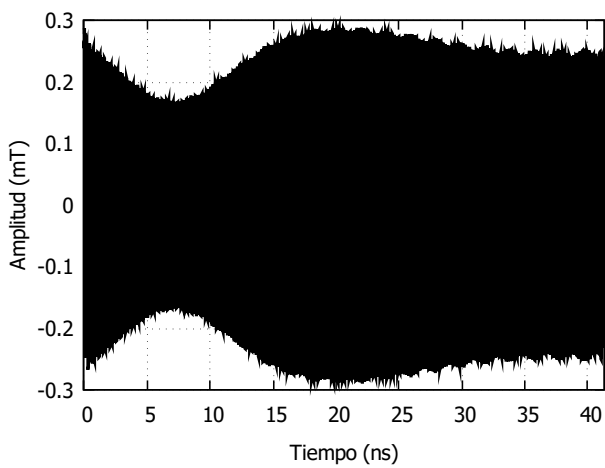
(d)



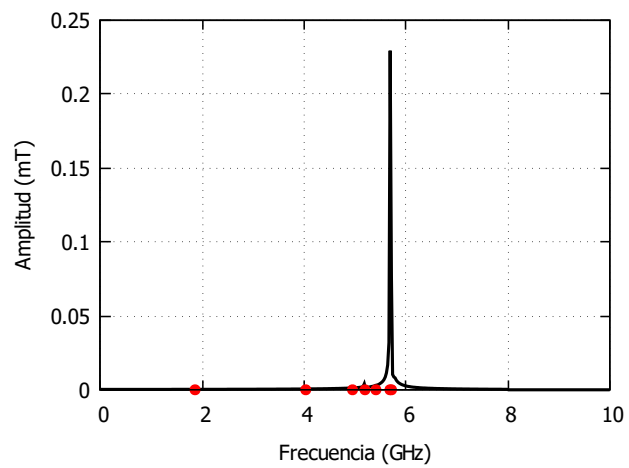
(e)



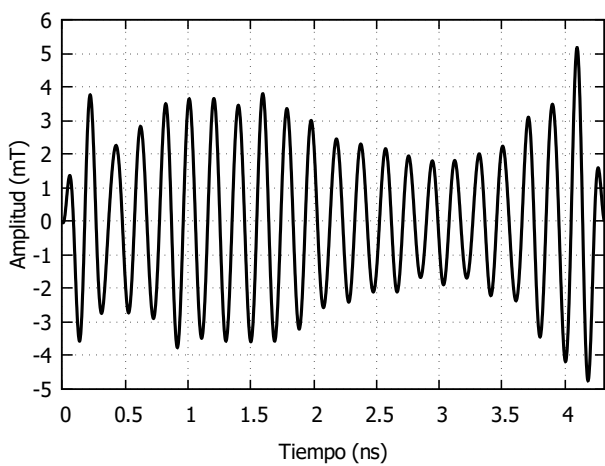
(f)



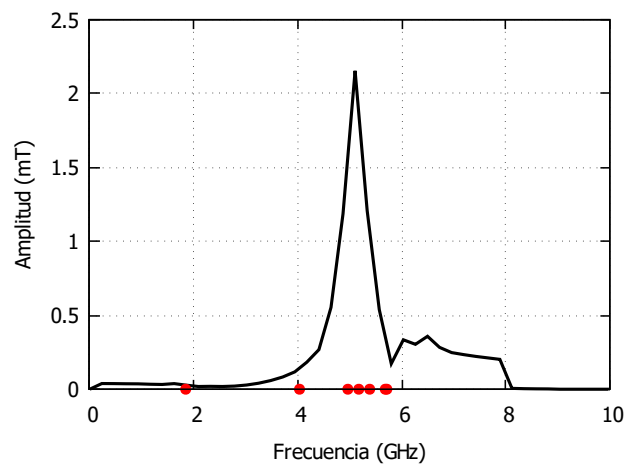
(g)



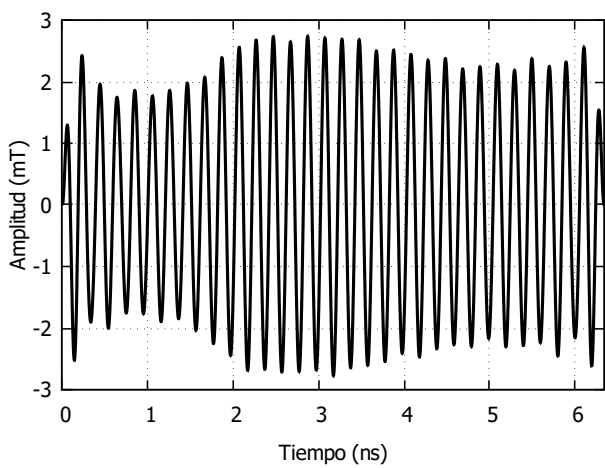
(h)



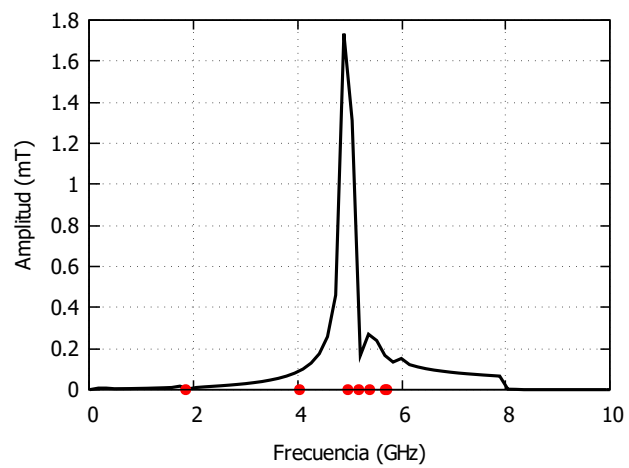
(i)



(j)



(k)



(l)

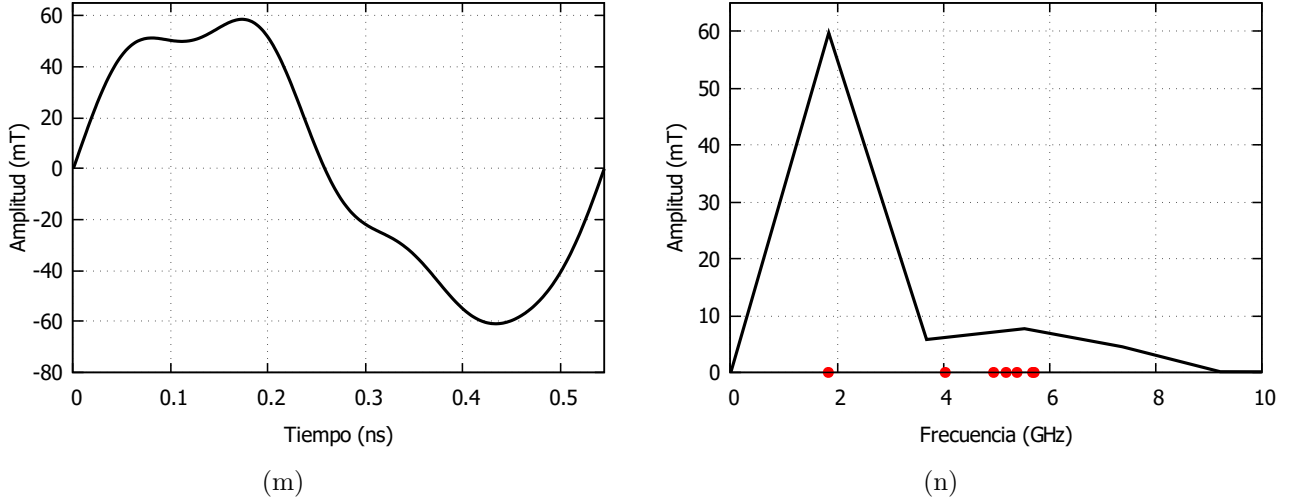


Figura 5.2: Pulsos óptimos obtenidos para cada una de las transiciones fundamentales del sistema GdW₃₀ así como la correspondiente transformada de Fourier. Los tiempos de transición empleados para cada transición son los mostrados en la [tabla 5.2](#). Así, (a) y (b) se corresponden con la primera transición, (c) y (d) a la segunda, etcétera.

6.1. Puerta de Toffoli

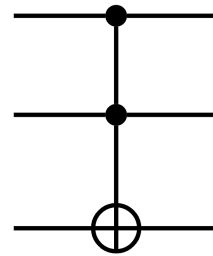
La primera puerta que generaremos es la puerta de Toffoli, También llamada puerta CCNOT o CCX. Esta puerta, como mencionamos en la introducción, es importante en sistemas de tres q-bits, pues permite, mediante combinaciones de la misma, construir cualquier operación clásica en un ordenador cuántico. La representación matricial asociada al operador de esta puerta en la base computacional, así como el símbolo usado en circuitos lógicos se muestran en la [Fig. 6.1](#).

A efectos prácticos, esta puerta aplica la puerta σ_X al último q-bit si el primero y el segundo están en el estado $|1\rangle$. En caso contrario no cambia el estado de ningún q-bit.

El tiempo de propagación T se ha elegido como el tiempo que requiere un pulso- π en este sistema para producir la última transición ($|6\rangle \rightarrow |7\rangle$), pues es, al fin y al cabo, la transición que manipula

$$U_{\text{Toffoli}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(a)



(b)

Figura 6.1: (a) Representación matricial de la puerta de Toffoli en la base computacional. (b) Símbolo utilizado para la representación de la Puerta de Toffoli en circuitos lógicos.

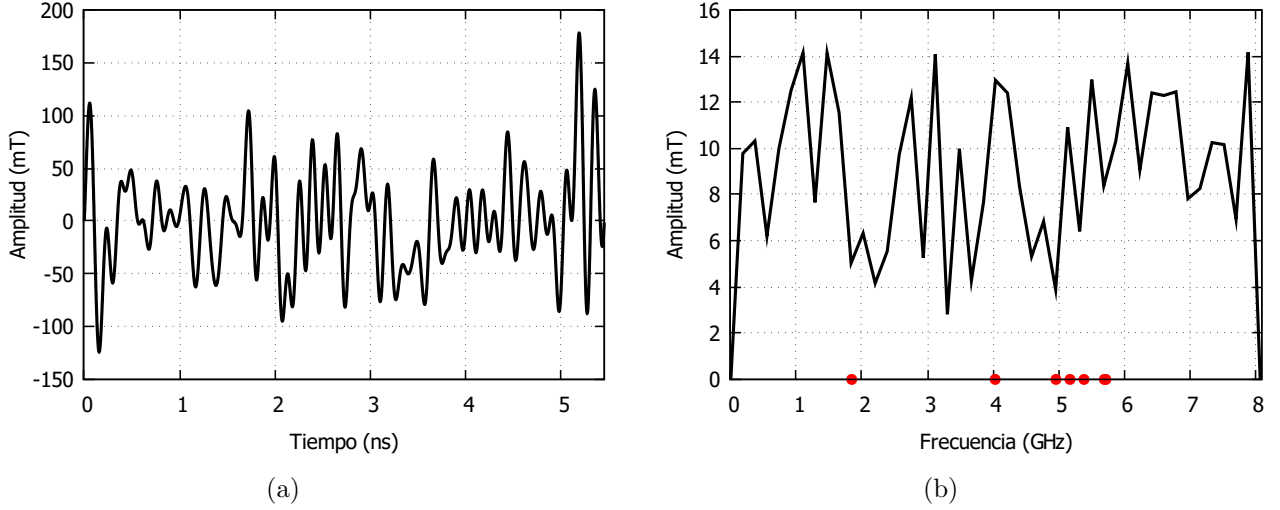


Figura 6.2: Pulso en el dominio temporal **(a)** y frecuencial **(b)** necesario para generar una puerta de Toffoli en el sistema GdW_{30} . En rojo aparecen las frecuencias características del sistema. El valor de $1 - \text{Fidelidad}$ obtenida para la puerta, usando este pulso, es de $2.39 \cdot 10^{-4}$.

esta puerta. Eligiendo el cutoff de frecuencias en 8 GHz, tenemos que encontrar el valor óptimo de 87 parámetros de control. A diferencia de lo que ocurría en la optimización de transiciones, donde podíamos tomar los parámetros de control iniciales como aquellos que más se aproximaran al pulso- π , en este caso vamos completamente a ciegas por lo que los parámetros de control iniciales se han generado aleatoriamente. El programa ha requerido de 226 iteraciones del proceso de optimización, llevadas a cabo a lo largo de unas 8 horas en un ordenador doméstico.

El pulso obtenido necesario para que el operador evolución en T sea equivalente a la puerta de Toffoli, así como su transformada de Fourier se muestran en la [Fig. 6.2](#).

6.2. Puerta de Deutsch

La puerta de Deutsch (o D_θ) es un tipo de puerta de tres q-bits cuya representación es la siguiente:

$$D_\theta = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_6 & 0 \\ 0 & D_0(\theta) \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad D_0(\theta) = \begin{pmatrix} i \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & i \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

siendo \mathbb{I}_6 la matriz identidad de dimensión 6. De esta forma, la puerta de Deutsch actúa de forma similar a la puerta de Toffoli, en el sentido de que es una puerta *controlada*: es decir, solo aplica la transformación $D_0(\theta)$ al tercer q-bit si los dos primeros están en el estado $|1\rangle$. De hecho, para $\theta = \pi/2$, la puerta de Deutsch coincide con la puerta de Toffoli. Hemos decidido trabajar con las puertas de Deutsch, pues cumplen la propiedad de que son un conjunto de puertas universales para sistemas de tres q-bits: una vez se tiene un método para generar puertas de Deutsch, se puede construir cualquier circuito.

Igual que en el caso de la puerta de Toffoli, hemos tomado T como el tiempo usado en la última transición del sistema por pulsos- π . Tampoco se ha cambiado el valor del cutoff en frecuencias. Ahora bien, el valor inicial de los parámetros de control se ha tomado como los obtenidos para

generar la puerta de Toffoli, pues estos dos tipos de puertas actúan de forma similar. Los tiempos de cálculo requeridos para obtener los pulsos óptimos varían en función del valor de θ , siendo de 12 horas y media (171 iteraciones) en el mejor de los casos y de 18 horas (300 iteraciones) en el peor. Realizadas también en un ordenador doméstico.

En la figura Fig. 6.3 se incluyen los pulsos obtenidos, así como sus transformadas de Fourier, para obtener la puerta de Deutsch con distintos valores de θ . También se incluye el valor de $1 - \text{Fidelidad}$ obtenido para cada una de ellas. Vemos que las amplitudes de los pulsos son bastante altas; en la sección anterior también vimos cómo los pulsos obtenidos mediante QOCT tenían amplitudes significativamente mayores que los pulsos- π que usábamos de referencia. Sería posible obtener pulsos de menor amplitud aumentando el tiempo de propagación.

7. Conclusiones

A lo largo de este documento hemos conseguido mostrar que la teoría de control óptimo nos permite obtener la forma de la perturbación que debemos introducir en un sistema de 8 niveles (GdW_{30}) tal que el operador evolución resultante, pasado un tiempo T , sea equivalente al operador que define una puerta lógica. De esta forma, hemos obtenido, con valores de fidelidad considerablemente altos, las perturbaciones necesarias para generar la puerta de Toffoli y distintas puertas de Deutsch. La duración de esta perturbación es de 5.45 ns, considerablemente menor que el tiempo de coherencia de las transiciones características del sistema ($\sim 0.5 \mu\text{s}$). Esto permite ignorar los grados de libertad del sistema que interactúan con el exterior, considerando simplemente la evolución temporal dada por la ecuación de Schrödinger. Concluimos, por lo tanto, que este sistema cumple con las condiciones necesarias para poder realizar cálculos de computación cuántica: en primer lugar, cada transición tiene una frecuencia característica única; en segundo lugar, los tiempos de decoherencia son lo suficientemente largos como para permitir que las puertas se ejecuten sin que se deteriore el sistema por los efectos del entorno.

En una primera fase del trabajo, hemos abordado el problema de generar transiciones entre estados. Hemos visto que los pulsos obtenidos mediante optimal control permiten obtener estas transiciones con una fidelidad mayor que la obtenida mediante pulsos- π y en tiempos significativamente menores. A cambio, la amplitud de los pulsos tiende a ser mayor que la que necesitaríamos con los métodos habituales.

En la segunda parte del trabajo, hemos pasado al estudio de las puertas cuánticas. Se han logrado obtener puertas de 3 q-bits: puertas de Toffoli y de Deutsch. Hemos elegido esta familia de puertas porque constituyen un conjunto universal (cualquier circuito de computación cuántica puede construirse concatenando puertas de esta familia). Los resultados obtenidos, de nuevo, son satisfactorios, pues se han obtenido fidelidades cercanas a la unidad en tiempos relativamente cortos. Sin embargo, igual que ocurría con las transiciones de estado, la amplitud de los pulsos necesarios para replicar las puertas buscadas son elevadas, y podría llegar a suponer un problema experimental. En ese caso, debe aumentarse el tiempo T de aplicación del pulso, garantizándose que existen soluciones con buena fidelidad para tiempos superiores, pero teniendo cuidado de no acercarnos demasiado a los tiempos de coherencia de las transiciones.

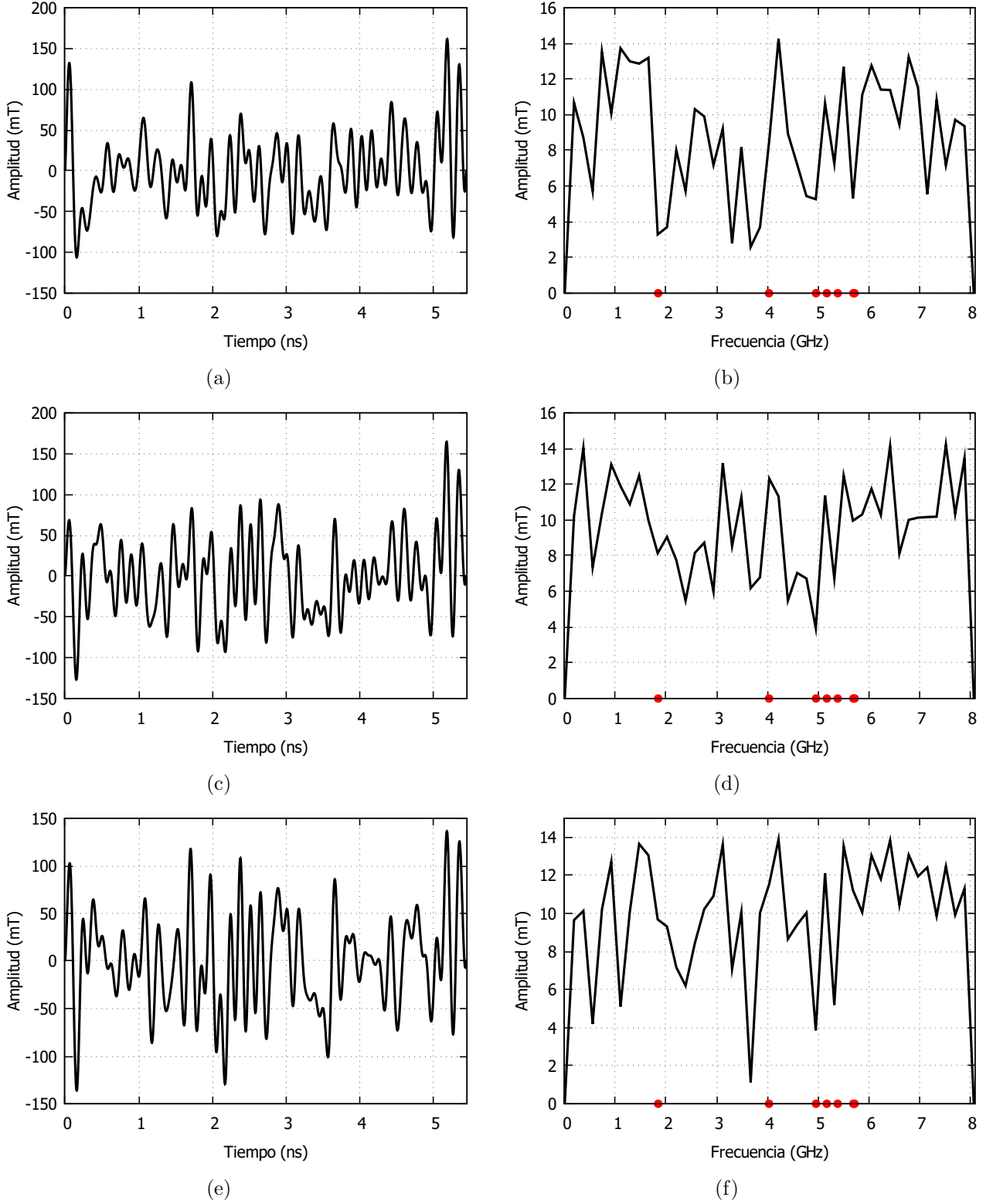


Figura 6.3: Pulsos necesarios para generar puertas de Deutsch con distintos valores de θ . En concreto, (a) y (b) muestran el pulso en el dominio temporal y frecuencial para una puerta de Deutsch con $\theta = \pi/4$, siendo el valor de $1 - \text{Fidelidad}$ de $2.27 \cdot 10^{-4}$. (c) y (d) muestran esto mismo para $\theta = 3\pi/4$ con una fidelidad de $3.12 \cdot 10^{-4}$. Por último, tenemos (e) y (f) para $\theta = \pi$ y una fidelidad de $5.14 \cdot 10^{-4}$.

El código desarrollado y utilizado para la realización de los cálculos puede encontrarse en [*https://gitlab.com/acbarrigon/qoct-gates.git*](https://gitlab.com/acbarrigon/qoct-gates.git).

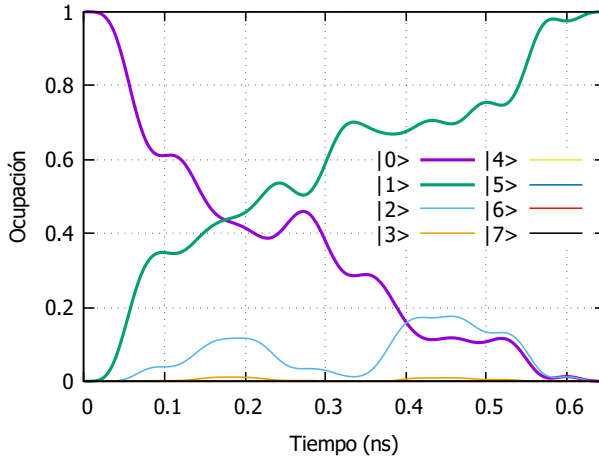
Bibliografía

- [1] Michael A.Nielsen e Isaac L.Chuang. *Quantum computation and quantum information*. 2000.
- [2] David Collins, KW Kim y WC Holton. “Deutsch-Jozsa algorithm as a test of quantum computation”. En: *Physical Review A* 58.3 (1998), R1633.
- [3] MD Jenkins y col. “Coherent manipulation of three-qubit states in a molecular single-ion magnet”. En: *Physical Review B* 95.6 (2017), pág. 064423.
- [4] MD Jenkins y col. “A scalable architecture for quantum computation with molecular nanomagnets”. En: *Dalton Transactions* 45.42 (2016), págs. 16682-16693.
- [5] Jonathan R Friedman y col. “Macroscopic measurement of resonant magnetization tunneling in high-spin molecules”. En: *Physical review letters* 76.20 (1996), pág. 3830.
- [6] Sylvain Bertaina y col. “Quantum oscillations in a molecular magnet”. En: *Nature* 453.7192 (2008), págs. 203-206.
- [7] Maxie M Roessler y Enrico Salvadori. “Principles and applications of EPR spectroscopy in the chemical sciences”. En: *Chemical Society Reviews* 47.8 (2018), págs. 2534-2553.
- [8] Erwin L Hahn. “Spin echoes”. En: *Physical review* 80.4 (1950), pág. 580.
- [9] MJ Martínez-Pérez y col. “Gd-based single-ion magnets with tunable magnetic anisotropy: molecular design of spin qubits”. En: *Physical review letters* 108.24 (2012), pág. 247213.
- [10] José J Baldoví y col. “Coherent manipulation of spin qubits based on polyoxometalates: the case of the single ion magnet [GdW 30 P 5 O 110] 14-”. En: *Chemical Communications* 49.79 (2013), págs. 8922-8924.
- [11] J.R. Johansson, P.D. Nation y F. Nori. “QuTiP: An open-source Python framework for the dynamics of open quantum systems”. En: *Computer Physics Communications* 183.8 (ago. de 2012), págs. 1760-1772. DOI: 10.1016/j.cpc.2012.02.021. URL: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.02.021>.
- [12] J.R. Johansson, P.D. Nation y F. Nori. “QuTiP 2: A Python framework for the dynamics of open quantum systems”. En: *Computer Physics Communications* 184.4 (abr. de 2013), págs. 1234-1240. DOI: 10.1016/j.cpc.2012.11.019. URL: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.11.019>.
- [13] Daniel Manzano. “A short introduction to the Lindblad master equation”. En: *AIP Advances* 10.2 (2020), pág. 025106.
- [14] John Von Neumann. “Wahrscheinlichkeitstheoretischer aufbau der quantenmechanik”. En: *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse* 1927 (1927), págs. 245-272.

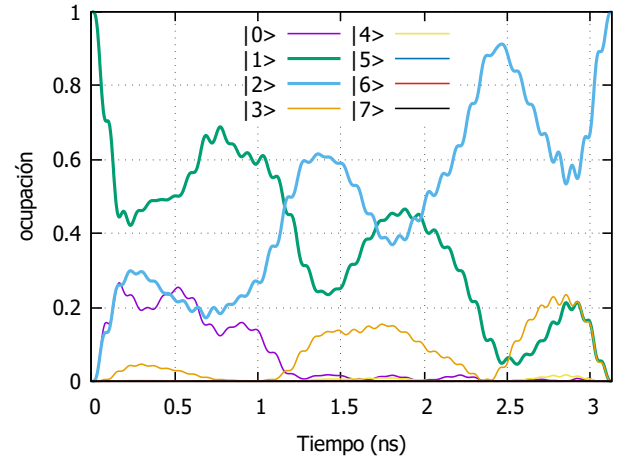
- [15] Vittorio Gorini, Andrzej Kossakowski y Ennackal Chandy George Sudarshan. “Completely positive dynamical semigroups of N-level systems”. En: *Journal of Mathematical Physics* 17.5 (1976), págs. 821-825.
- [16] Goran Lindblad. “On the generators of quantum dynamical semigroups”. En: *Communications in Mathematical Physics* 48.2 (1976), págs. 119-130.
- [17] D Manzano y PI Hurtado. “Harnessing symmetry to control quantum transport”. En: *Advances in Physics* 67.1 (2018), págs. 1-67.
- [18] Mark M Wilde. *Quantum information theory*. Cambridge University Press, 2013.
- [19] Constantin Brif, Raj Chakrabarti y Herschel Rabitz. “Control of quantum phenomena: past present and future”. En: *New Journal of Physics* 12.7 (2010), pág. 075008.
- [20] Donald E. Kirk. *Optimal Control Theory. An Introduction*. New York: Dover Publications, Inc., 1998.
- [21] A. Castro. “Optimal Control Theory for Electronic Structure Methods”. En: *Handbook of Materials Modeling* (2018).
- [22] Jelmer Ypma, Hans W.Borchers y Dirk Eddelbuettel. “R interface to NLOpt”. En: *Journal of unreproducible Results* (2018).
- [23] Dieter Kraft. “A software package for sequential quadratic programming”. En: *Forschungsbericht- Deutsche Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft- und Raumfahrt* (1988).
- [24] J. Nocedal. “Updating quasi-Newton matrices with limited storage”. En: *Math. Comput.* 35, 773-782 (1980).
- [25] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë. *Quantum mechanics*. 1973.

Anexo: Ocupación de cada nivel en las transiciones fundamentales usando QOCT

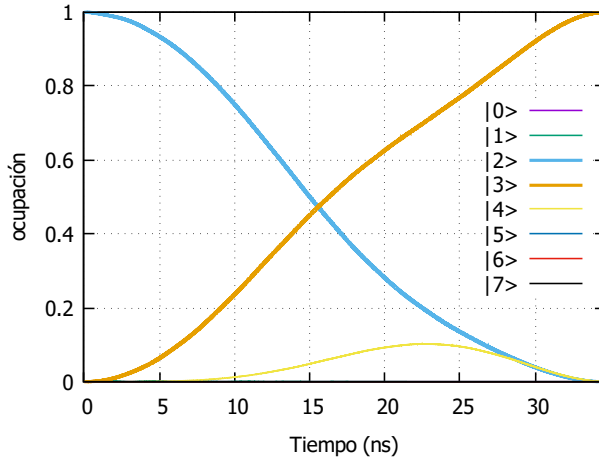
En las gráficas que se muestran a continuación aparece la variación de la ocupación de cada nivel en función del tiempo durante la aplicaciones de pulsos obtenidos mediante QOCT. En concreto, estos pulsos son los que aparecen en la Fig. 5.2. Cada uno de ellos induce la transición de un nivel determinado del sistema al nivel superior. Esto lo hace en tiempos diez veces menores a los que serían necesarios si utilizáramos pulsos- π pero de forma que no afecta a la fidelidad.



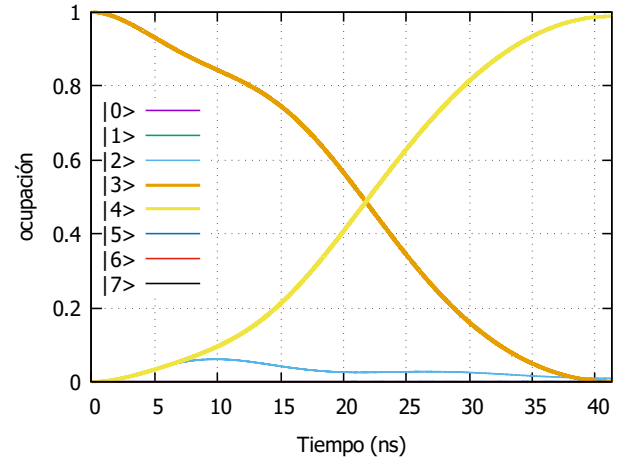
(a)



(b)



(c)



(d)

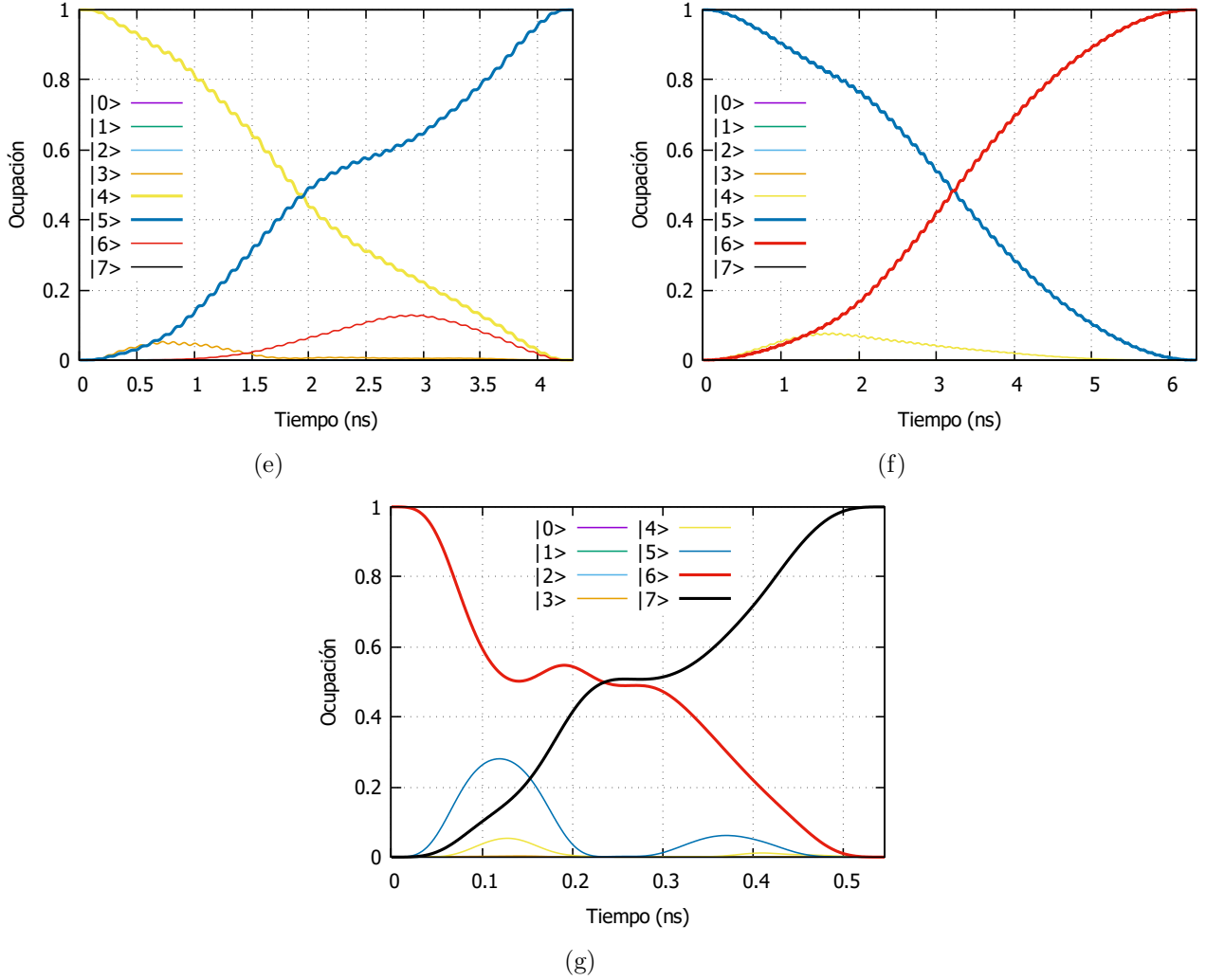


Figura 7.1: Variación en la ocupación de cada uno de los estados durante la aplicación de cada uno de los pulsos mostrados en la Fig. 5.2. Siendo (a) la variación de la ocupación en la transición del estado $|0\rangle$ al $|1\rangle$, (b) del $|1\rangle$ al $|2\rangle$, etcétera.