



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

**Estudio de la dinámica colectiva de una red atómica excitada:
Cálculo del espectro de energías mediante computación cuántica**

Autor: Irene Valladares Duque

**Tutores: Juan Carlos García Escartín, Manuel Antonio Donaire del Yerro
Año 2023**

Índice

1. Motivación	2
2. Fenómenos de desexcitación espontánea colectiva	3
2.1. Tasa de decaimiento para un átomo	3
2.2. Tasa de decaimiento para un sistema multiatómico. Gas de Dicke	6
2.3. Red unidimensional infinita de Zoubi y Ritsch	9
2.4. Sistema N=3. Cálculo de la tasa de decaimiento del estado simétrico	12
2.5. Resultados: tasa de decaimiento para un sistema triatómico	20
3. Computación cuántica	21
3.1. Qubits y puertas cuánticas	21
3.2. Algoritmo variacional	22
3.3. Valor esperado de la energía	25
3.3.1. Conversión del hamiltoniano a qubits	25
3.3.2. Elección del ansatz	26
3.3.3. Elección del optimizador:	27
3.4. Valor esperado de la energía del estado fundamental para N=5	29
4. Conclusiones	31
A. Anexo: Definiciones y fórmulas	34
B. Anexo: Programa	39

Resumen

En este trabajo se estudian los fenómenos de desexcitación espontánea que ocurren en sistemas con un gran número de átomos excitados. Primero se explica este fenómeno a partir de los estudios realizados por Dicke, quien describió por primera vez ese fenómeno cuántico, donde se proporcionan una manera de clasificar y ordenar los estados del sistema según su tasa de desexcitación. Después, se estudia la aparición de fenómenos de desexcitación en redes atómicas lineales. Seguidamente, se calcula de forma analítica la tasa de desexcitación del estado simétrico en una red triatómica en dos configuraciones espaciales: átomos dispuestos en fila, y átomos dispuestos en los vértices de un triángulo equilátero. Como resultado de este cálculo, se demuestra que la tasa de decaimiento coincide con la predicha por Dicke solo en el caso de la disposición triangular. Por último, para complementar el estudio de los estados colectivos, se estima la energía del estado superradiante de una red pentatómica mediante un algoritmo variacional implementado en un ordenador cuántico. Solo se obtuvieron resultados precisos cuando se ejecutó en un simulador ideal, aunque se proponen mejoras en el tratamiento del ruido derivado de la ejecución en un ordenador real.

1. Motivación

Los ordenadores cuánticos emplean qubits para llevar a cabo cálculos y procesamiento de datos: por consiguiente, el diseño de la unidad más elemental del ordenador es clave para su correcto funcionamiento. Los qubits son sistemas físicos que pueden reducirse de manera efectiva a sistemas de dos niveles de energía: 0 y 1. Algunos ejemplos de sistemas empleados como qubits son el spin del electrón, tomando spin arriba y spin abajo como 0 y 1, respectivamente; y la polarización del fotón, asignando 0 y 1 a dos estados de polarización ortogonales.

Por norma general, se eligen sistemas físicos que tengan el tiempo de coherencia más largo, sean más estables, y puedan almacenarse en un espacio de menor tamaño. Las redes de átomos idénticos pueden presentar todas estas cualidades [11]. Estas redes se forman por el efecto de pulsos láser que confinan átomos en trampas de potencial, de modo que se ordenan de manera periódica como en una red cristalina. Cada átomo tiene un electrón que puede ocupar exclusivamente los dos orbitales más externos; es decir, cada átomo es un sistema de dos niveles. Por lo tanto, puede codificarse como un qubit. Estas cualidades las cumplen los átomos de Rydberg. Estos son átomos alcalinos muy excitados cuyo último electrón está muy alejado del núcleo, por lo que es más fácil de ionizar.

El tiempo de coherencia del qubit depende de cuánto pueda mantenerse cada átomo en esta configuración de dos niveles. Las desexcitaciones espontáneas colectivas de la red reducen el tiempo de coherencia del sistema global y por ello es preciso minimizar su efecto. Es preciso averiguar la función de onda y la energía de las configuraciones del sistema que provocan dichos fenómenos de-coherentes con el fin de evitar recrear estos estados en las redes de qubits. Por ello, en este trabajo se estudiarán la tasa de desexcitación, y la energía de estados colectivos radiantes en redes atómicas unidimensionales.

En la Sección 2, se estudia en profundidad la tasa de desexcitación espontánea en sistemas con gran número de átomos. Primero, en la subsección 2.1, se introducen los conceptos necesarios para explicar qué es y cómo se calcula la tasa de decaimiento espontáneo en un único átomo. Después, en la subsección 2.2, se explica cómo clasificar los estados colectivos, y calcular su tasa de desexcitación para sistemas con un número elevado de átomos basándose en los resultados del artículo [1] de R. H. Dicke. Seguidamente, en la sección 2.3 se analiza el modelo de red atómica propuesta en el artículo [6] de H. Zoubia y H. Ritsch. Por último, en la subsección 2.4, se propone un modelo triatómico realista y se calcula analíticamente la tasa de decaimiento para el estado simétrico. Se consideran dos configuraciones espaciales: átomos distribuidos a lo largo de una red, y átomos formando un triángulo equilátero.

En la Sección 3, se calcula numéricamente la energía de los estados colectivos del artículo de Zoubi y Ritsch mediante el uso de algoritmos variacionales implementados en ordenadores cuánticos. Tras explicar en las subsecciones 3.1 y 3.2 los conceptos fundamentales detrás de la computación cuántica y los algoritmos variacionales respectivamente, en la subsección 3.3 se explica cómo se ha simulado el sistema en un ordenador cuántico y cómo se ha diseñado el algoritmo variacional empleado para calcular la energía. Finalmente, en la sección 4, se comentan los resultados y las conclusiones derivadas de este estudio.

2. Fenómenos de desexcitación espontánea colectiva

2.1. Tasa de decaimiento para un átomo

En el formalismo de la óptica cuántica [3] las variables físicas del sistema, como el campo eléctrico, se sustituyen por operadores y el comportamiento de las partículas se describe mediante su función de onda, que evoluciona según la ecuación de Schrodinger.

El campo electromagnético se descomponen como una suma infinita de modos normales de frecuencias distintas $\omega_{\mathbf{k}_1}, \omega_{\mathbf{k}_2}, \dots$, cuya relación de dispersión es $\omega = ck$. Cada modo se asocia a un oscilador armónico unidimensional que está ocupado por un cierto número de partículas-onda llamadas fotones cuya energía es $E_{\text{fotón}} = \hbar\omega_{\mathbf{k}}$. La energía de cada modo está cuantizada y su estado de ocupación fotónico se representa por el ket $|n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \dots\rangle$ donde n es el número de fotones en cada modo. Así, el operador de la energía del campo electromagnético, H_R , es la suma de la energía de todos estos modos:

$$H_R = \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}, \varepsilon}^\dagger a_{\mathbf{k}, \varepsilon} + \frac{1}{2} \right).$$

Donde \mathbf{k} es el vector de onda del fotón, ε la polarización, $a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger$ y $a_{\mathbf{k}, \lambda}$ son el operador creación y aniquilación fotónico respectivamente.

La electrodinámica cuántica estudia la interacción entre las partículas cargadas y el campo electromagnético. En este trabajo se van a estudiar sistemas multiatómicos donde cada átomo tiene capas internas ‘congeladas’ de tal manera que solo su último electrón puede interactuar con el campo electromagnético. Además, el electrón solo puede moverse entre las dos últimas capas electrónicas, las cuales tienen una diferencia de energía entre ellas, o GAP, bien definida. Despreciando la energía cinética de los núcleos, si cada electrón tiene carga q y masa m entonces el hamiltoniano del sistema es:

$$H_0 = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} + H_R = H_P + H_R, \quad (2.1)$$

donde H_P es la energía de los electrones: la energía cinética y la energía asociada a la interacción coulombiana entre partículas cargadas. El subíndice α denota tanto al átomo como a su electrón correspondiente.

La introducción del potencial perturbativo $V(\mathbf{R})$ provoca el acoplo entre electrones y el campo de radiación. A primer orden de teoría de perturbaciones, los átomos se pueden considerar como dipolos eléctricos que interactúan con el campo eléctrico¹ modificando el hamiltoniano del sistema como:

$$H = H_0 + V(\mathbf{R}) \quad (2.2)$$

$$V(\mathbf{R}) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{\alpha} \boldsymbol{\mu}(\alpha) \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}_{\alpha}). \quad (2.3)$$

En esta última ecuación \mathbf{R}_{α} es la posición del centro de masas del átomo cuyo electrón es α , ε_0 es la permitividad eléctrica del vacío, $\boldsymbol{\mu}(\alpha)$ es el momento dipolar del átomo α y $\mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}_{\alpha})$ es el operador campo eléctrico evaluado en la posición del átomo α .

¹La carga positiva correspondería al núcleo y la carga negativa sería la nube electrónica.

El operador campo eléctrico, Ecuación del Anexo (A.68), se escribe como una suma ponderada de operadores creación y aniquilación:

$$\mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_\alpha) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\frac{\hbar c k \varepsilon_0}{2V} \right)^{\frac{1}{2}} \{ \epsilon^{(\lambda)}(\mathbf{k}) a^{(\lambda)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\alpha} - \epsilon^{-(\lambda)}(\mathbf{k}) a^{\dagger(\lambda)}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_\alpha} \}. \quad (2.4)$$

El operador momento dipolar afecta a la parte atómica de la función de onda. Solo conecta estados atómicos de distinta simetría:

$$\langle 0 | \boldsymbol{\mu}(\alpha) | 0 \rangle = \langle 1 | \boldsymbol{\mu}(\alpha) | 1 \rangle = 0 \quad (2.5)$$

$$\langle 1 | \boldsymbol{\mu}(\alpha) | 0 \rangle = \langle 1 | \mu_x(\alpha) | 0 \rangle + \langle 1 | \mu_y(\alpha) | 1 \rangle + \langle 1 | \mu_z(\alpha) | 0 \rangle = \boldsymbol{\mu}^{10}(\alpha) \quad (2.6)$$

$$\langle 0 | \boldsymbol{\mu}(\alpha) | 1 \rangle = \boldsymbol{\mu}^{01}(\alpha) \quad (2.7)$$

Se puede aproximar que los átomos interactúen con el campo eléctrico como dipolos siempre y cuando el tamaño del átomo sea mucho menor que la longitud de onda, λ_0 , asociada a la energía del GAP.

Al añadir este potencial perturbativo los estados y valores propios del sistema cambian. Por ejemplo, si un átomo solo tuviera dos niveles de energía:

$$\begin{aligned} \text{Estado fundamental:} & \quad |0\rangle \text{ Energía: } E_0 = 0, \\ \text{Primer estado excitado:} & \quad |1\rangle \text{ Energía: } E_1 = \hbar\omega_0 \end{aligned}$$

antes de añadir la perturbación el electrón solo podría ocupar estas dos capas y tendría solo dos posibles energías. Tras aplicar la perturbación los estados atómicos están ligados a los estados fotónicos y los estados del sistema átomo-campo eléctrico se describen como :

$$|0, n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \dots, n_{\mathbf{k}_n}\rangle, \text{ con energía: } 0 + \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(n_{\mathbf{k}, \varepsilon} + \frac{1}{2} \right),$$

$$|1, n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \dots, n_{\mathbf{k}_n}\rangle \text{ con energía: } \hbar\omega_0 + \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(n_{\mathbf{k}, \varepsilon} + \frac{1}{2} \right)$$

Como los estados propios cambian, esta perturbación provoca desexcitaciones espontáneas de electrones desde capas de mayor energía hasta aquellas de menor energía emitiendo un fotón en el proceso. Siguiendo con el ejemplo anterior, el electrón se desexcita desde el estado $|1, 1 : 0\rangle$, es decir, átomo excitado sin fotones en el sistema, hasta $|0, 1 : \mathbf{k}\varepsilon\rangle$, donde \mathbf{k} es el momento y la ε polarización del nuevo fotón.

La tasa de decaimiento espontáneo, Γ_0 , de un electrón desde un estado inicial hasta un estado final perteneciente a un continuo se calcula mediante la Regla de Oro de Fermi [7]. Formalmente, es el resultado de estudiar una transición desde un estado inicial único hasta un continuo de estados finales aplicando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo.

Sea un sistema afectado por una perturbación $V(t)$ que conecta los estados inicial y final. Si la energía del estado inicial $|i\rangle$ es $E_i = \hbar\omega_i$ y la energía del estado final $|f\rangle$ es $E_f = \hbar\omega_f$; la probabilidad de

decaimiento en primer orden de teoría de perturbaciones, P_{if} , es el módulo cuadrado de la amplitud de probabilidad, A_{if} , de dicha transición:

$$A_{if} = \langle f|U(t,0)|i\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau U^f(t') V_{fi} U^i(t') = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V_{fi} e^{i(E_f - E_i)t'/\hbar},$$

donde $U^f(t')$ y $U^i(t')$ son el operador evolución del hamiltoniano evaluado en el estado inicial y final, por ejemplo para el estado inicial: $U(t')|i\rangle = U^i(t') = e^{-i\omega_i t'/\hbar}|i\rangle$.

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |A_{if}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi}(t') dt' \right|^2 \quad (2.8)$$

donde $\omega_{fi} = \omega_f - \omega_i$ es la diferencia de energías entre el estado inicial y el final, y $V_{fi}(t') = \langle f|V(t')|i\rangle$ el elemento de matriz del potencial que conecta los estados.

Integrando se halla que la probabilidad de decaimiento tiene un máximo centrado en la frecuencia ω_{fi} :

$$\mathcal{P}_{if}(t; \omega = \omega_{fi}) = \mathcal{P}_{if}(t) = \frac{V_{fi}^2}{\hbar^2} F(t, \omega - \omega_{fi}) \quad \text{siendo } F \text{ la función sinc(x): } F(t, \omega - \omega_{fi}) = \left\{ \frac{\sin[(\omega_{fi} - \omega)t/2]}{(\omega_{fi} - \omega)/2} \right\}^2$$

Integrando sobre la densidad de estados finales $\rho(E)$:

$$\mathcal{P}(t) = \int_{\{E_{acc}\}} \mathcal{P}_{if}(t) \rho(E) \quad \text{siendo } E_{acc} \text{ el número de estados finales accesibles.} \quad (2.9)$$

Como la función de probabilidad tiene un pico en la frecuencia ω_{fi} actúa como una delta de Dirac sobre la energía de los estados finales, es decir, $\rho(E) = \rho(E_{fi})$, que se pueden considerar constantes. Integrando y derivando con respecto al tiempo se obtiene la Regla de Oro de Fermi:

$$\mathcal{P}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} V_{fi}^2 \rho(E_{fi}) t$$

Regla de Oro de Fermi: $\Gamma_0 = \frac{d\mathcal{P}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} V_{fi}^2 \rho(E_{fi})$

Tomando el Hamiltoniano (2.1), en el caso de que el potencial V sea el potencial dipolar eléctrico (2.3), independiente del tiempo, se sabe que conecta estados que difieran en un fotón y cuyo estado atómico sea distinto. Entonces la transición $|1, 1 : 0\rangle$ hasta $|0, 1 : \mathbf{k}\epsilon\rangle$ tiene una tasa de emisión espontánea Γ_0 :

$$\Gamma_0 = \frac{k_0^3 \mu^2}{3 \hbar \epsilon_0 \pi} \quad (2.10)$$

Donde k_0 es el vector de onda de la transición entre el estado fundamental y el estado excitado, μ el vector momento dipolar atómico y ϵ_0 la permitividad eléctrica en el vacío. Se puede representar la amplitud de probabilidad, A_{if} , y la probabilidad de emisión, \mathcal{P}_{if} , en el siguiente diagrama de Feynman:

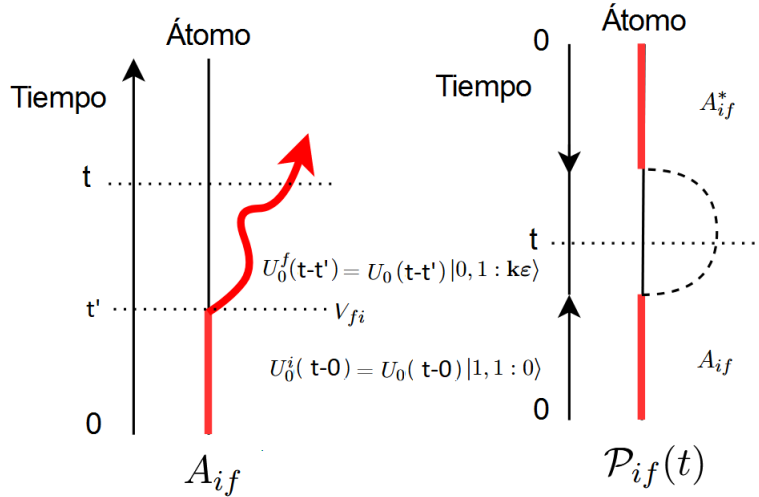


Figura 1: Digrama de Feynman para la desexcitación de un átomo. La línea punteada y la flecha roja representan un fotón. En rojo se representan los estados atómicos excitados, $|1\rangle$.

El diagrama de la izquierda representa cómo sucede la desexcitación en el tiempo. Suponiendo que el átomo ya haya sido excitado a tiempo 0, este evoluciona libremente hasta que actúa la perturbación y se emite un fotón, que se detecta después de un tiempo t .

El diagrama de la derecha representa la probabilidad de desexcitación. Se usa una doble escala de tiempo porque en el complejo conjugado de la amplitud de desexcitación los operadores evolución actúan al revés en el tiempo. Aunque se represente con una línea punteada cerrada, el fotón se emite libremente, no se reabsorbe.

2.2. Tasa de decaimiento para un sistema multiatómico. Gas de Dicke

La tasa de emisión espontánea de un gas de átomos idénticos, como el mostrado en la Figura 2, se suele considerar que es Γ_0 veces el número de átomos totales puesto que se supone que todos emiten independientemente. Este resultado solo es válido en ciertas condiciones especiales. En general la tasa de desexcitación del sistema tendrá que ser calculada para cada estado colectivo del sistema debido a que todos los átomos están interaccionando entre sí a través del campo electromagnético en el que están inmersos.

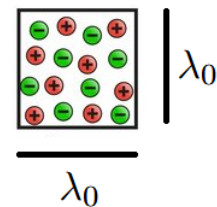


Figura 2: Gas de átomos excitados, en rojo, y desexcitados, en verde, encerrados en un volumen comparable con λ_0 .

Estos fenómenos colectivos, puramente cuánticos, fueron descubiertos por Dicke [1] a mediados del siglo pasado. Demostró teóricamente que la intensidad emitida es proporcional al cuadrado del número de átomos del sistema. Aquellos estados cuyo ritmo de emisión espontánea sea anormalmente alto o anormalmente bajo se denominan, respectivamente, ‘superradiantes’ e ‘infraradiantes’.

El fenómeno se produce en el límite de interacción dipolar eléctrica, es decir, cuando la longitud de onda de la radiación emitida es mucho mayor que el tamaño de los átomos, pudiendo estos considerarse como dipolos puntuales perfectos. También se desprecian colisiones entre átomos y se

consideran interacciones entre átomos exclusivamente a pares .

Sea un sistema de N átomos cuyo hamiltoniano es (2.1) y cada átomo se considera un sistema de dos niveles: estado fundamental, $|0\rangle$, y estado excitado, $|1\rangle$. De manera efectiva, se puede considerar cada átomo como un fermión con spin $\frac{1}{2}$, correspondiendo $-\frac{1}{2} = |0\rangle$ y $\frac{1}{2} = |1\rangle$. La base de estados del sistema es el producto tensorial de la base de cada átomo. Por ejemplo para un sistema con dos átomos:

$$|\text{Átomo 1, Átomo 2}\rangle = |00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle \quad (2.11)$$

Como resultado de aplicar la perturbación dipolar eléctrica, (2.3), además de conectar el campo electromagnético con los átomos se cambian los autoestados del sistema, los cuales serán combinaciones lineales de los estados (2.11). Gracias al análogo del spin, la nueva base se obtiene siguiendo las reglas de suma del momento angular, siempre y cuando se establezcan condiciones de periodicidad e invariancia ante translaciones en el conjunto de átomos, además de despreciar el efecto de las condiciones de contorno.

Los autoestados se escriben $|r, m\rangle$, siendo r el momento angular total y m su proyección sobre el eje Z. El momento angular toma valores $|m| \leq r \leq \frac{N}{2}$ y hay m kets para cada valor fijo de r , con degeneración:

$$\frac{N!(2r+1)}{(\frac{1}{2}N+r+1)!(\frac{1}{2}N-r)!}$$

El número cuántico m toma valores según el número de átomos excitados y desexcitados. Sea n_a el número de átomos desexcitados y n_b el número de estados excitados, entonces se define: $m = \frac{1}{2}(n_b - n_a)$. Cuanto más negativo sea el valor de m más átomos habrá desexcitados; cuanto más positivo, más átomos habrá excitados.

Base acoplada $ r, m\rangle$	Base desacoplada (2.11)	Estado de los átomos
$ 1, 1\rangle =$	$ 11\rangle$	2 átomos excitados
$ 1, -1\rangle =$	$ 00\rangle$	0 átomos excitados
$ 1, 0\rangle =$	$\frac{1}{\sqrt{2}} [10\rangle + 01\rangle]$	1 átomo excitado y 1 desexcitado
$ 0, 0\rangle =$	$\frac{1}{\sqrt{2}} [10\rangle - 01\rangle]$	1 átomo excitado y 1 desexcitado

Tabla 1: Tabla donde se clasifican los estados propios en un sistema con 2 átomos, $N = 2$, después de añadir la perturbación (columna ‘Base acoplada’) expresados en función de los vectores de la base sin perturbar (columna ‘Base desacoplada’). En la tercera columna se describe el estado de excitación atómico.

Se puede demostrar [1] que la tasa de desexcitación espontánea para un sistema con un gran número, N , de átomos se puede calcular en función de sus números cuánticos r y m :

$$\Gamma = \Gamma_0(r+m)(r-m+1), \quad (2.12)$$

donde Γ_0 es la tasa de desexcitación de una sola partícula, Ecuación (2.10).

Suponiendo que el sistema ya esté excitado de tal manera que cada átomo puede encontrarse en estado excitado o desexcitado indistintamente, se pueden dar los siguientes casos:

Emisión independiente:

Ocurre cuando todos los átomos están excitados. Entonces $m = r = \frac{1}{2}N$ y el ritmo de emisión es $\Gamma = N\Gamma_0$. En el ejemplo, correspondería con el estado de la base acoplada $|1, 1\rangle$, pues todos los átomos están excitados.

El sistema se desexcita como si todas las partículas emitieran independientemente.

Superradiancia

Ocurre cuando hay la misma cantidad de átomos excitados que desexcitados. Entonces $m = 0$, $r = \frac{1}{2}N$ y es $\Gamma = \frac{1}{2}N(\frac{1}{2}N + 1)\Gamma_0$. Este ritmo de desexcitación es un máximo del sistema.

Cuando N es muy grande: $\Gamma = \frac{\Gamma_0}{4}N^2$. Por lo cual el ritmo de desexcitación es proporcional a N^2 . Es un resultado extraordinario, porque el sistema se desexcita más rápido de lo esperado.

En general, el estado de la base acoplada $|\frac{1}{2}N, 0\rangle$ es superradiante. En el ejemplo $N = 2$, correspondería con el estado $|1, 0\rangle$, donde hay un átomo excitado y uno desexcitado en estado simétrico. Esa deslocalización de la excitación hace que el estado sea superradiante.

Infrarradiancia

Ocurre cuando hay la misma cantidad de átomos excitados que desexcitados pero las fases relativas de los estados atómicos son opuestas. Entonces, $r = m = 0$ y el ritmo de desexcitación es $\Gamma = 0$. Por lo cual, el sistema emite más lentamente de lo normal.

En general, el estado de la base acoplada $|0, 0\rangle$ es infrarradiante. En el ejemplo, correspondería con el estado antisimétrico $|0, 0\rangle$, donde hay un átomo excitado y uno desexcitado.

En resumen, los estados superradiantes tienen el máximo momento angular posible y los subradiantes el mínimo posible, tendiendo ambos a $m \sim 0$. El límite $m = 0$ solo se cumple en sistemas con un número par de átomos. La tasa de desexcitación de los estados intermedios varía entre la tasa máxima $\Gamma = N^2$ correspondiente con el estado superradiante y la tasa mínima $\Gamma \sim 0$ del estado infraradiante.

Un sistema con dos átomos, $N = 2$, se desexcita con tasas en un rango cuyo máximo es $2\Gamma_0$ y cuyo mínimo es 0.

Si bien este formalismo se desarrolló para un gas de átomos, siempre que un sistema esté compuesto de átomos de dos niveles, que su tamaño sea menor que la longitud de onda de la radiación emitida y cumpla las condiciones de simetría, sus estados colectivos se desexcitarán como los estados de Dicke.

2.3. Red unidimensional infinita de Zoubi y Ritsch

El artículo [6] propone un sistema cuya distribución atómica propicia la aparición de fenómenos de desexcitación espontánea. Primero establece el hamiltoniano que rige el comportamiento del sistema, luego, mediante el teorema de Bloch, calcula analíticamente el número de estados y su energía. Después calcula la tasa de desexcitación de cada uno de ellos mediante la Regla de Oro de Fermi.

Sea una cadena unidimensional de átomos idénticos equiespaciados una distancia a . Cada átomo se considera de manera efectiva un sistema energético de dos niveles, estado fundamental $|0\rangle$, de energía E_0 y estado excitado $|1\rangle$, de energía $E_1 = \hbar\omega_0$. Tomando el estado fundamental como origen de energías la energía de la transición fundamental es $E_A = \hbar\omega_0$. Estas condiciones se pueden reproducir experimentalmente con átomos ultrafríos atrapados en una red iónica [4].

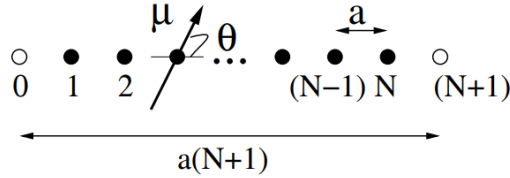


Figura 3: Esquema de una red con N átomos y un átomo por celdilla. La separación interatómica es a y la longitud del segmento es $L = a(N + 1)$. Todos los átomos tienen la misma polarización. El vector momento dipolar eléctrico, μ , forma un ángulo θ con la red. En los extremos hay sendos átomos vacantes para fijar las condiciones de contorno.

Debido a las interacciones dipolo-dipolo entre los átomos, los estados excitados se comparten a lo largo de la red. Esta deslocalización permite describir el estado del sistema mediante modos de excitación colectiva, que a causa de la longitud finita de la cadena se caracterizan por ser ondas estacionarias. Suponiendo que solo haya una excitación el Hamiltoniano [6] del sistema es:

$$H_{ex} = \sum_n E_A B_n^\dagger B_n + \sum_{nm} J B_n^\dagger B_m. \quad (2.13)$$

Los operadores B_n / B_n^\dagger actúan sobre el átomo en la posición n creando o extinguiendo una excitación:

$$B_n^\dagger |\phi_1 \phi_2 \dots\rangle \begin{cases} 0 & \text{si } \phi_n = |1\rangle \\ |\phi_1 \phi_2 \dots 1_n \dots\rangle & \text{si } \phi_n = |0\rangle \end{cases}$$

$$B_n |\phi_1 \phi_2 \dots\rangle \begin{cases} 0 & \text{si } \phi_n = |0\rangle \\ |\phi_1 \phi_2 \dots 0_n \dots\rangle & \text{si } \phi_n = |1\rangle \end{cases}$$

La constante J es la fuerza del acoplo dipolar eléctrica entre primeros vecinos.

$$J = \frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0 a^3} (1 - 3 \cos^2 \theta) \quad (2.14)$$

Surgen tantos estados colectivos como átomos hay en la red. Su energía viene dada [6] por:

$$E_k = E_A + 2J \cos\left(\frac{\pi k}{N+1}\right) \quad (2.15)$$

siendo $k = 1, \dots, N$. Los modos con k impar pueden radiar, son ‘brillantes’, siendo el modo $k = 1$ superradiante. Los modos con k par son no radiantes, ‘oscuros’.

Es preciso clarificar que el modo $k = 1$ es el más radiante dentro del subespacio de una excitación, pero no tiene por qué ser el máximo de radiación del sistema considerando todas las posibles excitaciones. El carácter radiante del estado fundamental depende del signo de J . No hay correlación entre la energía del estado y su tasa de desexcitación espontánea.

Estos resultados se consideran válidos siempre y cuando se asuma:

- Interacción solo a primeros vecinos, por lo cual J tiene un valor constante y solo depende de la constante a . Esto es justificable debido a que J es más pequeño cuanto mayor sea la distancia entre dos átomos, de tal manera que se puede despreciar para segundos y sucesivos vecinos.
- Límite dipolar eléctrico; por lo cual la longitud de onda de la radiación emitida, $\lambda_A = hc/E_A$, es más grande que el tamaño del átomo.
- La longitud total de la cadena no supera la longitud de onda de la radiación emitida, es decir, $a \leq \lambda_A$. De lo contrario, la interacción entre todos los átomos deja de ser instantánea y se deben considerar correcciones radiativas.

La tasa de decaimiento se calcula [6] a partir de la regla de oro de Fermi:

$$\Gamma_k = \frac{\mu^2 E_k^3}{3\pi\epsilon_0 \hbar^4 c^3} \left(\frac{2a}{L}\right) \cot^2\left(\frac{\pi ka}{2L}\right) \quad (2.16)$$

donde $L = a(N + 1)$ es la longitud total de la cadena.

Para una cadena monoatómica, $L = 2a$ y $E_k = E_A$, la tasa de decaimiento es $\Gamma_A = \frac{\mu^2 E_A^3}{3\pi\epsilon_0 \hbar^4 c^3}$, reproduciendo el resultado hallado en (2.10). Al comparar E_k con E_A se manifiesta el comportamiento superradiante/infraradiante de los estados. Por ejemplo, en la Figura 2.3 se representa la tasa de decaimiento frente a la de un átomo para los 5 modos ‘brillantes’. El estado $k=1$ tiene una tasa de desexcitación 9 veces mayor que la tasa de desexcitación de un solo átomo por lo cual es superradiante.

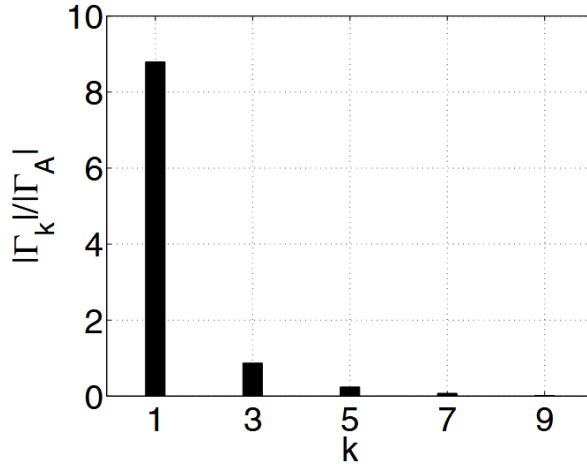


Figura 4: Tasa de desexcitación de los modos de excitación colectiva frente a la tasa de un único átomo, es decir, Γ_k/Γ_A frente a k para un sistema $N = 10$

En particular, para un sistema con 3 átomos los estados y valores propios son una combinación lineal de los kets del subespacio de una excitación $|100\rangle, |010\rangle, |001\rangle$, como puede verse en la siguiente Tabla:

Energía	Estado	Vector propio
$E_1 = E_A + \sqrt{2} J$	Superradiante	$ E_1\rangle : \frac{1}{2}[100\rangle + 001\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} 010\rangle]$
$E_2 = E_A$	No radiante	$ E_2\rangle : \frac{1}{\sqrt{2}}[- 100\rangle + 001\rangle]$
$E_3 = E_A - \sqrt{2} J$	Radiante	$ E_3\rangle : \frac{1}{2}[100\rangle + 001\rangle] - \frac{1}{\sqrt{2}} 010\rangle]$

Tabla 2: Energía, vectores y caracter radiante de los modos colectivos del sistema $N = 3$. Los vectores propios se han hallado diagonalizando numéricamente la matriz del hamiltoniano.

Según la Ecuación (2.16) la tasa de decaimiento del estado superradiante E_1 es:

$$\Gamma_1 = \frac{\mu^2 E_1^3}{3\pi\epsilon_0 \hbar^4 c^3} \left(\frac{1}{2}\right) \cot^2\left(\frac{\pi}{8}\right) \sim 2,91 \frac{\mu^2 E_1^3}{3\pi\epsilon_0 \hbar^4 c^3}, \quad (2.17)$$

habiendo sustituido $L = 4a$ y $k = 1$.

2.4. Sistema N=3. Cálculo de la tasa de decaimiento del estado simétrico

Como considerar la interacción entre átomos exclusivamente a pares es poco realista, en este trabajo se propone un sistema triatómico donde tres átomos se comuniquen entre ellos y se calculará analíticamente el ritmo de desexcitación para el estado simétrico.

Sea un sistema con 3 átomos idénticos A, B, C. Cada átomo se considera de manera efectiva un sistema energético de dos niveles, estado fundamental y estado excitado, representados por los kets $|0\rangle$ y $|1\rangle$ respectivamente. La energía del estado fundamental es E_0 y la del estado excitado E_1 . Se toma E_0 como origen de energías, por lo cual la energía del estado excitado se puede expresar en función de la frecuencia de transición atómica natural, $E_1 - E_0 = E_A = \hbar\omega_0$. Suponiendo que el sistema se haya excitado instantáneamente de tal manera que solo un átomo cambia su estado atómico, el hamiltoniano inicial es (2.1) y la base de estados es:

$$|A, B, C\rangle = |100\rangle, |010\rangle, |001\rangle. \quad (2.18)$$

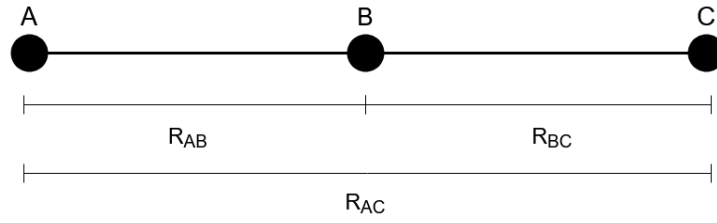


Figura 5: Sistema triatómico. La longitud total de la red no supera la longitud de onda de la transición natural λ_0 .

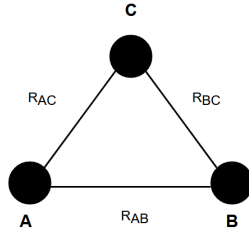


Figura 6: Sistema triatómico dispuesto como triángulo equilátero.

Considerando que la red de átomos interactúa con el campo electromagnético como dipolos eléctricos, se añade al hamiltoniano el potencial perturbativo:

$$V(\mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B, \mathbf{R}_C) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \boldsymbol{\mu}(A) \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_A) - \frac{1}{\varepsilon_0} \boldsymbol{\mu}(B) \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_B) - \frac{1}{\varepsilon_0} \boldsymbol{\mu}(C) \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_C) = V_A + V_B + V_C \quad (2.19)$$

Consecuentemente, los estados y valores propios cambian. Como en el caso de Dicke, estos estados solo se pueden considerar propios si se consideran condiciones de contorno periódicas. Si se ordenan según la nomenclatura de momento angular $|rm\rangle$:

Base acoplada $ rm\rangle$	Base desacoplada $ A, B, C\rangle$
$ \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle =$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [100\rangle + 010\rangle + 001\rangle]$
$ \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle =$	$ 000\rangle$
$ \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}\rangle =$	$\frac{1}{\sqrt{6}} [001\rangle + 010\rangle - 2 100\rangle]$
$ \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}\rangle' =$	$\frac{1}{\sqrt{2}} [001\rangle - 010\rangle]$

Tabla 3: Base de estados acoplados en función de los desacoplados.

Desde el momento inicial, se supone que la excitación se mueve entre dos átomos cualesquiera transmitiéndose como fotón virtual durante un tiempo τ . La evolución en el tiempo de dichas parejas de átomos viene dada por el operador evolución $U_{k_0 R}(\tau)$ que se sabe [10] tiene elementos de matriz:

$$-ie^{-\Gamma_0\tau/2}e^{-i\omega_0\tau} \sin \left[T \tilde{\Omega}(k_0 R) \right] |A_0, B_1\rangle \langle A_1, B_0| \quad (2.20)$$

$$e^{-\Gamma_0\tau/2}e^{-i\omega_0\tau} \cos \left[T \tilde{\Omega}(k_0 R) \right] |A_1, B_0\rangle \langle A_1, B_0| \quad (2.21)$$

donde $\Gamma_0 = \frac{k_0^3 \mu^2}{3\hbar \epsilon_0 \pi}$ es la frecuencia de desexcitación fundamental de un átomo y ω_0 es la frecuencia de transición atómica natural.

La excitación se transmite con frecuencia $\tilde{\Omega}(k_0 R)$, la cual expresada en términos de la función de Green², es:

$$\tilde{\Omega}(k_0 R) = \frac{\omega_0^2 \boldsymbol{\mu}_A \cdot \mathbf{G}(k_0 R) \cdot \boldsymbol{\mu}_B}{e^2 c} = \frac{\omega_0^2 \boldsymbol{\mu}_A \cdot [\text{Re} \mathbf{G}(k_0 R) + i \text{Im} \mathbf{G}(k_0 R)] \cdot \boldsymbol{\mu}_B}{e^2 c} = \Omega_{k_0 R} - i\Gamma_{k_0 R}, \quad (2.22)$$

donde el vector momento dipolar eléctrico es $\boldsymbol{\mu}$. La parte real de esta frecuencia corresponde con la energía del fotón virtual y la parte imaginaria con su tasa de decaimiento.

El tensor de Green es el campo eléctrico inducido a una distancia R por un dipolo puntual de frecuencia $\omega_0 = c k_0$ es:

$$\mathbf{G}(k_0 R) = \frac{k_0 e^{ik_0 R}}{4\pi} \left[\frac{\alpha}{k_0 R} + \frac{i\beta}{(k_0 R)^2} - \frac{\beta}{(k_0 R)^3} \right]$$

donde los tensores $\alpha = \mathbf{I} - \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{R}}$ y $\beta = \mathbf{I} - 3\hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{R}}$ con $\hat{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{R}}{R}$.

Como el sistema tiene tres átomos habrá tres parejas de átomos. Consecuentemente, los subíndices 'A', 'B' y las distancias R de las anteriores fórmulas cambian para especificar la pareja. Por lo cual

²La función de Green, $G(k_0 R)$, es la transformada de Fourier temporal del propagador del campo electromagnético en el vacío.

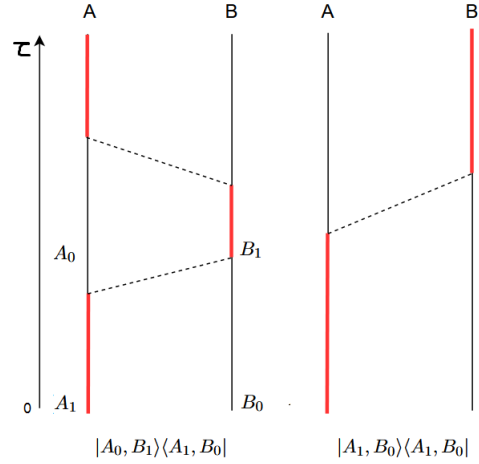


Figura 7: Diagrama de Feynman que representa los posibles procesos en los que se puede compartir la excitación entre los átomos A y B. Las líneas punteadas representan fotones virtuales.

el operador evolución del sistema es:

$$U(\tau) = U_{k_0 R_{AB}}(\tau) + U_{k_0 R_{AC}}(\tau) + U_{k_0 R_{BC}}(\tau) \quad (2.23)$$

En este subespacio de una excitación el ket $|\frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle$ tendrá una tasa de emisión espontánea más alta por tener mayor momento angular y número cuántico m más cercano a 0. Suponiendo que de 0 a tiempo τ la excitación se intercambia entre parejas de átomos, el objetivo es calcular el ritmo de desexcitación en primer orden de teoría de perturbaciones desde el estado $|\frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle$ al estado fundamental $|\frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle$ cuando el fotón virtual deja de intercambiarse, se emite y mide a tiempo T .

La amplitud de probabilidad, Ecuación (A.74), de la desexcitación desde el estado inicial $|\frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle$ al estado final $|\frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle$ es³:

$$A_{if} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}, 1 : \mathbf{k}\epsilon \left| U_{0\text{Total}}(T, 0) \right| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}, 1 : 0 \right\rangle = \frac{1}{i\hbar\sqrt{3}} \int_0^T d\tau U_0^f(\tau) V_{fi} U_0^i(\tau) = \quad (2.24)$$

$$\frac{1}{i\hbar\sqrt{3}} \int_0^T d\tau e^{i\omega\tau} V_A^{if} \frac{(c_{AB} + c_{AC} + s_{AB} + s_{AC})}{2} + \frac{1}{i\hbar\sqrt{3}} \int_0^T d\tau e^{i\omega\tau} V_B^{if} \frac{(c_{AB} + c_{BC} + s_{AB} + s_{BC})}{2} \quad (2.25)$$

$$+ \frac{1}{i\hbar\sqrt{3}} \int_0^T d\tau e^{i\omega\tau} V_C^{if} \frac{(c_{AC} + c_{BC} + s_{AC} + s_{BC})}{2}, \quad (2.26)$$

donde $c_{AB/BC/AC}, s_{AB/BC/AC}$ son los elementos diagonales y no diagonales del operador evolución, (2.21), (2.20), evaluados entre el estado inicial y el estado intermedio a tiempo τ . Indican si la excitación comienza y termina en el mismo átomo, $c_{AB/AC}$, o en su pareja, $s_{AB/AC}$. Por ejemplo:

$$c_{AB} = \langle 100 | U_{\text{total}}(\tau) | 100 \rangle = e^{-\Gamma_0\tau/2} e^{-i\omega_0\tau} \cos \left[\tau \tilde{\Omega}(kR_{AB}) \right]_{\omega=\omega_0}, \quad (2.27)$$

$$s_{AB} = \langle 010 | U_{\text{total}}(\tau) | 100 \rangle = -ie^{-\Gamma_0\tau/2} e^{-i\omega_0\tau} \sin \left[\tau \tilde{\Omega}(kR_{AB}) \right]_{\omega=\omega_0}. \quad (2.28)$$

El resultado de su integración puede consultarse en las Ecuaciones (A.83) y (A.84). La amplitud de probabilidad tiene en cuenta los 4 procesos que pueden llevar a la emisión de un fotón desde cada átomo. Por ejemplo, el término $\frac{1}{i\hbar\sqrt{3}} \int_0^T d\tau e^{i\omega\tau} V_A^{if} \frac{(c_{AB}+c_{AC}+s_{AB}+s_{AC})}{2}$ describe la amplitud de probabilidad de que el átomo A emita el fotón, lo cual viene representado en la Figura 2.4.

³El factor $\frac{1}{2}$ se introduce como renormalización tras la evolución durante τ del estado inicial.

Respecto a los elementos de matriz, V_{if} , del potencial perturbativo, Ecuación (2.19); por sus características solo conecta estados atómicos de la base (2.18) que sean distintos y estados del campo electromagnético que difieran en un fotón. Por ejemplo:

$$V_A^{if} = \langle 000, 1 : \mathbf{k}\boldsymbol{\varepsilon} | V_A | 100, 1 : 0 \rangle = \quad (2.29)$$

$$-\frac{1}{\varepsilon_0} \langle -|\boldsymbol{\mu}(A)|+\rangle \langle \mathbf{k}\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_A) | 0 \rangle \quad (2.30)$$

Los elementos V_{if} dependen de la posición, del momento dipolar eléctrico y de la polarización del átomo. Una descripción más detallada puede encontrarse en la Ecuación (A.75) del Anexo.

Cuando se emite un fotón real la interacción entre los átomos pasa de considerarse a pares a tratarse de una interacción en conjunto. Esto es debido a que el sistema tiene memoria, es decir, no se desprecian los procesos previos a la emisión del fotón, junto con que el estado inicial es una superposición coherente de estados de la base desacoplada. El resultado de la integración de (2.24) es:

$$A_{if} = \frac{1}{i\hbar 2\sqrt{3}} \left[V_A^{if} \left(\frac{(e^{M_{AB}(\omega)})^T - 1}{M_{AB}(\omega)} + \frac{e^{(M_{AC}(\omega))^T} - 1}{M_{AC}(\omega)} \right) + \right. \quad (2.31)$$

$$\left. V_B^{if} \left(\frac{e^{(M_{AB}(\omega))^T} - 1}{M_{AB}(\omega)} + \frac{e^{(M_{BC}(\omega))^T} - 1}{M_{BC}(\omega)} \right) + V_C^{if} \left(\frac{e^{(M_{AC}(\omega))^T} - 1}{M_{AC}(\omega)} + \frac{e^{(M_{BC}(\omega))^T} - 1}{M_{BC}(\omega)} \right) \right] \quad (2.32)$$

siendo las nuevas frecuencias complejas:

$$M_{AB/BC/AC}(\omega) = -\Gamma_0/2 - \Gamma_{AB/BC/AC} + i(\omega - \omega_0 - \Omega_{AB/BC/AC}) \quad (2.33)$$

Entonces la frecuencia del fotón emitido es $\omega_{AB/BC/AC}^+ = cK_{AB/BC/AC}^+$ y su complejo conjugado $\frac{\omega_{AB/BC/AC}^-}{c}$:

$$\frac{\omega_{AB/BC/AC}^+}{c} = K_{AB/BC/AC}^+ = \frac{\omega_0 + \Omega_{AB/BC/AC} + i(\Gamma_0/2 + \Gamma_{AB/BC/AC})}{c} \quad (2.34)$$

$$\frac{\omega_{AB/BC/AC}^-}{c} = K_{AB/BC/AC}^- = \frac{\omega_0 + \Omega_{AB/BC/AC} - i(\Gamma_0/2 + \Gamma_{AB/BC/AC})}{c} \quad (2.35)$$

La parte real indica que el fotón emitido tiene una energía mayor que ω_0 y la parte imaginaria indica que la tasa de decaimiento será mayor que la tasa de decaimiento de un átomo individual, Γ_0 .

Para calcular la tasa de desexcitación se halla la probabilidad de desexcitación y luego se deriva

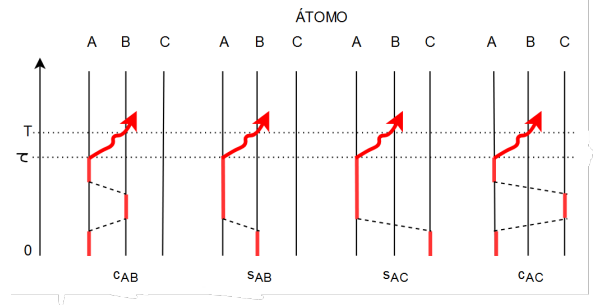


Figura 8: Digrama de Feynman de los posibles procesos en los que el átomo A emite un fotón. La escala de tiempo se indica a la izquierda. En rojo se indica que el átomo está excitado. Aunque en el diagrama se muestran un número finito de transiciones, en la realidad los átomos pueden intercambiarse la excitación infinitas veces durante el tiempo τ .

respecto al tiempo de detección del fotón, T :

$$\Gamma = \frac{\partial}{\partial T} (|A_{if}|^2) = \frac{1}{\hbar^2 12} \frac{\partial}{\partial T} \left| V_A^{if} \left(\frac{e^{(M_{AB}(\omega)T) - 1}}{M_{AB}(\omega)} + \frac{e^{(M_{AC}(\omega)T) - 1}}{M_{AC}(\omega)} \right) + \right. \quad (2.36)$$

$$\left. V_B^{if} \left(\frac{e^{(M_{AB}(\omega)T) - 1}}{M_{AB}(\omega)} + \frac{e^{(M_{BC}(\omega)T) - 1}}{M_{BC}(\omega)} \right) + V_C^{if} \left(\frac{e^{(M_{AC}(\omega)T) - 1}}{M_{AC}(\omega)} + \frac{e^{(M_{BC}(\omega)T) - 1}}{M_{BC}(\omega)} \right) \right|^2 \quad (2.37)$$

$$\Gamma = \frac{1}{\hbar^2 12} \frac{\partial}{\partial T} \left(\sum_{m=A,B,C} |V_m^{if}|^2 (\text{Coef.}_m)^* (\text{Coef.}_m) + \sum_{\substack{m,j=A,B,C \\ m \neq j}} V_m^{if*} V_j^{if} (\text{Coef.}_m)^* (\text{Coef.}_j) \right) \quad (2.38)$$

Como A_{if} y A_{if}^* dependen de K^+ y K^- respectivamente, la tasa de desexcitación será una combinación lineal ponderada de dichas frecuencias. En la figura 9 se representa visualmente la probabilidad de emisión, $|A_{if}|^2$:

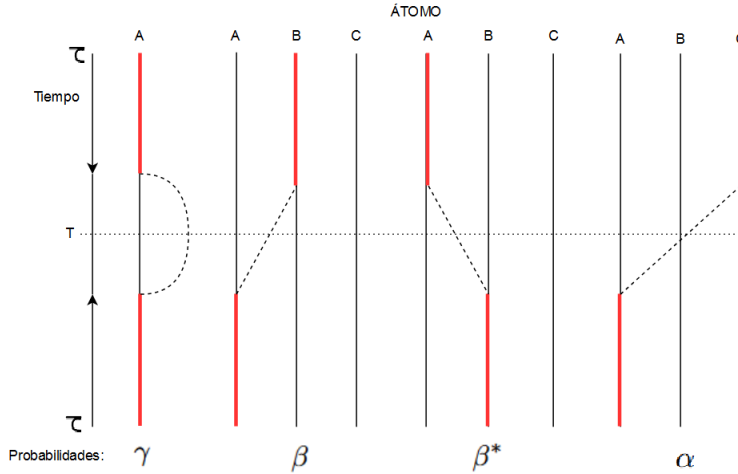


Figura 9: Digrama de Feynman que muestra la probabilidad de desexcitación del átomo A, $|V_A^{if}|^2 (\text{Coef.}_A)^* (\text{Coef.}_A)$. La escala de tiempo se indica a la izquierda y empieza en τ , aunque previamente ocurrirían cualquiera de los 4 estados representados en la Figura 8. La línea punteada representa un fotón virtual. El proceso γ representa la probabilidad de desexcitación del átomo A, mientras que β y α mezclan las probabilidades de desexcitación del átomo A y B. Esta mezcla hace que la tasa de desexcitación del sistema difiera con respecto a Γ_0 .

Términos cuadrados: $\frac{\partial}{\partial T} \sum_m |V_m^{if}|^2 (\text{Coef.}_m)^* (\text{Coef.}_m)$

Para mostrar el cálculo de la tasa de decaimiento de los términos cuadrados, se resuelve el término

cuadrado correspondiente con $|V_A^{if}|^2$, pues los otros dos términos se resuelven de manera similar.

$$\gamma = \left| V_A^{if} \left(\frac{e^{(M_{AB}(\omega)T - 1)}}{M_{AB}(\omega)} + \frac{e^{(M_{AC}(\omega)T - 1)}}{M_{AC}(\omega)} \right) \right|^2 = \quad (2.39)$$

$$|V_A^{if}|^2 \left[\frac{\partial}{\partial T} \left| \frac{e^{(M_{AB}(\omega)T - 1)}}{M_{AB}(\omega)} \right|^2 + \frac{\partial}{\partial T} \left| \frac{e^{(M_{AC}(\omega)T - 1)}}{M_{AC}(\omega)} \right|^2 \right] \quad (2.40)$$

$$+ \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{e^{(M_{AB}(\omega)T - 1)}}{M_{AB}(\omega)} \right)^* \left(\frac{e^{(M_{AC}(\omega)T - 1)}}{M_{AC}(\omega)} \right) + \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{e^{(M_{AB}(\omega)T - 1)}}{M_{AB}(\omega)} \right)^* \left(\frac{e^{(M_{AC}(\omega)T - 1)}}{M_{AC}(\omega)} \right) \quad (2.41)$$

Sabiendo que el módulo del elemento de potencial es $|V_A^{if}|^2 : \frac{P^2}{\pi^2} |\mu(A)|^2 \lim_{R_A \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\sin kR_A}{R_A}$, Ecuación (A.78), entonces se integra⁴, con respecto a todas las posibles energías del fotón, k , y se halla:

$$\gamma = \frac{P^2 |\mu(A)|^2}{\pi c} \left[e^{(-\Gamma_0 - 2\Gamma_{AB})T} ((K_{AB}^+)^3 + (K_{AB}^-)^3) + e^{(-\Gamma_0 - 2\Gamma_{AC})T} ((K_{AC}^+)^3 + (K_{AC}^-)^3) \right] \quad (2.42)$$

$$+ e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_{AB} - \Gamma_{AC} + i(\Omega_{AC} - \Omega_{AB}))T} ((K_{AC}^+)^3 + (K_{AB}^-)^3) + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_{AC} - \Gamma_{AB} - i(\Omega_{AC} - \Omega_{AB}))T} ((K_{AB}^+)^3 + (K_{AC}^-)^3) \quad (2.43)$$

con $P^2 = \left(\frac{\hbar c}{2\varepsilon_0} \right)$.

Como los tres átomos son idénticos entonces su momento dipolar es idéntico: $|\mu(A)|^2 = |\mu(B)|^2 = |\mu(C)|^2 = |\mu|^2$. La integración de los tres términos cuadrados da como resultado:

$$\frac{\partial}{\partial T} \sum_m |V_m^{if}|^2 (\text{Coef.}_m)^* (\text{Coef.}_m) = \frac{P^2 |\mu|^2}{\pi c} \sum_{x,y=AB,AC,BC} \left[e^{(-\Gamma_0 - 2\Gamma_x)T} ((K_x^+)^3 + (K_x^-)^3) \right] \quad (2.44)$$

$$+ e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_x - \Gamma_y + i(\Omega_x - \Omega_y))T} ((K_y^+)^3 + (K_x^-)^3) + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_x - \Gamma_y - i(\Omega_y - \Omega_x))T} ((K_x^+)^3 + (K_y^-)^3) \quad (2.45)$$

Términos cruzados: $\frac{\partial}{\partial T} \sum_{\substack{m,j=A,B,C \\ m \neq j}} V_m^{if*} V_j^{if} (\text{Coef.}_m)^* (\text{Coef.}_j)$.

Hay 6 términos cruzados: 3 términos y sus 3 correspondientes complejos conjugados. Se resuelve para el caso $V_A^{if*} V_B^{if} (\text{Coef.}_A)^* (\text{Coef.}_B)$ y luego se generaliza al resto de términos.

$$\beta = V_A^{if*} V_B^{if} \left[\frac{\partial}{\partial T} \left| \frac{e^{(M_{AB} + iN_{AB})T - 1}}{M_{AB} + iN_{AB}} \right|^2 + \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{e^{(M_{AB} + iN_{AB})T - 1}}{M_{AB} + iN_{AB}} \right)^* \left(\frac{e^{(M_{BC} + iN_{BC})T - 1}}{M_{BC} + iN_{BC}} \right) \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{e^{(M_{AC} + iN_{AC})T - 1}}{M_{AC} + iN_{AC}} \right)^* \left(\frac{e^{(M_{AB} + iN_{AB})T - 1}}{M_{AB} + iN_{AB}} \right) + \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{e^{(M_{AC} + iN_{AC})T - 1}}{M_{AC} + iN_{AC}} \right)^* \left(\frac{e^{(M_{BC} + iN_{BC})T - 1}}{M_{BC} + iN_{BC}} \right) \right]$$

Sabiendo que en el límite $k_0 R = k_0 (R_A - R_B) \rightarrow 0$ el elemento de matriz del potencial es $V_A^{if*} V_B^{if} = \frac{P^2}{\pi^2} |\mu(A)|^2 \lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\sin kR}{R}$, Ecuación (A.79), entonces se integra⁵ con respecto a

⁴El resultado de la integración puede encontrarse en las ecuaciones (A.90) y (A.86) en el Anexo

⁵El resultado de la integración puede encontrarse en las ecuaciones (A.90) y (A.86) en el Anexo

todas las posibles energías del fotón, k , y se halla:

$$\beta = \frac{P^2 |\mu|^2}{\pi c} \left[e^{(-\Gamma_0 - 2\Gamma_{AB})T} ((K_{AB}^+)^3 + (K_{AB}^-)^3) + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_{AB} - \Gamma_{BC} + i(\Omega_{AB} - \Omega_{BC}))T} ((K_{AB}^+)^3 + (K_{BC}^-)^3) \right. \\ \left. + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_{AB} - \Gamma_{AC} + i(\Omega_{AC} - \Omega_{AB}))T} ((K_{AC}^+)^3 + (K_{AB}^-)^3) + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_{AC} - \Gamma_{BC} + i(\Omega_{AC} - \Omega_{BC}))T} ((K_{AC}^+)^3 + (K_{BC}^-)^3) \right] \\ \text{con } P^2 = \left(\frac{\hbar c}{2\varepsilon_0} \right).$$

Cuando se suma con su término complejo conjugado, $B^* = V_B^{if*} V_A^{if} (\text{Coef.}B)^* (\text{Coef.}A)$, se obtiene:

$$\beta + \beta^* = \frac{2P^2 |\mu|^2}{\pi c} \left[2e^{(-\Gamma_0 - 2\Gamma_{AB})T} (K_{AB})^3 + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_{AB} - \Gamma_{BC})} \cos((\Omega_{AB} - \Omega_{BC})T) ((K_{AB})^3 + (K_{BC})^3) \right. \\ \left. + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_{AB} - \Gamma_{AC})} \cos((\Omega_{AC} - \Omega_{AB})T) ((K_{AC})^3 + (K_{AB})^3) \right. \\ \left. + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_{AC} - \Gamma_{BC})} \cos((\Omega_{AC} - \Omega_{BC})T) ((K_{AC})^3 + (K_{BC})^3) \right]$$

Como los tres átomos son idénticos entonces su momento dipolar es idéntico: $|\mu(A)|^2 = |\mu(B)|^2 = |\mu(C)|^2 = |\mu|^2$. La integración de los seis términos cruzados da como resultado:

$$\frac{\partial}{\partial T} \sum_{\substack{m,j=A,B,C \\ m \neq j}} V_m^{if*} V_j^{if} (\text{Coef.}m)^* (\text{Coef.}j) = \frac{2P^2 |\mu|^2}{\pi c} \sum_{x,y,z=AB,AC,BC} \left[2e^{(-\Gamma_0 - 2\Gamma_x)T} (K_x)^3 + \right. \\ \left. e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_x - \Gamma_z)} \cos((\Omega_x - \Omega_z)T) ((K_x)^3 + (K_z)^3) \right. \\ \left. + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_x - \Gamma_y)} \cos((\Omega_y - \Omega_x)T) ((K_y)^3 + (K_x)^3) \right. \\ \left. + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_y - \Gamma_z)} \cos((\Omega_y - \Omega_z)T) ((K_y)^3 + (K_z)^3) \right]$$

En el cálculo de los términos cruzados se ha tomado el límite ‘near field’ $k_0 R \lll 0$, es decir, considerar que la distancia entre los átomos es muy pequeña con respecto a la longitud de onda del GAP λ_0 . En estas condiciones se produce la superradiancia, porque si la cadena tuviera mayor longitud que la longitud de onda los átomos en los extremos no interactuarían instantáneamente con el resto y aparecerían más términos que tendrían en cuenta las condiciones radiativas.

Entonces Γ es:

$$\Gamma = \frac{1}{\hbar^2 12} \sum_{x,y,z=AB,AC,BC} \left[2e^{(-\Gamma_0 - 2\Gamma_x)T} ((K_x^+)^3 + (K_x^-)^3) \right] \quad (2.46)$$

$$+ e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_x - \Gamma_y + i(\Omega_x - \Omega_y))T} ((K_y^+)^3 + (K_x^-)^3) + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_x - \Gamma_y - i(\Omega_y - \Omega_x))T} ((K_x^+)^3 + (K_y^-)^3) \quad (2.47)$$

$$+ e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_x - \Gamma_y + i(\Omega_x - \Omega_y))T} ((K_x^+)^3 + (K_y^-)^3) \quad (2.48)$$

$$+ e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_x - \Gamma_z + i(\Omega_z - \Omega_x))T} ((K_z^+)^3 + (K_x^-)^3) + e^{(-\Gamma_0 - \Gamma_z - \Gamma_y + i(\Omega_z - \Omega_y))T} ((K_z^+)^3 + (K_y^-)^3) \quad (2.49)$$

Ahora se halla el límite no markoviano, es decir, vamos a suponer que el fotón real se mide muy pronto, casi sin dejar evolucionar al estado inicial $|\frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle$. Por lo cual se puede tomar el límite $\Gamma_{0/AB/AC/BC} T \lll 1$, expandiendo $e^{-\Gamma_{0/AB/AC/BC} T} \sim 1$. Además, se puede despreciar la parte imaginaria de las frecuencias (2.34), (2.35) de tal manera que:

$$(K_{AB/AC/BC}^-)^3 = (K_{AB/AC/BC}^+)^3 = K_{AB/AC/BC} = \frac{\omega_0 + \Omega_{AB/BC/AC}}{c} \quad (2.50)$$

Tasa de desexcitación si los tres átomos están equiespaciados:

Como las distancias interatómicas R_{AB} y R_{BC} son iguales, entonces $\Omega_{eq} = \Omega_{AB} = \Omega_{BC} \neq \Omega_{AC}$ y por lo tanto $K_{eq} = K_{AB} = K_{BC} \neq K_{AC}$. Aplicando esta aproximación al término cuadrado γ , Ecuación (2.39):

$$\gamma = \frac{2 P^2 |\mu(A)|^2}{\pi c} [(K_{eq})^3 + (K_{AC})^3] \quad (2.51)$$

$$+ \cos((\Omega_{AB} - \Omega_{AC})T) ((K_{eq})^3 + (K_{AC})^3) \quad (2.52)$$

Tomando el promedio temporal:

$$\gamma = \frac{2 P^2 |\mu(A)|^2}{\pi c} [(K_{eq})^3 + (K_{AC})^3]$$

Por lo cual la suma de todos los términos cuadrados sería:

$$\frac{\partial}{\partial T} \sum_m |V_m^{if}|^2 (\text{Coef.}_m)^* (\text{Coef.}_m) = \frac{2 P^2 |\mu(A)|^2}{\pi c} [6 (K_{eq})^3 + 3 (K_{AC})^3]$$

Tomando las mismas aproximaciones y promedios temporales sobre los términos cruzados se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial T} \sum_{\substack{m,j=A,B,C \\ m \neq j}} V_m^{if*} V_j^{if} (\text{Coef.}_m)^* (\text{Coef.}_j) = \frac{2 P^2 |\mu|^2}{\pi c} [10 (K_{eq})^3 + 2 (K_{AC})^3]$$

Uniendo ambas contribuciones y sustituyendo el valor de las constantes, y suponiendo que el momento dipolar es isotrópico⁶ entonces:

$$\Gamma_{eq} = \frac{2 P^2 |\mu|^2}{3 \hbar^2 12 \pi c} [16 (K_{eq})^3 + 5 (K_{AC})^3] = \frac{|\mu|^2}{3 \pi \varepsilon_0 \hbar} \left[\frac{16}{12} (K_{eq})^3 + \frac{5}{12} (K_{AC})^3 \right] \quad (2.53)$$

donde $K_{eq} = \frac{\omega_0 + \Omega_{eq}}{c}$

Tasa de desexcitación si los tres átomos se disponen en forma de triángulo equilátero:

Entonces $\Omega_{tri} = \Omega_{AB} = \Omega_{BC} = \Omega_{AC}$ y por lo tanto $K_{AB} = K_{BC} = K_{AC} = K_{tri}$. Partiendo de la amplitud de probabilidad (2.31):

$$A_{if} = \frac{6}{i \hbar \sqrt{3} 2} \left(V_A^{if} \left(\frac{e^{(M(\omega)T)} - 1}{M(\omega)} \right) \right) \quad (2.54)$$

$$\Gamma = \frac{\partial}{\partial T} (|A_{if}|^2) = \frac{36}{\hbar^2 12} \left| V_A^{if} \left(\frac{e^{(M(\omega)T)} - 1}{M(\omega)} \right) \right|^2 = \frac{36}{\hbar^2 12} \gamma \quad (2.55)$$

Tomando la aproximación markoviana en la Ecuación (2.51):

$$\gamma = \frac{2 P^2 |\mu|^2}{\pi c} (K_{tri})^3$$

Sustituyendo y asumiendo que el momento dipolar es isotrópico:

$$\Gamma_{tri} = \frac{|\mu|^2}{3 \pi \varepsilon_0 \hbar} 3 K_{tri}^3 \quad (2.56)$$

con $K_{tri} = \frac{\omega_0 + \Omega_{tri}}{c}$

⁶Si $\mu' = (\frac{\mu_x}{\sqrt{3}}, \frac{\mu_y}{\sqrt{3}}, \frac{\mu_z}{\sqrt{3}})$ entonces $|\mu'|^2 = \frac{|\mu|^2}{3}$

2.5. Resultados: tasa de decaimiento para un sistema triatómico

1.- Resultado para un gas de Dicke:

La tasa de decaimiento del estado $|\frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle]$ en un gas triatómico se obtiene sustituyendo sus números cuánticos en la Ecuación (2.12):

$$\boxed{\Gamma_{Dicke} = 3\Gamma_0} \quad (2.57)$$

donde $\Gamma_0 = \frac{k_0^3 \mu^2}{3\hbar \epsilon_0 \pi}$ siendo k_0 el vector de onda del GAP.

2.- Resultado para la red de Zoubia y Ritsch:

La tasa de decaimiento del estado superradiante $|E_1\rangle = \frac{1}{2} [|100\rangle + |001\rangle] + \frac{\sqrt{2}}{2} |010\rangle$ para un sistema con 3 átomos, Ecuación (2.17), es:

$$\boxed{\Gamma_1 = \frac{\mu^2 E_1^3}{3\pi \epsilon_0 \hbar^4 c^3} \left(\frac{1}{2}\right) \cot^2\left(\frac{\pi}{8}\right) \sim 2,91 \frac{\mu^2 E_1^3}{3\pi \epsilon_0 \hbar^4 c^3}} \quad (2.58)$$

donde $E_1 = E_A + \sqrt{2}J$. En términos del vector de onda correspondiente con la energía $E_1 = \hbar c k_1$:

$$\boxed{\Gamma_1 \sim 2,91 \frac{\mu^2 k_1^3}{3\pi \epsilon_0 \hbar}} \quad (2.59)$$

3.- Resultados del sistema triatómico propuesto:

El estado inicial es $|\frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle]$. Su la tasa de decaimiento para la red triatómica donde los átomos estén equiespaciados, Ecuación 2.53, es:

$$\boxed{\Gamma_{eq} = \frac{|\mu|^2}{3\pi \epsilon_0 \hbar} \left[\frac{16}{12} (K_{eq})^3 + \frac{5}{12} (K_{AC})^3 \right]} \quad (2.60)$$

donde $K_{eq} = \frac{\omega_0 + \Omega_{eq}}{c} = k_0 + \frac{\omega_0^2 \mu \cdot [\text{ReG}(k_0 R_{AB/BC})] \cdot \mu}{e^2 c^2}$.

En disposición de triángulo equilátero su tasa de decaimiento viene dada por la Ecuación (2.56):

$$\boxed{\Gamma_{tri} = \frac{\mu^2}{3\pi \epsilon_0 \hbar} 3K_{tri}^3} \quad (2.61)$$

donde $K_{tri} = \frac{\omega_0 + \Omega_{tri}}{c} = k_0 + \frac{\omega_0^2 \mu \cdot [\text{ReG}(k_0 R_{AB/BC/AC})] \cdot \mu}{e^2 c^2}$

3. Computación cuántica

Desde los años 80 la computación cuántica mezcla las tecnologías de la información con los principios de la mecánica cuántica para llevar a cabo cálculos y procesamientos de datos. Si los ordenadores clásicos utilizan bits para almacenar la información los ordenadores cuánticos utilizan qubits, que son unidades de información cuántica.

Un ordenador cuántico aprovecha los fenómenos cuánticos como la superposición y el entrelazamiento para realizar cálculos de manera paralela y resolver algunos problemas más eficientemente en comparación con los ordenadores clásicos. La superposición permite que un qubit exista en múltiples estados al mismo tiempo y el entrelazamiento permite que los qubits estén correlacionados entre sí, incluso cuando se encuentran separados espacialmente.

3.1. Qubits y puertas cuánticas

¿Qué es un qubit?

Un bit clásico tiene dos estados posibles, 0 o 1. Un qubit, denominado $|\phi\rangle$, puede estar en cualquier combinación lineal de los vectores de la base computacional: $|0\rangle$ y $|1\rangle$.

$$\begin{aligned} \text{Base computacional: } & |0\rangle, |1\rangle; \\ |\psi\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \end{aligned}$$

donde α y β son números complejos que obedecen la condición de normalización $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Hasta que no se mida, y por lo cual colapse, el estado $|\phi\rangle$ puede estar en cualquier superposición de los estados base. El resultado de la medida es probabilístico. Que el resultado sea $|0\rangle$ tiene probabilidad $|\alpha|^2$ y que el resultado sea $|1\rangle$ tiene probabilidad $|\beta|^2$.

Un qubit puede ser un ión atrapado, un fotón, un átomo artificial (transmon) o un átomo real. En el caso de los átomos reales, la mayor dificultad para operar con ellos es su necesidad de operar a muy bajas temperaturas.

Sistemas de varios qubits

Para describir el estado de un sistema con dos partículas se debe hacer el producto tensorial de su espacio de estados. Por ejemplo, la base computacional de un sistema con dos qubits tiene 4 kets y la descripción de un estado genérico es:

$$\begin{aligned} \text{Base computacional: } & |\text{qubit 1, qubit 2}\rangle = |00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle; \\ |\phi\rangle &= \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle \end{aligned}$$

donde α son coeficientes. Por ejemplo, la probabilidad de obtener el estado $|00\rangle$ sería $|\alpha_{00}|^2$. En general, para un sistema de N qubits, la base que describe el sistema tiene dimensión 2^N . Un ordenador cuántico es capaz de operar con todas las superposiciones coherentes de los vectores de la base.

Puertas cuánticas

Análogamente a las puertas lógicas clásicas, en computación cuántica las operaciones se realizan mediante puertas cuánticas. Formalmente, son matrices unitarias y su principal ventaja es que son de actuación reversible, por lo cual no se pierde información al aplicarlas sobre el sistema.

Por ejemplo, la puerta clásica NOT, que invierte el estado del bit sobre el que es aplicado, se corresponde con la puerta cuántica X, descrita por la matriz:

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Suponiendo que el estado inicial sea $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, el resultado de la operación es:

$$X|\psi\rangle = \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle.$$

Por lo cual, se han intercambiado los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$; exactamente el mismo efecto que una puerta NOT. Experimentalmente, esta operación se corresponde con aplicar un átomo, calificado como qubit, el operador del momento angular en el eje X.

Las puertas cuánticas más prácticas son el trío de matrices de Pauli, las puertas X, Y, Z. Actúan como puerta NOT, puerta NOT invirtiendo la fase y puerta inversora de fase, respectivamente.

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.62)$$

También se usan con frecuencia la puerta de Hadamar, H, y la puerta S^\dagger :

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad S^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}.$$

3.2. Algoritmo variacional

En química computacional se utiliza el método variacional para encontrar la energía del estado fundamental de moléculas cuando no se conoce la función de onda de dicho estado fundamental.

Sea H el hamiltoniano de un sistema, como por ejemplo una molécula H_2 . Si es hermítico se puede expresar como[14]:

$$H = \sum_{i=1}^N \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|,$$

donde λ_i son sus valores propios y $|\psi_i\rangle$ sus vectores propios. Los vectores propios forman una base ortonormal ordenada ascendentemente según el valor de sus autovectores. El estado fundamental es $H|\psi_0\rangle = \lambda_0|\psi_0\rangle$. El valor esperado de H sobre un estado arbitrario $|\psi\rangle$ es la energía de dicho estado:

$$\langle H \rangle_\psi \equiv \langle \psi | H | \psi \rangle.$$

Expresando esta cantidad en función de los estados y valores propios de H :

$$\begin{aligned}\langle H \rangle_\psi &= \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) | \psi \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \lambda_i \langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \lambda_i |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2.\end{aligned}$$

Esta última ecuación demuestra que el valor esperado de H en un estado arbitrario se puede expresar como una combinación lineal de los valores propios multiplicados por ciertos pesos $|\langle \psi_i | \psi \rangle|^2$ que indican cómo de parecidos son el estado arbitrario y el vector propio correspondiente. En concreto, si el vector arbitrario fuera el vector propio del estado fundamental, es decir $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$, entonces:

$$\langle H \rangle_{\psi_0} = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = \lambda_0.$$

Para cualquier otro estado sabemos que su energía tendrá que ser mayor, por lo cual λ_0 es una cota inferior de energía del sistema:

$$\lambda_0 \leq \langle H \rangle_\psi = \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \lambda_i |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2. \quad (3.63)$$

La Ecuación (3.63) es la base del método variacional: primero se propone un estado inicial $|\psi(\bar{\theta})\rangle$, llamado *ansatz*, que sea parecido a $|\psi_0\rangle$, donde los parámetros permiten variar el *ansatz* de manera sistemática. Después se calcula su valor esperado $\langle H \rangle_{\psi(\bar{\theta})}$. Un optimizador se encarga de actualizar los parámetros $\bar{\theta}$ de tal manera que el valor esperado vaya tomando valores progresivamente menores hasta que o bien se alcance λ_0 o bien se alcance un criterio de parada, por ejemplo que $|\langle \psi_0 | \psi(\bar{\theta}) \rangle|^2$ sea muy pequeño.

Este algoritmo es menos eficiente cuanto más compleja es la molécula que se simula porque el espacio de estados de orbitales moleculares crece exponencialmente y por ello aumentan tanto el tamaño de la matriz del hamiltoniano como la cantidad de información necesaria para describir el *ansatz*. Para solventar este problema A. Peruzzo[12] propuso el Algoritmo Cuántico Variacional (en inglés *VQE algorithm*).

Algoritmo Cuántico Variacional (VQE algorithm)

Es un algoritmo híbrido entre un ordenador clásico y uno cuántico que utiliza el método variacional para calcular la energía del estado fundamental de un sistema molecular. Funciona de manera similar a su homólogo clásico: Primero se construye un circuito parametrizable que prepare el *ansatz* y mida el valor esperado del hamiltoniano en dicho estado. Después un optimizador clásico actualiza los parámetros con los que se genera un nuevo estado de prueba. Este proceso se itera hasta conseguir encontrar el valor mínimo de la energía.

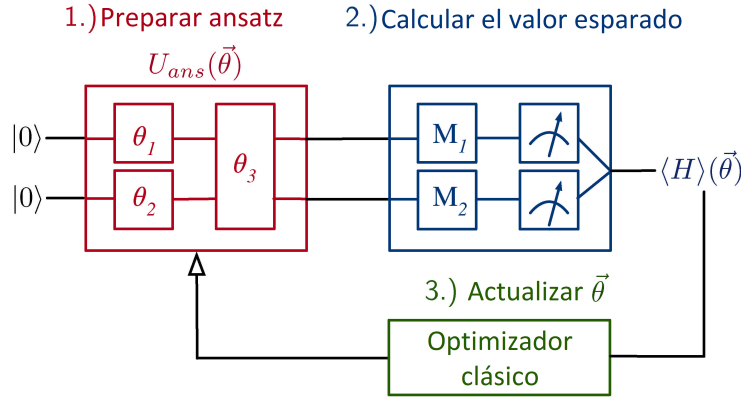


Figura 10: Esquema del funcionamiento del algoritmo VQE [13].

A continuación se describen las partes más importantes:

1. **Circuito que mide el valor esperado del hamiltoniano:** Primero se debe traducir el problema físico para poder ser interpretado por un ordenador cuántico. Para ello el hamiltoniano debe estar expresado como una serie de puertas cuánticas que actúen sobre los qubits en la base computacional, lo cual se puede hacer de varias maneras siendo las más comunes Jordan-Wigner y Bravyi-Kitaev[9].
2. **Circuito que genera el ansatz:** Debe ser un circuito parametrizado que sea capaz de generar el subespacio donde se encuentre el estado solución. Por el principio variacional, (3.63), se sabe que:

$$\frac{\langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle}{\langle \psi(\vec{\theta}) | \psi(\vec{\theta}) \rangle} \geq \lambda_0$$

El objetivo es variar el conjunto de parámetros hasta que el vector tenga una energía parecida a λ_0 .

Un buen ansatz debe generar el subespacio solución y además usar el circuito más sencillo con el menor número de parámetros posible. Los dos tipos de ansatz más comunes son los inspirados en el problema físico, pero no necesariamente eficientes; y los hechos para aprovechar eficientemente los recursos del hardware, si bien no pueden adaptarse a las características particulares del problema.

3. **Optimizador:** Es la única parte clásica del algoritmo. En cada iteración, el optimizador propone sets de parámetros para el ansatz para obtener una nuevo valor de la energía. Un buen optimizador debe obtener el valor más exacto posible con el menor número de iteraciones.

En teoría, los algoritmos variacionales cuánticos prometen superar las limitaciones de los algoritmos clásicos debido a que no almacenan los estados intermedios durante la ejecución de los circuitos cuánticos y por lo tanto alivian parte de la carga computacional derivada de generar el ansatz y calcular su energía. En la práctica todavía no se ha podido simular moléculas más eficientemente que con algoritmos clásicos debido a las limitaciones del hardware.

3.3. Valor esperado de la energía

El objetivo es calcular el valor esperado del estado fundamental de la cadena lineal descrita por Zoubia y Ritsch [6] con 5 átomos idénticos utilizando el algoritmo cuántico variacional. Se ha elegido este modelo frente a los otros dos estudiados por ser fácilmente implementable en un ordenador cuántico. El algoritmo se programa en *Qiskit*, un software de código libre creado para trabajar con ordenadores cuánticos.

Aunque con este espacio de estados tan pequeño, la base de estados tendría dimensión 2^5 , no sería necesario calcular la energía mediante un algoritmo variacional, pues podría simplemente diagonalizarse el hamiltoniano por métodos algebraicos. No obstante, por la naturaleza del sistema se ha empleado la variante cuántica del algoritmo variacional para analizar si es una herramienta útil en el estudio de este tipo de sistemas y corregir sus fallos de cara a implementarse eficientemente en sistemas más complicados.

La base de estados inicial en el subespacio de una excitación es: $|10000\rangle, |01000\rangle, |00100\rangle, |00010\rangle, |00001\rangle$. Como se ha explicado en la subsección 2.3, aparecen modos colectivos. En la siguiente Tabla vienen escritos:

Energía	Estado	Vector propio
$E_1 = E_A + \sqrt{3} J$	Superradiante	$ E_1\rangle : \frac{\sqrt{3}}{6} 10000\rangle + \frac{1}{2} 01000\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} 00100\rangle + \frac{1}{2} 00010\rangle + \frac{\sqrt{3}}{6} 00001\rangle$
$E_2 = E_A + J$	No radiante	$ E_2\rangle : \frac{1}{2} [- 10000\rangle + - 01000\rangle + 00010\rangle + 00001\rangle]$
$E_3 = E_A$	Radiante	$ E_3\rangle : \frac{1}{\sqrt{3}} [- 10000\rangle + 00100\rangle - 00001\rangle]$
$E_4 = E_A - J$	No radiante	$ E_4\rangle : \frac{1}{2} [- 10000\rangle + 01000\rangle - 00010\rangle + 00001\rangle]$
$E_5 = E_A - \sqrt{3} J$	Radiante	$ E_5\rangle : -\frac{\sqrt{3}}{6} 10000\rangle + \frac{1}{2} 01000\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} 00100\rangle + \frac{1}{2} 00010\rangle - \frac{\sqrt{3}}{6} 00001\rangle$

Tabla 4: Energía, vectores y caracter radiante de los modos colectivos del sistema $N = 5$. Los vectores propios se han hallado diagonalizando numéricamente la matriz del hamiltoniano.

3.3.1. Conversión del hamiltoniano a qubits

Para poder ser interpretado por un ordenador cuántico el hamiltoniano debe transformarse de estados atómicos y operadores a qubits sobre los que actúan puertas cuánticas. Hay distintas maneras de codificar los qubits y de expresar los operadores aniquilación y creación como puertas cuánticas. Por simplicidad, en este trabajo se ha elegido la codificación de Jordan-Wigner .

Cada qubit se codifica como si fuera un átomo. El estado qubit $|0\rangle$ corresponde con un átomo en estado fundamental y el estado qubit $|1\rangle$ con un átomo en estado excitado. Un sistema de 5 átomos se transforma en un sistema con 5 qubits.

Los operadores B_n^\dagger y B_n se expresan como [9]:

$$B_n^\dagger = \frac{1}{2}(X_n - iY_n) \quad (3.64)$$

$$B_n = \frac{1}{2}(X_n + iY_n). \quad (3.65)$$

Otras codificaciones son más eficientes y precisan de menos operadores para traducir los operadores creación y aniquilación. Por ejemplo la codificación Bravyi-Kitaev asigna los estados qubit $|0\rangle, |1\rangle$

según si la cantidad de orbitales ocupados en un cierto estado es par o impar, consecuentemente cambiando la descripción de los operadores. Como este sistema solo considera átomos de dos niveles, la cantidad total de orbitales no es muy grande y la elección de Jordan-Wigner frente a otras codificaciones no afecta significativamente al rendimiento del programa.

Usando los operadores (3.64) y (3.65) el hamiltoniano (2.13) se reescribe como:

$$H_{ex} = \sum_n E_A \frac{1}{4}(X_n^2 + Y_n^2) + \sum_{nm} J \frac{1}{4}(X_n - iY_n)(X_m + iY_m)$$

Tomando las matrices que dan la acción de los operadores en la base computacional, Ecuación (3.62), se demuestra que $X_n^2 = Y_n^2 = I$.

Para el sumando en J , en la multiplicación de los operadores $(X_n - iY_n)(X_m + iY_m) = X_n X_m + Y_n Y_m - iY_n X_m + iX_n Y_m$ los términos imaginarios se cancelan por simetría.

El hamiltoniano (2.13) expresado en la manera de Jordan-Wigner es:

$$H_{ex} = \sum_n \frac{E_A}{2} I_n + \sum_{nm} J \frac{1}{4} (X_n X_m + Y_n Y_m) \quad (3.66)$$

Los hamiltonianos (2.13) o el (3.66) son equivalentes excepto por un factor $\frac{1}{2}$. Por ejemplo, para el estado $|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|01\rangle + |10\rangle]$ el valor esperado es:

$$\begin{aligned} \text{Usando (2.13): } \langle \chi | H_{ex} | \chi \rangle &= \frac{E_A}{2} (\langle 10 | a_1^\dagger a_1 | 10 \rangle + \langle 01 | a_2^\dagger a_2 | 01 \rangle) + \frac{J}{2} (\langle 10 | a_1^\dagger a_2 | 01 \rangle + \langle 01 | a_2^\dagger a_1 | 10 \rangle) = \\ &= \frac{E_A}{2}(2) + \frac{J}{2}(2) = E_A + J \end{aligned}$$

Usando (3.66) y descomponiendo los operadores X e Y en sus proyectores:

$$\begin{aligned} \langle \chi | H_{ex} | \chi \rangle &= \frac{E_A}{4} (\langle 01 | 01 \rangle + \langle 10 | 10 \rangle) \\ &+ \frac{J}{8} (\langle 1 | X_1 | 0 \rangle \langle 0 | X_2 | 1 \rangle + \langle 0 | X_1 | 1 \rangle \langle 1 | X_2 | 0 \rangle \\ &+ \langle 1 | Y_1 | 0 \rangle \langle 0 | Y_2 | 1 \rangle + \langle 0 | Y_1 | 1 \rangle \langle 1 | Y_2 | 0 \rangle) = \frac{E_A}{2} + \frac{J}{2} \end{aligned}$$

3.3.2. Elección del ansatz

Se han elegido dos ansatz en función de su eficiencia y del subespacio de estados generado. En ambos casos se sabe que el ansatz contiene al subespacio de excitación única de tal manera que puede formar el estado E_1 , descrito en (3.3).

Hardware efficient: EfficientSU2 Este ansatz está diseñado para contener cualquier estado solución utilizando los menos parámetros y puertas posibles. El circuito consiste en rotaciones alrededor de los 3 ejes intercaladas con puertas CX que entrelazan los qubits. Como genera todos los kets posibles del espacio de estados de n qubits, contiene la solución.

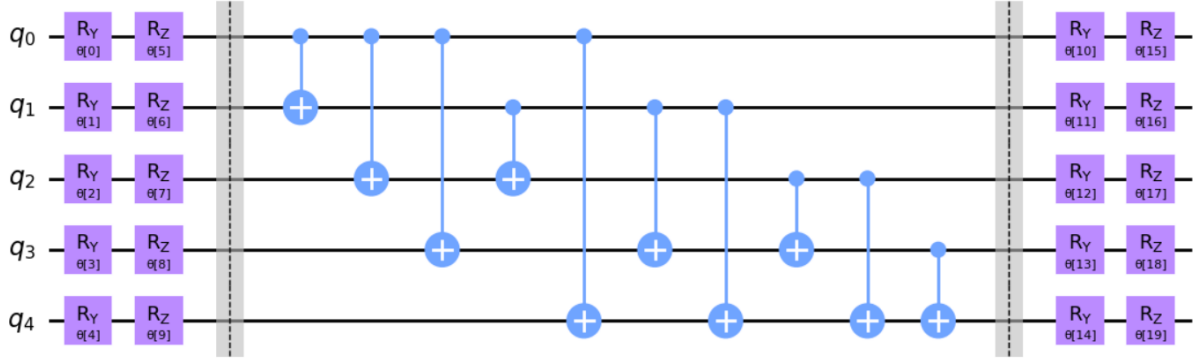


Figura 11: Circuito parametrizable SU2 para 5 qubits con 1 bloque del conjunto de puertas CX. En total tiene 30 puertas lógicas

$$\begin{aligned}
 & (-0.5273798716 - 0.4705861898i)|00000\rangle + (0.0054517921 - 0.2225852083i)|00001\rangle + (-0.0192904305 - 0.0923402849i)|00010\rangle + (0.0690076542 - 0.0635229695i)|00011\rangle \\
 & + (-0.0616521515 - 0.0620087531i)|00100\rangle + (0.0020432969 - 0.0258251125i)|00101\rangle + \dots + (-0.0083949062 + 0.0086179478i)|11011\rangle + (0.0056704884 - 0.2112375317i)|11100\rangle \\
 & + (0.0210287717 - 0.0205299929i)|11101\rangle + (0.0468138278 + 0.0220658144i)|11110\rangle + (0.2809722128 + 0.0016500079i)|11111\rangle
 \end{aligned}$$

Figura 12: Evolución del ket $|00000\rangle$ por el ansatz EfficientSU2 para parámetros iniciales aleatorios.

Problem motivated: ExcitationPreserving Este ansatz está diseñado para conservar la cantidad de estados $|00\rangle$, $|01\rangle + |10\rangle$ y $|11\rangle$. El circuito consiste de rotaciones respecto al eje Z intercaladas con entrelazamientos de 2 en 2 qubits.

Este ansatz se ha elegido pensando en la solución al problema pues si es aplicado después de una puerta X (que genera una excitación en un qubit) el estado subsiguiente pertenece al subespacio creado por los kets $|10000\rangle$, $|01000\rangle$, $|00100\rangle$, $|00010\rangle$, $|00001\rangle$.

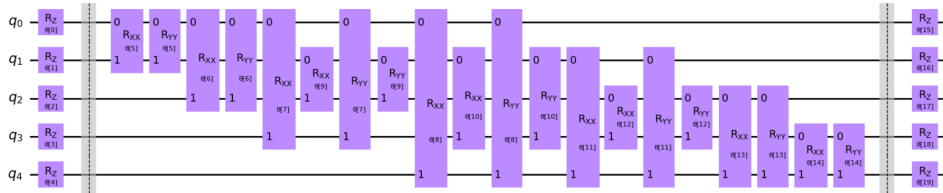


Figura 13: Circuito parametrizable ExcitationPreserving para 5 qubits con entrelazamiento entre todos ellos. En total tiene 30 puertas lógicas.

$$\begin{aligned}
 & (0.2424676241 - 0.8988973222i)|00001\rangle + (-0.2190650729 + 0.0780557237i)|00010\rangle + (-0.0457303603 + 0.2419490432i)|00100\rangle + (0.1020843255 - 0.0710901211i)|01000\rangle \\
 & + (-0.006141134 - 0.0544749475i)|10000\rangle
 \end{aligned}$$

Figura 14: Evolución del ket $|10000\rangle$ por el ansatz ExcitationPreserving para parámetros iniciales aleatorios.

3.3.3. Elección del optimizador:

Para actualizar los parámetros del ansatz, los optimizadores comparan los valores de la función energía calculados a partir de varios conjuntos paramétricos iniciales y devuelven aquel conjunto que resulte dar el valor más bajo. Para saber en qué dirección del espacio de estados descienden los valores de la función los optimizadores pueden evaluarla de manera local o de manera global. Si se

evalúa de manera local, llamados ‘métodos de gradiente’ porque se calcula la derivada de la función objetivo, la optimización es más rápida pero puede dar lugar a que se atasque en mínimos locales. Si se evalúa de manera global, métodos ‘sin gradiente’, se tarda más pero la solución tendrá más posibilidades de ser un mínimo global. El proceso de optimización termina cuando las variaciones en el valor de la función objetivo cambian muy poco entre iteración e iteración.

En este trabajo se ha elegido el optimizador global COBYLA. Este algoritmo obtiene soluciones de la función a base de algoritmos lineales y luego las compara con los valores de la función inicial para ver la dirección del descenso y obtener el siguiente conjunto de parámetros.

3.4. Valor esperado de la energía del estado fundamental para N=5

Se ha elegido simular un sistema con 5 qubits tanto por tener un espacio de estados lo suficientemente grande, 2^5 , para ser interesante aplicar el cálculo variacional como por las limitaciones del hardware accesible, pues la mayoría de los ordenadores cuánticos de IBM tienen como máximo 5 qubits.

Se calcula el valor esperado de la energía del estado fundamental para un sistema donde el GAP es 1eV, la distancia interatómica 1000Å, el momento dipolar atómico es $\mu = 1e\text{Å}$ y forma con la red un ángulo de 45° . En estas condiciones el valor de la constante de acoplo dipolar J , Ecuación (2.14), es $J = -7,2 * 10^{-09} eV$, nueve veces menor en orden de magnitud que E_A . El programa calcula el valor esperado de la constante J , pues como se puede verse en el hamiltoniano convertido a qubits (3.66), la energía E_A es una constante. Se toma como referencia energía básica e-11eV, de tal manera que $J = -720 * 10^{-11} eV$. De esta manera el GAP entre valores propios de energía tiene una magnitud lo suficientemente grande para poder ser evaluado correctamente por el programa. Los resultados del programa se comparan con la energía del estado fundamental calculada teóricamente. Como se puede consultar en la Tabla 4, la energía del estado fundamental es $E_1 = E_A + \sqrt{3} J$, el cual resulta ser el estado superradiante. Tomando $E_A = 0$ el valor de la energía es:

$$\sqrt{3} J = -1247,05 * 10^{-11} eV \quad (3.67)$$

Se ha ejecutado el algoritmo variacional cuántico con los dos ansatz, ExcitationPreserving y EfficientSU, con dos simuladores, uno ideal y uno con ruido. El simulador real tiene en cuenta la naturaleza estadística del proceso de medida de los qubit pero no considera otros posibles errores asociados al proceso de medida, como la decoherencia de los qubits o errores específicos de cada puerta, entre muchos otros. Para obtener un comportamiento más realista se ejecuta el algoritmo con un simulador que imita el comportamiento de un ordenador cuántico real, manejado por IBM, con bastante precisión. El comportamiento esperable es que la medida sea más inexacta conforme aumenta el número de puertas que forman la rutina, pues a cada iteración se acumularán más errores.

Por último, se mide la fidelidad del estado obtenido. Al finalizar el proceso iterativo el optimizador devuelve el conjunto de parámetros que ha producido el último valor de la función energía. Si se introducen estos parámetros en el ansatz, se debería obtener un estado similar a

$$|E_1\rangle : \frac{\sqrt{3}}{6} |10000\rangle + \frac{1}{2} |01000\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |00100\rangle + \frac{1}{2} |00010\rangle + \frac{\sqrt{3}}{6} |00001\rangle .$$

La fidelidad evalúa cuánto se parecen, siendo idénticos cuando es 100 % .

A continuación se introdujo en el programa con simulador ruidoso la matriz de calibración del ordenador IBM-Belem. La matriz de calibración se calcula enviando al ordenador cuántico los estados de la base, haciendo que los mida y contabilizando cuántas veces devuelve el estado esperado y cuántas veces devuelve el resultado de otro estado. Aplicando este filtro cuando se ejecuta el programa se mitiga parte del ruido sistemático asociado a la medida.

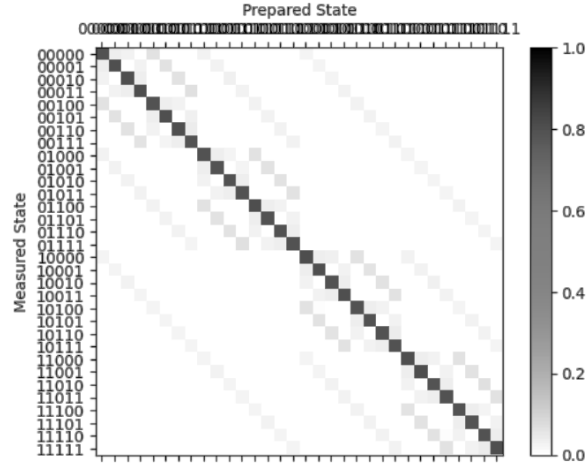


Figura 15: Matriz de calibración en el ordenador cuántico IBM-Belem para los 2^5 vectores de la base de 5 qubits. Por las características de nuestro problema, solo son relevantes los vectores del subespacio de una excitación. Lo deseable es que solo haya elementos diagonales, pues los elementos fuera de la diagonales indican errores sistemáticos del ordenador.

OPTIMIZADOR	COBYLA					
ANSATZ	ExcitationPreserving				Con matriz de calibración	
Simulador	Aer Simulator		Simulador	IBM-Belem	Simulador	IBM-Belem
Número parámetros	30		Número parámetros	30	Número parámetros	30
Número puertas	30		Número puertas	30	Número puertas	30
J	-1202 eV 10^{-11}		J	-249 eV 10^{-11}	J	-375 eV 10^{-11}
Error relativo	4 %		Error relativo	80 %	Error relativo	70 %
Fidelidad	93 %		Fidelidad	66 %	Fidelidad	92 %
ANSATZ	Efficient SU2					
Simulador	Aer Simulator		Simulador	IBM-Belem		
Número parámetros	20		Número parámetros	20		
Número puertas	30		Número puertas	30		
J	-1612 eV 10^{-11}		J	-1149 eV 10^{-11}		
Error relativo	29 %		Error relativo	8 %		
Fidelidad	5 %		Fidelidad	4 %		

Figura 16: Resultados del algoritmo VQE con el optimizador COBYLA y los ansatz ExcitationPreserving y EfficientSU2.

El error relativo se calcula comparando el resultado de la energía del optimizador frente al valor teórico (3.67).

4. Conclusiones

Al comparar los resultados, subsección 2.5, de la tasa de decaimiento calculada en los tres sistemas estudiados: gas de Dicke, el modelo de red infinita de Zoubi y Ritsch y la red triatómica propuesta en la subsección 3.3; se halla que el resultado es prácticamente el mismo:

$$\frac{\Gamma_{tri}}{\Gamma_0} = 3 \frac{K^3}{k_0^3} = 3 \frac{(k_0 + \frac{\Omega_{AB/BC/AC}}{c})^3}{k_0^3}, \quad \frac{\Gamma_1}{\Gamma_0} \sim 2,91 \frac{(k_0 + \frac{\sqrt{2}J}{\hbar c})^3}{k_0^3}, \quad \frac{\Gamma_{Dicke}}{\Gamma_0} = 3 \quad (4.68)$$

Las tasas de decaimiento de los sistemas modelados, Γ_{tri} y Γ_1 , incluyen una corrección en la energía que Dicke desprecia, pues considera que el valor de dicha corrección es muy pequeño. Por ejemplo, para una cadena atómica cuya energía del GAP sea 1eV, y por lo cual su vector de onda asociado es $1\mu\text{m}$, y su distancia interatómica $a = 1000\text{\AA}$, el valor de la constante de interacción J es del orden de e-0.9eV. De hecho en el límite ‘near field’ ambas correcciones, $\frac{\Omega_{AB/BC/AC}}{c}$ y $\frac{\sqrt{2}J}{\hbar c}$, tienen el mismo orden de magnitud debido a tener la distancia interatómica elevada al cubo en sus denominadores:

$$J = \frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0 a^3} (1 - 3 \cos^2 \theta), \quad \Omega_{k_0 R} = \text{Re } G(k_0 R) \sim \frac{k_0 \cos(k_0 R)}{4\pi} \frac{\beta}{(k_0 R)^3} \quad (4.69)$$

donde a y R son la distancia interatómica de la red.

Por último, pese a que Γ_{tri} recupere el factor ‘3’ de Dicke, la tasa de desexcitación Γ_1 no es exactamente igual. Esto se explica porque el estado que se desexcita no es el mismo que el estado totalmente simétrico de Dicke:

$$\text{Estado inicial de Dicke y de la subsección 2.4: } \left| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle] \quad (4.70)$$

$$\text{Estado inicial subsección 2.3: } |E_1\rangle = \frac{1}{2} [|100\rangle + |001\rangle] + \frac{\sqrt{2}}{2} |010\rangle \quad (4.71)$$

Pese a estar formados por los mismos kets del subespacio de una excitación, $|100\rangle, |010\rangle, |001\rangle$; los pesos en cada uno de ellos son distintos. En (4.70) los tres kets contribuyen con el mismo peso mientras que en (4.71) el estado $|010\rangle$ contribuye con más peso. Esto es debido a la simetría y las condiciones de contorno tomadas en cada sistema.

En el caso del gas de Dicke y de la disposición en forma de triángulo del sistema de la subsección 2.4 se considera que las distancias interatómicas son todas iguales y por lo cual todos los átomos se comunican entre ellos. Pero en la red lineal Zoubi y Ritsch solo se considera interacción a primeros vecinos, por lo cual el primer átomo no puede comunicarse con el tercero. Por ello el peso del ket $|010\rangle$ es mayor.

En resumen, si tanto el sistema descrito en la subsección 2.4, con disposición triangular, como el de la subsección 3.3 reproducen el comportamiento superradiante de Dicke en una red lineal triatómica ¿por qué estudiar un sistema tan complejo como el de la subsección 2.4?

El motivo reside en la validez de las aproximaciones tomadas en sistema de Dicke y en el sistema de la subsección 3.3. Estos dos sistemas pueden utilizarse exclusivamente en el ‘near field’, es decir, cuando los átomos están muy juntos y $k_0 R \lll 1$. Las dimensiones máximas tanto del volumen del gas como de la longitud de la red son del orden de λ_0 , siendo en este último caso la distancia interatómica necesariamente menor que $0,1 \lambda_0$. Esto pone límite a la cantidad de átomos con los que

se quisiera diseñar una red de qubits u obligaría a hacer muy densas las redes atómicas, propiciando la aparición de otros efectos de interacción, como la transmisión de la interacción como fotones virtuales del sistema estudiado en 2.4 .

El cálculo efectuado en la subsección 2.4 busca una descripción del sistema más realista y general a todos los órdenes de radiación. Propone un sistema donde el estado inicial evolucione hasta emitir un tiempo después el fotón, es decir, propone un sistema con memoria, y por lo cual técnicamente la tasa de decaimiento, Ecuación (2.46), depende del tiempo; lo cual reproduce las condiciones del proceso de medida real. Además, en vez de haber tomado la aproximación de ‘near field’ podría haberse calculado la tasa de desexcitación cuando la longitud de la cadena superase λ_0 , ‘medium’ y ‘far field’, por lo que la tasa de desexcitación tendría correcciones radiativas. De hecho, aun tomando la aproximación de ‘near field’, la tasa de decaimiento calculada, Ecuación (2.46), pone de manifiesto que una red triatómica no es superradiante como dicta Dicke a no ser que se den condiciones de contorno específicas.

En cuanto al cálculo del valor esperado de la energía, los resultados de simulador ideal en la Figura 16 ponen de manifiesto que el ansatz que mejores resultados da es ExcitationPreserving, pues calcula el valor de la energía con un 4% de error. Aunque ambos ansatz tienen el mismo número de puertas cuánticas y continen el subespacio que genera la solución, como el hamiltoniano solo está definido para estados de excitación única y el ansatz Efficient SU2 genera todos los estados de la base, no es capaz de converger a un mínimo en dicho subespacio. Si bien al ejecutar el algoritmo y reducir el número de iteraciones sí se obtenía un resultado adecuado, pero sería una convergencia forzada.

Cuando se ejecuta el programa en un ordenador ruidoso se obtienen resultados bastante poco precisos, hasta con un 80% de error relativo. Incluso tras aplicar la matriz de calibración la supresión de los errores sistemáticos no mejora significativamente el resultado. Este comportamiento es esperable tanto por la cantidad de puertas que tienen los ansatz como por la construcción del programa.

Por una parte, cuanto más complejo sea el programa, más puertas tendrá y más errores se acumularán por la propia naturaleza cuántica de los qubits. El ansatz ExcitationPreserving demuestra ser un ansatz adecuado al problema pero poco eficiente en el uso de los recursos del hardware.

Por otra parte, para realizar medidas precisas en un ordenador cuántico se debe adaptar el programa a la arquitectura del ordenador, cosa que en este algoritmo no se ha tenido en cuenta y se ha elegido una transpilación genérica. Además, los ordenadores cuánticos son extremadamente sensibles a las condiciones del hardware. Desde la temperatura externa hasta el afinamiento de la longitud de onda de los láseres que miden el estado de los qubit añade ruido al resultado de la medida. Además de la matriz de calibración para los errores sistemáticos habría que tener en cuenta más efectos decoherentes, pero IBM no deja acceso a estos datos.

Por los motivos señalados con anterioridad, este algoritmo realiza el cálculo del valor esperado con un error asumible siempre y cuando se realice en un ordenador ideal. Por la cantidad de puertas de los ansatz, el resultado en un ordenador real es bastante impreciso. Para reducirlo posiblemente habría que calibrar todos los errores del hardware; tiempo de decoherencia, errores de reseteo..., y buscar un ansatz que fuera más eficiente, por ejemplo, el ansatz de nueva generación ADAPT-VQE [15].

En conclusión, motivado por el uso en computación cuántica de redes lineales multiatómicas actuando como qubits, se ha realizado un análisis comparativo y crítico de la presencia de fenómenos de desexcitación colectiva en dichos sistemas. No solo se han identificado y definido las condiciones

físicas del sistema; distancia interatómica, geometría y condiciones de contorno del sistema, sino que además se ha modelado el hamiltoniano de la red para ser interpretado por un ordenador cuántico con fin de poder calcular la energía del estado superradiante en una red pentatómica. A raíz de este estudio se concluye que las redes atómicas solo presentarán estados superradiantes siempre y cuando los láseres que exciten los átomos de la red generen estados parecidos al estado simétrico, y solo se recuperarán las condiciones de superradiancia de Dicke siempre y cuando la distancia interatómica entre los átomos sea la misma. Además, aunque los resultados del cálculo variacional solo hayan sido concluyentes en la simulación sin ruido, por las similitudes del hamiltoniano de este sistema con el hamiltoniano del modelo de Ising de materiales ferromagnéticos, los resultados de este trabajo podrían utilizarse en su estudio.

A. Anexo: Definiciones y fórmulas

Operador campo eléctrico evaluado en la posición del átomo i:

$$\mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_\alpha) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\frac{\hbar c k \varepsilon_0}{2V} \right)^{\frac{1}{2}} \{ \epsilon^{(\lambda)}(\mathbf{k}) a^{(\lambda)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\alpha} - \epsilon^{-(\lambda)}(\mathbf{k}) a^{\dagger(\lambda)}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_\alpha} \}. \quad (\text{A.72})$$

Dirección de propagación: \mathbf{k} , $\mathbf{k} = k_x + k_y + k_z$

El vector campo eléctrico es perpendicular a la dirección de propagación. El índice λ recorre los vectores λ_1 y λ_2 que forman el plano perpendicular a la dirección de propagación. Describen la polarización del campo.

Vector de polarización: $\epsilon^{(\lambda)}(\mathbf{k})$ y su complejo conjugado $\epsilon^{-(\lambda)}(\mathbf{k})$

Volumen del sistema: V

Propiedades del operador campo eléctrico:

Actúa sobre los estados propios del campo electromagnético $|n\rangle$ evaluado en la posición del átomo i .

$$\langle n \pm 1 | \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_i) | n \rangle = 1 \quad (\text{A.73})$$

Amplitud de probabilidad de transición entre dos estados, A_{if} , por teoría de perturbaciones a primer orden en imagen de Interacción:

$$A_{if} = \langle f | U_0(t, 0) | i \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t_f} d\tau U_0^f(\tau) V_{fi} U_0^i(\tau) \quad (\text{A.74})$$

$U_0^f(t') = U_0(t') |0, 1 : \mathbf{k}\epsilon\rangle$ Estado inicial: $i = |i\rangle$, Estado final: $f = |f\rangle$.

Operador evolución: $U(t, 0)$

Operador evolución ket final: $U_0^f(\tau) = \langle f | U_0(\tau)$

Operador evolución ket inicial: $U_0^i(\tau) = U_0(\tau) |i\rangle$

Elemento de matriz del potencial perturbativo: $V_{fi} = \langle f | V | i \rangle$

Operador evolución para los estados propios de (2.1): $U(t) |i\rangle = e^{-i\omega_i t/\hbar} |i\rangle$.

Elementos de matriz para el cálculo de la subsección 2.4:

$$V_A^{if} = \langle 000, \mathbf{k}\epsilon | V_A | 100, 0 \rangle = -\frac{1}{\varepsilon_0} \langle 0 | \boldsymbol{\mu}(A) | 1 \rangle \langle \mathbf{k}\epsilon | \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_A) | 0 \rangle = P \left(\frac{k}{V} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_A} \sum_{i, \lambda} \epsilon_i^{(\lambda)}(\mathbf{k}) \mu_i^{on}(A) \quad (\text{A.75})$$

$$V_B^{if} = \langle 000, \mathbf{k}\epsilon | V_B | 010, 0 \rangle = -\frac{1}{\varepsilon_0} \langle 0 | \boldsymbol{\mu}(B) | 1 \rangle \langle \mathbf{k}\epsilon | \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_B) | 0 \rangle = P \left(\frac{k}{V} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_B} \sum_{j, \lambda} \epsilon_j^{(\lambda)}(\mathbf{k}) \mu_j^{on}(B) \quad (\text{A.76})$$

$$V_C^{if} = \langle 000, \mathbf{k}\epsilon | V_C | 001, 0 \rangle = -\frac{1}{\varepsilon_0} \langle 0 | \boldsymbol{\mu}(C) | 1 \rangle \langle \mathbf{k}\epsilon | \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R}_C) | 0 \rangle = P \left(\frac{k}{V} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_C} \sum_{m, \lambda} \epsilon_m^{(\lambda)}(\mathbf{k}) \mu_m^{on}(C) \quad (\text{A.77})$$

siendo $P = i \left(\frac{\hbar c}{2\varepsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}}$.

Los subíndices 'i', 'j' se refieren a las 3 coordenadas espaciales (x,y,z) por el producto escalar entre

$\epsilon^{(\lambda)}(\mathbf{k})$, vector de polarización del campo eléctrico, y $\boldsymbol{\mu}(A/B/C)$, momento dipolar del átomo. Los elementos de matriz del momento dipolar se denotan como $\langle 0|\boldsymbol{\mu}(i)|1\rangle = \boldsymbol{\mu}^{on}(i)$.

Módulo de los elementos de matriz del potencial:

Los módulos cuadrados son $|V_{A/B/C}^{if}|^2$. Por ejemplo para V_A^{if} :

$$|V_A^{if}|^2 = (V_A^{if})^* V_A^{if} = |P|^2 \sum_{i,\lambda,k} \bar{\epsilon}_i^{(\lambda)}(\mathbf{k}) \epsilon_i^{(\lambda)}(\mathbf{k}) \left(\frac{k}{V}\right) |\boldsymbol{\mu}_i(A)|^2 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{R}_A - \mathbf{k}\mathbf{R}_A)}$$

El sumatorio en polarizaciones, usando (A.80), es:

$$|V_A^{if}|^2 = P^2 \sum_{i,k} (\delta_{ii} - \hat{k}_i \hat{k}_i) \left(\frac{k}{V}\right) |\boldsymbol{\mu}_i(A)|^2 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{R}_A - \mathbf{k}\mathbf{R}_A)}$$

Pasando del sumatorio a la integral en el continuo de vectores de onda fotónicos mediante ecuación (A.81):

$$|V_A^{if}|^2 = P^2 \lim_{kR \rightarrow 0} \sum_i \int_0^\infty \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} k (\delta_{ii} - \hat{k}_i \hat{k}_i) |\boldsymbol{\mu}_i(A)|^2 e^{ikR}$$

Usando (A.82) se integra en ángulo sólido:

$$\begin{aligned} \sum_i (\delta_{ii} - \hat{R}_i \hat{R}_i) &= 3 - \frac{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2}{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2} = 3 - 1 = 2 \\ \sum_i (\delta_{ii} - 3 \hat{R}_i \hat{R}_i) &= 0 \\ \text{Entonces: } \sum_i \int_0^\infty (\delta_{ii} - \hat{k}_i \hat{k}_i) d\Omega &= 4\pi \cdot 2 \end{aligned}$$

Sacando como constante el módulo del momento dipolar, $\sum_i |\boldsymbol{\mu}_i(A)|^2 = \mu^2(A)$

$$|V_A^{if}|^2 = \frac{P^2 \mu^2(A)}{\pi^2} \lim_{kR \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\sin(kR)}{R} \quad (\text{A.78})$$

Módulos cruzados de los elementos de matriz del potencial:

Los módulos cruzados son del tipo $(V_m^{if})^* V_n^{if}$. Por ejemplo para el término $(V_A^{if})^* V_B^{if}$:

$$(V_A^{if})^* V_B^{if} = P^2 \sum_{i,j,\lambda,k} \bar{\epsilon}_i^{(\lambda)}(\mathbf{k}) \epsilon_j^{(\lambda)}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B)} \left(\frac{k}{V}\right) \mu_i^{on}(\mathbf{A}) \mu_j^{no}(\mathbf{B})$$

Renombrando $\mathbf{R} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$ y haciendo el sumatorio en polarizaciones, usando (A.80):

$$(V_A^{if})^* V_B^{if} = P^2 \sum_{i,j,k} (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} \left(\frac{k}{V}\right) \mu_i^{on}(\mathbf{A}) \mu_j^{no}(\mathbf{B})$$

Pasando del sumatorio a la integral en el continuo de vectores de onda fotónicos mediante ecuación (A.81):

$$(V_A^{if})^* V_B^{if} = P^2 \sum_{i,j} \int_0^\infty \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} k (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} \mu_i^{on}(\mathbf{A}) \mu_j^{no}(\mathbf{B})$$

Usando (A.82) se integra en ángulo sólido:

$$\int_0^\infty (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\Omega = 4\pi \left\{ (\delta_{ij} - \hat{R}_i \hat{R}_j) \frac{\sin kR}{kR} + (\delta_{ij} - 3\hat{R}_i \hat{R}_j) \left(\frac{\cos kR}{k^2 R^2} - \frac{\sin kR}{k^3 R^3} \right) \right\}$$

En el límite $\lim_{kR \rightarrow 0}$ se recupera el anterior caso, por lo cual:

$$\sum_i (\delta_{ii} - \hat{R}_i \hat{R}_i) = 3 - \frac{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2}{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2} = 3 - 1 = 2$$

$$\sum_i (\delta_{ii} - 3\hat{R}_i \hat{R}_i) = 0$$

$$\text{Entonces: } \sum_i \int_0^\infty (\delta_{ii} - \hat{k}_i \hat{k}_i) d\Omega = 4\pi \cdot 2$$

Sacando como constante el módulo del momento dipolar y suponiendo que son partículas idénticas, $\sum_{i,j} \mu_i^{on}(\mathbf{A}) \mu_j^{no}(\mathbf{B}) = \mu^2(A)$:

$$(V_A^{if})^* V_B^{if} = \frac{P^2 \mu^2(A)}{\pi^2} \lim_{kR \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\sin(kR)}{R} \quad (\text{A.79})$$

Suma de las polarizaciones:

$$\sum_\lambda \epsilon_i^{(\lambda)}(k) \bar{\epsilon}_j^{(\lambda)}(k) = (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) \quad (\text{A.80})$$

Los índices ‘i’, ‘j’ son las coordenadas espaciales (x,y,z) del vector polarización.

Coordenada unitaria del vector de propagación: $\hat{k}_i = \frac{k_i}{\sqrt{k_i^2 + k_j^2 + k_l^2}}$

Transformación de suma en integral para k

En el límite $V \rightarrow \infty$ la suma en k puede sustituirse por una integral:

$$\frac{1}{V} \sum_k \Rightarrow \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (\text{A.81})$$

siendo $d^3\mathbf{k} = k^2 dk d\Omega$

Integral en ángulo sólido:

Integral extraída de [5] pag 148.

$$\tau_{ij}(kR) = \int (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\Omega = 4\pi \left\{ (\delta_{ij} - \hat{R}_i \hat{R}_j) \frac{\sin kR}{kR} + (\delta_{ij} - 3\hat{R}_i \hat{R}_j) \left(\frac{\cos kR}{k^2 R^2} - \frac{\sin kR}{k^3 R^3} \right) \right\} \quad (\text{A.82})$$

Es la parte imaginaria de la función de Green en el espacio libre.

INTEGRALES:

Integrales en el tiempo para el seno y el coseno:

$$\int_0^T d e^{i\omega\tau} c_{AB} = \int_0^T d\tau e^{i\omega\tau} \gamma e^{-\Gamma_0\tau/2} e^{-i\omega_0\tau} \cos \left[\tau \tilde{\Omega}(k_0 R_{AB}) \right]$$

$$\int_0^T d e^{i\omega\tau} c_{AB} = \frac{1}{2} \left[\frac{e^{(-\Gamma_0/2 + \Gamma_{AB} + i(\omega - \omega_0 + \Omega_{AB}))T} - 1}{-\Gamma_0/2 + \Gamma_{AB} + i(\omega - \omega_0 + \Omega_{AB})} + \frac{e^{(-\Gamma_0/2 - \Gamma_{AB} + i(\omega - \omega_0 - \Omega_{AB}))T} - 1}{-\Gamma_0/2 - \Gamma_{AB} + i(\omega - \omega_0 - \Omega_{AB})} \right] \quad (\text{A.83})$$

$$\int_0^T d e^{i\omega\tau} s_{AB} = \int_0^T d\tau (-i) e^{i\omega\tau} \gamma e^{-\Gamma_0\tau/2} e^{-i\omega_0\tau} \sin \left[\tau \tilde{\Omega}(k_0 R_{AB}) \right]$$

$$\int_0^T d e^{i\omega\tau} s_{AB} = \frac{1}{2} \left[\frac{e^{(-\Gamma_0/2 - \Gamma_{AB} + i(\omega - \omega_0 - \Omega_{AB}))T} - 1}{-\Gamma_0/2 - \Gamma_{AB} + i(\omega - \omega_0 - \Omega_{AB})} - \frac{e^{(-\Gamma_0/2 + \Gamma_{AB} + i(\omega - \omega_0 + \Omega_{AB}))T} - 1}{-\Gamma_0/2 + \Gamma_{AB} + i(\omega - \omega_0 + \Omega_{AB})} \right] \quad (\text{A.84})$$

Se suman y simplifican las contribuciones de las integrales cuando se pueda. Por ejemplo, para el término en V_A^{if} :

$$\frac{1}{i\hbar\sqrt{3}} \int_0^T d\tau e^{i\omega\tau} \alpha (c_{AC} + c_{BC} + s_{AC} + s_{BC}) = \frac{1}{i\hbar\sqrt{3}} \left(\frac{e^{(M+N_{AB})T} - 1}{M + N_{AB}} + \frac{e^{(M+N_{AC})T} - 1}{M + N_{AC}} \right) \quad (\text{A.85})$$

Integrales con exponenciales temporales:

$$I = \int_0^\infty dk k^3 \frac{e^{icTk}}{-ick - a + ib} = \frac{-2\pi K^3 e^{-icKT}}{c} \quad (\text{A.86})$$

siendo $K = \frac{b+ia}{c}$.

Sea $f(k) = k^3 \frac{e^{i(mk-p)}}{-ick - a + ib}$ con $cT > 0$, $a > 0$ y $b > 0$.

Convergencia en los límites de integración:

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow 0} f(k) &= 0 \\ \lim_{k \rightarrow \infty} f(k) &= \infty \end{aligned}$$

Para que la integral converja se añade un factor $e^{-\gamma k}$ con la condición $\gamma \rightarrow 0$.

$$I = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^\infty dk e^{-\gamma k} k^3 \frac{e^{icTk}}{-ick - a + ib}$$

La función presenta un polo simple en $K = \frac{b+ia}{c}$. Elijiendo como contorno un cuarto de circunferencia en el plano superior y aplicando el teorema de Cauchy: $\oint f = 2\pi i \text{Res}(f(k), K)$.

Contornos de integración:

$$\begin{aligned} \text{R1:} & \quad z = x; dz = dx & \quad x \in [0, R) \\ \text{R2:} & \quad k = xi; dk = i dx & \quad x \in (R, 0] \\ \gamma_R: & \quad k = Re^{i\varphi}; dk = iRe^{i\varphi} d\varphi & \quad \varphi \in [0, \frac{\pi}{2}] \end{aligned}$$

Entonces la integral es:

$$\oint f = \int_{R1} f + \int_{\gamma_R} f + \int_{R2} f = 2\pi i \text{Res}(f(k), K) \quad (\text{A.87})$$

Integral en R2:

Se calcula el módulo de la función evaluada en el contorno R2:

$$|f(xi)| = \left| e^{-\gamma xi} (ix)^3 \frac{e^{-cTx}}{(ck - a + ib)} \right| = \frac{x^3 e^{-cTx}}{\sqrt{(ck - a)^2 + b^2}}$$

Usando el criterio de comparación de integrales y tomando $R \rightarrow \infty$:

$$\left| \int_{R2} f \right| \leq \int_{R \rightarrow \infty}^0 dx \frac{x^2 e^{-cTx}}{\sqrt{(ck - a)^2 + b^2}} \leq \int_{R \rightarrow \infty}^0 dx e^{-cTx} x^2 \quad (\text{A.88})$$

Esta integral es la función Gamma: $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$ si $\text{Re}\{z\} > 0$.

$$\int_{R \rightarrow \infty}^0 dx e^{-cTx} x^2 = -\frac{2}{cT^3} \rightarrow 0 \quad \text{si } cT \gg$$

Integral en γ_R :

Se calcula el módulo de la función evaluada en el contorno γ_R :

$$|f(Re^{i\varphi})| = \left| e^{-\gamma Re^{i\varphi}} (Re^{i\varphi})^3 \frac{e^{cTRe^{i\varphi}}}{(-icRe^{i\varphi} - a + ib)} \right| = \frac{R^3 e^{-\gamma R \cos(\varphi)} e^{-mR \sin(\varphi)}}{|-icRe^{i\varphi} - a + ib|^2}$$

Tomando el límite $R \rightarrow 0$ y $\gamma \rightarrow 0$ la integral tiende a 0.

Residuo:

Reescribiendo el denominador: $-a + i(ck - b) = (-i)(-a) + ck - b = ck - b + ia = k - K$

$$\text{Res}(f(k), K) = \lim_{k \rightarrow K} = (k - K)f(k) = \lim_{k \rightarrow K} \frac{-i}{c} K^3 e^{icTK}$$

Sustituyendo los resultados de las integrales en los contornos en la ecuación (A.87):

$$I = 2\pi i \frac{-i}{c} K^3 e^{icTK} = \frac{-2\pi K^3 e^{icKT}}{c}$$

El complejo conjugado de esta integral es:

$$I^* = \int_0^\infty dk k^3 \frac{e^{-icTk}}{ick - a - ib} = \frac{-2\pi K^{*3} e^{icK^*T}}{c} \quad (\text{A.89})$$

siendo $K^* = \frac{b-ia}{c}$.

Integral independiente del tiempo:

$$\lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\sin kR}{R} \left(\frac{1}{-ick - a + ib} + \frac{1}{ick - a - ib} \right) = \frac{-\pi}{c} ((K)^3 + (K^*)^3) \quad (\text{A.90})$$

Descomponiendo el seno como $\sin(x) = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$:

$$\lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{2iR} \left(\frac{1}{-ick - a + ib} + \frac{1}{ick - a - ib} \right)$$

Se resuelve la integral para el primer sumando de polo $K = \frac{b+ia}{c}$. El segundo sumando se resuelve de manera inmediata al ser su complejo conjugado.

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{2iR} \left(\frac{1}{-ick - a + ib} \right) &= \lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \left(\frac{e^{ikR}}{2iR(-ick - a + ib)} \right) \\ &- \lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \left(\frac{e^{-ikR}}{2iR(-ick - a + ib)} \right) = I_1 + I_2 \end{aligned}$$

Utilizando la Integral (A.89) se resuelve I_1 :

$$I_1 = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{-\pi K^2 e^{-iKR}}{iRc}$$

La integral I_2 se integra en un contorno de límites similares pero ubicado en el cuarto cuadrante. Como dicho cuadrante no contiene al polo la integral se anula. Entonces:

$$\lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{2iR} \left(\frac{1}{-ick - a + ib} \right) = I_1 + I_2 = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{-\pi K^2 e^{-iKR}}{iRc}$$

Su integral complejo conjugada es:

$$\lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{2iR} \left(\frac{1}{ick - a - ib} \right) = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{-\pi K^{*2} e^{iKR}}{iRc}$$

Sumando ambas contribuciones y descomponiendo las exponenciales como $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$:

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow 0} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\sin kR}{R} \left(\frac{1}{-ick - a + ib} + \frac{1}{ick - a - ib} \right) &= \frac{-\pi}{c} \left[K^2 \lim_{R \rightarrow 0} \frac{\sin KR}{R} + K^{*2} \lim_{R \rightarrow 0} \frac{\sin K^*R}{R} \right] \\ &= \frac{-\pi}{c} ((K)^3 + (K^*)^3) \end{aligned}$$

B. Anexo: Programa

```
from qiskit import *
from numpy import *
import numpy as np
import math as mth
from qiskit.circuit import QuantumCircuit, Parameter
from qiskit.quantum_info import Statevector
from qiskit.circuit.library.n_local.excitation_preserving import *
from qiskit.circuit.library.n_local.efficient_su2 import *
from typing import Union, Optional, List, Tuple, Callable, Any
from qiskit.circuit.library.standard_gates import RZGate
from qiskit.circuit.library import ExcitationPreserving
from scipy.optimize import minimize
from qiskit.algorithms.optimizers import COBYLA, SLSQP, GradientDescent
from qiskit.algorithms.optimizers import SPSA
from qiskit.circuit.library import PauliTwoDesign
from qiskit_aer import AerSimulator\*
```



```

# Parámetros iniciales del sistema
theta= 45 # Grados
eps2 = 55.26349406*pow(10,-4) #e/(eV A)
a= 1000 # Armstrongs= A
Ea = 0 #eV
mu= 1 # eV*A
dim= 5 #dimension del sistema

hbar= 6.582119569*pow(10,-16) # eV*s
c= 3*pow(10,18) # A/s
L = a*(dim+1) # A

# Si se toma como unidad de referencia e-11 entonces J toma valores:
J = pow(mu,2)*pow(10,11)*(1-3*pow((np.cos(np.deg2rad(theta))),2))/(4*np.pi*eps2*pow(a,3))
print(J) # J está en eV*e-11 \\*

from qiskit_ibm_provider import IBMProvider
IBMProvider.save_account(token='',overwrite=True)
provider = IBMProvider()

backend = provider.get_backend('ibmq_belem')
backend_sim = AerSimulator.from_backend(backend)

backend_ideal = Aer.get_backend('aer_simulator')\\*

# Ansatz
def define_ansatz(thetas, entanglement, reps):
    #ansatz = EfficientSU2(5, reps=reps, entanglement=entanglement,
    #insert_barriers=True)

    ansatz = ExcitationPreserving(5, reps=reps, mode='fsim', entanglement=entanglement,
    insert_barriers=True)

    pra = ansatz.parameters
    lengthy = ansatz.num_parameters_settable

    if len(thetas)<lengthy:
        print("Necesitas más parámetros")
        return None
    else:
        for i in range(lengthy):
            ansatz.assign_parameters({pra[i]: thetas[i]}, inplace=True)
        return (ansatz)\\*

# Función para medir 2 qubits usando EXECUTE
def measuring(init,circuit, Energy_meas):

```

```

shots = 2**14 # number of samples used for statistics
#sim = Aer.get_backend('aer_simulator')
sim = backend_ideal

QC = init.compose(circuit)
counts = execute(QC,sim,shots=shots).result().get_counts()
probs = {}
for output in ['00','01', '10', '11']:
    if output in counts: # Osea, si hay datos para el registro '01', se almacenan, si
        probs[output] = counts[output]/shots
    else:
        probs[output] = 0

Energy_meas.append( probs['00'] - probs['01'] - probs['10'] + probs['11'] )

# Valor esperado de la energía
def valor_esperado(thetas, entanglement, reps):

    q = QuantumRegister(dim)
    qc = QuantumCircuit(q)
    ans = define_ansatz( thetas, entanglement, reps)
    qc.x(0)
    qc.compose(ans,inplace=True)

    # Para almacenar los resultados del valor medio
    Energy_measX = []
    Energy_measY = []
    XY_sim = []

    # Circuito para medir <XX>
    measure_XX = QuantumCircuit(q)
    for i in range(dim):
        for j in range(dim):
            if i != j and (j==i+1):
                measure_XX = QuantumCircuit(q)
                measure_XX.h([i,j])
                measure_XX.measure_active()
                measuring(qc,measure_XX,Energy_measX)

    # Circuito para medir <YY>
    measure_YY = QuantumCircuit(q)
    for i in range(dim):

```

```

    for j in range(dim):
        if i != j and (j==i+1):
            measure_YY = QuantumCircuit(q)
            measure_YY.sdg([i,j])
            measure_YY.h([i,j])
            measure_YY.measure_active()
            measuring(qc,measure_YY,Energy_measY)

    XY_sim.append((J/2)*(np.sum(np.array(Energy_measX)) + np.sum(np.array(Energy_measY))))
    #Resultados del valor medio de la energía
    EnergExp = Ea+XY_sim[0]
    return (EnergExp)\*\*

# Diccionario parámetros
eff_SU2 = {'rep1': 20,
           'rep2': 30,}

expres = {'fullfsim1':30,
          'fullfsim2':55,
          'fulliswap1':20,
          'fulliswap2':35,
          'linearfsim1':18,
          'linearfsim2':31,
          'lineariswap1':14,
          'lineariswap2':23,
}

def string(params):
    numero = []
    for i in range(0,params):
        numero.append(np.random.uniform(0, 2*math.pi))
    return numero

numero = string(expres['fullfsim1'])
print(numero)
res = minimize(valor_esperado, numero, args = ('full',1), method='COBYLA')
print(res) \*\*

# Función energía
def Energy(k, dim):
    return Ea + 2*J*math.cos(math.pi*k/(dim+1))

print('Energía teórica del ground state para 5 qubits: ', Energy(1,5))

# Errores
def error(exp,teor):

```

```

    e = abs((exp-teor)/teor)
    return(e*100)

print('Energía experimental ground state: ', res.fun)
# Error relativo en la medida
print('Error relativo:', error(res.fun, Energy(1,5)), "%")\\*

from qiskit.quantum_info import Statevector
state = Statevector.from_int(0, 2**5)
q = QuantumRegister(dim)
qc = QuantumCircuit(q)

ans = define_ansatz(res.x, 'full', 1)
qc.x(0)
qc.compose(ans,inplace=True)

state = state.evolve(qc)
state.draw('latex')\\*

#FIDELITY
from qiskit.quantum_info import *
desired_vectorE1 = [
    0, math.sqrt(3)/6, 1/2, 0, math.sqrt(1/3), # |00001> y |00010> y |00100>
    0, 0, 0, 1/2, 0, # |01000>
    0, 0, 0, 0, 0,
    0, math.sqrt(3)/6, 0, 0, 0, # |10000>
    0, 0, 0, 0, 0,
    0, 0, 0, 0, 0, 0 # Padding zeros
]

s = state_fidelity(desired_vectorE1, state)
print('Fidelity',s)

```

Referencias

- [1] R. H. DICKE, *Coherence in Spontaneous Radiation Processes*, Phys. Rev. **93**, 99. 1954
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.93.99>
- [2] M. SARGENT, *Laser Physics*, Appendix G, Westview Press, 1978
- [3] C. COHEN-TANNOUJDI ET AL., *Atom—Photon Interactions: Basic Process and Applications*, Chapter 1, WILEY-VCH Verlag GmbH and Co, 2004

- [4] CHEN, LIANGCHAO AND WANG ET AL., *Experimental Observation of One-Dimensional Super-radiance Lattices in Ultracold Atoms*, PhysRevLett **120**,193601
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.193601>
- [5] D.P. CRAIG, T. THIRUNAMACHANDRAN, D.D. PAIGE, *Molecular Quantum Electrodynamics*, Academic Press Inc., 1984
- [6] H. ZOUBIA, H. RITSCH, *Optical properties of collective excitations for an atomic chain with vacancies*, Eur. Phys. J. D (2012) **66**: 292
<https://doi.org/10.1140/epjd/e2012-30465-9>
- [7] EMMANUEL N. KOUKARAS, *Fermi's Golden Rule*, 2022
<https://www.doccity.com/en/fermi-s-golden-rule-2/9002671/>
- [8] NONIA VAQUERO, *Simulating molecules with variational quantum eigensolvers*, Trabajos fin de master UVa
<https://uvadoc.uva.es/handle/10324/57885>
- [9] JULES TILLY AND HONGXIANG CHEN AND SHUXIANG CAO ET AL, *The Variational Quantum Eigensolver: a review of methods and best practices*, arXiv:2111.05176
<https://arxiv.org/abs/2111.05176>
- [10] JULIO SÁNCHEZ-CÁNOVAS, *Master Thesis, 'Resonant Van der Waals interaction: net force in a two-atom system'*, Universidad de Valladolid
<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/38471>
- [11] GRAHAM, T.M., SONG, Y., SCOTT, J. ET AL, *Multi-qubit entanglement and algorithms on a neutral-atom quantum computer*, Nature **604**, 457–462 (2022)
<https://doi.org/10.1038/s41586-022-04603-6>
- [12] ALBERT PERUZZO ET AL, *A variational eigenvalue solver on a quantum processor*, Communications, 5:4213, (2014)
<https://arxiv.org/abs/1304.3061>
- [13] MAUPIN, O. G., BACZEWSKI, A. D., LOVE, P. J., LANDAHL, A. J. , *Variational Quantum Chemistry Programs in JaqalPaq.*, Entropy **2021**, 23(6), 657.
<https://doi.org/10.3390/e23060657>
- [14] <https://learn.qiskit.org/course/ch-applications/simulating-molecules-using-vqe>
- [15] YORDANOV, Y.S., ARMAOS, V., BARNES, C.H.W. ET AL., *Qubit-excitation-based adaptive variational quantum eigensolver*, Nature Commun Phys 4, 228 (2021)
<https://doi.org/10.1038/s42005-021-00730-0>