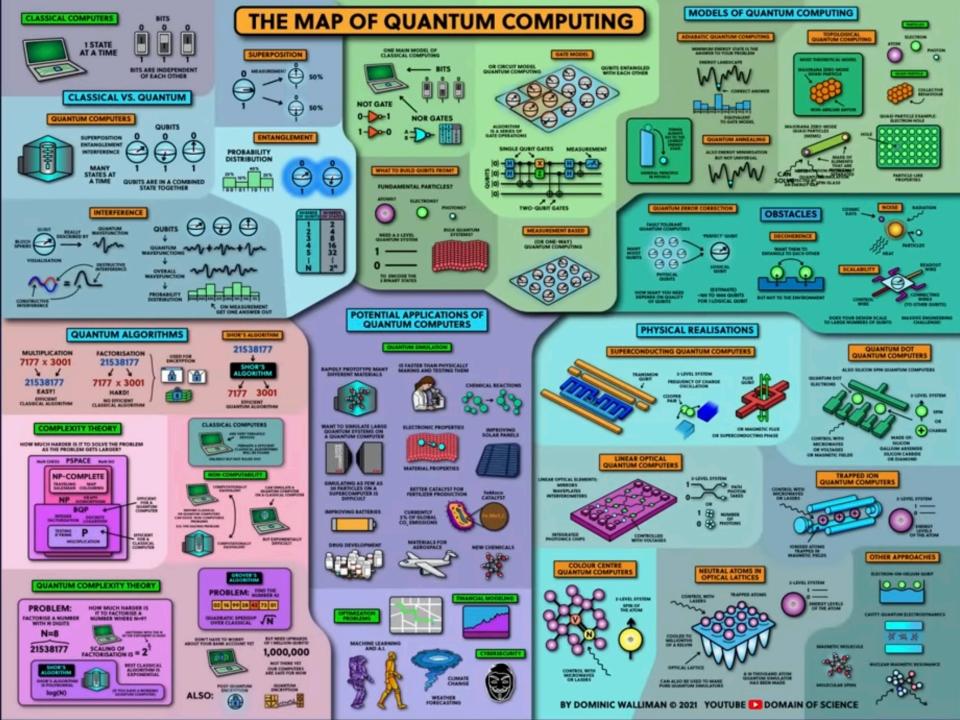




## Elementos de física cuántica para la computación cuántica

Prof. Humberto Rojas Escuela de Física Facultad de Ciencias - UCV



## ¿Qué es una computadora cuántica?

Una computadora cuántica es un dispositivo que aprovecha propiedades específicas descritas por la mecánica cuántica para realizar cálculos.

## ¿Qué es la mecánica cuántica?

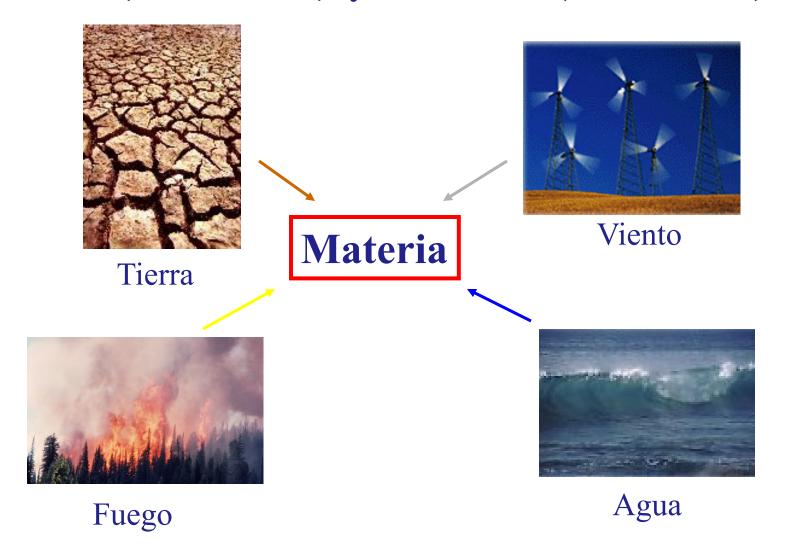
La mecánica cuántica es la teoría que describe el comportamiento de la materia y la energía a escalas muy pequeñas, donde las reglas de la física clásica dejan de ser válidas.

## Algunas preguntas fundamentales

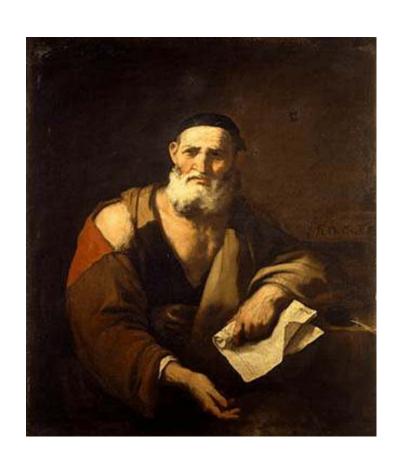
¿Qué es la materia?
¿Cuál es la estructura de la materia?

Sólo hace poco mas de 120 años se empezó a dar respuesta, sin ambigüedad, a estas preguntas.

#### Platón (428-347 a.c.) y Aristóteles (384-322 a.c.)

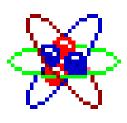


## $\alpha \tau o \mu \delta \varsigma = indivisible$





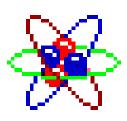
Leucipo (~ 500 a.c) y Demócrito (460-370 a.c.)



## $\alpha \tau o \mu \delta \varsigma = indivisible$



- Constituyen el bloque elemental con el que está hecha la materia.
- •Existen diferentes tipos de unidades elementales o átomos.



## Propiedades de los átomos

- Todos están hechos del mismo material.
- Poseen diferentes formas y tamaños.
- Son muy pequeños y, por ende, invisibles.
- Existe un número infinito de ellos.
- •Se combinan de varias maneras para formar todo lo que existe.
- •El calor, frío, la tristeza, la euforia, también están hechos de átomos.

## Alquimia y química





Todos los metales son combinaciones de Mercurio y Azufre. Un elixir debe catalizar la conversión a Oro de una mezclas de ellos.

Avicenna (985-1037), Albertus Magnus (1193-1280), Thomas Aquinas (1225-1274), Paracelsus (1493-1541), Robert Boyle (1626-1691), Isaac Newton (1642 -1727), Conte di Cagliostro (1743-1795), Comte de Saint Germain (Siglo 18)

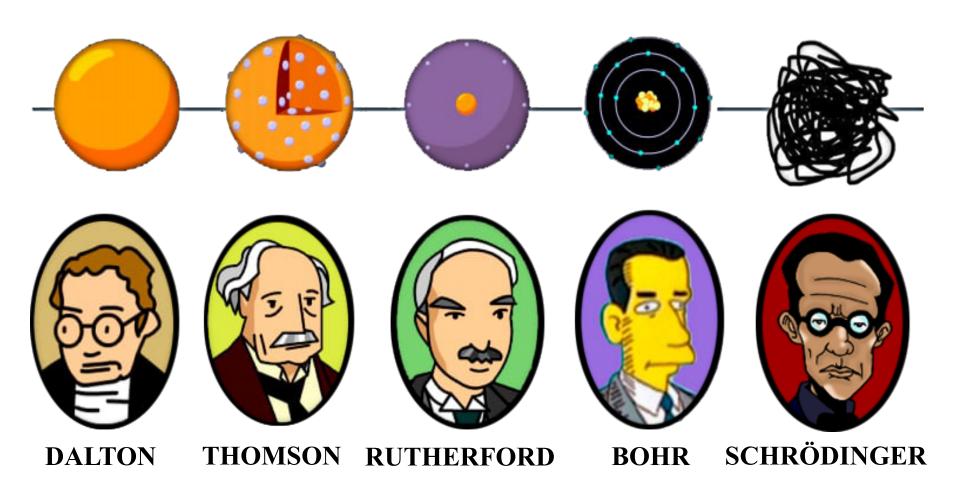
#### Definición de elemento químico



Algo que no puede ser dividido en unidades menores mediante una reacción química.

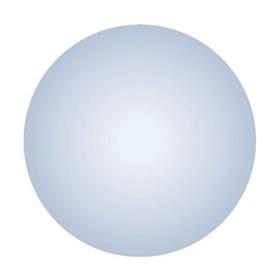
**Robert Boyle (1626-1691)** 

#### Modelos atómicos



#### Modelo de Dalton





John Dalton (1766-1844)

Todos los átomos de un mismo elemento presentan las mismas características.

Primeras bases de la teoría atómica. Mostró que los átomos se unían entre sí en proporciones definidas (moléculas) según cada elemento y por medio de una fuerza eléctrica (enlace químico).

#### Tabla periódica de Mendeleev

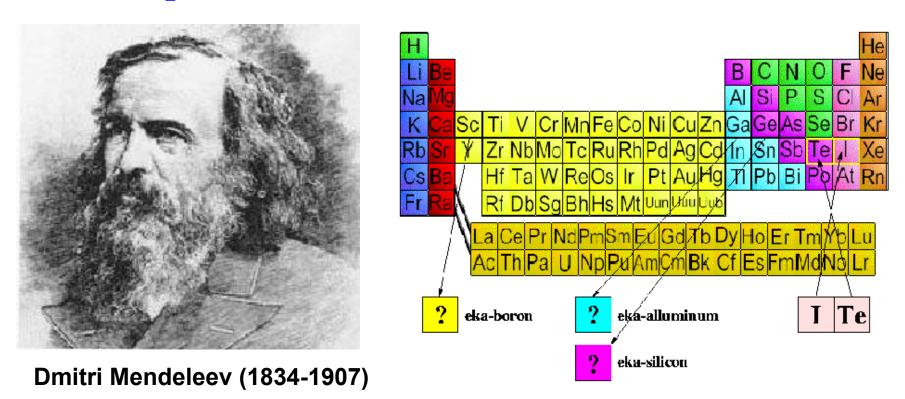


Tabla de 63 elementos químicos basada en la *valencia* en lugar de su masa.

## Tabla periódica de elementos

| Metales   | Metales         | Metales de<br>transición | T antánidos | Actinidad | Otros   | NA Metales    | Gases Nobles  |
|-----------|-----------------|--------------------------|-------------|-----------|---------|---------------|---------------|
| Alcalinos | Alcalinoterreos | transición               | Lamamos     | Acumuos   | Metales | 140 TATERATE? | Oases 1400les |

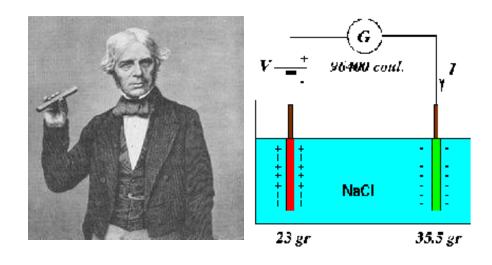
| Grupo  | 1        | 2        |    | 3        | 4         | 5         | 6         | 7         | 8         | 9         | 10         | 11         | 12         | 13         | 14         | 15         | 16         | 17         | 18         |
|--|----------|----------|----|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
|  | IA       | ПΑ       |    | ШВ       | IVΒ       | VB        | VIB       | VIIB      |           | VIIIE     | 3          | IB         | ШВ         | ША         | ΓVA        | VA         | VIA        | VIIA       | VША        |
| Período  |          |          |    |          |           |           |           |           |           |           |            |            |            |            |            |            |            |            |            |
| 1  | 1<br>H   |          |    |          |           |           |           |           |           |           |            |            |            |            |            |            | 2<br>He    |            |            |
| 2  | 3<br>Li  | 4<br>Be  |    |          |           |           |           |           |           |           |            |            | 5<br>B     | 6<br>C     | 7<br>N     | 8          | 9<br>F     | 10<br>Ne   |            |
| 3  | 11<br>Na | 12<br>Mg |    |          |           |           |           |           |           |           |            | 13<br>A1   | 14<br>Si   | 15<br>P    | 16<br>S    | 17<br>C1   | 18<br>Ar   |            |            |
| 4  | 19<br>K  | 20<br>Ca |    | 21<br>Sc | 22<br>Ti  | 23<br>V   | 24<br>Cr  | 25<br>Mn  | 26<br>Fe  | 27<br>Co  | 28<br>Ni   | 29<br>Cu   | 30<br>Zn   | 31<br>Ga   | 32<br>Ge   | 33<br>As   | 34<br>Se   | 35<br>Br   | 36<br>Kr   |
| 5  | 37<br>Rb | 38<br>Sr |    | 39<br>Y  | 40<br>Zr  | 41<br>Nb  | 42<br>Mo  | 43<br>Tc  | 44<br>Ru  | 45<br>Rh  | 46<br>Pd   | 47<br>Ag   | 48<br>Cd   | 49<br>In   | 50<br>Sn   | 51<br>Sb   | 52<br>Te   | 53<br>I    | 54<br>Xe   |
| 6  | 55<br>Cs | 56<br>Ba |    | *        | 72<br>Hf  | 73<br>Ta  | 74<br>W   | 75<br>Re  | 76<br>Os  | 77<br>Ir  | 78<br>Pt   | 79<br>Au   | 80<br>Hg   | 81<br>Tl   | 82<br>Pb   | 83<br>Bi   | 84<br>Po   | 85<br>At   | 86<br>Rn   |
| 7  | 87<br>Fr | 88<br>Ra |    | **       | 104<br>Rf | 105<br>Db | 106<br>Sg | 107<br>Bh | 108<br>Hs | 109<br>Mt | 110<br>Uun | 111<br>Uuu | 112<br>Uub | 113<br>Uut | 114<br>Uuq | 115<br>Uup | 116<br>Uuh | 117<br>Uus | 118<br>Uuo |
| Lantánidos         *         57         58         59         60         61         62         63         64         65         66           La         Ce         Pr         Nd         Pm         Sm         Eu         Gd         Tb         Dy |          |          |    |          |           | 66<br>Dy  | 67<br>Ho  | 68<br>Er  | 69<br>Tm  | 70<br>Үb  | 71<br>Lu   |            |            |            |            |            |            |            |            |
| Actínidos  |          | 3        | ** | 89<br>Ac | 90<br>Th  | 91<br>Pa  | 92<br>U   | 93<br>Np  | 94<br>Pu  | 95<br>Am  | 96<br>Cm   | 97<br>Bk   | 98<br>Cf   | 99<br>Es   | 100<br>Fm  | 101<br>Md  | 102<br>No  | 103<br>Lr  |            |

#### Propiedades eléctricas de la materia





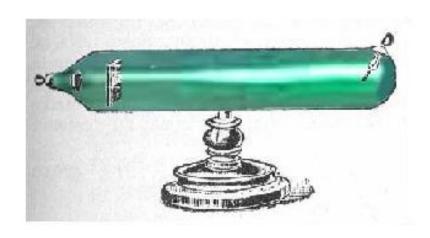
Alessandro Volta (1745-1827)



Michael Faraday (1791-1867)

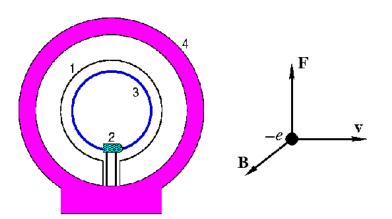
#### Descubrimiento del electrón





**Tubo de Crookes** 

Joseph John Thomson (1856-1940)



Ecuación de Lorentz:  $F = -e\vec{v} \times \vec{B}$ 

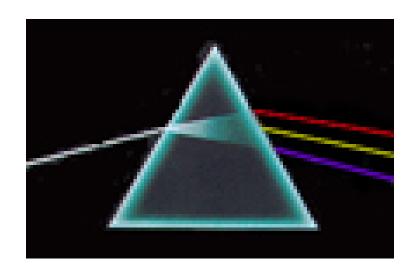
Aceleración centrípeta

$$|\mathbf{a}| = \mathbf{m} \mathbf{v}^2 / \mathbf{r}$$

$$\frac{e}{m} = \frac{v}{rB} \qquad \frac{e}{m} = 1.76 \times 10^{11} \text{ coul/kg}$$

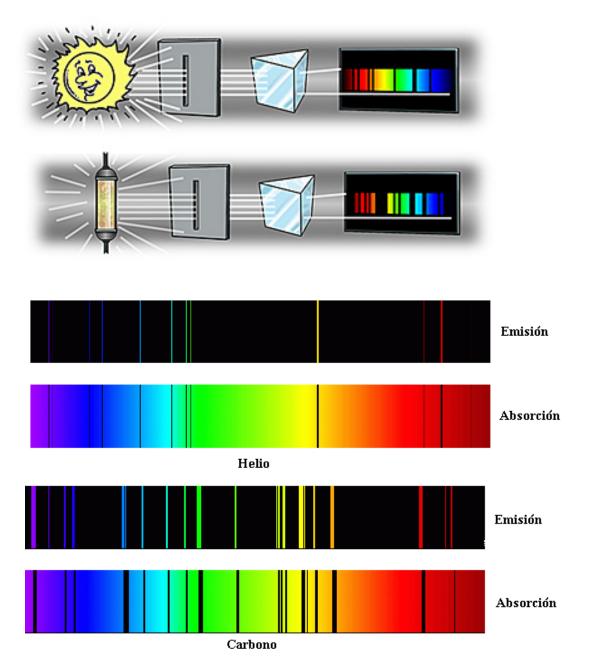
#### Espectros de línea de elementos



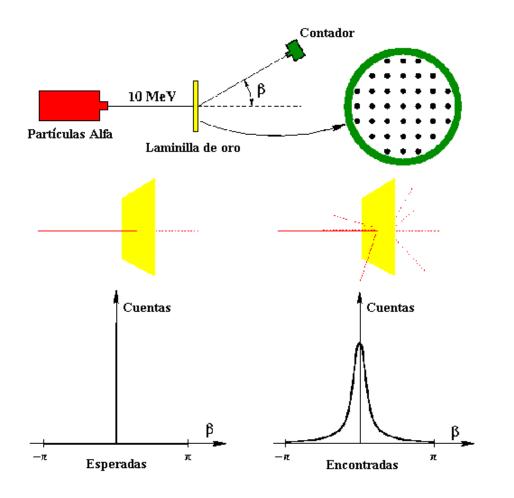


Gustav Kirchhoff (1824-1887)

Cada elemento posee su propio espectro de emisión. Las líneas de absorción ocurren en el mismo sitio donde ocurren las líneas de emisión.



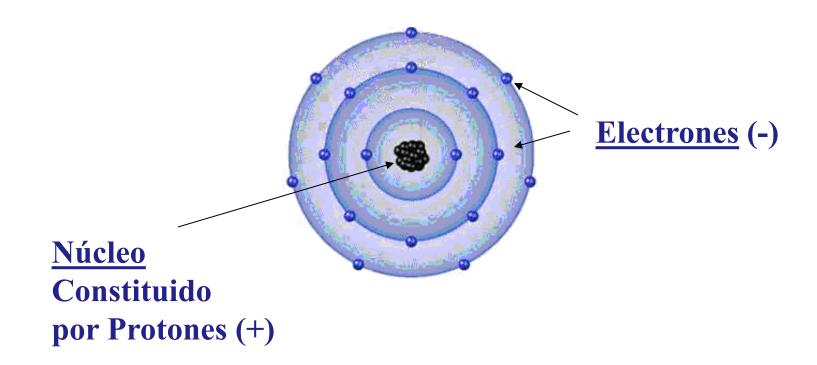
#### El núcleo atómico



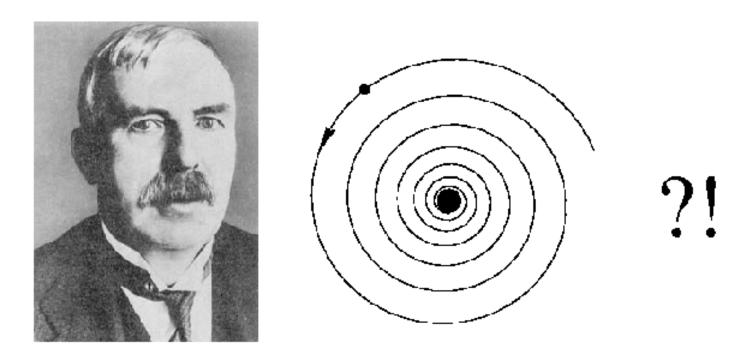
# Experimento de dispersión de partículas alfa de Rutherford

- •Se basa en la hipótesis de que las partículas alfa se dispersan en centros masivos con carga eléctrica.
- •De aquí, el núcleo parece tener un radio de 10-4 Å .

### Propuesta de estructura atómica



#### Modelo planetario del átomo



**Ernest Rutherford (1871-1937)** 

Este sistema colapsaría en aproximadamente 10-8 segundos debido a la emisión de radiación sincrónica.

#### Radiación "Térmica"



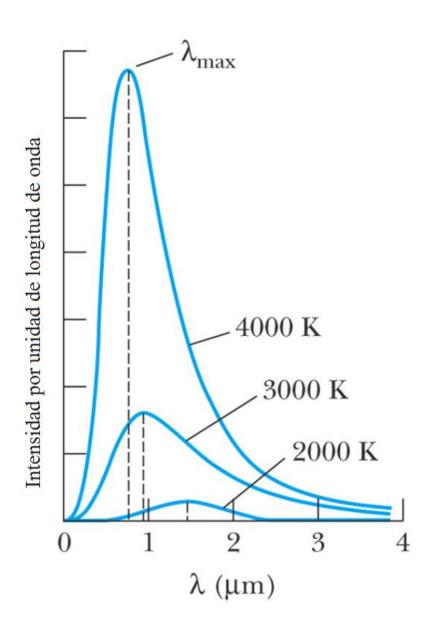




90% de la radiación es invisible por estar en el infrarrojo.

#### Radiación "Térmica"

Los detalles del espectro de emisión son casi independientes del material que compone el cuerpo que irradia pero si son fuertemente dependientes en de la temperatura.



#### Distribución de Boltzmann

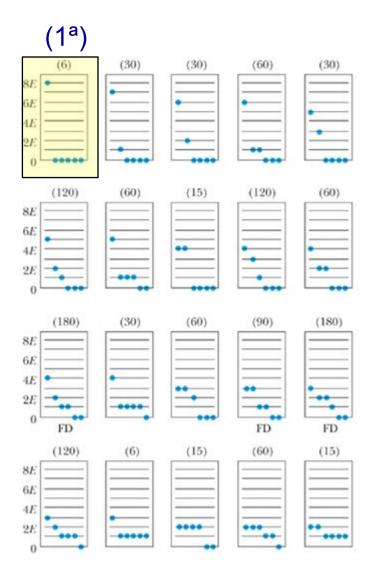


$$p(E) = \frac{1}{kT} e^{-E/kT}$$

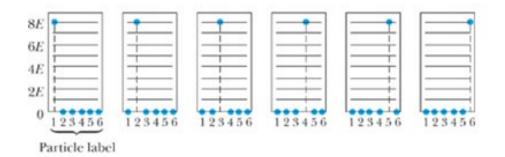
donde k es la Constante de Boltzmann's.

Ludwig Boltzmann (1844-1906)

De acuerdo a Boltzmann un sistema macroscópico en equilibrio térmico esta compuesto por un gran número de subsistemas microscópicos cuya energía está distribuida exponencialmente.



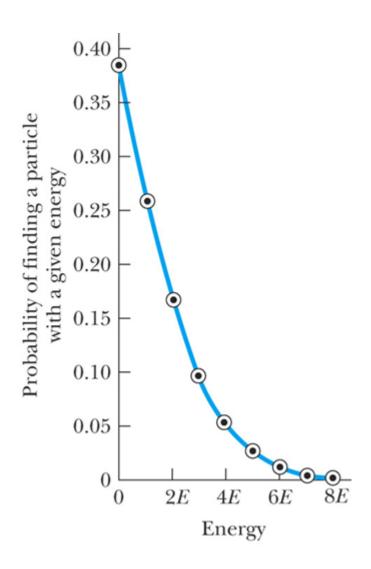
20 arreglos de seis partículas "indistinguibles" con una energía total de 8E. No. Total de divisiones 1287.



Descomposición del arreglo (1<sup>a</sup>) en seis duplicados para partículas distinguibles.

$$P_i = \frac{N\text{\'u}mero\ de\ duplicados}{N\text{\'u}mero\ total\ de\ divisiones}$$

#### Distribución de Boltzmann



#### Distribución de Maxwell-Boltzmann

Función de distribución para un conjunto de seis partículas distinguibles con una energía total de 8E.

$$n(E) = \sum_{i} P_{i}.n_{entes}(E)$$

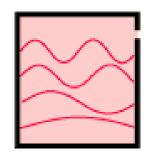
 $n_{entes}(E) = Número de entes en la división i con energía E.$ 

#### Teoría Clásica de Radiación de una Cavidad

#### Rayleigh y Jeans

Número de modos por unidad de frecuencia por unidad de volumen:

$$\frac{8\pi v^2}{c^3}$$



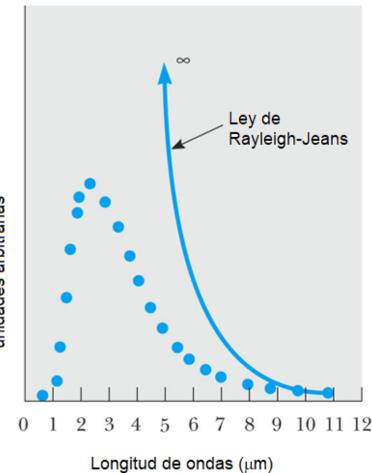




#### "Catástrofe Ultravioleta"

$$\rho(v)dv = \frac{8\pi v^2}{c^3}dv$$



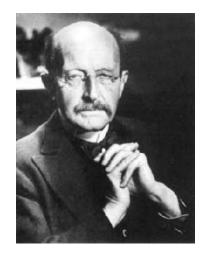


#### Teoría de Planck para la Radiación de una Cavidad

#### **Max Karl Ernst Ludwig Planck**

(1858-1947)

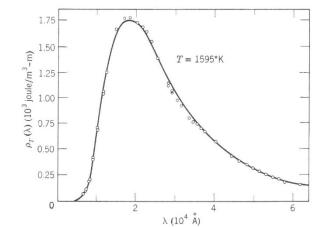
E = nhv



A la cantidad *hv* se le da el nombre de *cuanto de energía*.



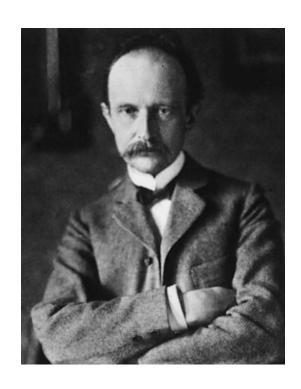
Area =  $\bar{\mathscr{E}} < kT$ 1/e &P(&) Area =  $\overline{\mathscr{E}} \ll kT$ 

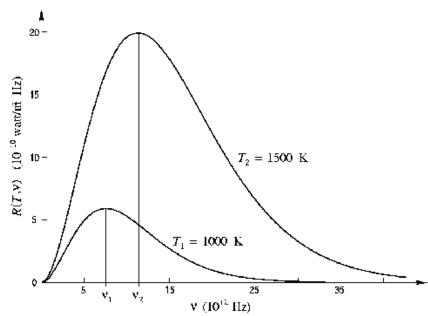


Ajuste de teoría a datos experimentales

#### Nace la Física Cuántica







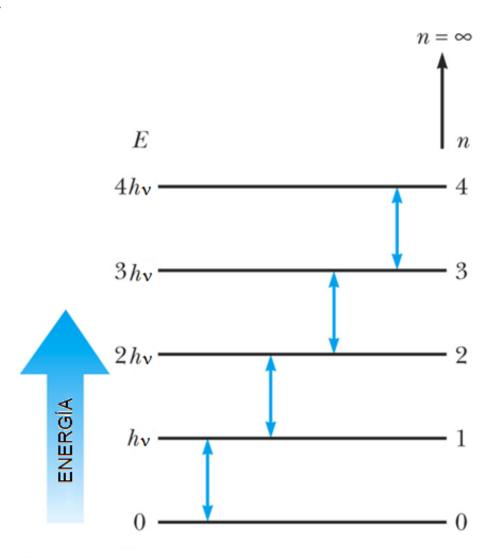
Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947)

El 14 de diciembre de 1900 en la Sociedad Alemana de Física Planck presenta su artículo "Sobre la teoría de la ley de distribución de energía del espectro normal".

#### **Energía Cuantizada**

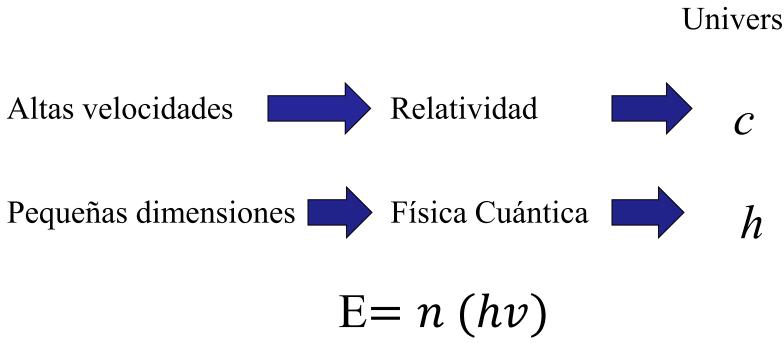
**Niveles Cuánticos** 

Número Cuántico n



#### Extendiendo los límites de las leyes Físicas

Constante Universal



A la cantidad hv se le da el nombre de cuanto de energía.

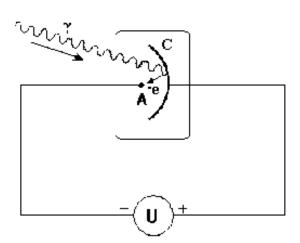
#### El efecto fotoeléctrico

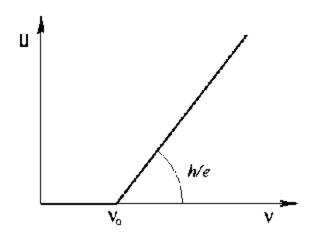


Albert Einstein (1879-1955)

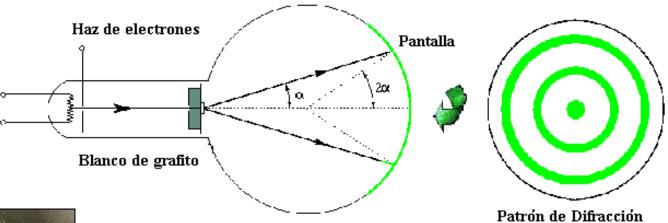
$$eU = hv - \Phi$$

 $(\Phi = \text{funcion trabajo} = hv_0)$ 



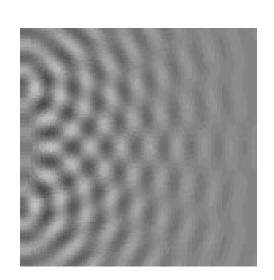


#### **Ondas Materiales**





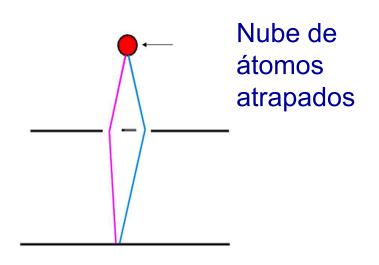
$$P = \frac{h}{\lambda}$$



**Louis de Broglie (1892-1987)** 

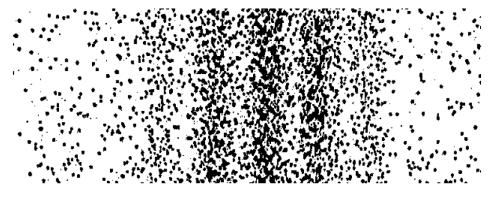
## Dualidad onda-partícula en átomos

Franjas de interferencia obtenidas con las ondas de Broglie de átomos metaestables de Neón enfriados mediante un LASER



F. Shimizu, K. Shimizu, H. Takuma: Phys. Rev. **A46**, R17 (1992)

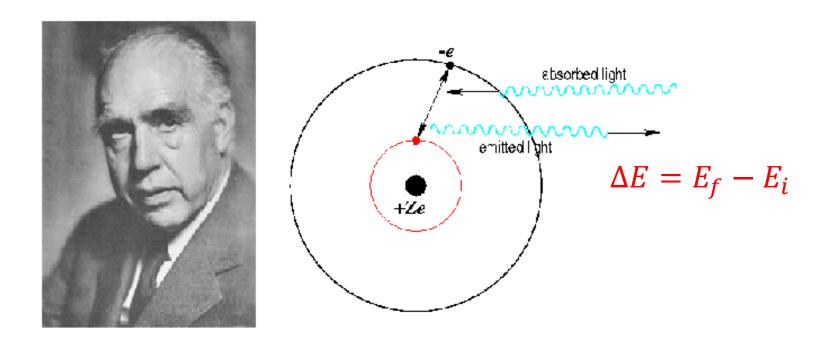
#### Resultado experimental



- •Cada átomo produce un impacto localizado en el detector.
- •La distribución de los impactos esta modulada espacialmente.

La onda asociada al átomo permite calcular la probabilidad de localizarlo en un sitio determinado.

#### Modelo del átomo de Bohr

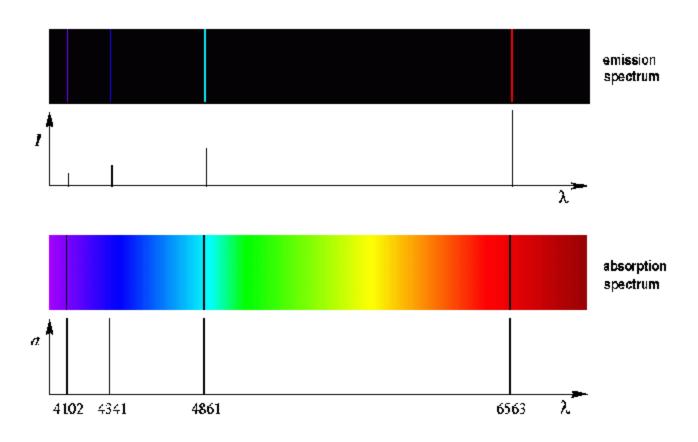


Niels Bohr (1885-1962)

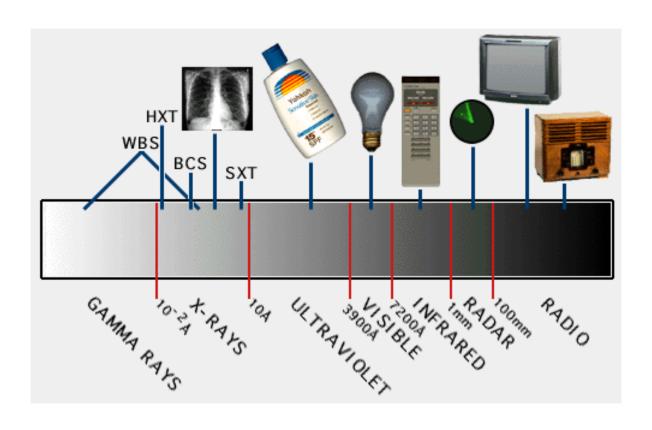
Se basa en que las órbitas de los electrones son estables. Existen sólo pocas órbitas posibles cada una con un radio y energía bien definidos.

#### Mecanismo de Radiación

Cuando un electrón salta de un nivel de energía alto hacia un nivel de energía más bajo, libera energía. Esta liberación de energía puede ser en forma de radiación electromagnética de frecuencia v (dada por la relación  $\Delta E = hv$ ).



# Espectro electromagnético



## Modelo de Sommerfeld

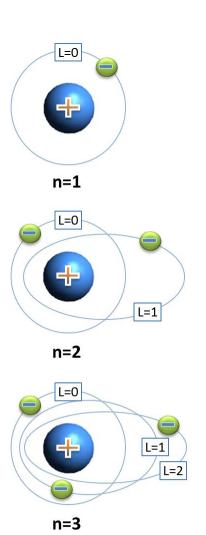
#### Sistemas periódicos

$$\oint Ld\theta = n_{\theta}h$$

$$\oint Ld\theta = n_{\theta}h \qquad \oint p_r dr = n_r h$$



 $L=n_{\theta}\hbar$ Cuantización del momento angular



**Arnold Sommerfeld (1868-1951)** 

n = número cuántico principal n<sub>θ</sub> = número cuántico azimutal

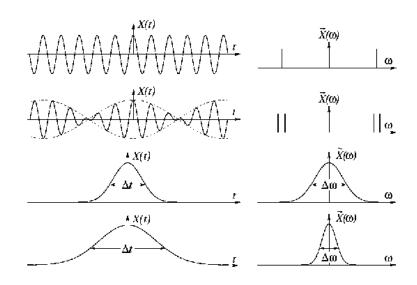
# El Principio de incertidumbre



$$\Delta p \cdot \Delta x \ge \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \ge \frac{\hbar}{2}$$

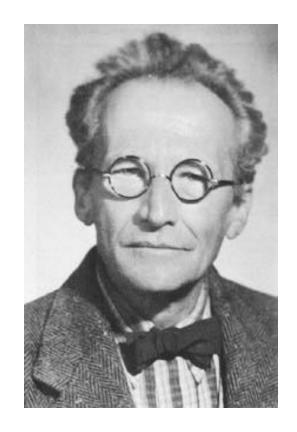
Werner Heisenberg (1901-1976)



Análisis espectral de Fourier

$$\Delta \omega \cdot \Delta t \ge 1/2$$

# Ecuación de Schrödinger



### Propone una ecuación de ondas

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

Versión independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Erwin Schrödinger (1887-1961)

 $\Psi(x,t)$  contiene información de la partícula.

## Mecánica cuántica

Generalización de los postulados de de Broglie

Función de onda Ecuación de Onda Leyes que rigen el movimiento de las ondas.

Max Born – Establece conexión entre comportamiento de la función de onda y la partícula a la cual está asociada.

 $\Psi(x,t)$  cambia si la partícula esta sujeta a un potencial V(x,t).

# Densidad de probabilidad P(x, t)

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$$

Probabilidad por unidad de longitud en el eje x de encontrar a la partícula cerca de x en un tiempo t.

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

Probabilidad de hallar la partícula entre las coordenadas x y x + dx en un tiempo t.

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$$
 es siempre real y positiva. 
$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t) dx = 1$$

En 3D 
$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 = \Psi^*(x, y, z, t) \Psi(x, y, z, t)$$

# Valor esperado (promedio)

$$\overline{f(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)P(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)f(x)\Psi(x,t)dx$$

### Valor promedio de la posición $\bar{x}$

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx}$$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$$

### Valor promedio del momento $ar{p}$

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} pP(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)p\Psi(x,t)dx$$

# **Operador momento**

Clásicamente 
$$p = m \frac{dx}{dt}$$

Cuánticamente no es posible conocer p y x con precisión infinita (Principio de incertidumbre).

Supongamos una función de onda  $\Psi(x,t)$  tal que:

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - wt) + i sen(kx - wt) = e^{i(kx - \omega t)}$$

Si calculamos su derivada con respecto a x:

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = ike^{i(kx - \omega t)} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi \frac{p}{h}$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\Psi(x,t) \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

# Operador momento

### De aquí que:

$$p\Psi(x,t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{i}{i} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$$

$$p\Psi(x,t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$$

$$\hat{p} \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

# Operador Energía

$$E\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

$$E = hv = \frac{h}{2\pi} 2\pi v = \hbar w$$

$$\hat{E} \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

### Mecánica ondulatoria

Consideremos una partícula de masa m que se mueve en un espacio unidimensional. Entonces, según la mecánica newtoniana clásica, su energía se puede expresar como:

$$E = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

donde p = mv es el momento y V(x) la energía potencial.

Si sustituimos la energía y el momento por sus respectivos operadores, obtenemos:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) \qquad \text{Ecuación de Schrödinger}$$
 
$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right]\Psi(x,t)$$

### Hamiltoneano

$$\widehat{H} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right]$$

$$\widehat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$$

$$E = hv = \hbar w$$

$$\Psi(x,t) = e^{-iwt}\Psi(x)$$

$$w = 2\pi v$$

Sustituyendo en la ecuación de Schödinger y cancelando la dependencia temporal obtenemos una ecuación independiente del tiempo.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\widehat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

# Autofunciones y autovalores

$$\widehat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Esta ecuación indica cuales son los valores de energía  $E_l$  (autovalores o valores propios) de la partícula al aplicar el operador de Hamilton a sus respectivas autofunciones  $\Psi_l(x)$ .

El operador de Hamilton en un operador lineal. Por lo tanto si  $\Psi_l(x)$  es solución de la ecuación, una combinación lineal  $\Psi(x)$  de soluciones también es solución.

$$\widehat{H}\Psi(x) = \sum_{l} c_{l} \widehat{H}\Psi_{l}(x) = \sum_{l} c_{l} E_{l} \Psi_{l}(x)$$

### Notación de Dirac

$$|\Psi_l\rangle=\Psi_l(x)$$
 Ket  $\langle\Psi_l|=\Psi_l^*(x)$  Bra

### Base de autofunciones

Si usamos la base de autofunciones  $\{|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, |\Psi_3\rangle, |\Psi_4\rangle, \dots, |\Psi_n\rangle\}$  para representar al operador lineal  $\widehat{H}$ 

$$\widehat{H}|\Psi\rangle = \sum_{l} c_{l} E_{l} |\Psi_{l}\rangle$$

Donde  $E_l$  es la energía asociada a la solución  $\Psi_l(x)$ .

La representación matricial de  $\widehat{H}$  es una matriz diagonal  $M_H$ .

$$\widehat{H} = \sum_{l} E_{l} |\Psi_{l}\rangle\langle\Psi_{l}| \qquad M_{H} = \begin{vmatrix} E_{1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & E_{n} \end{vmatrix}$$

- Los autovalores del Hamiltoneano son los posibles valores de la energía (valores reales).
- El operador de Hamilton es hermitiano  $\widehat{H}^{\dagger} = \widehat{H}$ .

# Principio variacional

Permite obtener el estado fundamental de un sistema, es decir, su energía más baja posible.

Si propones una función de onda  $\Psi(x,t)$  cualquiera (que cumpla ciertas condiciones), la energía que calcules con ella siempre será mayor o igual a la verdadera energía del estado fundamental.

Si  $\Psi_{prueba}$  es una función de onda de prueba normalizada, entonces:

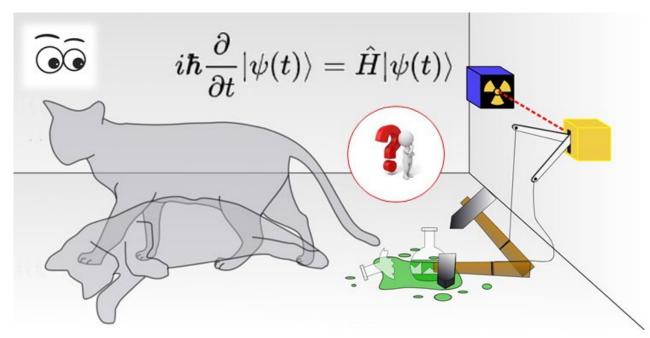
$$E_0 \le \langle \Psi_{prueba} | \widehat{H} | \Psi_{prueba} \rangle$$

donde  $E_0$  es la energía verdadera del estado fundamental y  $\widehat{H}$  es el hamiltoniano del sistema.

La idea es elegir buenas funciones de prueba e ir ajustando sus parámetros, puedes acercarte bastante a la energía real del sistema, sin necesidad de resolver la ecuación de Schrödinger completa.

### Postulado de Medición

Los sistemas están 'fijos' en un determinado estado sólo una vez que se miden. Antes de una medición, los sistemas pueden estar en un estado indeterminado. Después de medirlos, quedan en estado definido.



Cada cantidad física medible "a" se describe mediante un correspondiente operador hermitiano, A, que actúa sobre el estado  $\Psi(x,t)$ .

# Superposición, entrelazamiento y Reversibilidad

### El principio de superposición

La combinación lineal de dos o más vectores de estado es otro vector de estado. en el mismo espacio de Hilbert y describe otro estado del sistema.

#### **Entrelazamiento**

Dos sistemas se encuentran en un caso especial de superposición cuántica, llamado entrelazamiento, si la medición de un sistema está correlacionada con el estado del otro sistema de una manera tal que los estados de los dos sistemas son no separables ¿Paralelismo?

### **Reversibilidad**

Todos los operadores utilizados en la computación cuántica, que no sean para medición, deben ser reversibles.

# **GRACIAS**