

Una Breve Introducción Pedagógica Sobre el Formalismo y Fundamentos de la Funcionalidad del Computador Cuántico en Estudiantes del 1er Semestre del Programa de Ing. Electrónica

Abstract: Entre las más importantes extensiones y aplicaciones de la teoría cuántica se encuentra la computación cuántica que contempla la aplicabilidad de sistemas cuánticos de dos niveles y de aquí se deriva un formalismo cuya relaciones y otras derivaciones tiene semejantes características a la de un computador clásico. Se presentan las estrategias y los métodos de cómo un primer estudio fenomenológico del computador cuántico en los primeros semestres en estudiantes de ingeniería electrónica va a poder abrir una línea de investigación proyectado para futuros tesis con implicaciones durante el tiempo que toma el programa de ingeniería. Aunque en este paper se enfoca el aspecto enteramente teórico, se presentan esfuerzos por conectar los principios elementales del computador clásico con el prospectivo computador cuántico.

1 Fundamentos de la Mecánica Cuántica

La Mecánica Cuántica (MC) [1] [2] fué inventada con el objeto de entender el comportamiento de la materia en la escala microscópica. Definitivamente, siendo las dimensiones del mundo microscópico del orden de 10^{-15} metros ó 10^{-15} segundos, se necesitó reemplazar la Mecánica Clásica por una teoría mas contundente en sus predicciones. Esto llevó a inventar un nuevo formalismo matemático y fundar nuevos postulados. Las relaciones y ecuaciones mas importantes de la MC son

$$\hat{H}|\Psi \rangle = E|\Psi \rangle, \quad (1)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\Psi(x,t) = -i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \quad (2)$$

$$\text{Prob} = |\Psi(x,t)|^2 \quad (3)$$

$$[\hat{X}, \hat{P}] = \hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = i\frac{\hbar}{2\pi}, \quad (4)$$

donde \hbar es la constante de Planck $\approx 10^{-34}$ J.s. Vamos a ahora a comentar muy puntualmente el significado de todas estas relaciones y de como estas se usan para el estudio de los fenómenos microscópicos. La ecuación (1) es conocida como la ecuación de Schrödinger y nos dice que el operador cuántico \hat{H} está actuando sobre el estado $|\Psi\rangle$ y trae como resultado la medición de la energía del sistema E . Por ejemplo, si queremos medir la energía de un cuerpo que se mueve uniformemente y tiene un momentum p , entonces $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle = \frac{p^2}{2m}|\Psi\rangle$ que es fácilmente entendible ya que es la única energía de un cuerpo en movimiento rectilíneo. La ecuación (2) es en realidad la misma ecuación de Schrödinger (ES) pero escrita en una manera diferente. Se puede apreciar que en vez de $|\Psi\rangle$ aparece ahora $\Psi(x,t)$ y que en vez de \hat{H} y E aparecen derivadas. Lo que ha ocurrido es que en (1) la ES está en su forma fundamental o matemáticamente hablando uno puede decir que (1) es el estilo abstracto. Para fines prácticos uno necesita trabajar con derivadas o integrales. Es por ello que (1) puede ser expresado en una representación, llámese representación una coordenada generalizada. Así, el operador \hat{H} ó también conocido como el Hamiltoniano del sistema tiene el mismo significado como se conoce en física clásica, osea $H = T + V$ donde "T" y "V" son la energía cinética y potencial respectivamente. Convenientemente se elige la representación de coordenadas "x" y como consecuencia uno tiene que el Hamiltoniano se convierte en derivadas que van a operar a $\Psi(x,t)$ que es ahora función del espacio y tiempo. Lo mismo con E . Es decir que se reemplaza por la derivada con respecto al tiempo. Naturalmente hay reglas que reemplazan los operadores por las derivadas en una manera mucho mas rigurosa y que se explican muy detalladamente en los textos. La ecuación (2) nos dice también que la ES es en realidad una ecuación diferencial de segundo grado en "x" y de primer grado en el tiempo. También (2) nos dice que la función de onda $\Psi(x,t)$ depende del tiempo [1][2] y del espacio, y que es un cantidad compleja y no real. Ahora vamos a comentar la ecuación (3). Aquello nos dice que la probabilidad de hallar a un estado en "x" y en "t" es la función de onda elevado al cuadrado. Cuando se habla de probabilidad, se habla de un número entre 0 y 1. Este hecho es en realidad lo mas impresionante y excitante de la MC. En efecto, (3) roza la esquina más delicada de la MC y afirma que en MC no existe la determinación como ocurre en la Mecánica Clásica. Finalmente, el efecto de aceptar un mundo probabilístico trae como consecuencia aceptar la relación descubierta por el físico austriaco Werner

Heisemberg. La relación (4) nos dice que los operadores posición y momentum no conmutan, y que resulta en $i\frac{h}{2\pi}$. Físicamente (4) significa también que el orden de la medida es importante, es decir si uno mide la posición y luego el momentum, aquello no es igual que medir primero el momentum y luego la posición. De (4) se deriva también el principio de incertidumbre de Heisemberg.

2 La Preparación del Estado Cuántico

Después del éxito de la MC, las primeras aplicaciones se hicieron en el régimen de las bajas energías es decir en sistemas atómicos. El esquema de la aplicabilidad de la MC tiene como piedra angular el uso de la ecuación de Schrödinger (1). Esto implica la definición completa del estado del sistema $|\Psi\rangle$. La preparación del estado es lo mas importante en MC. Si la preparación del estado es óptima, entonces la aplicabilidad de las ecuaciones de la MC es también óptima. Por preparación del estado se entiende el modelamiento de un sistema cuántico. Por ejemplo, si se sabe que hay un sistema atómico que se manifiesta bajo ciertas circunstancias aleatoriamente, entonces se puede modelar por medio de estados gaussianos como

$$\Psi(x, t = 0) = \exp \left[\frac{-x^2}{4\pi} \right], \quad (5)$$

y de aquí es posible extraer información de las energías del sistema a partir de la aplicabilidad de la ES (2). Naturalmente estamos usando la representación de coordenadas [2]. Precisamente, la información que se extrae es en realidad una consecuencia de la acción de la medición. El acto de medir, trae también consigo inevitablemente el cambio del estado. El estado también cambia por efecto de la evolución temporal de la función de onda. De esta forma, para un tiempo "t" y después de la medición se tiene

$$\Psi(x, t) = \exp \left(\frac{iEt}{h} \right) \exp \left[\frac{x^2}{4\pi\rho} \right], \quad (6)$$

donde ρ es un parámetro que dicta el cambio cuantitativamente y cualitativamente. Así los cambios en el nivel microscópico ocurren espontáneamente y por efecto de la medición. Por espontáneo se entiende como la dinámica de las interacciones. La presencia del exponencial complejo pone de manifiesto la existencia de un operador intrínseco que se le denomina el operador de evolución temporal y tiene la forma $\hat{U}|\Psi\rangle = |\Psi(t)\rangle$. Así uno puede deducir que $\hat{U} = \exp(-it\hat{H}/h)$ y que depende del Hamiltoniano. Por ejemplo vamos a suponer que el sistema descrito por (5) emite N fotones hasta un tiempo $t = T$ y luego absorbe M fotones. La energía del sistema es

en realidad la diferencia de la energía de los fotones emitidos y absorbidos. Naturalmente aquello depende del Hamiltoniano del sistema. En general, los sistemas están denotados por la constitución de sus estados. En otras palabras se puede escribir que

$$|\Psi\rangle = \sum_j^N \mathcal{A}_j |j\rangle \quad (7)$$

donde el estado del sistema se puede expresar como una suma de N elementos a los que se denomina vectores de base. Otro ejemplo son aquellos estados donde su especificación está dado por la configuración del spin, es decir en sistemas donde la información esta concentrada en la orientación de su spin en la cual únicamente puede existir solamente dos posibilidades $+1/2$ y $-1/2$. Lógicamente uno espera tener la configuración del estado general en la siguiente forma

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \quad (8)$$

Lo que hemos hecho es en realidad la preparación del estado más general. Llevándolo al sentido común lo que estamos haciendo es en realidad considerar todas las posibilidades. Vamos ahora a hallar la transición del estado $|\Psi\rangle$ a uno de los accesibles $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Cabe indicar que los estados accesibles están relacionados por relaciones de ortogonalidad, y se rigen por $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. Si elegimos que el estado final sea por ejemplo $|+\rangle$ entonces se tiene

$$\langle +|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \langle ++\rangle = \frac{1}{2} = 0.5 \quad (9)$$

que significa también que hemos colapsado el estado $|-\rangle$. Como habíamos mencionado anteriormente, este ejemplo ha sido enfocado usando el estilo abstracto y que en muchos casos trae como consecuencia la completa manejabilidad de la dinámica cuántica.

2.1 El Spin

En contraste a la Mecánica Clásica, la MC predice la existencia de una propiedad adicional del electrón aparte de su masa y de su carga. Es denominado el spin y fúe descubierto por los alemanes Stern y Gerlach en 1930. Los valores que puede tener el spin del electrón son únicamente $+1/2$ y $-1/2$. El signo es muy importante y nos dice la "orientación" del spin que puede estar apuntando hacia arriba o hacia abajo. Ahora surge una pregunta: cómo podemos saber si electrón tiene su spin $+1/2$ ó $-1/2$ si no podemos observarlo directamente? Para contestar esta pregunta, primero debemos saber que el electrón tiene una carga negativa entonces, por conceptos del electromagnetismo, sabemos que cualquier entidad con carga puede ser

acelerada por campos externos ya sea el campo magnético o eléctrico. Entonces observando la dirección por donde podría viajar el electrón debido a la presencia de los campos es fácil concluir cual es su spin, dentro de un rango de probabilidades. Específicamente, es el campo magnético que interacciona con el spin del electrón a través del Hamiltoniano de interacción,

$$\mathcal{H}_{\text{INT}} = \vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}} \quad (10)$$

donde $\vec{\mathbf{S}}$ es el vector de spin y está acoplado al campo magnético $\vec{\mathbf{B}}$. Claramente, el acoplamiento es una multiplicación escalar de vectores. Pero debemos enfatizar que cuando se habla de vectores es por un arreglo matemático. La ecuación de Schrödinger correspondiente a esta interacción está dado por

$$\mathcal{H}_{\text{INT}}|+ \rangle = +B_0|+ \rangle \quad (11)$$

donde el vector $|+ \rangle$ denota el estado donde el sistema ha sido medido. Obviamente, el sistema también puede ser medido en el estado $| - \rangle$ y va a diferir de la expresión anterior en el signo. Experimentalmente, existe la tecnología para controlar y monitorear el cambio de spin en el electrón, átomos e iones. Así, es posible extender estos argumentos en los fundamentos del computador cuántico [3] [4].

3 Fundamentos del Computador Cuántico

El subsecuente paso es ahora definir las principales variables que son necesarias para la funcionalidad del computador cuántico. Antes debemos aclarar que la MC provee el formalismo, las matemáticas y la maquinaria conceptual. Para que exista un computador cuántico [5] es necesario tener a la mano **aquellos fenómenos en donde se reflejen la efectividad de la teoría del computador cuántico** [6]. Por otro lado, es también muy importante constituir una secuencia sistemática que demuestre la **necesidad de un computador cuántico**. En otras palabras, el computador cuántico debe ser extremadamente efectivo a un computador clásico tanto en cálculo, resolución y performance. Antes de entrar a la funcionalidad observemos algunas propiedades del computador clásico.

3.1 El Computador Clásico

Un computador clásico (CC) es aquel cuya funcionalidad está basado en un input, procesos intermedios y el output. Un ejemplo es el programa C++ donde se escribe los algoritmos de cómputo en un file cuya extensión es `cpp`. Luego, lo que se hace es compilar el file y verificar el output. Si no existe errores durante la compilación,

entonces se crea el ejecutable cuya ejecución nos da el output deseado. Naturalmente hay un tiempo de compilado y otro para la ejecución. A veces el tiempo de ejecución es proporcional al número de "loops", y es un detalle de extrema importancia para el usuario. A todo este conjunto de operaciones se le denomina "software". Lo que va a constituir los elementos físicos internos del computador es lo que se denomina el "hardware" y está constituido por la electrónica que a su vez está organizado por circuitos y chips. Con respecto al software, el file va a ser procesado en el lenguaje del computador o comúnmente conocido como bits [7]. Los valores de los bits pueden ser 0 o 1. El string es una sucesión de bits y encierra una información como por ejemplo 10101100. Por otro lado, las unidades básicas del procesamiento son llamados gates. Los gates tienen por objeto la de llevar a cabo la dinámica de los bits. Por ejemplo, el cambio de un bit de 0 a 1 y viceversa es dado por el gate **NOT**, la fusión de dos bits en un bit es dado por el gates **AND** y **OR**. Con estas definiciones es posible construir circuitos en donde la información, consistiendo en los bits, pueden ser procesados eficientemente por medio de un algoritmo.

3.2 Elementos Básicos de Computador Cuántico

Para que sea describible un computador cuántico, es necesario fundar sus elementos a partir de los conceptos clásicos. Habíamos mencionado anteriormente que el spin es una propiedad intrínseca de especies microscópicas como son el electrón, los átomos o iones. Por ellos definimos análogamente al bit, el **qubit** la unidad básica del software cuántico, y que va ser representado por $|0\rangle$ y $|1\rangle$. El string cuántico o multi-qubit va a ser simplemente la superposición lineal

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (12)$$

y en realidad los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ son las posibles configuraciones del spin $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Por el otro lado, los gates cuánticos van a ser descritos por operadores unitarios, que matemáticamente son representados por matrices cuyo determinante es igual a 1. De esta forma, se puede escribir como la acción universal de un gate cuántico sobre un multi-qubit en la siguiente manera,

$$\hat{U}|\Psi\rangle = |\Psi'\rangle \quad (13)$$

donde el multi-qubit $|\Psi'\rangle$ ha sido transformado por efecto del operador unitario bajo las reglas de la Mecánica Cuántica. La fusión de qubits demanda el entendimiento de entrelazar estados individuales, por ejemplo la acción de dos gates **AND** tienen su imagen en el software cuántico como

$$\mathbf{AND}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \gamma|01\rangle \quad (14)$$

$$\mathbf{AND}(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) = \rho|10\rangle \quad (15)$$

y siguiendo la lógica es posible escribir la fusión de los nuevos qubits en un subsecuente paso como es descrito abajo

$$\mathbf{AND}(\gamma|01 \rangle + \rho|10 \rangle) = g(\gamma, \rho)|0110 \rangle \quad (16)$$

donde $g(\gamma, \rho)$ es función de las constantes que acompañan los qubits originales y transformados. De esta forma, el nuevo multi-qubit $|0110 \rangle$ viene a ser un string cuántico y puede llevar información dependiendo del algoritmo. Vamos a suponer que las sucesivas aplicaciones de gates pueden ser descritos por el operador Θ , entonces

$$\Theta|\Psi \rangle = g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_j)|10110100\dots10100 \rangle \quad (17)$$

que también puede expresado en una manera mucho mas formal introduciendo el concepto de producto tensorial de vectores de estado,

$$\Theta|\Psi \rangle = g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_j)|1 \rangle \otimes |0 \rangle \otimes |1 \rangle \otimes |1 \rangle \otimes |0 \rangle \otimes |1 \rangle \otimes \dots \quad (18)$$

donde el producto $|1 \rangle \otimes |0 \rangle = |10 \rangle$ es posible si existe una transformación lineal entre $|1 \rangle$ y $|0 \rangle$. De esta forma existe una operación que es dictada por el producto tensorial de estados cuánticos que nos permite ubicar la operación análoga a la de un computador clásico, en cuanto al procesamiento o compilación del input. El hardware, que es aquello que va a corresponder la parte interna del computador, en el caso cuántico va a denotar a los iones [8] y su correspondiente cambio de spin. Entonces, una sucesiva aplicación de operaciones que envuelven el cambio de spin va a denotar lo siguiente

$$\Theta|\Psi \rangle = g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_j)|+ \rangle \otimes |- \rangle \otimes |+ \rangle \otimes |+ \rangle \otimes |- \rangle \otimes |+ \rangle \otimes \dots \quad (19)$$

lo que implica que el efecto en su conjunto a poder ser observado solamente si existe un elemento que comunique el efecto del cambio de spin con el observador externo. Precisamente, el Hamiltoniano (Ec. 10) que describe el acoplamiento del spin y el campo magnético va a ser el responsable de proveer la información del cambio de energía de sistema. Técnicamente hablando, el spin de una cadena de iones representa intuitivamente el concepto de un string. Para controlar la cadena del spin, los iones tendrían que estar aislados y vía la interacción con fotones o algunos pulsos externos [9], entonces es posible conocer las transiciones cuánticas bajo la influencia del campo magnético externo. El hecho mas importante en el uso de iones aislados o atrapados, es que el cambio de spin toma un tiempo del orden 10^{-20} segundos. De esta forma, para una cadena de 10^{10} iones atrapados, la capacidad de almacenamiento de información es extremadamente eficiente, es decir el número de cambios $\hat{U}|+ \rangle \rightarrow |- \rangle$ es del orden de 10^{20} por segundo y por ion. Entonces, para una cadena de 10^{10} iones se tiene 10^{30} operaciones. Para vislumbrar las bondades del computador cuántico, entonces es necesario monitorear todas las operaciones

accesibles por segundo. De esta forma, hay argumentos sólidos que confirman la factibilidad de la construcción de un computador cuántico. Cabe resaltar, que la completa manipulación de los qubits va a estar dado por las reglas de la Mecánica Cuántica, sobre todo en las reglas de transformación de combinaciones lineales de los estados cuánticos.

4 Conclusión

En este breve report se ha dado de manera general algunos aspectos relacionados al prospectivo computador cuántico basdo enteramente en las reglas de la Mecánica Cuántica. Esto podría ser de apoyo para aquellos estudiantes que deseen cultivar su interés en el desarrollo científico de las nuevas ramas de la ingeniería de computación y electrónica como es revisado en [10].

REFERENCIAS

- [1] Quantum Mechanics, Vol. 1 1st Edition by Claude Cohen-Tannoudji (Author), Bernard Diu (Author), Frank Laloe, Wiley 1997.
- [2] Modern Quantum Mechanics (2nd Edition) 2nd Edition by J. J. Sakurai 2014.
- [3] Introduction to Quantum Computing; A guide to solving intractable problems simply Brad Hunting and David Mertz 2001.
- [4]M. A. Novotny, Determination of the Lowest-Energy States for the Model Distribution of Trained Restricted Boltzmann Machines Using a 1000 Qubit D-Wave 2X Quantum Computer, Neural Computation (Volume: 29, Issue: 7, July 2017).
- [5] N. Gershenfeld, Toward a table-top quantum computer, IBM Systems Journal (Volume: 39, Issue: 3.4, 2000).
- [6] Polina Bayvel, Quantum Logic Circuits and Optical Signal Generation for a Three-Qubit, Optically Controlled, Solid-State Quantum Computer, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics (Volume: 15, Issue: 6, Nov.-dec. 2009).
- [7] I.G. Karafyllidis, Quantum computer simulator based on the circuit model of quantum computation, IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Regular Papers (Volume: 52, Issue: 8, Aug. 2005).
- [8] F. Rossi, The excitonic quantum computer, IEEE Transactions on Nanotechnology (Volume: 3, Issue: 1, March 2004).
- [9] Yosuke Kanai, Quantum Dynamics Simulation of Electrons in Materials on High-Performance Computers, Computing in Science and Engineering (Volume: 16, Issue: 5, Sept.-Oct. 2014).

[10] B.C. Grau, How to teach basic quantum mechanics to computer scientists and electrical engineers, IEEE Transactions on Education (Volume: 47, Issue: 2, May 2004) .