

**INTERCAMBIO DE ENERGÍA EN PUNTOS CUÁNTICOS  
ACOPLADOS COMO COMPUERTAS PARA  
COMPUTACIÓN CUÁNTICA**

**HERNANDO EFRAÍN CAICEDO ORTIZ**

**UNIVERSIDAD DEL CAUCA  
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE LA  
EDUCACIÓN  
INGENIERÍA FÍSICA  
POPAYÁN  
2006**

**INTERCAMBIO DE ENERGÍA EN PUNTOS CUÁNTICOS  
ACOPLADOS COMO COMPUERTAS PARA COMPUTACIÓN  
CUÁNTICA**

**HERNANDO EFRAÍN CAICEDO ORTIZ**

Trabajo de grado para optar por el título de  
Ingeniero Físico

Director  
**SERVIO TULIO PEREZ MERCHANCANO Ph.D.**

**UNIVERSIDAD DEL CAUCA  
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE LA  
EDUCACIÓN  
INGENIERÍA FÍSICA  
POPAYÁN  
2006**

**Nota de Aceptación**

---

---

---

---

**Presidente del Jurado**

Servio Tulio Perez, Ph.D.  
Profesor del Departamento de Física.

---

**Jurado**

Freddy Amaya, Ph.D.  
Profesor del Departamento de Matemáticas.

---

**Jurado**

Carlos A. Rincon, Ph.D.  
Profesor del Departamento de Física.

**Popayán, 24 de Mayo de 2006.**

# Agradecimientos

Al finalizar esta etapa de mi vida y mirar atrás, han sido muchas las personas que me han permitido dar este nuevo paso. Inicialmente a la Universidad del Cauca, en especial al Departamento de Física por permitirme obtener conocimiento de la academia, a lo estudiantes y compañeros del grupo de semiconductores y nuevos materiales en el cual se llevo a cabo este trabajo, pablo, ober y magdalena, a los profesores Dora Ines Porras, quien me enseñó a leer, a Zory Pino quien me enseñó las matemáticas básicas, a Diego Correa por enseñarme más que algebra y Roger Carvajal mi profesor de física en el bachillerato, a ellos, mi gratitud y respeto. De igual forma agradezco a mis profesores de la Universidad Nacional y de la Universidad del Cauca, en especial a los malos, ya que ellos con su ejemplo me enseñaron lo que no debo de hacer. Una especial mención tiene mi director de tesis y amigo Prof. Servio Tulio Pérez, a su esposa la Prof. Luz Elena Bolivar y a toda su especial familia, gracias por el apoyo prestado en todos los campos en estos últimos años, a Andrés Sicard de la Universidad Eafit - Medellin, a Hernán Vivas de la Universidad de Toronto - Canada, Jereson Silva de la Universidad Nacional y a todas las personas con las cuales he podido interactuar y aprender de computación cuántica en nuestro país, a los amigos, en los cuales siempre encuentre verdadera amistad: Francisco Estrada, Ronald Hurtado, Yesid Villota, German Villota, Felipe Ordóñez, Cesar Sarria y al resto de compañeros de Ingeniería Física, A las maravillosas amigas de Bogotá, quienes siempre a pesar de la distancia estan pendientes de mi, Carola Hernández en la Universidad de los Andes y Marta Mariño en la Universidad Nacional, a mi hermosa Delta de Dirac, Adriana Isabel Figueroa, gracias por tu amistad, comprensión, tu ejemplo de verdadera mujer y por dejarme sentir lo que en verdad es el amor. Finalmente y no por ello menos importante expreso mi gratitud a mi madre, Nubia Amparo Ortiz, a mi hermano, Julián Andrés Caicedo y a mis bisabuelos Adela Argote y Segundo Santacruz. . .gracias por hacer de mi vida algo especial, siempre en cada momento los llevo en mi mente y estarán presentes en mi corazón por el resto de mi existencia. . . ESTE TRABAJO ESTA DEDICADO Y ES PARA USTEDES

# Lista de Símbolos

- $\rho$  = Radio de Punto Cuántico
- $\mu$  = Masa Efectiva del Electrón en una Estructura de GaAs
- $q_e$  = Carga del Electrón.
- $\mathbf{A}(\hat{r})$  = Potencial Vectorial
- $\omega_0$  = Frecuencia de Confinamiento
- $\omega_c$  = Frecuencia Ciclotrónica
- $u(\hat{z})$  = Potencial de Confinamiento en  $z$
- $\mu_B$  = Magnetón de Born
- $g_s$  = Factor Giromagnético
- $q_e$  = Cargar del Electrón
- $\Omega$  = Frecuencia de Fock-Darwin
- $a$  = Distancia de Separación Entre el Centro y uno de los Puntos Cuánticos
- $\oplus$  = Adición Modulo 2
- $\otimes$  = Producto Tensorial
- $\otimes$  = Producto Tensorial
- $|\psi\rangle$  = Estado  $\psi$
- $\langle\psi|$  = Complejo Conjugado del estado  $\psi$
- $\langle\psi|\psi\rangle$  = Producto Interno

- $\hat{I}$  = Operador identidad
- $|\psi\rangle\langle\psi|$  = Proyector
- $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$  = Valor esperado del operador  $\hat{A}$
- $\kappa$  = Constante de Coulomb

# Índice de Figuras

1.1.	Compuerta Reversible con $n$ entradas ( $i_n$ ) y $n$ salidas $o_n$ . . . . .	19
1.2.	Compuerta lógica AND . . . . .	20
2.1.	Nanocristales de Seleniuro de Cadmio en suspensión fluorescen bajo la luz ultravioleta. El color depende del tamaño de los nanocristales. Foto: Laboratorio de K. Jensen M. G. Bawendi C. Murray. . . . .	27
2.2.	Fabricación de un punto cuántico vertical por la técnica de litografía .	28
2.3.	Izquierda. Gráfica de escaneamiento electrónico, muestra pilares de puntos cuánticos. Cada barra tiene una longitud de $0.5 \mu\text{m}$ . En el gráfico de la derecha se ha insertado un diagrama esquemático de la estructura de un Punto Cuántico. Figura tomada de Reed et al. 1988	29
2.4.	Medida del flujo de corriente a travez de un punto cuántico a una temperatura de 50mK. para un rango de voltajes. Figura tomada de Tarucha et al. 1996. . . . .	30
2.5.	Geometría de un punto cuántico lateral. El punto es moldeado por la deflexión del gas de electrones bidimensional por debajo de los electrodos. Las áreas azules denotan los lugares donde se encuentran los electrodos, mientras que la línea negra representa la frontera entre la región deflectada (blanco) y la no deflectada (gris) del 2DEG. . . . .	31
2.6.	Puntos cuánticos con geometrías cilíndrica, cubica y piramidal . . . . .	31
3.1.	Arreglo de puntos cuánticos acoplados. Los electrodos superiores proveen un confinamiento lateral y permiten realizar la interacción de intercambio para operaciones de 2 – <i>qubits</i> (en esta imagen los dos puntos de la izquierda están desacoplados, mientras que los dos de la derecha están acoplados) . . . . .	35

3.2. Vista superior de un sistema de dos punto cuánticos acoplado lateralmente, cada uno con un electrón con diferente estado de espín. Los electrodos superiores son los encargados de realizar el confinamiento lateral. . . . .	36
4.1. Diagrama esquemático de un punto cuántico bajo un potencial de confinamiento paraboloides . . . . .	41
4.2. Comportamiento energético de un punto cuántico de radio $\rho$ constante y bajo la acción de campo magnético externo $\mathbf{B}$ paralelo al eje $z$ en terminos de $\omega_c/\omega_0$ . . . . .	47
4.3. Espectro de energía para un punto cuántico de radio variable sobre el cual actúa un campo magnético constante $\mathbf{B}$ en la dirección $z$ . . . . .	48
4.4. Espectro de Fock-Darwin para un punto cuántico considerando los efectos de espín. . . . .	49
5.1. a. Movimiento del electrón según el sistema de referencia ubicado en el núcleo. b. Movimiento del núcleo según el sistema de referencia ubicado en el electrón . . . . .	52
5.2. Comportamiento energético de la perturbación debida al acoplamiento espín orbita en función del campo magnético externo. . . . .	56
6.1. Intercambio de energía $J(B)$ para diversos campos eléctricos $E$ con $a = 0,7a_b$ y $c = 2,36$ . . . . .	66
6.2. Intercambio de energía $J(d)$ para diversos campos eléctricos $E$ con $a = 0,7a_b$ y $c = 2,36$ . . . . .	66
6.3. Transición del intercambio de energía $J(E)$ para diversos campos magnéticos $B$ con $a = 0,7a_b$ y $c = 2,36$ . . . . .	67
6.4. Esquema de switcheo propuesto en este trabajo para un sistema de dos cuánticos acoplados lateralmente, operando como una compuerta cuántica. . . . .	68

# Contenido

<b>Resumen</b>	<b>11</b>
<b>Introducción</b>	<b>12</b>
<b>1. Teoría Cuántica de la Información</b>	<b>14</b>
1.1. El Qubit . . . . .	14
1.2. Operadores Unitarios . . . . .	16
1.3. Mediciones Cuánticas . . . . .	17
1.4. Compuertas Cuánticas . . . . .	18
1.5. Paralelismo Cuántico . . . . .	20
1.6. Entrelazamiento . . . . .	22
1.7. Decoherencia . . . . .	23
<b>2. Puntos Cuánticos</b>	<b>24</b>
2.1. ¿Qué es un Punto Cuántico? . . . . .	24
2.2. Técnicas de Fabricación . . . . .	26
2.2.1. Suspensiones Coloidales . . . . .	26
2.2.2. Litografía . . . . .	28
2.2.3. 2DEG . . . . .	30
2.2.4. Crecimiento Stranski-Krastinow . . . . .	31
2.2.5. Técnica de los Laboratorios Fujitsu . . . . .	32
2.3. Aplicaciones . . . . .	33
<b>3. Computación Cuántica con Puntos Cuánticos</b>	<b>34</b>
3.1. Arquitectura de Loss&DiVincenzo . . . . .	35
3.1.1. Criterios de DiVincenzo . . . . .	38

<b>4. Punto Cuántico con un Electrón</b>	<b>40</b>
4.1. Características del Sistema Físico . . . . .	40
4.2. Punto Cuántico sin Efectos de Espín . . . . .	42
4.2.1. Hamiltoniano en el plano $xy$ . . . . .	42
4.2.2. Hamiltoniano en la dirección $z$ . . . . .	45
4.3. Punto Cuántico con Efectos de Espín . . . . .	45
4.4. Resultados . . . . .	46
4.5. Conclusiones . . . . .	50
<b>5. Interacción Espín-Orbita</b>	<b>51</b>
5.1. Interacción Espín-Orbita en un Átomo con un Electrón . . . . .	51
5.2. Energía debida al acoplamiento espín-orbita en un punto cuántico . .	53
5.3. Resultados . . . . .	56
5.4. Conclusiones . . . . .	57
<b>6. Intercambio de Energía</b>	<b>58</b>
6.1. Autofunciones en el Estado Fundamental . . . . .	58
6.2. Método de Heitler-London . . . . .	62
6.3. Evaluación del Intercambio de Energía . . . . .	63
6.4. Resultados . . . . .	65
6.5. Conclusiones . . . . .	68
<b>7. Conclusiones Generales</b>	<b>70</b>
<b>A. Operadores de Creación y Destrucción</b>	<b>73</b>
A.1. Reglas de Conmutación . . . . .	73
<b>B. Interacción Espín Orbita</b>	<b>76</b>
B.1. Hamiltoniano de la Interacción Espín Orbita . . . . .	76
<b>C. Evaluación del Término de Intercambio J</b>	<b>78</b>
C.1. Evaluación de $\Upsilon_1$ . . . . .	78
C.2. Evaluación de $\Upsilon_2$ . . . . .	80
C.3. Evaluación de $\Upsilon_3$ . . . . .	81
C.4. Evaluación de $\Upsilon_4$ . . . . .	84
C.5. Evaluación de $\Upsilon_5$ . . . . .	86
<b>Bibliografía</b>	<b>94</b>

## Resumen

Teniendo como escenario el área de la computación cuántica y considerando la arquitectura propuesta por Loss y DiVincenzo en 1998, se determina analíticamente y en forma detallada el acoplamiento de intercambio ó intercambio de energía  $J$  entre los estados singlete y triplete de un sistema de dos puntos cuánticos de Arsenuro de Galio (GaAs) que están acoplados lateralmente y sobre los cuales actúa un campo magnético  $\mathbf{B}$  paralelo al eje  $z$  y un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  paralelo al plano  $xy$  haciendo uso para ello de la aproximación de Heitler London. Para este proceso, inicialmente se determinan las funciones de onda y los niveles de energía de un punto cuántico bajo la influencia de un campo magnético paralelo a la dirección  $z$ , utilizando operadores de creación y destrucción. En segunda instancia se determina el efecto de acoplamiento espín orbita sobre este sistema. Finalmente, empleando el formalismo de operadores de creación y destrucción así como relaciones de translación en espacio y momentum, se calcula el intercambio de energía  $J$ . Los resultados obtenidos en este trabajo presentan una dependencia entre el intercambio de energía  $J$  y el campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , el campo magnético  $\mathbf{B}$  y la distancia de separación  $d$  entre los dos puntos cuánticos, los cuales abren la posibilidad de un control experimental de este parámetro, que no solo tiene aplicaciones para la construcción de compuertas cuánticas con puntos cuánticos, sino que adicionalmente permite explorar nuevos mecanismos de control del espín electrónico en materiales semiconductores más comunes como el Silicio (Si), el Germanio (Ge) y el Seleniuro de Cinc (ZnSe).

# Introducción

La Computación Cuántica y la Teoría de la Información Cuántica [1] son una excitante área de investigación y un desafío intelectual que toca los fundamentos de la ingeniería, la informática y la física cuántica, ofreciendo velocidades de procesamiento y capacidad de almacenamiento de información mucho mayores que las logradas e imaginadas hasta la fecha, lo que conlleva que en la actualidad sea una de las líneas con mayor desarrollo técnico, científico y tecnológico, donde el modelo de computabilidad ofrecido por estas teorías proporciona el primer desafío creíble de la “Tesis modificada de Church-Turing” [1], la cual establece que cualquier modelo “razonable” de computación puede ser simulado eficazmente por una Máquina de Turing probabilística [2].

Actualmente, la investigación en esta área ha sido encaminada fundamentalmente a la producción de un dispositivo de cómputo revolucionario que haga uso intensivo de los efectos mecánico cuánticos, los cuales presentan una mayor eficiencia y velocidad en procesamiento de información, es por ello que en el presente existen múltiples arquitecturas que plantean la opción de construir un computador cuántico. Uno de los esquemas con mayor auge es el propuesto en 1998 por Daniel Loss y David P. DiVincenzo [3], en el cual sistemas de dos puntos cuánticos acoplados, cada uno con un electrón, operan como compuertas cuánticas y el rol de qubit es realizado por el espín del electrón. El gran interés en utilizar este soporte físico para un computador cuántico radica en la inmensa cantidad de trabajos tanto teóricos como experimentales que se han realizado en los últimos 30 años en semiconductores de baja dimensionalidad, específicamente en puntos cuánticos, ofreciendo un gran conocimiento y soporte en esta temática, adicionalmente el hecho de emplear una tecnología basada en semiconductores, ofrece gran versatilidad al pensar en adaptar con eficiencia este nuevo esquema computacional a los actuales sistemas de procesamiento de información.

Teniendo este escenario como referencia y considerando el modelo de Loss y DiVincenzo [3], en este trabajo se determina el factor de acoplamiento de intercambio  $J$  (conocido también como intercambio de energía) de un sistema de dos puntos

cuánticos de Arsenuro de Galio (GaAs) acoplados lateralmente[4] a través de la aproximación Heitler-London[5, 6]. La importancia de  $J$  radica en que el problema de rotación de acoplamiento de qubits para la constitución de compuertas cuánticas empleando puntos cuánticos acoplados se reduce exclusivamente a determinar como este factor puede ser controlado experimentalmente. Es así como en esta investigación se logra determinar que tal control experimental de  $J$  se puede lograr a travez de la aplicación de campos electromagnéticos externos, así como tambien a travez de la variación en la distancia de separación entre los dos puntos cuánticos acoplados lateralmente. De esta forma, la arquitectura de Loss y DiVincenzo abre la posibilidad de implementar sistemas de puntos cuánticos acoplados entre si que al comportarse como compuertas cuánticas universales “*XOR*” y una de “1-qubit” [1, 7, 8] operen como un computador cuántico.

Este trabajo se encuentra dividido en seis capítulos. En el capítulo 1 se hace una descripción de los elementos que constituyen la teoría de la información cuántica y como los procesos mecánico cuánticos son empleados para el procesamiento de la información. En el segundo capitulo se presenta una breve introducción a los puntos cuánticos, resaltando sus características, técnicas de fabricación y aplicaciones tecnológicas. El tercer capítulo presenta la arquitectura de Loss y DiVincenzo, la cual describe a un sistema de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente y como estos pueden operar como una compuerta cuántica. Adicionalmente, se exhibe una descripción de los requisitos necesarios que debe cumplir cualquier sistema físico que se desee emplear para la implementación de un computador cuántico. Los capítulos 4, 5 y 6 son los resultados de la investigación propuesta para este trabajo de grado. En el capitulo 4 se describe la modelación de un punto cuántico con un electrón bajo la influencia de un campo magnético externo dirigido en la dirección  $z$ . En el capitulo 5 se determina la interacción espín-orbita para este mismo sistema y finalmente en el capitulo 6 se muestra detalladamente el calculo del factor de intercambio ó intercambio de energía  $J$  para un sistema de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente, cada uno con un electrón, el cual representa el objetivo principal de esta investigación. Finalmente se presentan algunas conclusiones generales de este trabajo.

# 1. Teoría Cuántica de la Información

Contra la estupidez, los propios dioses luchan en vano.  
*Schiller.* (Dramaturgo Alemán)

La computación cuántica[1] y la teoría cuántica de la información[9] no son otra cosa que una modificación de nuestro concepto de procesamiento de información y en este contexto hacen uso de efectos mecánico-cuánticos[10] que rigen el mundo subatómico, como la superposición el entrelazamiento<sup>1</sup> de estados. Este nuevo esquema, en comparación con la computación clásica, presenta un escenario de trabajo que no solo se restringe a dos únicos estados de operación  $(0, 1)$ , al contrario, se pueden obtener multitud de estados intermedios como resultado de la superposición de estas dos posibilidades. Esto trae consigo que al ser realizada cualquier operación, el sistema permita evaluar todas las posibilidades en un solo paso, es decir, realizar una computación en paralelo, mientras que clásicamente, esta evaluación se lleva a cabo independiente una de otra y en pasos diferentes. Esta característica de paralelismo cuántico se traduce en una reducción del tiempo y aumento en la velocidad de procesamiento de la información. En el presente capítulo se presentan los elementos fundamentales que hacen posible utilizar los fenómenos mecánico-cuánticos como herramientas de procesamiento de información.

## 1.1. El Qubit

Al igual que en los sistemas clásicos de cómputo en los cuales la mínima unidad de información es el bit, en la teoría de la computación cuántica este elemento tiene su contraparte y se denomina bit cuántico ó qubit[11, 1]. Aunque esta entidad se describe como un objeto matemático con ciertas propiedades específicas, tiene una realidad física, la cual se representa a través de un sistema cuántico de dos estados, pero en el cual todo su tratamiento es enteramente abstracto, dando libertad de generar una

---

<sup>1</sup>Aunque en la literatura científica se usa la palabra entanglement, en este trabajo se emplea su mejor traducción que es entrelazamiento.

teoría general de la computación e información que no depende del sistema físico que se emplee para su implementación. Al considerar sistemas de esta clase como mínimas unidades de información, es necesario para su correcta descripción, implementar el formalismo matemático de la mecánica cuántica. Aunque existen varios esquemas que describen los estados de un sistema cuántico[12, 13], el más conveniente y conciso es la notación Dirac[4], la cual se ha convertido en un estándar en la física moderna, donde cualquier estado es representado por un vector ket, denotado por  $|\ \rangle$  y las operaciones sobre estos se realizan a través de operadores que son transformaciones lineales que actúan sobre el ket.

Considerando esta representación, los dos estados base posibles para un qubit son  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  que corresponden en analogía al 0 y 1 de un bit clásico, donde estos vectores pertenecen a un espacio de Hilbert de funciones de onda de cuadrado integrable de infinitas dimensiones[14, 15]. Como se mencionó, la potencialidad de este esquema radica en que el qubit puede tomar otro valor diferente a los dos antes mencionados, siendo esto posible debido a la combinación lineal de estados, por lo cual un qubit en su forma más general está representado por

$$|\psi\rangle = a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle \quad (1.1)$$

Donde  $a_0$  y  $a_1$  son números complejos que satisfacen la relación de normalización  $|a_0|^2 + |a_1|^2 = 1$  y los kets  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  se representan por los vectores columna

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

La habilidad de un sistema cuántico de existir simultáneamente en una mezcla de todos los estados permitidos es conocida como "Principio de Superposición"[15, 16, 17] y es una característica completamente cuántica. Esto significa que mientras en un sistema clásico el bit tiene una información concreta a la cual se puede acceder sin perturbarla, el qubit siempre proporciona un resultado probabilístico y solo en aquellos casos en que  $a_0 = 0$  ó  $a_1 = 0$  el estado del sistema permanece inalterado.

Consideremos ahora la situación en la cual hay más de un qubit, es decir, un registro de memoria cuántica. En tal situación, el espacio de estados es el resultado del producto tensorial de los espacios asociados a cada uno de los qubits. Si estos se representan por  $L_1^2$  y  $L_2^2$  de dimensiones  $n$  y  $m$  respectivamente, el nuevo espacio vectorial es  $L_{12}^2 = L_1^2 \otimes L_2^2$  de dimensión  $mn$  que a su vez es el número de elementos de la base. Tomando el caso particular de un sistema de registro cuántico de dos qubits ( $2 - qubits$ ) en el cual la dimensión del espacio es  $2^2 = 4$ , su base natural esta constituida por 4 vectores. Aquí el qubit  $|\psi\rangle$  se describe de acuerdo a la superposición coherente

$$|\psi\rangle = a_{00} |00\rangle + a_{01} |01\rangle + a_{10} |10\rangle + a_{11} |11\rangle \quad (1.3)$$

Donde  $a_{mn(ij)}$  es un número complejo. De esta manera, para representar completamente el estado del sistema es necesario 4 número complejos. Considerando ahora un sistema de  $N$  qubits, la base consta de  $2^N$  elementos de estados accesibles. En forma más general, tomando cada uno de los elementos de la base mediante el ket  $|x\rangle$  con  $x = 0, 1, 2, 3, \dots, 2^N - 1$ , el qubit se puede representar así

$$|\psi\rangle = \sum_{x=0}^{2^N-1} a_x |x\rangle \quad (1.4)$$

Es vital considerar que no es correcto tratar de dar una interpretación al qubit desde un punto de vista probabilístico de la teoría clásica de la computación, debido a que esa aparente complejidad en la descripción de estos sistemas es la encargada de presentar las mayores ventajas con respecto al modelo clásico. Es así como en el estado cuántico que se describe por las ecuaciones (1.1) y (1.4), no solamente hay una combinación probabilística de cada estado, si no que adicionalmente se incorporan los efectos de Interferencia y Entrelazamiento, los cuales permiten realizar un masivo procesamiento de información que finalmente se traduce en un aumento exponencial en la velocidad de calculo con respecto a los dispositivos clásicos en los cuales esta característica es de tipo polinomial.

## 1.2. Operadores Unitarios

Consideremos el comportamiento de sistemas cuánticos estáticos, es decir, sistemas que no cambian ni evolucionan a otro estado con el tiempo, pero que si lo hacen cuando un factor externo incide sobre ellos. Su dinámica esta descrita por la ecuación de Schrödinger y los cambios de estos sistemas debido a factores externos son expresados por transformaciones lineales u operadores representados por una matriz cuadrada, los cuales pueden tomarse estado a estado en un camino que preserve la ortogonalidad, siendo los operadores unitarios o transformaciones unitarias[1] los únicos elementos matemáticos que cumplen con este requisito. Tomando un conjunto de  $n$  sistemas cuánticos de 2 estados, el operador que actúa sobre este conjunto es una matriz de dimensión  $2^n \times 2^n$ . Particularmente, considerando como ejemplo un conjunto de dos sistemas de este tipo, sobre el cual esta actuando un operador se tiene

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \chi & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha a_0 + \beta a_1 \\ \chi a_0 + \delta a_1 \end{pmatrix}, \quad (1.5)$$

donde el operador evolución esta dado por

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \chi & \delta \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

el cual es unitario, por lo tanto  $\hat{U}^*\hat{U} = 1$  y  $\hat{U}^*$  es el complejo conjugado de  $U$  donde Dentro del estudio de la computación cuántica este tipo de operadores juega un papel fundamental ya que abren la posibilidad de crear esquemas de procesamiento de información reversibles, permitiendo al sistema volver a su estado inicial después de llevar a cabo cualquier proceso.

### 1.3. Mediciones Cuánticas

A diferencia de los sistemas clásicos convencionales en los cuales la realización de una medida no afecta su estado, en los sistemas cuánticos este si es afectado cuando se ejecuta un proceso de medida, lo cual trae como consecuencia la evolución hacia otro estado completamente diferente al presentado inicialmente y donde adicionalmente la medida obtenida sobre el sistema es de tipo probabilístico. Para aclarar y enfatizar estas ideas es necesario retomar la ecuación (1.4) con su base natural  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ . Supongamos que se desea medir cuando el sistema se encuentra en cierto estado  $|\phi_n^m\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ , esto solo es posible determinando la probabilidad de encontrar el autovalor  $a_n$  de  $\hat{A}$  asociado a este estado, la cual esta dada por

$$P_{a_n} = \sum_{m=1}^{g_n} |\langle \phi_n^m | \psi \rangle|^2, \quad (1.7)$$

donde  $g_n$  es el índice de degenerancia del autovalor  $a_n$ . Cuando el 2 – qubit dado en la ecuación (1.3) es medido con respecto a la base, la probabilidad de encontrar un estado  $|0\rangle$  en el primer qubit del 2 – qubit es

$$P_{1|0\rangle} = |a_{00}|^2 + |a_{01}|^2, \quad (1.8)$$

de forma análoga, la probabilidad de encontrar un estado  $|1\rangle$  en el primer qubit del 2 – qubit es

$$P_{1|1\rangle} = |a_{10}|^2 + |a_{11}|^2. \quad (1.9)$$

Igualmente, para el segundo qubit es posible determinar la probabilidad de encontrar los estados  $|0\rangle$  y un  $|1\rangle$  en el 2 – qubit, estan representadas por

$$P_{2|0\rangle} = |a_{00}|^2 + |a_{10}|^2, \quad P_{2|1\rangle} = |a_{01}|^2 + |a_{11}|^2 \quad (1.10)$$

A diferencia de las medidas realizadas a elementos macroscópicos en los cuales tales procesos arrojan una cantidad absoluta, en los sistemas microscópicos el proceso de medida de sus estados genera probabilidades de encontrarlo en cierta configuración. Inmediatamente después de ser realizada la medición, la mecánica cuántica predice

que el sistema evoluciona a otro estado normalizado. Considerando que el primer qubit esta en  $|1\rangle$ , el 2 – *qubit* evoluciona al estado

$$|\psi^*\rangle = \frac{a_{10}|10\rangle + a_{11}|11\rangle}{\sqrt{|a_{10}|^2 + |a_{11}|^2}} \quad (1.11)$$

Si por el contrario, el primer qubit esta en  $|0\rangle$ , el 2 – *qubit* evoluciona a un nuevo estado representado por

$$|\psi^*\rangle = \frac{a_{00}|00\rangle + a_{01}|01\rangle}{\sqrt{|a_{00}|^2 + |a_{01}|^2}} \quad (1.12)$$

Expresiones similares a las anteriores pueden ser determinadas para la medida del segundo qubit del 2 – *qubit*, donde claramente queda representado el carácter probabilístico de estas entidades.

## 1.4. Compuertas Cuánticas

De la misma forma que en la electrónica convencional, en computación cuántica existen circuitos que realizan y llevan a cabo los procesos de cómputo. En este esquema, una compuerta lógico cuántica es una función que realiza un operador unitario en un conjunto de qubits seleccionados en un cierto periodo de tiempo. En la teoría clásica las compuertas lógicas constituyen un conjunto claramente finito[18], debido a que el espacio de estados de un qubit es continuo, el número de posibles transformaciones unitarias también lo es, y, en consecuencia, existen infinitas compuertas cuánticas. Sin embargo, es posible demostrar[8, 7, 19, 20] que cualquier transformación unitaria en un conjunto de  $n$  qubits puede realizarse mediante la aplicación sucesiva de tan sólo dos compuertas cuánticas: la asociada a la operación *XOR*, y la de rotación,  $\hat{R}(\theta, \phi)$ .

El operador *XOR* es un caso particular de un conjunto de operadores que actúan sobre un par de qubits y que pueden ser representados mediante la expresión

$$XOR = |0\rangle\langle 0| \hat{I} + |1\rangle\langle 1| \hat{U}, \quad (1.13)$$

donde  $\hat{U}$  representa una transformación unitaria cualquiera sobre un único qubit. Es decir, mientras que el primer qubit permanece inalterado, al segundo se le aplica  $\hat{I}$  ó  $\hat{U}$  dependiendo del estado del primero. Concretamente, la compuerta *XOR* transforma la secuencia ordenada de estados  $|x\rangle|y\rangle$  en  $|x\rangle|x \oplus y\rangle$ , donde  $\oplus$  identifica la operación lógica O-exclusiva. Por otra parte, la operación de rotación  $\hat{R}(\theta, \phi)$  se puede describir como

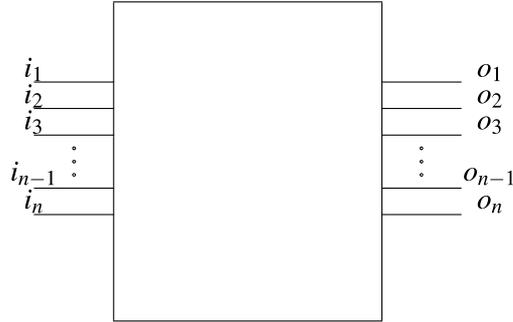


Figura 1.1: Compuerta Reversible con  $n$  entradas ( $i_n$ ) y  $n$  salidas  $o_n$

$$\hat{R}(\theta, \phi) = |0\rangle (\cos[\theta/2] \langle 0| - ie^{i\theta} \sin[\theta/2] \langle 1|) + |1\rangle (-ie^{i\theta} \sin[\theta/2] \langle 1| \langle 0| + \cos[\theta/2]) \quad (1.14)$$

Aquí es necesario que  $\theta$  y  $\phi$  sean reales, ello con el fin de conseguir efectuar una transformación  $\hat{R}(\theta, \phi)$  (con  $\theta$  y  $\psi$  continuos) mediante el empleo reiterado de una misma compuerta cuántica con estos valores perfectamente determinados.

Una característica muy importante que presentan los circuitos cuánticos es su capacidad de hacer computación reversible. Para entender este concepto, es necesario considerar un tipo de computación el cual se representa como una caja negra con un conjunto de líneas de entrada y de salida (Figura 1.1).

En este esquema de computo, por cada línea de entrada hay una y solo una línea de salida, la cual esta determinada por su entrada. En el caso mas trivial las señales simplemente se propagan a través de la caja sin modificarse. En estas circunstancias, la salida no lleva más información que la entrada. Si se conoce la salida, es posible calcular la entrada, por lo cual se dice que la computación de este proceso es reversible. Muy distinto es lo que ocurre con una compuerta lógica convencional, como por ejemplo la compuerta AND (Figura 1.2).

Para este caso se tienen dos líneas de entrada y solo una de salida. Hay tres posibles estados que pueden conducir a una salida cero. Por lo tanto se ha perdido irremediablemente información sobre la entrada y consecuentemente la compuerta AND es irreversible. Esta reducción en el espacio de fase de las entradas hacia las salidas trae consigo una inevitable disminución de la entropía[21]. Esto debe ser compensado con alguna generación de calor, por consiguiente, sistemas no reversibles se calientan. En 1982, Charles Bennet de IBM demostró que sistemas de computo reversible operan

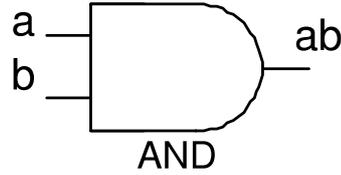


Figura 1.2: Compuerta lógica AND

como maquinas de Carnot, donde los procesos de perdida de energía por disipación de calor son mínimos[22]. Desde el punto de vista nanoscópico, las compuertas cuánticas si son reversibles debido que al estar descritas las operaciones que ellas realizan por operadores unitarios, tal como se presenta en la sección 1.2, estos procesos de reversibilidad aparecen de forma natural, por consiguiente es de esperar que los sistemas de computo mecánico cuántico presenten además de una alta velocidad de procesamiento una mayor eficiencia termodinámica, con un mínimo de consumo de energía.

## 1.5. Paralelismo Cuántico

Una de las características que convierte a la computación cuántica en una de las áreas más prometedoras es el poder solventar en mucho menos tiempo problemas intratables por la computación clásica, realizando para ello un procesamiento de información en paralelo de manera masiva. Esta idea, presentada por David Deutsch[2] en 1985 se esquematiza de la siguiente forma: Supóngase que se posee un computador cuántico que puede hacer evolucionar dos qubits cualesquiera según el operador unitario  $\hat{U}$  cuya transformación esta representada por

$$\hat{U} : |x\rangle |y\rangle \rightarrow |x\rangle |y \oplus f(x)\rangle. \quad (1.15)$$

Este operador cambia el segundo qubit  $|y\rangle$  a cero si  $f$  actuando en el primer qubit  $|x\rangle$  es 1 y no si  $f$  es 0<sup>2</sup>. Tomando  $|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  se tiene

$$\begin{aligned} \hat{U} : |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) &\rightarrow |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle) \\ &= |x\rangle (-1)^{f(x)} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), \end{aligned} \quad (1.16)$$

---

<sup>2</sup>La operación  $\oplus$  denota la adición binaria o en modulo 2, la cual esta definida por  $0 \oplus 0 = 0$ ,  $0 \oplus 1 = 1$ ,  $1 \oplus 0 = 1$  y  $1 \oplus 1 = 0$

donde se ha aislado la función  $f$  en una fase dependiente de  $x$ . Si  $|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  y  $|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  se comprueba de inmediato que

$$\hat{U} : \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [(-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(1)}|1\rangle] \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (1.17)$$

De esta manera, con solo realizar una proyección ortogonal del primer qubit en una base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ , donde

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle), \quad (1.18)$$

ya se ha resuelto con una única computación el problema planteado en la ecuación (1.15). Esto es posible debido que al utilizar un dispositivo cuántico, este no se limita a evaluar  $f(0)$  ó  $f(1)$ , por el contrario, actúa sobre una superposición de los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  permitiendo extraer información global de la función, es decir, información que depende de la combinación entre  $f(0)$  y  $f(1)$ . Este es el paralelismo cuántico.

De igual manera, se puede utilizar el procesamiento en paralelo para conocer algunas propiedades de funciones más complejas. Así, si se quisiese calcular, para todas las posibles combinaciones de un conjunto de  $N$  bits, el valor de una función cualquiera  $f$ , un computador clásico necesitaría realizar  $2^N$  evaluaciones de la función. Sin embargo, utilizando uno cuántico, solamente se precisa efectuar, sobre un conjunto de  $N$  qubits, una transformación dada por el operador unitario  $\hat{U}_r$  tal que

$$\hat{U}_r : |x\rangle |0\rangle \rightarrow |x\rangle |f(x)\rangle, \quad (1.19)$$

eligiendo que todos los registros de entrada se encuentren en el estado  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ , el estado del conjunto sería

$$\overbrace{\left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \right] \otimes \cdots \otimes \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \right]}^N = \frac{1}{2^{N/2}} \sum_{x=0}^{2^N-1} |x\rangle, \quad (1.20)$$

el cual representa el producto tensorial de los  $N$  estados de entrada. Al aplicar sobre (1.20) el operador  $\hat{U}_r$  se tiene

$$\frac{1}{2^{N/2}} \sum_{x=0}^{2^N-1} |x\rangle |f(x)\rangle, \quad (1.21)$$

y finalmente este estado recoge todas las propiedades globales de la función  $f$ .

## 1.6. Entrelazamiento

El entrelazamiento ó entanglement constituye probablemente el elemento clave que determina la gran diferencia entre las teorías cuántica y clásica de la información y es esta propiedad en la cual están basadas las compuertas cuánticas de 2-qubits. Sea el sistema cuántico compuesto por dos subsistemas idénticos  $A$  y  $B$ , cuyos espacios de estados respectivos,  $L_1^2$  y  $L_2^2$ , se consideran bidimensionales. Si se supone que las bases de  $L_1^2$  y  $L_2^2$  están formadas por los kets  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  el espacio de estados del sistema compuesto,  $L_{12}^2 = L_1^2 \otimes L_2^2$ , tendrá como base natural el conjunto  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ . Sin embargo, no todos los estados pertenecientes a  $L_{12}^2$  tienen una interpretación física clara; así, mientras que, por ejemplo, en  $|01\rangle$  es evidente que  $A$  se encuentra en  $|0\rangle$  y  $B$  en  $|1\rangle$ , otras situaciones, como la superposición  $1/2(|00\rangle + |01\rangle)$ , son más difíciles de interpretar, pues, aunque en este caso el estado de  $A$  es  $|0\rangle$ , el de  $B$  es una superposición de  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ . Finalmente, se pueden considerar ejemplos en los que no es posible asociar un estado cuántico a ninguno de los dos subsistemas de manera independiente: tal circunstancia se da, por ejemplo, en  $|\psi\rangle = 1/\sqrt{2}(|00\rangle + |11\rangle)$ . Este último tipo de estado, en el que no es posible una factorización de la forma  $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ , se denomina entrelazamiento.

Este tipo de estados tienen la característica de que si se realiza una media “local” en cualquiera de los dos subsistemas, no se adquiere ninguna información, es decir, el resultado es totalmente aleatorio (el estado se dice completamente mixto). La consecuencia inmediata de este hecho es que no se puede crear esta clase de estados mediante transformaciones realizadas por operadores unitarios del tipo  $U_A \otimes U_B$ ; la única manera de entrelazar dos sistemas es permitir que interactúen entre ellos.

Albert Einstein, Boris Podolsky y Nathan Rosen[23] fueron los primeros en percatarse de las consecuencias de la existencia de estos estados; pero, pareciéndoles del todo incompleta esta característica de “no localidad” de la Mecánica Cuántica, propusieron una teoría local de variables ocultas. Tres décadas más tarde, John Bell [24, 25, 26] consiguió probar que, mediante esquemas que supusiesen un comportamiento local de ambos subsistemas, es imposible imitar las correlaciones existentes entre los resultados obtenidos en la medida de dos subsistemas entrelazados. Los experimentos de Alan Aspect y su grupo [27, 28, 29] confirmaron las predicciones de la Teoría Cuántica y demostraron, por tanto, que el comportamiento de la naturaleza es “no local”.

## 1.7. Decoherencia

La decoherencia es el proceso físico por el cual el estado que describe la evolución cuántica de un sistema pierde su coherencia de fase[30, 31]. El origen físico de este proceso es la interacción entre el sistema en consideración y su entorno o ambiente (es decir, los grados de libertad externos o internos que no son accesibles al observador). Esto se debe a que tal interacción causa que las variables del sistema ( $S$ ) y del ambiente ( $A$ ) se correlacionen (de manera no separable) en el transcurso de la evolución, dando lugar a que los efectos de interferencia del sistema cuántico se pierdan irremediabilmente[30]. Esto sucede aún cuando el estado inicial del sistema no contenga correlaciones entre ambas variables y es una consecuencia del carácter unitario de la dinámica.

A pesar que la decoherencia y el entanglement son dos conceptos muy importantes que tiene profundas implicaciones en la teoría de la información cuántica, el estudio de estos tópicos en un sistema de puntos cuánticos acoplados desborda el alcance de esta investigación y no son explorados en el presente trabajo.

Hasta este punto se ha presentado un escenario que permite utilizar los fenómenos físico-cuánticos como elementos de procesamiento y almacenamiento de información, independiente del sistema físico empleado para su construcción. En el siguiente capítulo se describe uno de los más importantes sistemas físicos que en la actualidad es considerado como uno de los mas prometedores para la implementación de un dispositivo de computo cuántico y son los puntos cuánticos.

## 2. Puntos Cuánticos

En los últimos años, los procesos de reducción de las dimensiones de los materiales semiconductores en los cuales están localizados algunos electrones, es decir, confinamiento cuántico, han atraído ampliamente el interés en la comunidad científica, ello debido a las nuevas propiedades ópticas y electrónicas que surgen de este proceso de miniaturización, dando lugar a la aparición de una nueva área denominada física de sistemas de baja dimensionalidad. En ella se estudiaban dispositivos en los cuales ha sido posible reducir sus dimensiones entre 100nm y 10nm, tales como pozos, hilos y puntos cuánticos[32], trayendo como consecuencia una mayor cuantización de los niveles de energía, los cuales están separados entre sí unos cuantos meV.

En este capítulo se describe en particular uno de estos nuevos dispositivos, el cual es uno de los más estudiados en la actualidad, **el punto cuántico**. En la primera sección se presenta su definición y características más relevantes, en segunda instancia se describen algunas de las técnicas para su fabricación y finalmente se resalta su importancia y aplicabilidad en el desarrollo de nuevas tecnologías, entre ellas la computación cuántica.

### 2.1. ¿Qué es un Punto Cuántico?

Los Puntos Cuánticos, conocidos como nanocristales o átomos artificiales, son nanoestructuras sólidas semiconductoras compuestas (GaAs, GaAsAl, CdSe, PbS), de diámetros del orden del radio de un exciton de Bohr. Entre sus características más relevantes está el rango de propiedades eléctricas y ópticas que divergen de las presentadas por el material en bloque, las cuales pueden ser controladas en el proceso de fabricación.

Un punto cuántico actúa como una caja que confina partículas ya sea electrones, huecos, o excitones, cuyo número puede ser controlado aplicando una diferencia de

potencial a través de dos electrodos metálicos conectados al sistema. Este confinamiento crea una cuantización discreta de los niveles de energía, lo que implica la modificación de propiedades electrónicas y ópticas del sistema, permitiendo tener nuevas posibilidades en el diseño de átomos y moléculas artificiales. Adicionalmente, una de las grandes ventajas de este tipo de heteroestructuras es el pequeño número de portadores necesarios para definir un estado particular del sistema, en contraste con los dispositivos semiconductores normales, en los cuales es necesario el uso de muchos electrones para definir un cierto estado[33]. Un ejemplo de esta afirmación es considerar una compuerta lógica de negación construida de un material semiconductor en bloque. Para que este dispositivo opere correctamente, es necesario aplicar una diferencia de potencial mínima de 5 voltios[34], lo cual involucra la utilización de una gran cantidad de portadores. Si por el contrario consideramos una compuerta cuántica de negación (tal como se presenta en este trabajo en el capítulo 3), esta fácilmente se puede construir y operar con un punto cuántico el cual confina tan solo un electrón.

El descubrimiento de estas estructuras se remontan a principios de los años ochenta, cuando el grupo liderado por Alex Ekimov, del Instituto Fisicotécnico Ioffe de San Petersburgo observó unos espectros ópticos muy curiosos en muestras de vidrio en Sulfuro de Cadmio(CdSu) o Seleniuro de Cadmio (CdSe), ambos materiales Semiconductores. En la figura 2.1 se presenta un conjunto de nanocristales de Seleniuro de Cadmio de diversos tamaños y según los cuales la fluorescencia de estas estructuras bajo la acción de luz ultravioleta varia el color de emisión. El razonamiento presentado por Ekimov para explicar este fenómeno fue el siguiente: Debido al calentamiento de las muestras se provocó que pequeñas partículas de estos semiconductores denominadas nanocristalinas se precipitasen en el vidrio, causando un comportamiento óptico anómalo debido al confinamiento cuántico de los electrones en estos cristales. Una forma de comprender este razonamiento es imaginar un electron atrapado en una caja. Este sistema es modelado como un pozo de potencial infinito, donde los niveles de energía son de la forma

$$E_i = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2\mu l_i^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots; \quad i = 1, 2 \quad (2.1)$$

La mecánica cuántica a través del principio de dualidad onda-partícula establece que el electrón tiene propiedades de partícula y de onda. De la misma manera que una cuerda de violín esta sujeta por ambos extremos, la onda del electrón esta limitada por las paredes de la caja, que en este caso es el potencial de confinamiento infinito. La longitud de onda de las vibraciones de la cuerda (o del electrón) se debe ajustar a esos límites. El punto en el que la cuerda de un violín está sujeta cambia cuando el dedo del violín sube por el mastil. La longitud de la onda resultante se acorta y la frecuencia de las vibraciones de la cuerda aumenta al igual que la de todos sus armónicos. Si el tamaño de la caja que confina al electrón disminuye, el nivel ener-

gético más bajo del electrón (el análogo del tono fundamental del violín) aumentará, tal como esta representado por la ecuación (2.1). Para el caso de las nanocristalinas semiconductoras, como las descubiertas por Ekimov, el “tono” fundamental es la energía umbral de absorción óptica y los armónicos indican nuevas características de absorción a energías más elevadas.

En este punto cabe pensar lo siguiente: ¿Qué tamaño debe tener el nanocristal para que este fenómeno resulte visible?. En el vacío, los efectos de confinamiento son notorios cuando el electrón se encuentra atrapado en un volumen de 10 angstroms de diámetro. Adicionalmente, debido al confinamiento, los potenciales electrostáticos de los átomos de la red cristalina que constituyen el sistema se superponen, produciendo un medio donde las ondas del electrón se propagan con menos resistencia que en el espacio libre. En dicho medio, la masa efectiva del electrón es menor que la real. Para materiales semiconductores como el arsenuro de galio (GaAs), la masa efectiva ronda el 7% de lo que sería en el vacío y para el silicio (Si) es de 14% [32], por ello si se crea un punto cuántico con estos materiales, al medir el desplazamiento de la energía de absorción dado por la ecuación (2.1), el punto cuántico de GaAs presentaría un mayor corrimiento que un punto cuántico de Si, de aquí que gran parte de los estudios actuales en este tipo de estructuras se realicen con átomos artificiales de arsenuro de galio [35].

## 2.2. Técnicas de Fabricación

Originalmente, la mayoría de las investigaciones experimentales iniciales en este campo estuvieron concentradas en construir puntos cuánticos empotrados en matrices de vidrio o suspendidos en soluciones coloidales, resultando de ello cristales que tienen una forma más o menos esférica y con radios muy pequeños (Entre 1 y 100 nanómetros (nm)). En la actualidad existen nuevas técnicas que permiten fabricar sistemas compuestos de múltiples átomos artificiales, denominados puntos cuánticos autoensamblados, así como sistemas de puntos cuánticos con un solo electrón. En esta sección se describen algunas de las técnicas más relevantes existentes en la actualidad que permiten la fabricación de estas nanoestructuras.

### 2.2.1. Suspensiones Coloidales

Esta técnica, desarrollada en 1983 en los laboratorios Bell por Louis E. Brus [36] (actualmente en la Universidad de Columbia), permite obtener suspensiones coloidales de nanocristalinas precipitando soluciones que contenían los elementos que constituyen los semiconductores.



Figura 2.1: Nanocristales de Seleniuro de Cadmio en suspensión fluorescen bajo la luz ultravioleta. El color depende del tamaño de los nanocristales. Foto: Laboratorio de K. Jensen M. G. Bawendi C. Murray.

Las cristalitas crecen por adición de iones individuales hasta terminar su suministro. El tamaño del precipitado es controlado con un margen de  $0,5nm$  a  $50nm$  con solo variar el tiempo de precipitación. Este proceso permite obtener puntos cuánticos que no varían en más de un 15%. Al igual que en las nanocristalitas, la forma de determinar si en el sistema se presenta un confinamiento cuántico es midiendo el desplazamiento del nivel de energía de absorción fundamental a través de técnicas de espectroscopía. Adicionalmente este fenómeno se manifiesta en el cambio de color de los distintos agregados: conforme se va disminuyendo el diámetro de las nanocristalitas, estas pasan gradualmente del rojo oscuro al naranja y del naranja al amarillo, el cual se puede apreciar a simple vista, tal como se representa en la figura 2.1.

Con los posteriores trabajos de Paul Alivisatos en la universidad de Berkeley y Michael L. Steigerwald en la Universidad de Columbia, se amplió el número de elementos a partir de los cuales pueden formarse cristalitas, logrando la precipitación de compuestos tipo III - V como el Arsenuro de Galio, al igual que se logra estabilizar la superficie de los cristales semiconductores con una envoltura orgánica o “burbuja de Jabón” denominada micelio inverso, permitiendo un preciso control dimensional de la nanoestructura así como una mejora en su comportamiento cuántico. Debido a que las partículas de semiconductor tienen un cociente superficie-volumen muy grande y las superficies, en general, están constituidas por átomos con enlaces químicos sueltos, estos enlaces al estar mal cerrados pueden funcionar como amortiguadores y absorber la energía de electrones que vibren en modos de más alta energía (longitudes de onda más cortas), de ahí que muchas nanocristalitas no presenten las series armónicas de niveles de energía que se esperaría exhibiese un punto cuántico.

### 2.2.2. Litografía

Debido a las dificultades inherentes a la construcción de puntos cuánticos a partir de agregados de átomos, a mediados de los años ochenta se buscaron otras formas de fabricar este tipo de heteroestructuras. Es así como en 1987, Mark A. Reed logra construir los primeros puntos cuánticos litográficos[37], cortando pastillas de material de pozos cuánticos en pilares mediante técnicas avanzadas de impresión, similares a las utilizadas en la fabricación de circuitos integrados como el método de litografía de haz de electrones[37]. Considerando la figura 2.2, la técnica implementada es la siguiente

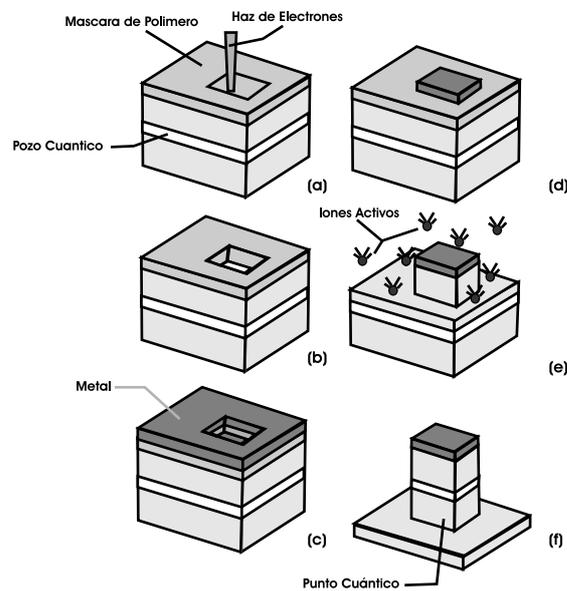


Figura 2.2: Fabricación de un punto cuántico vertical por la técnica de litografía

- (a) El haz de electrones recorre la superficie de un semiconductor que contiene una capa enterrada de material de pozos cuánticos.
- (b) Se elimina el material resistivo donde el haz haya dibujado una estructura.
- (c) Se deposita una capa metálica en la superficie resultante.
- (d) Un disolvente elimina el resto del material resistivo; el metal permanece solo donde el haz haya barrido el material resistivo.
- (e) Finalmente se obtiene un punto cuántico.

De esta manera se pueden construir puntos cuánticos verticales como pilares de un tamaño de hasta  $100nm$  como los que se aprecian en la figura 2.3, pero el proceso se torna cada vez más difícil al ir disminuyendo la escala a unos  $10nm$ , que es el límite del material resistivo mejor conocido. Por encima como por debajo del material de pozos cuánticos de estos pilares están las barreras túnel constituidas por capas aislantes ultrafinas, a las que siguen contactos conductores.

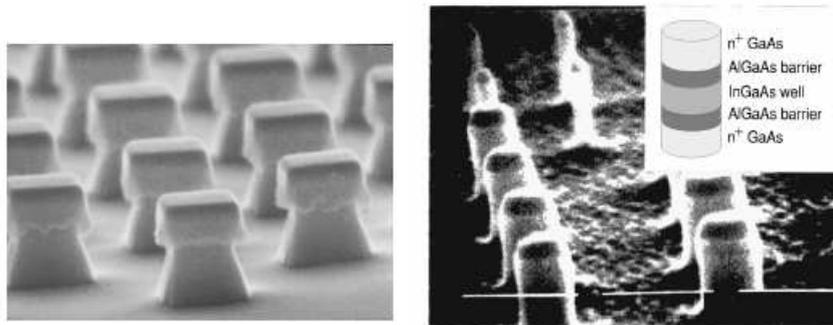


Figura 2.3: Izquierda. Gráfica de escaneamiento electrónico, muestra pilares de puntos cuánticos. Cada barra tiene una longitud de  $0.5 \mu m$ . En el gráfico de la derecha se ha insertado un diagrama esquemático de la estructura de un Punto Cuántico. Figura tomada de Reed et al. 1988

A pesar que el material aislante confina los electrones en el pozo, estos por efecto túnel pueden entrar o salir, lo que produce una pequeña corriente, la cual revela los estados de energía internos del pozo. Siempre que el voltaje a través del pozo suministre a los electrones una energía que coincida con la energía de uno de los estados permitidos (resonantes) del sistema, el flujo de corriente aumenta. Cuando el diámetro del pilar es muy pequeño, el espectro de corriente-voltaje presenta la serie armónica de picos característica del confinamiento cuántico, tal como se aprecia en la Figura 2.4, que muestra este comportamiento para un sistema de un punto cuántico vertical aislado de su entorno de diámetro  $0.5 \mu m$ . y a una temperatura de  $50mK$ [38], donde el primer pico corresponde al voltaje para el cual un electrón ingresa al punto y el número de electrones aumenta para cada uno de los subsecuentes picos.

Dentro de las ventajas que presenta este método esta el hecho que el punto cuántico queda revestido y es protegido de efectos de superficie. La parte superior e inferior del punto son interfases de monocristal construidas mediante epitaxia avanzada. Dado que el pilar conduce la electricidad, los enlaces en superficie del semiconductor que se

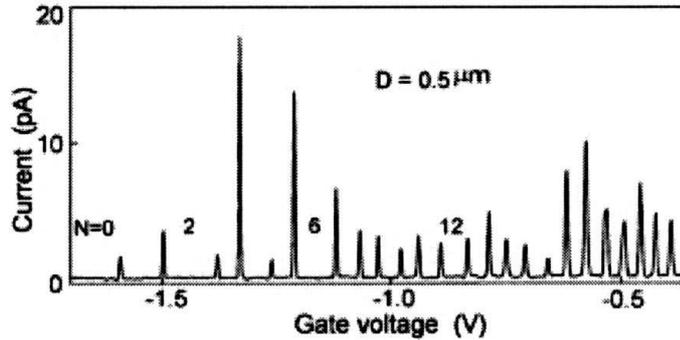


Figura 2.4: Medida del flujo de corriente a través de un punto cuántico a una temperatura de 50mK. para un rango de voltajes. Figura tomada de Tarucha et al. 1996.

emplean crean una carga positiva con respecto al núcleo interno del pilar. Esta carga repele hacia el interior, confinando cuánticamente los electrones de la superficie; la zona de la que han partido los electrones forma una funda aislante en torno al pilar, protegiendo los lados del punto.

### 2.2.3. 2DEG

Esta es una de las técnicas mas utilizadas para la fabricación de puntos cuánticos horizontales y consiste en depositar sobre una capa de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  una capa de GaAs por el método de “molecular-beam epitaxy” (MBE). Los electrones acumulados en la interfase de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $\approx 100\text{nm}$ ) forman un gas de electrones bidimensional (2DEG) ( $\approx 10\text{nm}$ ) como se aprecia en la figura 2.5, quedando confinados por este pozo cuántico y donde su movimiento en la dirección perpendicular a la interfase (dirección  $z$ ) esta restringida.

El número de electrones en el pozo puede ser controlado convenientemente dopando el material de la barrera  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  suficientemente lejos de la interfaz. De igual forma, es posible controlar la densidad de los electrones ubicando por encima de la barrera de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  conectores metálicos a los cuales se les suministra un voltaje, rechazando los electrones ubicados por debajo de el. Finalmente, el confinamiento tridimensional se logra haciendo uso del dopaje y de compresión a través de campos electricos (compresión electrostática)

De igual forma, en esta técnica la forma de los conectores metálicos determinan el tamaño, geometría y simetría del perfil confinante. Gracias a esta característica, que la propia naturaleza no ofrece, es posible estudiar una física atómica con átomos

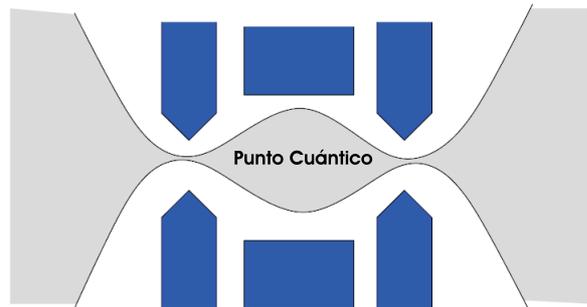


Figura 2.5: Geometría de un punto cuántico lateral. El punto es moldeado por la deflexión del gas de electrones bidimensional por debajo de los electrodos. Las áreas azules denotan los lugares donde se encuentran los electrodos, mientras que la línea negra representa la frontera entre la región deflectada (blanco) y la no deflectada (gris) del 2DEG.

artificiales de forma cuadrada, rectangular y piramidal, como los que se aprecia en la figura 2.6, lo cual abre posibilidades en el diseño y construcción de nuevos materiales.

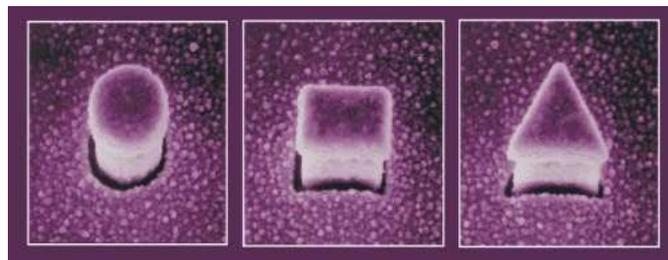


Figura 2.6: Puntos cuánticos con geometrías cilíndrica, cubica y piramidal

#### 2.2.4. Crecimiento Stranski-Krastinow

Esta técnica basada en el proceso de crecimiento de “Stranski Krastanow” (SK)[39], hace uso de un sustrato con parámetro de red diferente al de la película por crecer. Las tensiones generadas en la película por la diferencia en el parámetro de red, más la particular dinámica de crecimiento por MBE, hacen que la película se deposite de manera no uniforme sobre el sustrato y debido a ello se produce de manera natural un crecimiento en pequeñas islas, las cuales son las que se pretende usar como puntos cuánticos. La forma regulares de estas nanoestructuras es controlada variando

la temperatura de crecimiento de las películas. En semiconductores de tipo III-V, el crecimiento de SK se ha utilizado para crecer las islas de InAs en el GaAs y se ha demostrado que la fluctuación del tamaño de puntos es relativamente pequeña ( $< 10\%$ ).

El problema más grave con esta técnica es precisamente controlar el tamaño de las islas que por lo general varían de un punto a otro. Debido a que los puntos al ser excitados ópticamente emiten fotones cuya energía depende de sus dimensiones de las islas, un arreglo de puntos cuánticos autoensamblados tendría un espectro muy ancho, debido a la superposición de contribuciones de las islas de diferentes tamaños. En la actualidad, la investigación en la fabricación de puntos autoensamblados se concentra en desarrollar mecanismos que permitan controlar el tamaño de las islas, de tal manera que se pueda obtener un ancho de luminiscencia lo suficientemente angosto para aplicaciones optoelectrónicas.

### 2.2.5. Técnica de los Laboratorios Fujitsu

Este método, desarrollado en el 2002 por el centro de investigación en nanotecnología de los laboratorios Fujitsu[40] en cooperación con la Universidad de Tsukuba de Japón, combina la técnica de oxidación local usando el microscopio de fuerza atómica (AFM) con la técnica de crecimiento selectivo por “molecular-beam epitaxy” (MBE). En esta técnica, a través de la variación del voltaje y el tiempo de los pulsos aplicados a la punta de un microscopio de fuerza atómica, es posible crear un arreglo de puntos cuánticos con tamaños y formas definidas en un sustrato.

Los puntos cuánticos son producidos de la siguiente forma

- (a) El AFM se mueve a la proximidad de la superficie del semiconductor y se aplica un voltaje. Como resultado, las moléculas de agua presentes en la atmósfera se descomponen en iones de hidrógeno ( $H^+$ ) e hidróxido ( $OH^-$ ) debido al campo eléctrico local producido por el AFM y son los iones de hidróxido los que actúan sobre el semiconductor oxidándolo. El diámetro de los puntos de óxido puede ser controlado ajustando la duración del voltaje aplicado, así como del proceso de oxidación.
- (b) Los puntos de óxido fabricados en el paso anterior son removidos a través de una técnica de limpieza de ultrasonido con agua, formándose huecos en el sustrato.
- (c) Finalmente, usando un MBE, y similar a la técnica de Stranski-Krastinow, se hace un crecimiento de puntos, el cual solo se lleva a cabo únicamente en los huecos controlando los tiempos de crecimiento.

El uso de esta técnica permite fabricar puntos cuánticos con diámetros tan pequeños de hasta 20 nanómetros. Una particularidad de este técnica es su versatilidad para producir puntos de diversos tamaños en forma simultanea, los cuales son muy importantes para el diseño de sistemas de computo cuántico que utilizan el espín del electrón como qubits.

## 2.3. Aplicaciones

Debido a que las propiedades ópticas y de transporte que ofrecen los puntos cuánticos son configurables, estos han sido utilizados en diversos y nuevos campos de la tecnología como la fabricación de diodos laser, amplificadores, sensores remotos entre otros. Es así como en la actualidad es posible encontrar puntos cuánticos en nuestros hogares en algunos dispositivos electrónicos. El nuevo “Playstation 3” [41] y la nueva generación de reproductores de “DVD” emplean un haz laser azul para la lectura de datos. El laser azul, que hasta hace unos cuantos años eran imposible de implementar tecnológicamente, es en la actualidad una realidad, debido a la fabricación de un tipo especial de puntos cuánticos que al ser excitados ópticamente emiten una luz coherente en este rango del espectro visible, la cual al tener una longitud de onda más pequeña que los lasers convencionales permite grabar y leer mayor información tanto en “CD” como en “DVD”.

En otros campos como la biotecnología, los átomos artificiales son empleados como biosensores y sondas inorgánicas fluorescentes, las cuales esparcen luz permitiendo observar ciertos multiples procesos celulares. En telecomunicaciones, la utilización de laser de punto cuántico permitirá realizar con gran potencial procesos de amplificación óptica de señales en fibras ópticas, mejorando su fidelidad y la velocidad de transmisión de información.

Finalmente, una de las más sorprendentes y potenciales aplicaciones de estas nanoestructuras es su papel como soporte físico para la construcción de un computador cuántico basado en estado sólido[3]. Así como se presenta en este trabajo, utilizando la propuesta de Loss y DiVincenzo es posible construir compuertas cuánticas universales que son controladas externamente, lo cual abre un maravilloso camino hacia una futura implementación de dispositivos de cómputo mecánico-cuántico escalables.

En el siguiente capítulo se describe como mayor detalle como es posible emplear esta arquitectura, donde el espín del electrón confinado en cada una los puntos cuánticos cumple la función de un qubit.

### 3. Computación Cuántica con Puntos Cuánticos

Las capacidad de los dispositivos de procesar información deriva de sus propiedades físicas; en otras palabras, *la información es física*[42] y es por ello que el estudio de la computación y la información cuántica ha generado un gran interés en el campo de las ciencias básicas y la ingeniería. Los intrincados procesos mecánico cuánticos debidos a la superposición y las correlaciones cuánticas ofrecen una nueva generación de dispositivos que abren la posibilidad de realizar eficazmente procesos computacionales a través de nuevos y más potentes algoritmos como los descubiertos por Shor[43] y Grover[44].

Con la aparición de técnicas que permiten controlar los potenciales errores inhaderentes en los procesos transmisión de información ya sea a través de sistemas cuánticos o clásicos[1], se dio inicio en la mitad de la década de los noventa a una búsqueda que permitiera determinar cuales sistemas físicos son los más apropiados para operar como bits cuánticos (qubits). Dentro de los más prominentes ejemplos descubiertos para tal fin se encuentran la trampas de iones[45], cavidades QED[46], NMR[47], materiales superconductores[48], el espín nuclear en donadores[49, 50], el espín electrónico en puntos cuánticos semiconductores[3], entre otros. La demostración experimental de estas nuevas propuestas de hardware pueden ser escritas como muy productivas, siendo este el caso del modelo de trampa de iones o por el contrario, con diversas complicaciones, como ocurre con los esquemas basados en estado sólido, especialmente en sistemas de espín semiconductores, en los cuales experimentalmente es difícil demostrar la coherencia cuántica y el entrelazamiento controlado, pero aun así son considerados como los candidatos más promisorios para la construcción de un gran computador cuántico debido a su escalabilidad.

En este capítulo se presenta la arquitectura basada en puntos cuánticos propuesta por Loss DiVincenzo[3]. Seguidamente se describen los cinco criterios de DiVincenzo[7] que debe cumplir cualquier sistema físico interesado en operar como soporte físico para un computador cuántico, detallando como la arquitectura basada en puntos cuánticos puede cumplir estos cinco criterios.

### 3.1. Arquitectura de Loss&DiVincenzo

En el año de 1998, Daniel Loss de la universidad de Basel, Suiza y David P. DiVincenzo de IBM, USA, propusieron un modelo para la construcción de compuertas cuánticas basadas en puntos cuánticos acoplados, usando el espín de los electrones confinados en cada uno de los puntos como qubits[3]. En la figura 3.1 se describe es-

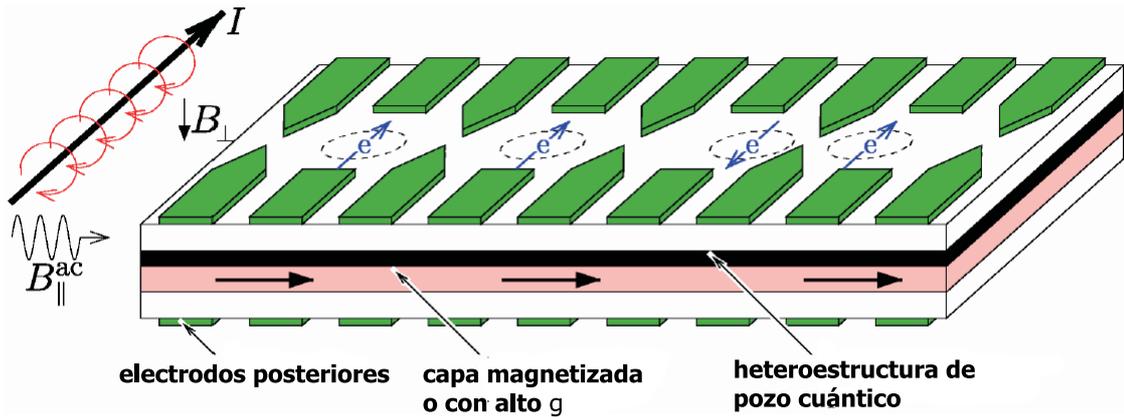


Figura 3.1: Arreglo de puntos cuánticos acoplados. Los electrodos superiores previenen un confinamiento lateral y permiten realizar la interacción de intercambio para operaciones de 2 – qubits (en esta imagen los dos puntos de la izquierda están desacoplados, mientras que los dos de la derecha están acoplados)

ta arquitectura, la cual se compone de un sistema de gas de electrones bidimensional (2DEG) formado a partir de una heteroestructura de pozo cuántico de AlGaAs. La parte superior de la estructura está cubierta con un patrón de electrodos metálicos, sujetos a un voltaje negativo que defleca el 2DEG creando un potencial efectivo que atrapa un pequeño número de electrones formando un punto cuántico. En la parte posterior, tal como se aprecia en la figura 3.2, existen un conjunto de electrodos que controlan el número de electrones en el punto cuántico a través de espectroscópica de bloqueo columbiana. Un control adicional sobre la función de onda de esta nanoestructura puede ser llevado a cabo por la aplicación de un campo magnético estático  $B_{\perp}$  perpendicular al 2DEG.

En este modelo, la orientación del espín de cada uno de los electrones que se encuentran confinados en los respectivos puntos cuánticos actúan como bits cuánticos. Debido que para la construcción de compuertas cuánticas de 2-qubits es necesario crear una interacción de dependencia entre estos dos elementos, tal acoplamiento se

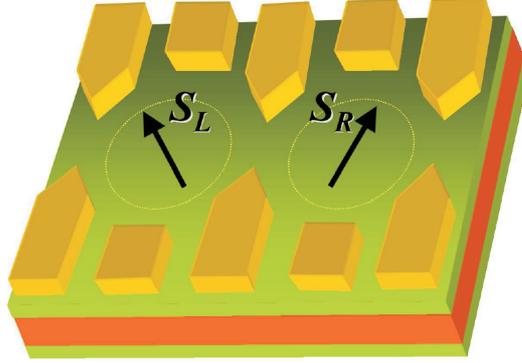


Figura 3.2: Vista superior de un sistema de dos punto cuánticos acoplado lateralmente, cada uno con un electrón con diferente estado de espín. Los electrodoes superiores son los encargados de realizar el confinamiento lateral.

logra considerando la interacción coulombiana y el principio de exclusión de Pauli, lo que da lugar a la descripción de un estado fundamental de los dos electrones en cada uno de los puntos cuánticos con una alta interrelación energética entre ellos, permitiendo producir una compuerta cuántica como NOT Controlado (XOR). Esta interrelación entre los qubits, físicamente se traduce en un intercambio de energía  $J(t)$  entre los dos espines  $\hat{S}_1$  y  $\hat{S}_2$  de cada uno de los electrones, el cual se encuentra descrito a través del hamiltoniano de Heisenberg así

$$\hat{H}_S(t) = J(t)\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \quad (3.1)$$

Como se presenta en este trabajo, el factor  $J$  puede ser controlado experimentalmente de diversas formas, una de ellas a través de la manipulación del voltaje inverso de los electrodoes que se encuentran justo entre los dos puntos.

Según esta arquitectura, el operador de evolución en el tiempo para este sistema de puntos cuánticos acoplados es:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t J(t)(\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2) dt\right) = e^{-i\tilde{J}\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2}, \quad (3.2)$$

con el parámetro relevante para la manipulación de espín  $\tilde{J}$

$$\tilde{J} = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t J(t) dt. \quad (3.3)$$

Considerando el caso  $\tilde{J} = \pi$ , el sistema de dos espines evolucionara de acuerdo con

el siguiente operador de intercambio

$$\hat{U}_{SW}(i, j) = e^{-i\pi\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j} = e^{-i\pi/4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

La matrix  $4 \times 4$  esta escrita en las bases  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ . Nótese la fase extra de  $\pi/4$  que aparece en  $\hat{U}_{sw}(i, j)$ , esto debe tenerse en cuenta dado que los espines  $(i, j)$  se desfajaran con respecto a los otros. Este operador de intercambio que es una compuerta cuántica tiene la propiedad

$$\begin{aligned} \hat{U}_{SW}(1, 2)(a_{0(1)} |0\rangle + a_{1(1)} |1\rangle)(a_{0(2)} |0\rangle + a_{1(2)} |1\rangle) = \\ (a_{0(2)} |0\rangle + a_{1(2)} |1\rangle)(a_{0(1)} |0\rangle + a_{1(1)} |1\rangle). \end{aligned} \quad (3.5)$$

La importancia de esta compuerta de intercambio yace en el hecho de que espines alejados pueden acercarse por un intercambio secuencial entre sus vecinos más próximos pero nunca produce un entrelazamiento entre ellos, tal como se aprecia en la ecuación 3.5. Una compuerta que produzca Entrelazamiento surge cuando  $\tilde{J} = \pi/2$  y es llamada raíz cuadrada del intercambio,

$$\hat{S}(i, j) = \sqrt{\hat{U}_{SW}(i, j)} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j} = e^{-i\pi/8} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} & e^{-i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} & e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Esta acción crea un entrelazamiento entre dos qubits que puede resumirse por la ecuación

$$\hat{S}(i, j) |\psi_{(i)}\psi_{(j)}\rangle = \frac{e^{-i\pi/8}}{1+i} (i |\psi_{(i)}\psi_{(j)}\rangle + |\psi_{(j)}\psi_{(i)}\rangle). \quad (3.7)$$

donde  $|\psi_{(i)}\rangle$  y  $|\psi_{(j)}\rangle$  estan representado por la ecuación (1.4). La compuerta raíz cuadrada del intercambio, junto con rotaciones de espines individuales pueden ser utilizadas para construir las importantes operaciones de dos qubits controladas como son las compuertas (CZ) y NOT Controlado (XOR).

$$\hat{U}_{CZ(1,2)} = e^{i\frac{3\pi}{2}\hat{S}_{1z}} e^{i\frac{\pi}{2}\hat{S}_{2z}} \hat{S}(1, 2) e^{-i\pi\hat{S}_{1z}} \hat{S}(1, 2) = e^{i\pi/4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

$$\hat{U}_{XOR} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{S}_{1y}} \hat{U}_{CZ(1,2)} e^{i\frac{\pi}{2}\hat{S}_{2y}} = e^{i\pi/4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Así pues, una combinación de la compuerta “raíz cuadrada de intercambio”  $\sqrt{U_{SW}}$  con rotaciones de un qubit  $e^{i\pi\hat{S}_{1z}}$ , dan lugar a una compuerta cuántica universal [7, 51]. De esta forma, la compuerta  $U_{XOR}$  puede ser usada para ensamblar algoritmos cuánticos con ayuda de cualquier otra compuerta de un qubit. Así mismo se aprecia que según las ecuaciones (3.2) y (3.3) el estudio de una compuerta cuántica  $XOR$  es reducido esencialmente a la descripción del mecanismo de intercambio de energía y a los mecanismos de control del mismo.

Experimentalmente, se puede describir como se realizan algunas de estas operaciones. Un ejemplo de ello son las rotaciones de espín, las cuales son logradas a través de un campo de resonancia de espín ESR ( $B_{||}^{ac}$  en la figura 3.1). Aquí cada electron es seleccionado al sintonizar su energía Zeeman usando un campo magnético local. Aunque lograr tal campo magnético local es muy difícil, es posible imaginar una arquitectura donde la corriente eléctrica  $I$  ubicada justo al lado del punto sea capaz de incrementar o disminuir la energía Zeeman a voluntad.

Es importante considerar adicional a estas condiciones experimentales, que el mecanismo de intercambio de acoplamiento descrito por Loss y DiVincenzo no es exclusivo de los punto cuánticos. En los últimos años subsecuentes propuestas para computación cuántica como espines nucleares de átomos donadores en sustratos de silicio [49], espín del electrón en puntos cuánticos de SiGe [52], electrones atrapados por ondas acústicas de superficie [53] y espín de impurezas paramagnéticas[54] cuentan con el mismo tipo de interacción. La razón principal de concentrarse en puntos cuánticos radica en que estos sistemas son el centro de varias investigaciones experimentales continuadas en física mesoscópica y parece razonable esperar que tales sistemas puedan ser fabricados como compuertas cuánticas funcionales considerando esta arquitectura.

### 3.1.1. Criterios de DiVincenzo

Al construir cualquier algoritmo cuántico[1] que realice determinada tarea surgen de forma natural una pregunta: ¿qué recurso físico es necesario para implementar esta tarea en un maquina real?. La respuesta a este interrogante fue presentada de manera elegante por David DiVincenzo[55], en la forma de 5 criterios que deben ser cumplidos por cualquier propuesta de implementación física de un computador cuántico. Estos criterios proveen un excelente punto de partida para describir como mayor detalle esta arquitectura en la cual el espín del electrón confinado en un punto cuántico opera como un qubit. Los criterios propuestos por DiVincenzo son los siguientes

1. *Un sistema físico es escalable cuando los qubits están claramente definidos.* Debido a las altas velocidades de procesamiento empleadas en un

computador cuántico, es necesario hacer uso de un gran número de qubits, del orden de  $10^5$ . Este requisito es cumplido en forma natural por el sistema de espín  $1/2$  como lo es un electrón confinado en un punto cuántico, donde  $|0\rangle = |\uparrow\rangle$  y  $|1\rangle = |\downarrow\rangle$ . En la actualidad, existen múltiples técnicas experimentales<sup>1</sup> que permiten la construcción de grandes arreglos de puntos cuánticos interconectados entre sí. El control del número de electrones confinados en cada uno de átomos artificiales se ha logrado usando el efecto de bloqueo de Coulomb[56, 57], el cual es un aumento de la resistencia a pequeños voltajes en dispositivos confinados a través de dos electrodos conductores.

2. ***La habilidad de inicializar el estado de los qubits en un estado inicial sencillo.*** La inicialización de qubits de espín en puntos cuánticos se puede lograr a través de equilibrio térmico, teniendo en cuenta que la cantidad de energía asociada a la temperatura de operación del sistema sea menor que la separación Zeeman, es decir  $g\mu_B B \gg kT$ .
3. ***Los tiempos de decoherencia deben ser mucho más largos que el tiempo de operación de la compuerta.*** Este es el criterio más difícil de cumplir por algunas de las propuestas existentes para la fabricación de computadores cuánticos. Aquí, los actuales conocimientos sobre qubits de espín en puntos cuánticos son muy prometedores. Los tiempos de operación de compuertas cuánticas que están por el orden de los nanosegundos son en principio viables[58]. Usando predicciones teóricas[3] y datos experimentales de tiempos de cambio de orientación del espín, los tiempos de decoherencia estimados están en el orden de los milisegundos. Así, los tiempos de decoherencia podrían ser de seis órdenes de magnitud más grande que los tiempos de operación de la compuerta cuántica.
4. ***Un conjunto de compuertas cuánticas universales.*** Con un conjunto de compuertas cuánticas universales[7], cualquier algoritmo cuántico puede ser implementado controlando una evolución unitaria particular del qubit. Es suficiente tener compuertas de 1 – *qubit* y una compuerta universal de 2 – *qubits* (*XOR*) para construir cualquier algoritmo cuántico.
5. ***Capacidad de medir un qubit específico.*** La lectura del qubit determina el resultado al final del cálculo. En este sentido, en la actualidad, la mejor propuesta para la medición del espín en puntos cuánticos es realizando una transferencia de información del espín al estado de carga[3], que puede ser accesado experimentalmente con mediciones de voltaje o corriente altamente sensibles.

---

<sup>1</sup>Véase sección 2.2

## 4. Punto Cuántico con un Electrón

La Física es como el sexo:  
seguro que da alguna compensación práctica,  
pero no es por eso por lo que la hacemos.  
*Richard P. Feynman (1918 - 1988)*

En este capítulo, se determina el comportamiento energético, así como la función de onda asociada a un electrón que se encuentra confinado en el interior de un punto cuántico bajo la influencia de un campo magnético perpendicular a la dirección de crecimiento de esta heteroestructura, haciendo uso para ello del formalismo de operadores de creación y destrucción. Este sistema físico cobra vital importancia en capítulos subsiguientes debido a que tanto la descripción de dos puntos cuánticos acoplados así como su intercambio de energía entre los estados singlete y triplete se encuentra representado por este sistema físico tanto funcional como energéticamente.

### 4.1. Características del Sistema Físico

El sistema considerado en este estudio está constituido por un punto cuántico de GaAs/AlGaAs de radio  $\rho$  el cual confina en su interior a un electrón y donde todo el sistema en conjunto es afectado externamente por un campo magnético homogéneo y constante de la forma  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  en la dirección paralela al eje  $z$ . Por razones experimentales[59, 60], se supone que el potencial de confinamiento al que está sometido el electrón en el eje  $z$  se modela como un pozo de paredes infinitas, mientras que sobre el plano  $xy$  se considera como un potencial armónico isotrópico bidimensional. En la figura 4.1 se presenta una gráfica tridimensional que describe la forma del potencial de confinamiento para un punto cuántico. Las interacciones electrostáticas de los diferentes núcleos atómicos del GaAs sobre el electrón se modela bajo la aproximación de masa efectiva y se asume una descripción a temperatura  $T \cong 0K$ , ello con el fin de considerar únicamente los estados de más baja energía. Los parámetros aquí empleados hacen referencia a puntos cuánticos fabricados con

la técnica 2DEG<sup>1</sup>; aunque esta escogencia no es crucial para nuestro análisis, permite ilustrar de mejor forma nuestros resultados.

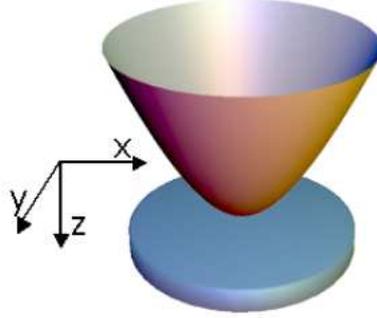


Figura 4.1: Diagrama esquemático de un punto cuántico bajo un potencial de confinamiento paraboloidal

El hamiltoniano que describe este sistema, incluyendo la interacción debida al campo magnético externo y al espín del electrón es

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left[ \hat{p} + \frac{q_e}{c} \mathbf{A}(\hat{r}) \right]^2 + \frac{\mu\omega_0^2}{2} (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + u(\hat{z}) - \frac{1}{2} g_s \mu \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (4.1)$$

donde  $\mathbf{A}(\hat{r}) = \frac{B}{2}(-\hat{y}, \hat{x}, 0)$  es un potencial vectorial del cual es posible derivar el campo magnético  $\mathbf{B}$  y adicionalmente cumple la condición de  $\nabla \cdot \mathbf{A}(\hat{r}) = 0$ ,  $\hat{p} = \hat{p}_x + \hat{p}_y + \hat{p}_z$  representa el momentum total del sistema,  $\frac{1}{2\mu} \left| \hat{p} + \frac{q_e}{c} \mathbf{A}(\hat{r}) \right|^2$  es la energía cinética, incluyendo la interacción de campo magnético asociada a  $\mathbf{A}(\hat{r})$ ,  $\mu$  es la masa efectiva del electrón en el GaAs, el termino  $\frac{\mu\omega_0^2}{2} (\hat{x}^2 + \hat{y}^2)$  representa el potencial bidimensional tipo oscilador armónico sobre el plano  $xy$ ,  $u(\hat{z})$  es el potencial de confinamiento en la dirección del eje  $z$  el cual se modela por un pozo de potencial de paredes infinitas y el ultimo termino representado por  $\frac{1}{2} g_s \mu \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}$  describe la interacción entre el espín del electrón con el campo magnético denominada acoplamiento Zeeman, donde  $g_s$  es el factor giromagnético o factor de Landé y  $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_z$  las matrices de Pauli.

La metodología empleada para determinar los autovalores de energía y las autofunciones asociadas a  $\hat{H}$  consiste en separar la ecuación (4.1) en dos hamiltonianos independientes entre si; el primero, denotado por  $\hat{H}_0$  que no incluye la interacción con el espín del electrón y se compone de los tres primeros términos de la ecuación (4.1), mientras que el segundo hamiltoniano  $\hat{H}_s$  si considera el efecto de espín y esta constituido exactamente por el cuarto termino de la ecuación (4.1).

<sup>1</sup>Una descripción de este método de fabricación fue presentado en la sección 2.2.3

## 4.2. Punto Cuántico sin Efectos de Espín

De acuerdo a la separación realizada en la sección anterior, se tiene

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu} \left[ \hat{p} + \frac{q_e}{c} \mathbf{A}(\hat{r}) \right]^2 + \frac{\mu\omega_0^2}{2} (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + u(\hat{z}), \quad (4.2)$$

Considerando que (ver A)  $[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = 0$ , representando la frecuencia ciclotrónica como  $\omega_c = \frac{q_e B}{c\mu}$ , la proyección del momento angular orbital en el eje  $z$  como  $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$  y  $\Omega^2 = \omega_0^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2$ , el hamiltoniano (4.2) toma la forma

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\hat{p}_y^2}{2\mu} + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\omega_c \hat{L}_z + \frac{1}{2}\mu\Omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + u(\hat{z}), \quad (4.3)$$

a su vez, la ecuación (4.3) puede ser separada en dos hamiltonianos, los cuales poseen variables independientes el uno del otro. El primero describe el comportamiento del electrón en el plano  $xy$  y el segundo incluye un confinamiento tipo pozo de potencial de paredes infinitas en el eje  $z$ .

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_\perp + \hat{H}_\parallel \quad (4.4)$$

tal que

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\hat{p}_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\omega_c \hat{L}_z + \frac{1}{2}\mu\Omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2), \quad (4.5)$$

y

$$\hat{H}_\parallel = \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} + u(\hat{z}), \quad (4.6)$$

donde  $\hat{p}_z$  representa el momentum en la dirección  $z$  y  $u(\hat{z})$  es el potencial de confinamiento en  $z$ , que como ya se menciona es un pozo de potencial infinito. A continuación describimos como determinar las autovalores de energía y las autofunciones de estos dos hamiltonianos.

### 4.2.1. Hamiltoniano en el plano $xy$

Consideremos inicialmente el hamiltoniano de la ecuación (4.5)

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\hat{p}_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\Omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \frac{1}{2}\omega_c \hat{L}_z. \quad (4.7)$$

Este hamiltoniano representa un oscilador armónico bidimensional con una interacción de campo magnético externo  $B$ . El proceso para determinar los autovalores de  $\hat{H}_\perp$  es análogo a la solución del oscilador armónico cuántico unidimensional, con

la diferencia que para este caso es necesario construir dos parejas de operadores de creación y destrucción por ser un sistema bidimensional. Considerando la variable  $\beta = \sqrt{\mu\Omega/\hbar}$ , los operadores de creación y destrucción se expresan en función de los operadores de posición y momentum, por lo tanto

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{2} \left[ \beta \hat{x} - \frac{i\hat{p}_x}{\beta\hbar} \right], \quad \hat{b}^+ = \frac{1}{2} \left[ \beta \hat{y} - \frac{i\hat{p}_y}{\beta\hbar} \right], \quad (4.8)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{2} \left[ \beta x + \frac{i\hat{p}_x}{\beta\hbar} \right], \quad \hat{b} = \frac{1}{2} \left[ \beta \hat{y} + \frac{i\hat{p}_y}{\beta\hbar} \right], \quad (4.9)$$

y cumplen las reglas de conmutación<sup>2</sup>

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^+] &= [\hat{b}, \hat{b}^+] = 1, \\ [\hat{a}^+, \hat{b}] &= [\hat{a}^+, \hat{b}^+] = [\hat{b}^+, \hat{a}] = [\hat{b}, \hat{a}] = 0. \end{aligned}$$

Utilizando estas nuevas herramientas, el hamiltoniano  $\hat{H}_\perp$  toma la forma

$$\hat{H}_\perp = \hbar\omega \left( \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1 \right) + \frac{i\omega_c \hbar}{2} \left( \hat{a} \hat{b}^+ - \hat{a}^+ \hat{b} \right). \quad (4.10)$$

El hamiltoniano de la ecuación (4.10) puede ser reducido aun más; para ello se introducen otros cuatro operadores, los cuales son

$$\hat{B}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{a}^+ - i\hat{b}^+ \right), \quad \hat{A}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{a}^+ + i\hat{b}^+ \right), \quad (4.11)$$

$$\hat{B} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{a} + i\hat{b} \right), \quad \hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{a} - i\hat{b} \right), \quad (4.12)$$

y presentan las mismas reglas de conmutación que  $\hat{a}^+, \hat{a}, \hat{b}^+, \hat{b}$ . Al introducir estos nuevos operadores en el hamiltoniano (4.10) se obtiene

$$\hat{H}_\perp = \hbar\Omega \left( \hat{A}^+ \hat{A} + \hat{B}^+ \hat{B} + 1 \right) + \frac{\omega_c \hbar}{2} \left( \hat{A}^+ \hat{A} - \hat{B}^+ \hat{B} \right). \quad (4.13)$$

donde  $\hat{H}_\perp$  tiene la misma forma que la presentada en la ecuación (4.10), con la diferencia que los operadores ahora son los descritos en (4.11) y (4.12). Denotando al producto de operadores  $\hat{A}^+ \hat{A}$  y  $\hat{B}^+ \hat{B}$  como  $\hat{N}_A$  y  $\hat{N}_B$  con autovalores  $n_A$  y  $n_B$  respectivamente, este hamiltoniano toma la forma

$$\hat{H}_\perp = \hbar\Omega \left( \hat{N}_A + \hat{N}_B + 1 \right) + \frac{\omega_c \hbar}{2} \left( \hat{N}_A - \hat{N}_B \right). \quad (4.14)$$

---

<sup>2</sup>La demostración de estas propiedades se encuentran con mayor detalle en el apéndice A

Tomando  $\omega_A = \Omega + \frac{1}{2}\omega_c$  y  $\omega_B = \Omega - \frac{1}{2}\omega_c$ , al aplicar el hamiltoniano sobre un estado arbitrario del sistema, el autovalor de energía queda expresado como

$$E_{\perp} = \hbar\omega_A \left( n_A + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_B \left( n_B + \frac{1}{2} \right), \quad (4.15)$$

por consiguiente, la energía del punto cuántico en el plano  $xy$  depende de los autovalores de los operadores  $\hat{N}_A$  y  $\hat{N}_B$ , así como de las frecuencias  $\omega_A$  y  $\omega_B$ , las cuales implícitamente están asociadas a la frecuencia de confinamiento del punto y del campo magnético externo aplicado sobre el sistema. Otra forma de expresar esta energía es definiendo  $n = n_A + n_B$  y  $m = n_A - n_B$ , por lo cual (4.14) toma la forma

$$E_{\perp} = \hbar\Omega (n + 1) + \frac{1}{2}\omega_c \hbar m, \quad (4.16)$$

Esta es la energía en el plano  $xy$  asociada a un electron confinado en un punto cuántico, donde  $n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$  representa el número cuántico principal,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \dots$  es el número cuántico azimutal y la energía en el estado fundamental es  $E_{\perp 0} = \hbar\Omega$ .

Hasta el momento se ha determinado la energía para este sistema, ahora calculemos su función de onda, para ello es necesario hacer uso de las propiedades que presentan los operadores  $\hat{N}_A$  y  $\hat{N}_B$ , las cuales son exactamente iguales a las presentadas por el operador  $\hat{N}$  para el problema de un oscilador unidimensional<sup>3</sup>. Según esto, cualquier estado del sistema se representa como una función del estado fundamental sobre el cual actúan tales operadores. Esta relación es descrita por

$$|\varphi_{n_A, n_B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n_A)!(n_B)!}} (\hat{A}^+)^{n_A} (\hat{B}^+)^{n_B} |\varphi_{00}\rangle. \quad (4.17)$$

Para determinar la forma de  $|\varphi_{00}\rangle$  se reemplaza en los operadores  $\hat{A}, \hat{A}^+, \hat{B}, \hat{B}^+$  por los operadores  $\hat{a}, \hat{a}^+, \hat{b}, \hat{b}^+$  representados en (4.8) y (4.9), adicionalmente, realizando un cambio de variable  $z = x + iy$  y  $z^* = x - iy$  y tomando como referencia el hecho que  $A|\psi_{00}\rangle = 0, B|\psi_{00}\rangle = 0$  se obtiene

$$\left( \frac{\beta}{2} z^* + \frac{1}{\beta} \partial_z \right) \psi_{00}(z, z^*) = 0, \quad (4.18)$$

$$\left( \frac{\beta}{2} z + \frac{1}{\beta} \partial_{z^*} \right) \psi_{00}(z, z^*) = 0, \quad (4.19)$$

que al ser solucionadas dan como resultado la función de onda en el estado fundamental representada por

$$|\psi_{00}\rangle = \sqrt{\frac{\beta^2}{\pi}} e^{-\frac{\beta^2}{2}(x^2 + y^2)} \quad (4.20)$$

---

<sup>3</sup>Véase [61], págs 206-212

### 4.2.2. Hamiltoniano en la dirección z

Tomando la ecuación (4.6)

$$\hat{H}_{||} = \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} + u(\hat{z}), \quad (4.21)$$

donde el potencial  $u(z)$  es de la forma

$$u(z) = \begin{cases} \infty & z < -\frac{1}{2} \text{ ó } z > \frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{2} < z < \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.22)$$

Debido a que este hamiltoniano describe un problema muy conocido que es el pozo de potencial de paredes infinitas, aquí tan solo se presenta la solución de este problema, de manera que el autoestado del sistema esta expresado por

$$|\varphi_{n_z}\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k_n z) & k_{n_z} = \frac{n_z \pi}{L}; n_z = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}(k_n z) & k_{n_z} = \frac{n_z \pi}{L}; n_z = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (4.23)$$

y los autovalores de energía son

$$E_{||} = \frac{n_z^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu L^2} \quad (4.24)$$

## 4.3. Punto Cuántico con Efectos de Espín

Al considerar el espín y sus efectos dentro del formalismo desarrollado hasta este momento, es necesario agregar al hamiltoniano  $\hat{H}$  un termino que representa la interacción entre el espín  $\hat{S}$  de una partícula con un campo magnético homogéneo en la dirección  $z$ , sin incluir la interacción espín-orbita. Este termino esta representado por

$$\hat{H}_s = -\hat{\mu}_s \cdot \mathbf{B}, \quad (4.25)$$

donde  $\hat{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_B \mathbf{S}}{\hbar}$ ,  $\mu_B = \frac{q_e \hbar}{2\mu}$  y  $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$ .

Reemplazando en la ecuación anterior, se obtiene

$$\hat{H}_s = \frac{g_s q_e \hbar}{4\mu} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (4.26)$$

Sea  $|\varphi_{m_z}\rangle = |+\rangle$  ò  $|-\rangle$   $|\pm\rangle$  de tal forma que

$$\sigma_z |\varphi_{m_z}\rangle = \sigma |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle = \pm |\varphi_{m_z}\rangle. \quad (4.27)$$

Debido a que el campo magnético solo esta dirigido en la dirección  $z$ , únicamente se considera el efecto de  $\sigma_z$ , adicionalmente tomando el momento angular exclusivamente de espín, esto es  $g_s = 2$ , la ecuación de valores propios asociada a este sistema se escribe como

$$\hat{H}_s |\varphi_{m_z}\rangle = \frac{q_e \hbar}{2\mu} \hat{\sigma}_z \mathbf{B} |\pm\rangle$$

que al actuar sobre un estado  $|\varphi_{m_z}\rangle$  arroja un autovalor de energía dado por

$$E_s = \pm \frac{q_e \hbar}{2\mu} B \quad (4.28)$$

El vector de estado para el electrón ubicado en el punto cuántico bajo una interacción de campo magnético en la dirección  $z$  se puede expresar como el producto tensorial entre el vector de estado correspondiente al oscilador armónico bidimensional (hamiltoniano  $xy$ ), el vector de estado del pozo de potencial infinito (hamiltoniano  $z$ ) y el vector de estado del electrón con espín dada en la ecuación anterior. Por consiguiente el vector total de estado es

$$|\psi\rangle = |\varphi_{n_A, n_B}\rangle \otimes |\varphi_{n_z}\rangle \otimes |\varphi_{m_z}\rangle = |\varphi_{n_A, n_B, n_z, m_z}\rangle. \quad (4.29)$$

Así mismo, el autovalor de energía total del sistema es

$$E = \hbar\Omega(n+1) + \frac{\hbar\omega_c}{2}(m) + \frac{n_z^2 \pi^2 \hbar^2}{2L^2 \mu} \pm \frac{q_e \hbar}{2\mu} B. \quad (4.30)$$

## 4.4. Resultados

Debido a que la frecuencia ciclotrónica  $\omega_c$  es una función del campo magnético y la frecuencia de confinamiento  $\omega_o$  es función del radio, es posible observar el comportamiento que presentan los autovalores de energía del sistema al variar estos parámetros. Este análisis lo restringimos a la energía asociada al hamiltoniano  $xy$  inicialmente y en segunda instancia considerando los efectos de espín, ello a que son estos términos quienes reflejan los efectos debido al campo magnético externo.

Tomando la ecuación (4.16) y factorizando  $\omega_0$  se obtiene una expresión en función de la variable  $\omega_c/\omega_0$ , por lo tanto la energía del sistema en el plano  $xy$  es

$$E_{\perp} = \hbar\omega_0 \left( \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{\omega_c}{\omega_0} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} (n+1) + \left( \frac{\omega_c}{\omega_0} \right) \left( \frac{m}{2} \right) \right). \quad (4.31)$$

Si se considera a  $\omega_o$  constante, es decir, el radio  $\rho$  del punto cuantico como fijo, la variable  $\omega_c/\omega_0$  puede tomar diversos valores, los cuales dependerán exclusivamente

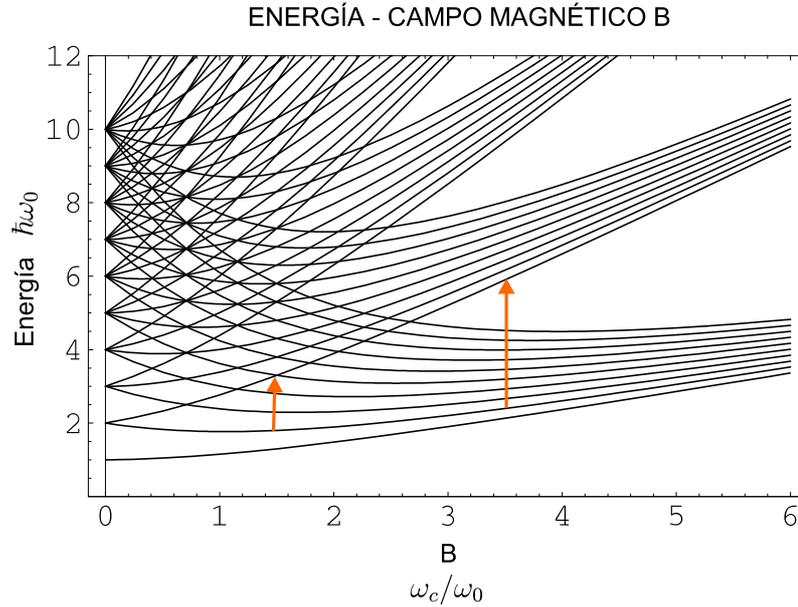


Figura 4.2: Comportamiento energético de un punto cuántico de radio  $\rho$  constante y bajo la acción de campo magnético externo  $\mathbf{B}$  paralelo al eje  $z$  en terminos de  $\omega_c/\omega_0$ .

de  $\omega_c$  y por consiguiente de la magnitud del campo magnético en la dirección  $z$ . En la figura 4.2 se observa como los niveles de energía presentan una degeneración al crecer  $\omega_c/\omega_0$ , es decir, al aumentar el campo magnético  $\mathbf{B}$ . Este comportamiento, en el cual los niveles de energía con  $m$  positivo o negativo se desplazan ya sea hacia arriba o abajo se debe a que el campo magnético tiende a orientar los momentos magnéticos ya sea en forma paralela o antiparalela, lo cual se traduce en un aumento o disminución de energía. Este particular fenómeno energético fue descrito analíticamente por Fock y Darwin en los años 30 y nos dice que para valores de  $m$  (+ ó -) la energía del sistema es diferente.

Para grandes campos magnéticos, el comportamiento de electrón libre prevalece sobre el confinamiento oscilatorio y los niveles de energía forman una secuencia llamadas bandas de Landau, la cual es un cruce de los estados energéticos y se presenta para valores de  $n \geq 2$ . Las flechas verticales en el gráfico entre los distintos orbitales representan algunas de las posibles transiciones ópticas permitidas en el sistema, las cuales para ciertos valores de campo magnético donde se hace visible la intersección de niveles, se dan de forma natural.

Factorizando ahora de la ecuación (4.16) a  $\omega_c$ , el campo magnético permanece cons-

tante y la variable  $\omega_0/\omega_c$  depende únicamente del radio  $\rho$ , por lo tanto

$$E_{\perp} = \hbar\omega_c \left[ \left[ \left( \frac{\omega_0}{\omega_c} \right)^2 + \frac{1}{4} \right]^{\frac{1}{2}} [n + 1] + \frac{m}{2} \right], \quad (4.32)$$

este comportamiento energético que se representa en la figura 4.3 describe una relación de proporcionalidad inversa entre el radio del punto y la energía del oscilador, la cual era de esperar ya que los efectos de confinamiento y reducción en la dimensiones del semiconductor se ven reflejadas en su comportamiento energético.

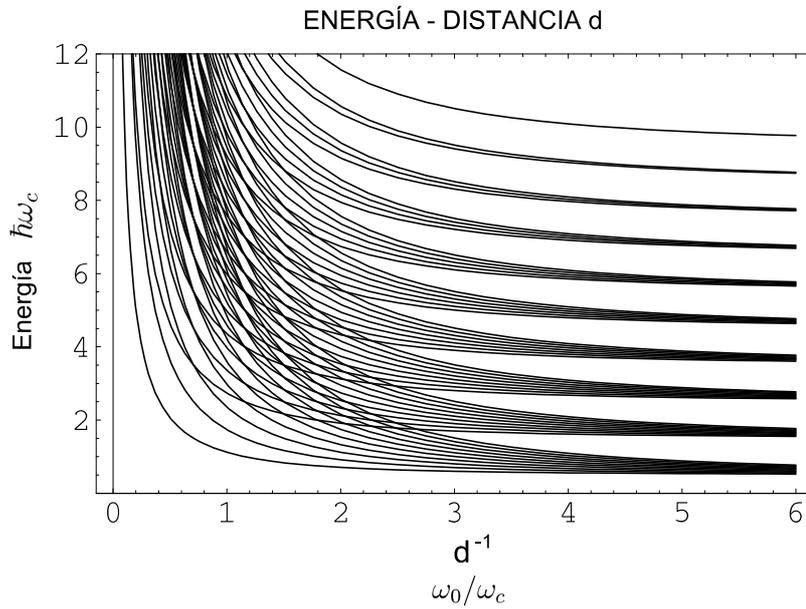


Figura 4.3: Espectro de energía para un punto cuántico de radio variable sobre el cual actúa un campo magnético constante  $\mathbf{B}$  en la dirección  $z$ .

Esta situación es similar a la presentada por un pozo cuántico de potencial, en el cual una disminución de  $\rho$  -*un mayor confinamiento sobre el sistema*- conduce inmediatamente a una mayor discretización de los niveles de energía. Cuando el radio del punto aumenta, es decir, hay una disminución de la variable  $\omega_0/\omega_c$ , los niveles de energía aumentan formando un continuo, en el cual no es posible caracterizarlos y distinguirlos unos de otros, en pocas palabras, el sistema deja de exhibir un comportamiento cuántico y la energía se transforma en un continuo.

Al considerar dentro de este análisis el efecto del espín del electrón sobre el punto cuántico, tal como es descrito en la ecuación (4.30), es posible expresar todo este

termino en función de la variable  $\omega_c/\omega_0$ , la cual, como ya se mencionó, depende exclusivamente de  $\mathbf{B}$ , por lo tanto

$$E = \hbar\omega_0 \left( \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{\omega_c}{\omega_0} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} [n + 1] + \left[ \frac{\omega_c}{\omega_0} \right] \left[ \frac{m}{2} \right] \right) \pm \frac{1}{2c} \left[ \frac{\omega_c}{\omega_0} \right] \quad (4.33)$$

En la figura 4.4 se observa tal comportamiento donde se han incluido los efectos de espín, los cuales producen un degeneración hiperfina de los subniveles de energía debido a que en cada uno de ellos pueden existir dos electrones con diferente orientación de espín, obedeciendo el principio de exclusión, lo que da lugar a un doble espectro de energía de Fock-Darwin. Los niveles de color rojo incluyen la interacción con espín  $|\uparrow\rangle$  mientras que los niveles de color azul representan al espín  $|\downarrow\rangle$ .

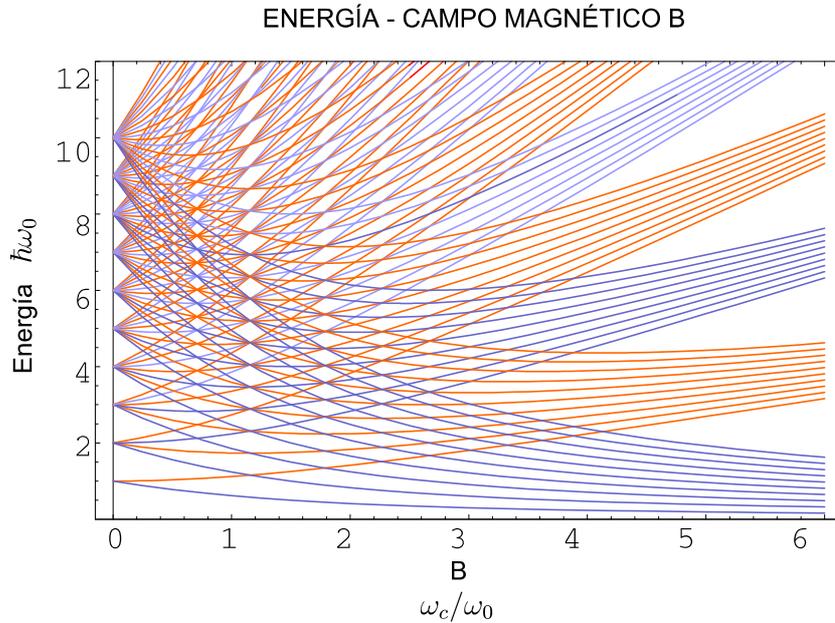


Figura 4.4: Espectro de Fock-Darwin para un punto cuántico considerando los efectos de espín.

Este fenómeno es conocido como efecto Zeeman anómalo y su gran importancia radica en su potencial utilización en el campo de la computación cuántica, ya que este efecto define claramente un sistema de dos niveles, lo que permite pensar en la construcción de compuertas cuánticas de 1 – *qubit* como son las de rotación y las de negación[7], en las cuales las operaciones se realizan a través de diversas técnicas, una de ellas es aplicando un campo magnético de microonda  $\mathbf{B}_r$  en resonancia con

el “splitting” Zeeman, es decir, con una onda a una frecuencia  $f = \Delta E/\hbar$ . Este efecto, conocido como resonancia paramagnética[62, 63] permite que este nuevo campo magnético  $\mathbf{B}_r$  oscilante y a la vez perpendicular a  $\mathbf{B}$  haga rotar el espín del electrón y que adicionalmente para un cierto tiempo fijo, sea posible la creación de un estado de superposición entre el  $|\uparrow\rangle$  y el  $|\downarrow\rangle$ .

## 4.5. Conclusiones

Basados en el formalismo de operadores de creación y destrucción, se logra determinar los autovalores de energía así como la forma general de las funciones de onda asociadas a un punto cuántico de GaAs, el cual confina un electrón en su interior y adicionalmente esta afectado por un campo magnético externo  $\mathbf{B}$  constante.

La energía de este sistema sin considerar los efectos del espín del electrón describe un interesante comportamiento y es el hecho de que algunos de los niveles de energía se cruzan entre si. Este fenómeno conocido como espectro de Fock-Darwin, presenta una característica importante y es que al aumentar la intensidad del campo magnético  $\mathbf{B}$ , la degeneración así como la cuantización de los niveles de energía se hace cada vez mas representativa debido al aporte energético que esta interacción realiza y que claramente se observa en el aumento de la energía cinética del sistema.

Otro resultado interesante presente en este capitulo es la fuerte dependencia de la cuantización energética del sistema en función del radio del punto cuántico, donde la relación funcional de entre estas variables es de inversa proporcionalidad, es por ello que al disminuir el tamaño del punto, su espectro energético hace visible una mayor discretización en los niveles de energía.

Al incluir el espín en nuestro análisis, se presenta un fenómeno denominado Efecto Zeeman Anómalo, el cual separa los niveles de energía entre si creando una estructura hiperfina en el espectro de energía. Esta ultima característica es de gran interés en el campo de la computación cuántica, ya que claramente este es un sistema cuántico de dos niveles, dando lugar a la creación de compuertas cuánticas de *1-qubit* como la compuerta de rotación y donde su control se realiza a través de la aplicación de un campo magnético oscilante  $\mathbf{B}_r$  perpendicular a  $\mathbf{B}$ , permitiendo que el espín del electrón rote y por consiguiente cambie de nivel.

## 5. Interacción Espín-Orbita

En esta sección se presenta un estudio de la interacción entre el momento magnético dipolar de espín y el campo magnético interno denominada interacción espín orbita para un punto cuántico con un electrón, bajo la acción de un campo magnético externo en la dirección  $z$ .

Inicialmente se determina el término que representa al acoplamiento en forma general para cualquier sistema de un átomo monoeléctrico. Posteriormente, usando teoría de perturbaciones, se evalúa esta cantidad para el caso de un punto cuántico con un electrón.

### 5.1. Interacción Espín-Orbita en un Átomo con un Electrón

Consideremos un sistema como el descrito en la figura (5.1.a). Según este esquema, es posible entender el origen del campo magnético que experimenta un electrón en un átomo monoeléctrico si se considera el movimiento del núcleo desde el punto de vista del electrón.

En un sistema de referencia fijo con respecto al electrón, el núcleo cargado ( $+Ze$ ) se mueve alrededor del electrón y este, de hecho, se encuentra localizado en el interior de una espira de corriente la cual produce un campo magnético.

En la figura (5.1.b) el núcleo cargado que se mueve con velocidad  $-\mathbf{v}$  constituye una densidad lineal de corriente dada por

$$\mathbf{j} = -ze\mathbf{v}. \quad (5.1)$$

De acuerdo con la Biot-Savart, esta densidad de corriente produce un campo magnético  $\mathbf{B}_{int}$  en la posición del electrón donde

$$\mathbf{B}_{int} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{j} \times \mathbf{r}}{r^3} = \frac{-ze\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}. \quad (5.2)$$

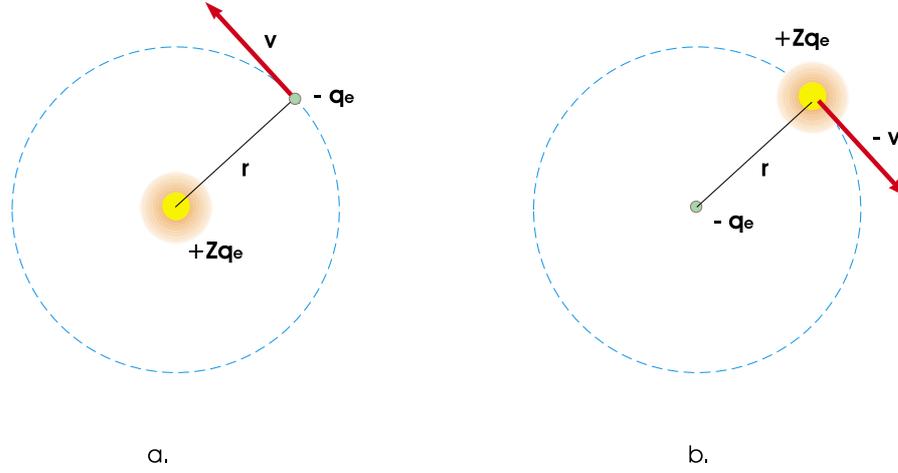


Figura 5.1: a. Movimiento del electrón según el sistema de referencia ubicado en el núcleo. b. Movimiento del núcleo según el sistema de referencia ubicado en el electrón

es conveniente expresar esta relación en términos del campo eléctrico  $\mathbf{E}_{int}$  que actúa sobre el electrón. Según la ley de Coulomb

$$\mathbf{E}_{int} = \frac{zq_e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (5.3)$$

de estas dos últimas ecuaciones se tiene

$$\mathbf{B}_{int} = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}_{int} \quad (5.4)$$

donde  $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ . Aquí  $\mathbf{B}_{int}$  es el campo magnético experimentado por el electrón cuando este se mueve a una velocidad  $\mathbf{v}$  relativa al núcleo dentro de un campo eléctrico  $\mathbf{E}_{int}$  producido por el propio núcleo. Esta relación es de validez general y de igual forma puede ser obtenida a través de condiciones relativistas.

El electrón y su momento magnético dipolar de espín pueden tener diferentes orientaciones en el campo magnético interno del átomo y su energía potencial es diferente para cada una de estas orientaciones. Considerando la energía potencial de interacción entre el espín del electrón y el campo magnético  $\mathbf{B}_{int}$  de la forma

$$\hat{H}_{s-o} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{int}, \quad (5.5)$$

tomando en cuenta que  $\boldsymbol{\mu}_s = \frac{g_s\mu_B\hat{S}}{\hbar}$ , al reemplazar el campo  $\mathbf{B}_{int}$  por la ecuación (5.4) se obtiene

$$\hat{H}_{s-o} = -\frac{g_s\mu_B\hat{S}}{\hbar c^2} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{E}_{int}) \quad (5.6)$$

y es el hamiltoniano que representa la interacción espín orbita para un átomo monoeléctrico y en el cual se observa una dependencia directa del campo eléctrico debido al núcleo. Otra forma de expresar esta ecuación es empleando  $\hat{L}$ , por lo cual el termino toma la forma

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{1}{\mu^2 c^2} \hat{S} \cdot \hat{L} \left( \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \right), \quad (5.7)$$

por lo cual el hamiltoniano de Espín Orbita queda expresado en función de  $U(r)$  que es la energía potencial asociada al sistema y esta ecuación se ha evaluado en un sistema de referencia en el cual el electrón esta en reposo.

Lo interesante en este modelo es medir la energía en el sistema de referencia original, en el cual el núcleo esta en reposo (aproximación Borh-Oppenheimer[64]). Debido al efecto llamado *precesión de Thomas*[65], en la transformación de velocidades relativistas al retomar el sistema de referencia del núcleo resulta una reducción de la energía potencial de orientación por un factor de 2[65], por lo tanto

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \hat{S} \cdot \hat{L} \left( \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \right), \quad (5.8)$$

donde  $r$  es la distancia de separación entre núcleo y electrón, y  $\mu$  corresponde a la masa del electrón y que para el caso de un punto cuántico de GaAs con un electron, este termino representa la masa efectiva del electrón .

Considerando que  $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$ , donde  $\sigma$  representa las matrices de Pauli y considerando una función  $\varphi(r)$  tal que  $\nabla\varphi(r) = -\frac{\nabla U(r)}{q_e}$ , la ecuación (5.8) queda finalmente representada por

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{q_e \hbar}{4\mu^2 c^2} (\nabla\varphi(r) \times \hat{\sigma}) \cdot \hat{p}, \quad (5.9)$$

que representa la interacción espín orbita.

## 5.2. Energía debida al acoplamiento espín-orbita en un punto cuántico

Suponiendo que el hamiltoniano de la interacción espín-orbita es una pequeña perturbación a nuestro sistema de un punto cuántico con un electrón bajo la acción de un campo magnético externo, es posible determinar el aporte energético al sistema. Para calcularlo, se hace uso de la teoría de perturbaciones, considerando para ello que el átomo artificial monoeléctrico se encuentra en el estado fundamental y no presenta degenerancia. Este electrón se ubica en la banda de conducción del GaAs,

de tal forma que su energía potencial según el hamiltoniano (4.5) esta representada por

$$U(r) = \left[ \frac{1}{2} \omega_c (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) + \frac{1}{2} \mu \Omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) \right]. \quad (5.10)$$

A partir de este termino, se construye la ecuación (5.9), obteniendo<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \hat{H}_{s-o} = & k \left( \hat{A} \hat{B} - \hat{A}^+ \hat{A} - \hat{B}^+ \hat{B} + \hat{A}^+ \hat{B}^+ - 1 \right) \hat{\sigma}_z + \lambda \left( \hat{B}^+ \hat{B} - \hat{A}^+ \hat{A} \right) \hat{\sigma}_z \\ & - Q \left( \hat{B} - \hat{A} + \hat{B}^+ - \hat{A}^+ \right) \hat{\sigma}_y \hat{p}_z - iQ \left( \hat{A}^+ + \hat{B}^+ - \hat{A} - \hat{B} \right) \hat{\sigma}_x \hat{p}_z \\ & + R \left( \hat{A} + \hat{B} + \hat{A}^+ + \hat{B}^+ \right) \hat{\sigma}_y \hat{p}_z + iR \left( \hat{B} - \hat{A} + \hat{A}^+ - \hat{B}^+ \right) \hat{\sigma}_x \hat{p}_z, \end{aligned} \quad (5.11)$$

donde  $\hat{A}, \hat{A}^+, \hat{B}, \hat{B}^+$  son los operadores de creación y destrucción definidos en las ecuaciones (4.11) y (4.12) del capítulo 4.

Debido a que la inclusión de la interacción espín-orbita complica el hamiltoniano total del punto cuántico con un electrón bajo un campo magnético externo considerando los efectos de espín y tomando en cuenta que el efecto debido a  $\hat{H}_{s-o}$  es muy pequeño, es posible solucionar este problema utilizando la *Teoría de Perturbaciones*[66]. En este modelo, el primer paso es la resolución exacta del problema simplificado, tal como se realizo en el capítulo anterior. El segundo paso es el cálculo aproximado de la correcciones determinadas por los términos que se han prescindido en el problema simplificado y que en este caso es  $\hat{H}_{s-o}$ , para ello supongamos que el hamiltoniano total de nuestro sistema esta dado de la forma

$$\hat{H}_T = \hat{H} + \mathfrak{S} \hat{H}_{s-o} \quad (5.12)$$

donde  $\hat{H}_{s-o}$  que es el acoplamiento espín-orbita representa una pequeña corrección o perturbación al hamiltoniano  $\hat{H}$  dado en la ecuación (4.1). Esta perturbación de primer orden para el sistema en un estado no degenerado esta representada por

$$E_{1p} = \langle \psi' | \mathfrak{S} \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle \quad (5.13)$$

---

<sup>1</sup>Una completa descripción de la deducción de este hamiltoniano se encuentra en el apéndice B.1

tomando  $\mathfrak{S} = 1$  se tiene

$$\begin{aligned}
\langle \psi' | \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle = & k \langle \psi' | \hat{A} \hat{B} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle - k \langle \psi' | \hat{A}^+ \hat{A} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle - k \langle \psi' | \hat{B}^+ \hat{B} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle \\
& + k \langle \psi' | \hat{A}^+ \hat{B}^+ \hat{\sigma}_z | \psi \rangle - k \langle \psi' | \hat{\sigma}_z | \psi \rangle + \langle \psi' | \lambda \hat{B}^+ \hat{B} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle \\
& - \langle \psi' | \lambda \hat{A}^+ \hat{A} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | Q \hat{B} \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | Q \hat{A} \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle \\
& + \langle \psi' | Q \hat{B}^+ \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | Q \hat{A}^+ \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | i Q \hat{A}^+ \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle \\
& + \langle \psi' | i Q \hat{B}^+ \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | i Q \hat{A} \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | i Q \hat{B} \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle \\
& + \langle \psi' | R \hat{A} \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle + \langle \psi' | R \hat{B} \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle + \langle \psi' | R \hat{A}^+ \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle \\
& + \langle \psi' | R \hat{B}^+ \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle + \langle \psi' | i R \hat{B} \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | i R \hat{A} \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle \\
& + \langle \psi' | i R \hat{A}^+ \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | i R \hat{B}^+ \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle, \tag{5.14}
\end{aligned}$$

donde

$$|\psi\rangle = |\varphi_{n_A, n_B}\rangle \otimes |\varphi_{n_z}\rangle \otimes |\varphi_{m_z}\rangle.$$

Debido a que la acción de los operadores inmersos en  $\hat{H}_{s-o}$  solo se realiza sobre cada uno de los autoestados asociados, la evaluación de la ecuación (5.13) se simplifica considerablemente. Veamos en forma explícita como es la acción de los operadores sobre cada subespacio.

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_{n'_A} | \hat{A} | \varphi_{n_A} \rangle &= \sqrt{n_A} \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A-1}}; & \langle \varphi_{n'_B} | \hat{B} | \varphi_{n_B} \rangle &= \sqrt{n_B} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B-1}} \\
\langle \varphi_{n'_A} | \hat{A}^+ | \varphi_{n_A} \rangle &= \sqrt{n_A + 1} \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A+1}}; & \langle \varphi_{n'_B} | \hat{B}^+ | \varphi_{n_B} \rangle &= \sqrt{n_B + 1} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B+1}} \\
\langle \varphi_{m'_z} | \hat{\sigma}_x | \varphi_{m_z} \rangle &= \delta_{\varphi_{m'_z}, -\varphi_{m_z}}; & \langle \varphi_{m'_z} | \hat{\sigma}_y | \varphi_{m_z} \rangle &= i m_z \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \\
\langle \varphi_{m'_z} | \hat{\sigma}_z | \varphi_{m_z} \rangle &= m_z \delta_{\varphi_{m'_z}, -\varphi_{m_z}}; & \langle \varphi_{n'_z} | \hat{p}_z | \varphi_{n_z} \rangle &= 0.
\end{aligned}$$

Si se observa con detenimiento de la última relación, todos los términos de (5.14) sobre las cuales actúa  $\hat{p}_z$  son iguales a cero, por lo tanto la corrección de primer orden al hamiltoniano  $\hat{H}$  es

$$\begin{aligned}
\langle \psi' | \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle = & k m_z \sqrt{n_A} \sqrt{n_B} \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A-1}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B-1}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\
& - k m_z n_A \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\
& - k m_z n_B \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\
& + k m_z \sqrt{n_A + 1} \sqrt{n_B + 1} \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A+1}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B+1}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\
& - k m_z \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\
& + \lambda n_B m_z \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} - \lambda n_A m_z \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}}. \tag{5.15}
\end{aligned}$$

### 5.3. Resultados

Observemos como es el efecto que describe el termino (5.15) sobre los estados de más baja energía, para ello es necesario tomar  $n_a = n_b = 0$  y que además  $|\psi'\rangle = |\psi\rangle$ . Por consiguiente la energía debida al acoplamiento espín orbita en esta caso es

$$\langle \psi' | \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle = -km_z \quad (5.16)$$

Para determinar cual es el estado con más baja energía tomando en cuenta que el electron puede tener dos diferentes orientaciones de espín, se determina la energía del punto sin perturbación. Tomando la masa efectiva del electron en un punto cuántico de Arsenuro de Galio (GaAs) como  $0,067m_e$  y el cual está sometido a un potencial de confinamiento  $\hbar\omega_0 = 3\text{meV}$ [59], bajo un campo  $B = 1\text{T}$ , la energía para este sistema la cual fue calculada en el capítulo 4 para  $m_z = 1$  es  $E_{0,0,1,1} = 10,0094 \times 10^{-3}\text{eV}$  mientras que para  $m_z = -1$  es  $E_{0,0,1,-1} = 8,28149 \times 10^{-3}\text{eV}$ , por lo tanto el estado de mas baja energía es para  $m_z = -1$ . La interacción espín orbita al ser evaluada para este estado es  $\langle \psi' | \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle = 5,7694 \times 10^{-10}\text{eV}$ , es decir, existe una diferencia de 7 ordenes de magnitud entre la energía del sistema y la perturbación debida al acoplamiento espín orbita.

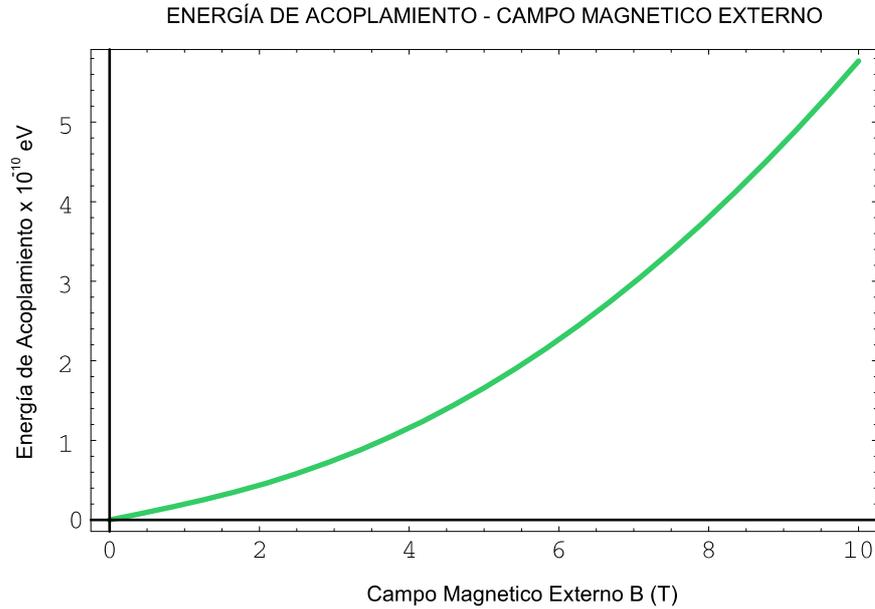


Figura 5.2: Comportamiento energético de la perturbación debida al acoplamiento espín orbita en función del campo magnético externo.

La gráfica (5.2) representa el comportamiento de energía debida al acoplamiento espín orbita para el estado de mínima energía. Como se puede apreciar, el comportamiento de la perturbación en función del campo magnético aplicado sobre el sistema es de tipo polinomial. Un hecho muy relevante de este resultado es que a pesar de que la interacción espín orbita es el resultado del efecto entre el campo magnético interno del sistema y el espín del electrón, finalmente el termino obtenido en este trabajo indica una relación directa con el campo magnético externo aplicado sobre el sistema. Adicionalmente, el gráfico nos dice que al no existir un campo magnético externo sobre el sistema, los efectos de acoplamiento espín orbita desaparecen.

La omisión de este efecto sobre sistemas que constituyen compuertas cuánticas de dos o más qubits tiene una muy pequeña influencia en la coherencia del espín del electrón, ello debido que el termino de espín orbita depende directamente de la masa efectiva del electrón, la cual es muy pequeña. Si por el contrario, consideramos huecos, los efectos de acoplamiento espín orbita toman una mayor relevancia desde el punto de vista energético y ya no es posible omitirlo[3].

## 5.4. Conclusiones

Empleando la teoría de perturbaciones, se logra determinar el acoplamiento espín orbita para un sistema de un punto cuántico confinando un electrón. El término que describe esta interacción para el nivel de mínima energía presenta una dependencia directa con el campo magnético externo aplicado sobre el punto cuántico en la dirección  $z$ . Tal dependencia trae consigo que solo el acoplamiento espín orbita exista si sobre el sistema actúa un campo  $\mathbf{B}$ , de lo contrario este efecto desaparece. Introduciendo datos reales de puntos cuánticos fabricados experimentalmente, la diferencia entre la energía del sistema sin incluir el acoplamiento espín orbita y esta interacción es de 7 ordenes de magnitud menor, lo que permite omitir dentro de nuestro estudio posterior esta cantidad y sus efectos.

## 6. Intercambio de Energía

Dentro de la arquitectura de Loss y DiVincenzo, un ingrediente fundamental lo constituye el parámetro de intercambio de energía  $J$ . La importancia de este factor radica en que gran parte del estudio de compuertas cuánticas basadas en puntos cuánticos acoplados se reduce a determinar como se puede realizar el control experimental de este parámetro[4]. Desde el punto de vista teórico, esto significa calcular un termino que represente a  $J$  en función de variables que puedan ser reguladas externamente. A pesar que este problema ya había sido tratado anteriormente para determinar espectros de energía en sistemas de dos puntos cuánticos acoplados horizontal y verticalmente[67], fue en 1999 con el trabajo de Burkard, Loss y DiVincenzo[4] donde se presenta un termino analítico que describe el intercambio de energía  $J$  en función del campo magnético  $\mathbf{B}$ , el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y la distancia de separación  $d$ . En esta sección, se presenta un detallado escenario que permite calcular el termino  $J$ . La técnica empleada para construir las funciones que representan el comportamiento del sistema acoplado es una adaptación del método de Heitler London, el cual permite que nuestro problema tenga una solución analítica y no numérica. Adicionalmente, la evaluación de  $J$  hace uso de un esquema matemáticamente elegante en el cual la utilización de la operadores de traslación, ciertas funciones especiales, así como las propiedades de simetría en Mecánica Cuántica juegan un papel vital. Finalmente se presentan algunos resultados referentes a  $J$  no reportados hasta ahora en la literatura y que conducen a un mejor entendimiento de esta arquitectura para compuertas cuánticas basadas en puntos cuánticos

### 6.1. Autofunciones en el Estado Fundamental

El sistema físico objeto de estudio esta constituido por dos puntos cuánticos de GaAs/AlGaAs acoplados lateralmente, obtenidos a través de la técnica de *2DEG*. Cada uno de estos puntos tiene un electrón confinado en su interior y la distancia de separación entre estas heteroestructuras es  $2a$ .

El hamiltoniano que describe a este sistema es

$$\hat{H} = \hat{H}_{orb} + \hat{H}_z, \quad (6.1)$$

donde  $\hat{H}_{orb}$  representa el comportamiento orbital, es decir, en el plano  $xy$  y  $\hat{H}_z$  es el comportamiento en la dirección  $z$ , el cual al igual que en el capítulo 4, se modela como un pozo de potencial infinito. Debido a que la dinámica de interacción entre los electrones confinados en cada uno de los puntos cuánticos se realiza en el plano  $xy$ , nuestro estudio se limita a considerar el hamiltoniano orbital, el cual es

$$\hat{H}_{orb} = \hat{H}_1(\hat{p}_1, \hat{r}_1) + \hat{H}_2(\hat{p}_2, \hat{r}_2) + C_{12}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) + W(\hat{r}_1, \hat{r}_2), \quad (6.2)$$

donde  $\hat{p}_1 = (\hat{p}_{x1}, \hat{p}_{y1}, 0)$ ,  $\hat{r}_1 = (\hat{x}_1, \hat{y}_1, 0)$ ,  $\hat{p}_2 = (\hat{p}_{x2}, \hat{p}_{y2}, 0)$ ,  $\hat{r}_2 = (\hat{x}_2, \hat{y}_2, 0)$ . Los hamiltonianos  $\hat{H}_j$ , con  $j = 1, 2$  son

$$\hat{H}_1(\hat{p}_1, \hat{r}_1) = \frac{1}{2\mu} \left[ \hat{p}_1 - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{r}_1) \right]^2 + eE\hat{x}_1 + \frac{m\omega_0^2}{2} [(\hat{x}_1 + a)^2 + \hat{y}_1^2] \quad (6.3)$$

$$\hat{H}_2(\hat{p}_2, \hat{r}_2) = \frac{1}{2\mu} \left[ \hat{p}_2 - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{r}_2) \right]^2 + eE\hat{x}_2 + \frac{m\omega_0^2}{2} [(\hat{x}_2 - a)^2 + \hat{y}_2^2], \quad (6.4)$$

aquí  $E$  es la magnitud del campo eléctrico aplicado en el plano a lo largo de la dirección  $x$ , es decir, a lo largo de la línea que conecta el centro de los dos puntos. La interacción columbiana esta representada por

$$C_{12} = \frac{q_e^2}{\kappa |\hat{r}_1 - \hat{r}_2|}, \quad (6.5)$$

adicionalmente,  $W(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = W_1(\hat{r}_1) + W_2(\hat{r}_2)$ , donde  $W_j$  tiene la forma

$$W_j = \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{1}{4a^2} (\hat{x}_j^2 - a^2)^2 - (\hat{x}_j \pm a)^2 \right], \quad j = 1 \text{ " + " } \text{ y } \quad j = 2 \text{ " - " } \quad (6.6)$$

Al considerar la suma de  $W_j$  con el ultimo termino de  $\hat{H}_j$ , el termino resultante representa el acoplamiento de cada uno de los dos puntos, incluyendo el tunelamiento. Este parámetro esta dado por

$$V_j = \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{1}{4a^2} (\hat{x}_j^2 - a^2)^2 - \hat{y}_j^2 \right], \quad (6.7)$$

Este potencial separa los dos puntos cuánticos en dos pozos armónicos de frecuencia  $\omega_0$ , uno para cada punto y donde su escogencia es motivada por el factor experimental que el espectro de punto cuántico de GaAs se describe por un potencial de confinamiento parabólico[59].

Teniendo en cuenta que adicional a la interacción de campo magnético, los Hamiltonianos  $\hat{H}_1$  y  $\hat{H}_2$  incluyen la interacción de campo eléctrico, una herramienta matemática que permite determinar con cierto grado de facilidad las autofunciones

de  $\hat{H}_1$  y  $\hat{H}_2$  con base en los hamiltonianos de **Fock-Darwin**, son las traslaciones de posición y momentum[17, 64]

El procedimiento para determinar estas autofunciones[17] consiste en describir el hamiltoniano del sistema, el cual incluye la interacción de campo eléctrico, en función de otro hamiltoniano el cual no tiene esta interacción y para el cual se conocen sus funciones de onda. Para realizar este proceso, se construye un operador de traslación, el cual al actuar sobre el hamiltoniano inicial permite desacoplar el termino debido al campo eléctrico  $\mathbf{E}$ . Veamos con mayor detalle como es este proceso para un sistema de puntos cuánticos acoplados lateralmente: Inicialmente, tomando el hamiltoniano  $\hat{H}_1$ , es necesario construir una traslación en la componente de momentum de tal forma que al introducirla en  $\hat{H}_1$ , la interacción de campo eléctrico desaparezca del primer término de este hamiltoniano y en su lugar quede representada como una constante. Para que esto ocurra, la traslación debe ser de la forma  $\hat{p}_{y_1} \rightarrow \hat{p}_{y_1} - q_e^2 BE/2m\omega_0^2 c - q_e Ba/2c$ , generando un nuevo hamiltoniano  $\tilde{\hat{H}}_1$ . Según el modelo teórico que describe estas operaciones en mecánica cuántica[64], el operador asociado a esta traslación en su forma más general es

$$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}\cdot\hat{r}}, \quad (6.8)$$

por consiguiente, para nuestro caso, este operador es

$$\hat{U}_1 = e^{-\frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{q_e^2 BE}{2\mu\omega_0^2 c} - \frac{q_e Ba}{2c} \right] \hat{y}_1} \quad (6.9)$$

donde unicamente se ha introducido la traslación de momentum en  $y$ , siendo nula para los otros dos ejes restantes, pero donde el operador de posición sigue siendo el mismo en las tres direcciones.

Empleando este nuevo operador, el proceso de traslación se representa por

$$\tilde{\hat{H}}_1 = \hat{U}_1 \hat{H}_1 \hat{U}_1^* \quad (6.10)$$

donde  $\hat{U}_1^*$  es el operador adjunto de  $\hat{U}$ . Como se observa, el operador  $\hat{U}$  tan solo afecta la componente  $y$  debido a que solo en esta dirección hay una traslación de  $\hat{p}$ .

En forma extendida, el hamiltoniano  $\tilde{\hat{H}}_1$  es

$$\tilde{\hat{H}}_1 = \underbrace{\frac{1}{2\mu} \left[ \hat{p}_1 - \frac{q_e}{c} \mathbf{A}(\hat{x}_{-1}, \hat{y}_1, 0) \right]^2 + \frac{\mu\omega_0^2}{2} [\hat{x}_{-1}^2 + \hat{y}_1^2]}_{\text{Hamiltoniano de Fock-Darwin } \hat{H}_{FD1}} - \left[ q_e E a + \frac{q_e^2 E^2}{2\mu\omega_0^2} \right], \quad (6.11)$$

donde  $\hat{x}_{-1} = \hat{x}_1 + a + \frac{q_e E}{\mu\omega_0}$  y recordando que  $\mathbf{A}(\hat{r}) = B(-\hat{x}, \hat{y}, 0)$ , por consiguiente

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_{FD1} - \left[ q_e E a + \frac{q_e^2 E^2}{2\mu\omega_0^2} \right]. \quad (6.12)$$

Si ahora realizamos el proceso inverso, es decir, aplicamos una traslación de la forma  $\hat{p}_{y_1} \rightarrow \hat{p}_{y_1} + \frac{q_e^2 BE}{2m\omega_0^2 c} + \frac{q_e Ba}{2c}$ , se tiene que el operador traslación en esta situación es  $\hat{U}^*$ , por lo tanto

$$\hat{H}_1 = \hat{U}_1^* \hat{H}_{FD1} \hat{U}_1 - \left[ \frac{q_e^2 E^2}{2\mu\omega_0^2} + q_e E a \right]. \quad (6.13)$$

Esta ecuación significa que el hamiltoniano  $\hat{H}_1$  puede ser expresado como la suma de un hamiltoniano de Fock-Darwin sobre el cual actúa una traslación  $\hat{U}$  más un término constante que depende del campo eléctrico y de la distancia de separación del punto cuántico (1) al origen. Adicionalmente, la ecuación (6.13) indica que la autofunción asociada al hamiltoniano  $\hat{H}_1$  es igual a una autofunción de Fock-Darwin bajo una traslación  $\hat{U}_1$ , ello debido a las propiedades de simetría de este tipo de operaciones dentro de la mecánica cuántica. Por lo tanto, el estado fundamental del hamiltoniano  $\hat{H}_1$  se encuentra representado por

$$\phi_0^{(1)}(x_1, y_1) = e^{-\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{q_e^2 BE}{2\mu\omega_0^2 c} + \frac{q_e Ba}{2c} \right] y_1} \sqrt{\frac{\mu\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\mu\Omega}{2\hbar}(x_1^2 + y_1^2)} \quad (6.14)$$

De forma similar, siguiendo este mismo proceso para  $\hat{H}_2$ , con una traslación de la forma  $\hat{U}_2 = e^{-\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{q_e^2 BE}{2\mu c\omega_0^2} + \frac{q_e Ba}{2c} \right] \hat{y}_1}$  y  $\hat{x}_{+2} = \hat{x}_2 - a + \frac{q_e E}{\mu\omega_0}$  se obtiene

$$\hat{\tilde{H}}_2 = \underbrace{\frac{1}{2\mu} \left[ \hat{p}_2 - \frac{q_e}{c} \mathbf{A}(\hat{x}_{+2}, \hat{y}_2, 0) \right]^2 + \frac{\mu\omega_0^2}{2} [\hat{x}_{+2}^2 + \hat{y}_2^2]}_{\text{Hamiltoniano de Fock-Darwin } \hat{H}_{FD2}} - \left[ \frac{q_e^2 E^2}{2\mu\omega_0^2} - q_e E a \right], \quad (6.15)$$

entonces

$$\hat{\tilde{H}}_2 = \hat{H}_{FD2} - \left[ \frac{q_e^2 E^2}{2\mu\omega_0^2} - q_e E a \right], \quad (6.16)$$

por lo cual la función de onda asociada a  $\hat{\tilde{H}}_2$  se obtiene de la misma manera que para  $\hat{H}_1$  (ecuaciones (6.13) - (6.14)), es decir, aplicando una traslación a la función de onda del estado fundamental del hamiltoniano de Fock Darwin  $\hat{H}_{FD2}$ , por lo tanto el estado fundamental para este sistema queda representado por

$$\phi_0^{(2)}(x_2, y_2) = e^{-\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{q_e^2 BE}{2\mu\omega_0^2 c} - \frac{q_e Ba}{2c} \right] y_2} \sqrt{\frac{\mu\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\mu\Omega}{2\hbar}(x_2^2 + y_2^2)}. \quad (6.17)$$

Las autofunciones dadas en las ecuaciones (6.14) y (6.17) representan los orbitales moleculares del sistema de puntos cuánticos y tal como se observará en las siguientes secciones, son vitales para la determinación del intercambio de energía.

## 6.2. Método de Heitler-London

Esta aproximación conocida también como método de enlace de valencia[5, 6] fue desarrollada en 1927 por Heitler y London y es empleada para determinar la variación energética cuando dos átomos, cada uno con un electrón (como en el caso de átomos de hidrógeno) se acercan y forman una molécula. Cuando estos dos átomos están a una distancia infinita, el hamiltoniano total se representa como la suma de dos hamiltonianos atómicos independientes y la solución exacta de este sistema es el producto de dos orbitales, obteniendo como resultado que la energía sea el doble que del átomo individual. Por otra parte, si estos dos átomos presentan un acercamiento entre ellos y conforman una molécula, el hamiltoniano de este sistema presenta una serie de términos cruzados entre electrón y núcleo de un átomo por un lado y electrón y núcleo del otro átomo por otro lado, acoplado el sistema e impidiendo la separación de las variables respecto a cada uno de los electrones.

Heitler y London cuestionaron la ubicación de los electrones en cada uno de sus correspondientes orbitales, por ello construyeron dos funciones de onda de prueba, una simétrica y otra antisimétrica, las cuales permiten determinar analíticamente la variación energética asociadas a los estados singlete y triplete[65] que se representa por el intercambio de energía  $J$ . Para la situación de átomos artificiales como es el caso de los puntos cuánticos, las funciones de prueba se construyen a partir de los orbitales atómicos que son las autofunciones de los hamiltonianos en el estado fundamental asociados a cada uno de los puntos cuánticos en forma independiente. En forma general, estos orbitales atómicos se presentan de la forma

$$\left. \begin{aligned} A(j) = \phi_0^{(1)}(x_j, y_j) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{q_e^2 BE}{2\mu\omega_0^2 c} + \frac{q_e Ba}{2c} \right) y_j} \sqrt{\frac{\mu\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\mu\Omega}{2\hbar} (x_{-j}^2 + y_1^2)} \\ B(j) = \phi_0^{(2)}(x_j, y_j) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{q_e^2 BE}{2\mu\omega_0^2 c} - \frac{q_e Ba}{2c} \right) y_j} \sqrt{\frac{\mu\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\mu\Omega}{2\hbar} (x_{+j}^2 + y_1^2)} \end{aligned} \right\} j = 1, 2, \quad (6.18)$$

donde  $\hat{x}_{-j} = \hat{x}_j + a + \frac{q_e E}{\mu\omega_0}$ ,  $\hat{x}_{+j} = \hat{x}_j - a + \frac{q_e E}{\mu\omega_0}$  y las funciones de onda aproximadas son

$$\Psi_{\pm} = \frac{|A(1)B(2)\rangle \pm |A(2)B(1)\rangle}{\sqrt{2(1 \pm S^2)}}. \quad (6.19)$$

donde el signo positivo (negativo) corresponde al estado de espín singlete (triplete). El solapamiento de los orbitales izquierdo y derecho para un cierto punto  $(x, y)$  esta representado por

$$S = \left\langle \phi_0^{(2)}(x, y) \middle| \phi_0^{(1)}(x, y) \right\rangle, \quad (6.20)$$

Por consiguiente, usando las funciones de prueba que el esquema de Heitler-London nos ofrece, el intercambio de energía  $J$  es entonces obtenido a través de la relación

$$J = \epsilon_t - \epsilon_S = \langle \Psi_- | \hat{H}_{orb} | \Psi_- \rangle - \langle \Psi_+ | \hat{H}_{orb} | \Psi_+ \rangle \quad (6.21)$$

donde  $\epsilon_t$  es la energía asociada al estado triplete,  $\epsilon_s$  es la energía del estado singlete y  $\hat{H}_{orb}$  es el hamiltoniano de todo el sistema. Por consiguiente, todo el problema se reduce a evaluar la ecuación 6.21. A pesar que aparentemente este proceso es sencillo, la evaluación del termino 6.21 requiere de un largo e intrincado proceso matemático que hace uso entre otras herramientas de operaciones de traslación así como de diversas funciones especiales. Este proceso es descrito en la siguiente sección.

### 6.3. Evaluación del Intercambio de Energía

Con todos estos elementos, estamos en posición de determinar el parámetro  $J$ . En primera instancia, se calcula la integral de solapamiento representada por la ecuación (6.20), la cual describe los efectos debido a las interacciones electromagnéticas y gravitacionales entre los dos átomos artificiales, las cuales se hacen más visibles y cobran mayor relevancia a cortas distancias. La solución de esta integral es

$$\begin{aligned}
S &= \langle \phi_0^{(2)}(x, y) | \phi_0^{(1)}(x, y) \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^{*(2)}(x, y) \phi_0^{(1)}(x, y) dx dy \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{q_e B a}{c})y} e^{-\frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \left(x + \frac{eB}{\mu\omega_0}\right)^2 + a^2 + y^2} dx dy \\
&= e^{-\frac{\mu\Omega a^2}{\hbar} - \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\mu\hbar c^2 \Omega}}.
\end{aligned} \tag{6.22}$$

Por otra parte, considerando la ecuación (6.21) y al introducir en ella de forma extendida el hamiltoniano  $\hat{H}_{orb}$ , las funciones de prueba (6.19) y reagrupando nuevamente se obtiene

$$J = \frac{S^2}{1 + S^4} [\Upsilon_1 - \frac{\Upsilon_2}{S^2} + \Upsilon_3 - \frac{\Upsilon_4}{S^2} + \Upsilon_5], \tag{6.23}$$

donde

$$\begin{aligned}
\Upsilon_1 &= \langle A(1) | H_1 | A(1) \rangle \langle B(2) | B(2) \rangle + \langle B(2) | H_2 | B(2) \rangle \langle A(1) | A(1) \rangle \\
&\quad + \langle B(1) | H_1 | B(1) \rangle \langle A(2) | A(2) \rangle \langle A(2) | H_2 | A(2) \rangle \langle B(1) | B(1) \rangle, \tag{6.24}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Upsilon_2 &= \langle A(1) | H_1 | B(1) \rangle \langle B(2) | A(2) \rangle + \langle B(2) | H_2 | A(2) \rangle \langle A(1) | B(1) \rangle \\
&\quad + \langle B(1) | H_1 | A(1) \rangle \langle A(2) | B(2) \rangle \langle A(2) | H_2 | B(2) \rangle \langle B(1) | A(1) \rangle, \tag{6.25}
\end{aligned}$$

$$\Upsilon_3 = \langle A(1)B(2) | V_{12} | A(1)B(2) \rangle + \langle A(2)B(1) | V_{12} | A(2)B(1) \rangle, \tag{6.26}$$

$$\Upsilon_4 = \langle A(1)B(2) | V_{12} | A(2)B(1) \rangle + \langle A(2)B(1) | V_{12} | A(1)B(2) \rangle, \tag{6.27}$$

$$\begin{aligned} \Upsilon_5 &= \langle A(1)B(2) | W_1 + W_2 | A(1)B(2) \rangle + \langle A(2)B(1) | W_1 + W_2 | A(2)B(1) \rangle \\ &- \frac{1}{S^2} [\langle A(2)B(1) | W_1 + W_2 | A(1)B(2) \rangle + \langle A(1)B(2) | W_1 + W_2 | A(2)B(1) \rangle]. \end{aligned} \quad (6.28)$$

La evaluación de estos parámetros presentan un largo y complejo proceso matemático y algebraico, es por ello que la descripción de un detallado escenario que permite el cálculo de estas cinco cantidades se presenta en el apéndice C. Utilizando estos resultados para cada uno de los términos se tiene

$$\Upsilon_1 = 2(E_{01} + E_{02}) + 4\mu a^2 \omega_0^2 \quad (6.29)$$

$$\Upsilon_2 = 2 S^2 (E_{01} + E_{02}) \quad (6.30)$$

$$\Upsilon_3 = 2 \left( \frac{\pi \mu \Omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \frac{q_e^2}{\kappa} e^{-\frac{\mu a^2 \Omega}{\hbar}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{\mu a^2 \Omega}{\hbar} \right). \quad (6.31)$$

$$\Upsilon_4 = 2 \sqrt{\frac{\mu \pi \Omega}{2\hbar}} \frac{q_e^2}{\kappa} e^{-\frac{2\mu \Omega}{\hbar} a^2 - \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\hbar c^2 \mu \Omega}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\mu \Omega \hbar c^2} \right) \quad (6.32)$$

$$\Upsilon_5 = -4\mu a^2 \omega_0^2 + \mu \omega_0^2 \left[ \frac{3\hbar}{2\mu \Omega} + 3 \left( \frac{q_e E}{\mu \omega_0^2} \right)^2 + \frac{3}{2} a^2 \right] \quad (6.33)$$

Reemplazando estos términos en la ecuación (6.23) se tiene

$$\begin{aligned} J &= \frac{S^2}{1 + S^4} [\Upsilon_1 - \frac{\Upsilon_2}{S^2} + \Upsilon_3 - \frac{\Upsilon_4}{S^2} + \Upsilon_5] \\ &= \frac{S^2}{1 + S^4} \left\{ 2(E_{01} + E_{02}) + 4\mu a^2 \omega_0^2 - \frac{1}{S^2} 2 S^2 (E_{01} + E_{02}) \right. \\ &+ 2 \left( \frac{\pi \mu \Omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \frac{q_e^2}{\kappa} e^{-\frac{\mu a^2 \Omega}{\hbar}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{\mu a^2 \Omega}{\hbar} \right) \\ &- \frac{1}{S^2} \left[ 2 \sqrt{\frac{\mu \pi \Omega}{2\hbar}} \frac{q_e^2}{\kappa} e^{-\frac{2\mu \Omega}{\hbar} a^2 - \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\hbar c^2 \mu \Omega}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\mu \Omega \hbar c^2} \right) \right] \\ &\left. - 4\mu a^2 \omega_0^2 + \mu \omega_0^2 \left[ \frac{3\hbar}{2\mu \Omega} + 3 \left( \frac{q_e E}{\mu \omega_0^2} \right)^2 + \frac{3}{2} a^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.34)$$

simplificando los términos, definiendo  $d = a\sqrt{\mu\omega_0/\hbar}$ ,  $b = \frac{\Omega}{\omega_0}$ ,  $C = \frac{q_e^2}{\kappa} \frac{1}{\hbar\omega_0} \sqrt{\left(\frac{\pi\mu\omega_0}{2\hbar}\right)}$  y considerando que  $\frac{S^2}{1-S^4} = \frac{1}{\sinh[2d^2(2b-\frac{1}{b})]}$  se obtiene finalmente

$$J = \frac{\hbar\omega_0}{\sinh [2d^2 (2b - \frac{1}{b})]} \left[ C\sqrt{b} \left\{ e^{-bd^2} \mathbf{I}_0 (bd^2) - e^{d^2(b-\frac{1}{b})} \mathbf{I}_0 \left( d^2 \left[ b - \frac{1}{b} \right] \right) \right\} + \frac{3}{4b} (1 + bd^2) + \frac{3}{2} \frac{1}{d^2} \left( \frac{q_e E a}{\hbar\omega_0} \right)^2 \right]. \quad (6.35)$$

que es el intercambio de energía entre los dos punto cuánticos acoplados lateralmente y el cual se encuentra en función de los variables de control externo  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{a}$  incluidos en los parámetros adimensionales  $d$ ,  $b$  y  $C$ .

## 6.4. Resultados

La ecuación (6.35), que representa el intercambio de energía esta constituida por cuatro términos a saber; el primer y segundo termino son el resultado de  $\Upsilon_3$  y  $\Upsilon_4$ , donde es visible el efecto de la interacción columbiana  $V_{12}$  tal como se describe en las ecuaciones (6.26) y (6.27), el tercero representado por  $\frac{3}{4b} (1 + bd^2)$  describe un comportamiento polinomial, el cual evita que el decaimiento ofrecido por los dos primeros términos sea demasiado abrupto, el cuarto y último término representa el aporte debido a la interacción de campo eléctrico sobre el sistema.

El resultado de  $J(B)$  es graficado en la figura (6.1), en la cual se aprecia que  $|J/\hbar\omega_0| \lesssim 0.2$ . La característica más remarcable de  $J(B)$  es el cambio de signo de positivo a negativo para un cierto valor de campo magnético  $B = B_0^S$ , que ocurre para una gama de parámetros  $E$ ,  $c$  y  $a$ . Debido a la interacción del campo eléctrico, el intercambio de energía aumenta lo que a su vez conduce a que el valor del campo magnético  $B = B_0^S$  para el cual se presenta el cambio de signo de  $J$  presente un desplazamiento hacia la derecha, tal como se aprecia en la gráfica, en la cual para una cierta gama de valores de campo eléctrico, el campo  $B_0$  esta entre 1,3T y 4,6T. La transición antiferromagnético ( $J > 0$ ) a ferromagnético ( $J < 0$ ) es causada por la interacción columbiana, en particular por el termino de intercambio negativo, el cual esta representado por el segundo miembro de ecuación (6.35). Una característica muy interesante para este sistema se presenta para grandes valores de campo magnético, para los cuales el entrelazamiento entre la orientación de espín de cada uno de los puntos cuánticos desaparece, tomando finalmente todo el sistema la misma orientación de espín.

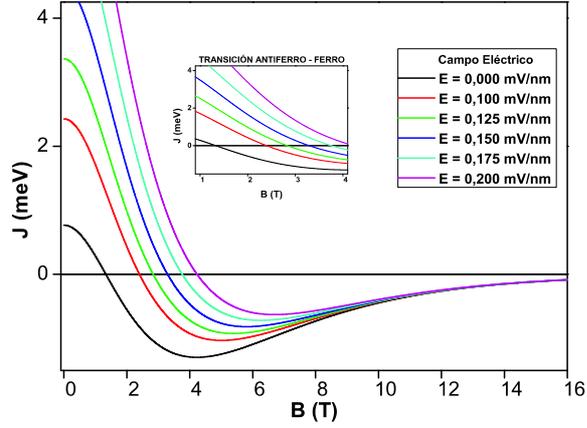


Figura 6.1: Intercambio de energía  $J(B)$  para diversos campos eléctricos  $E$  con  $a = 0,7a_b$  y  $c = 2,36$ .

Tomando en cuenta que  $B \gg B_0$  ( $\approx 3,5\text{T}$  para  $\hbar\omega_0 = 3\text{meV}$ ), el campo magnético localiza los orbitales por un factor  $b \approx B/B_0 \gg 1$ , reduciendo el solapamiento de las funciones de onda. De forma similar, este mismo solapamiento decae exponencialmente para grandes distancias de separación entre los puntos, donde  $d \gg 1$ . Sin embargo, es importante apreciar que esta supresión exponencial es parcialmente compensada por el crecimiento exponencial representado por  $e^{d^2(b-\frac{1}{b})}$  y que hace parte del segundo término de la ecuación (6.35) que describe a  $J$ .

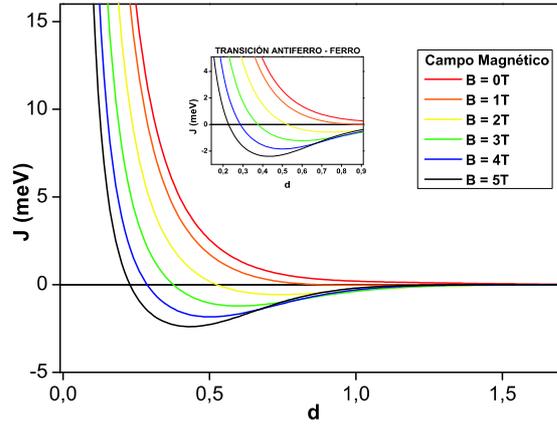


Figura 6.2: Intercambio de energía  $J(d)$  para diversos campos eléctricos  $E$  con  $a = 0,7a_b$  y  $c = 2,36$ .

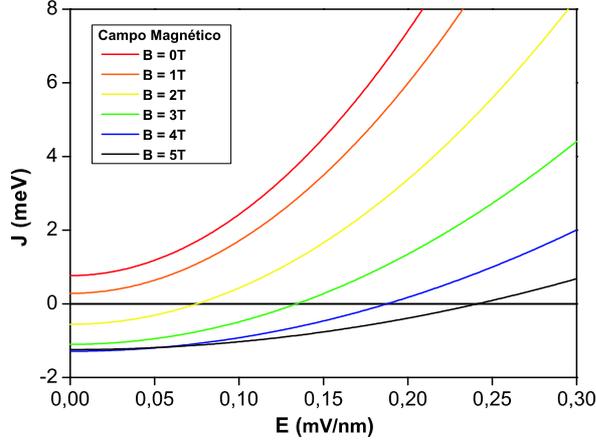


Figura 6.3: Transición del intercambio de energía  $J(E)$  para diversos campos magnéticos  $B$  con  $a = 0,7a_b$  y  $c = 2,36$ .

Como resultado de todo lo anterior, el acoplamiento de intercambio  $J$  decae exponencialmente como  $\exp(-2d^2b)$  para  $b$  o  $d$  grandes, tal como se muestra en la figura 6.2. Este comportamiento indica que a medida que la distancia de separación aumenta o que la frecuencia de confinamiento del sistema disminuye, se hace visible un comportamiento individualizado de cada punto cuántico, es decir, la interacción entre los dos átomos artificiales desaparece, por ello,  $J$  tiende a cero.

La figura 6.3 presenta el comportamiento de  $J(E)$  para distintos valores de  $B$ , manteniendo  $d$  fijo. En esta gráfica se observa un fenómeno interesante y es el hecho de poder producir un cambio de signo del parámetro  $J$ , pero tal transición se realiza de ferromagnético ( $J < 0$ ) a antiferromagnético ( $J > 0$ ) actuando sobre el sistema un campo magnético de intensidad  $B \geq 1,35\text{T}$ . Esta característica conduce a pensar en un esquema de dos puntos cuánticos acoplados operando como una compuerta cuántica, que puede regresar a su estado inicial sin eliminar la interacción del campo magnético  $\mathbf{B}$  después de cambiar  $J$ . Si se considera que la transición inicialmente es de antiferro a ferro, variando el campo magnético y manteniendo fijo  $\mathbf{E}$  (Fig.6.4.A-B), para retornar a su estado inicial, se debe mantener constante  $\mathbf{B}$  e incrementar el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  hasta que el sistema presente un cambio de ferro a antiferro (Fig.6.4.C-D).

Finalmente, y más desde un contexto del magnetismo y de la ciencia de los materiales, debido a que el sistema considerado única y exclusivamente está constituido por los dos puntos cuánticos acoplados lateralmente, donde cada uno de ellos tiene un electrón confinado en su interior, este se comporta como una molécula artificial,

la cual según el signo de  $J$  tiene propiedades de material ferromagnético ( $J < 0$ ) o antiferromagnético ( $J > 0$ ), por consiguiente la variación de los parámetros  $E$ ,  $B$  y  $d$  no solo produce cambios en intercambio de energía -y en últimas en el control de los qubits- si no que adicionalmente cambia las propiedades magnéticas del punto cuántico, permitiendo tener un sistema molecular artificial muy versátil con potenciales aplicaciones no solo en el campo de la computación cuántica tal como se ha descrito a lo largo de este trabajo, sino en campos como la spintronica, la ciencia de los materiales y la teoría del magnetismo.

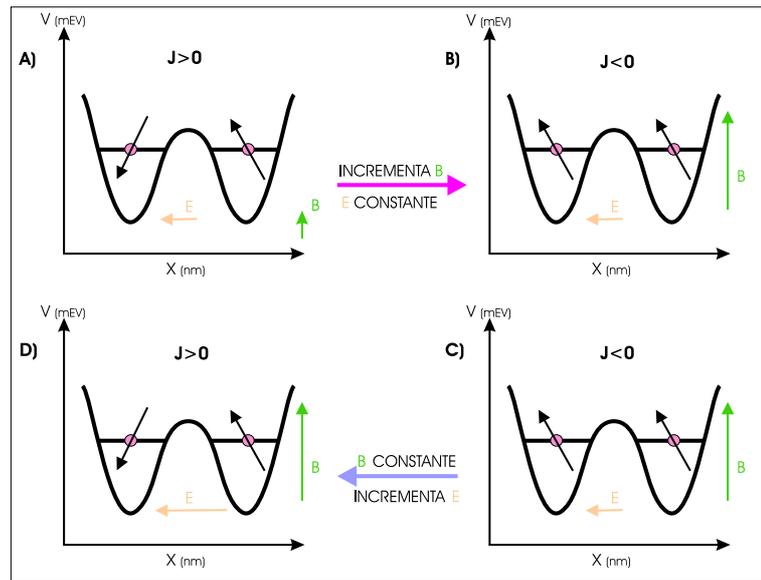


Figura 6.4: Esquema de switcheo propuesto en este trabajo para un sistema de dos cuánticos acoplados lateralmente, operando como una compuerta cuántica.

## 6.5. Conclusiones

En este capítulo se ha presentado de forma explícita todo el proceso que hace posible calcular el intercambio de energía  $J(B, E, d)$  entre espines electrónicos de un sistema de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente (conteniendo cada uno un electrón) como una función de los campos eléctrico y magnético externos aplicados sobre el sistema, así como de la distancia de separación entre puntos  $d$ , usando para ello la aproximación de Heitler-London. Se muestra que  $J(B, E, d)$  cambia de signo con el incremento del campo  $B$  antes de desaparecer exponencialmente. Un similar comportamiento se presenta cuando sobre el sistema se varía el campo eléctrico  $E$ ,

manteniendo constante  $B$  y  $d$ . En tal situación la transición presentada por el intercambio de energía  $J(E)$  es inversa a la observada en  $J(B)$ . Esta característica muy particular, en la cual es posible producir un cambio de signo en  $J(E)$  no ha sido reportada hasta el momento, de ahí la importancia de este resultado. Además de ser de interés fundamental, la dependencia del intercambio de energía  $J(B, E, d)$  de los parámetros  $B$ ,  $E$ , y  $d$  abre la posibilidad de usar puntos cuánticos acoplados como compuertas cuánticas que pueden ser operados por campos magnético/o eléctricos para producir entrelazamiento entre los qubits.

## 7. Conclusiones Generales

En este trabajo se logra inicialmente modelar en forma adecuada el comportamiento físico de un punto cuántico con un electrón, bajo la influencia de un campo magnético paralelo al eje  $z$ . La descripción de este sistema se realiza empleando el formalismo de operadores de creación y destrucción, lo que permite calcular de forma transparente, rápida y elegante los niveles de energía así como la forma general de las funciones de onda para cada uno de los posibles estados del sistema.

Para el sistema de un punto cuántico bajo un campo magnético externo  $B$ , se obtiene un espectro energético que además de tener una fuerte dependencia de  $B$ , la cual se traduce en la presencia de los niveles de Landau, está estrechamente relacionado con las dimensiones del punto cuántico, en especial con su radio. Esta fuerte dependencia es una característica típica de los puntos cuánticos, en los cuales la disminución de radio produce una cuantización de la energía.

Debido al efecto de un campo magnético externo  $\mathbf{B}$  sobre el punto cuántico, aparece en él un acoplamiento entre este factor y el momento magnético dipolar de espín del electrón. Tal interacción, conocida como efecto Zeeman anómalo, describe un sistema de dos estados energéticamente distinguibles, el cual claramente puede operar como una compuerta cuántica de rotación de  $1 - qubit$  y que puede ser controlada externamente. En este sentido las investigaciones experimentales en este campo en los últimos 6 años han logrado un alto desarrollo técnico y tecnológico, permitiendo vislumbrar para un futuro no muy lejano que este tipo de compuertas sean una realidad.

Se logra determinar a través de la teoría de perturbaciones la interacción espín-orbita para un punto cuántico con un electrón, bajo la acción de un campo magnético externo en la dirección  $z$ , obteniendo una forma general un término que describe el comportamiento para cualquier nivel de energía no degenerado.

El efecto energético que la interacción espín-orbita tiene sobre el sistema de un punto cuántico con un electrón bajo la interacción de un campo magnético  $\mathbf{B}$ , presenta una razón de diferencia de siete órdenes de magnitud con respecto al nivel de energía más

bajo, lo cual físicamente significa que el efecto de esta cantidad es muy pequeño. En el presente estudio y con el ánimo de considerar un modelo muy simple de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente, cada uno con un electrón, el efecto de acoplamiento espín-orbita no es tenido en cuenta para el cálculo del intercambio de energía.

Se logra describir en forma adecuada el formalismo físico y matemático que permite obtener un término analítico que representa el intercambio de energía  $J$  para un sistema de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente de GaAs, cada uno confinando un electrón.

El término que representa al intercambio de energía  $J$  depende explícitamente de tres parámetros que pueden ser controlados externamente como son el campo magnético  $\mathbf{B}$  en la dirección  $z$ , el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  paralelo a eje  $x$  y la distancia de separación  $d$  entre los dos puntos cuánticos.

La posibilidad de crear un cambio en el signo del intercambio de energía a través de un campo eléctrico  $E$ , es un método adicional a los descritos y reportados en la literatura, lo que permite explorar una nueva área de trabajo que hasta el momento experimentalmente no se ha explotado.

Se presenta un esquema de cambio en el parámetro  $J$ , el cual le permite a una compuerta cuántica basada en puntos cuánticos alcanzar su estado inicial después de llevar a cabo una operación, sin necesidad de suprimir las interacciones de los campos magnético  $\mathbf{B}$  y eléctrico  $\mathbf{E}$  sobre el sistema.

Esta descripción del factor  $J$  en función de variables que pueden ser controladas experimentalmente y teniendo en cuenta la arquitectura de Loss y DiVincenzo abre la posibilidad de usar puntos cuánticos acoplados lateralmente como dispositivos de compuertas cuánticas.

Aunque la descripción de este esquema fue realizado para dos puntos cuánticos de GaAs acoplados lateralmente, su estudio puede ser generalizado a sistemas de muchos cuerpos así como puntos cuánticos acoplados verticalmente, átomos acoplados a una red de Bravais, solapamiento de donadores poco profundos en silicio entre otros, lo que permite explorar otras formas de implementación para un dispositivo de cómputo mecánico cuántico.

El mejoramiento de las técnicas de fabricación de puntos cuánticos, el control en el número de electrones confinados en estas heteroestructuras así como el desarrollo de nuevos métodos en la medición de los estados de espín del para estos átomos artificiales presentan un panorama muy promisorio en esta área, permitiendo pensar

que en algunos años la construcción de un computador cuántico escalable basado en puntos cuánticos semiconductores sea una realidad.

# Apéndice A. Operadores de Creación y Destrucción

## A.1. Reglas de Conmutación

Considerando los operadores fermionicos de la forma

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{2} \left[ \beta \hat{x} - \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right], \quad \hat{b}^+ = \frac{1}{2} \left[ \beta \hat{y} - \frac{i \hat{p}_y}{\beta \hbar} \right], \quad (\text{A.1})$$

$$\hat{a} = \frac{1}{2} \left[ \beta x + \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right], \quad \hat{b} = \frac{1}{2} \left[ \beta \hat{y} + \frac{i \hat{p}_y}{\beta \hbar} \right], \quad (\text{A.2})$$

Veamos las reglas de conmutación de estos operadores

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = [\hat{b}, \hat{b}^+] = 1, \quad (\text{A.3})$$

$$[\hat{a}^+, \hat{b}] = [\hat{a}^+, \hat{b}^+] = [\hat{b}^+, \hat{a}] = [\hat{b}, \hat{a}] = 0. \quad (\text{A.4})$$

**Teorema 1.**  $[\hat{a}, \hat{a}] = 0$ .

*Demostración.*

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}] &= \hat{a} \hat{a} - \hat{a} \hat{a} \\ &= \frac{1}{2} \left( \beta \hat{x} + \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right) \left( \beta \hat{x} + \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right) - \frac{1}{2} \left( \beta \hat{x} + \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right) \left( \beta \hat{x} + \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left[ \left( \beta^2 \hat{x}^2 + \frac{i \beta \hat{x} \hat{p}_x}{\beta \hbar} + \frac{i \hat{p}_x \beta \hat{x}}{\beta \hbar} + \frac{\hat{p}_x^2}{\beta^2 \hbar^2} \right) - \left( \beta^2 \hat{x}^2 + \frac{i \beta \hat{x} \hat{p}_x}{\beta \hbar} + \frac{i \hat{p}_x \beta \hat{x}}{\beta \hbar} + \frac{\hat{p}_x^2}{\beta^2 \hbar^2} \right) \right] \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$[\hat{a}, \hat{a}] = 0.$$

□

De forma análoga para  $[\hat{a}^+, \hat{a}^+]$ ,  $[\hat{b}, \hat{b}]$  y  $[\hat{b}^+, \hat{b}^+]$

**Teorema 2.**  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ .

*Demostración.*

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^+] &= \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} \\
&= \frac{1}{2} \left( \beta\hat{x} + \frac{i\hat{p}_x}{\beta\hbar} \right) \left( \beta\hat{x} - \frac{i\hat{p}_x}{\beta\hbar} \right) - \frac{1}{2} \left( \beta\hat{x} - \frac{i\hat{p}_x}{\beta\hbar} \right) \left( \beta\hat{x} + \frac{i\hat{p}_x}{\beta\hbar} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left[ \left( \beta^2\hat{x}^2 - \frac{i\beta\hat{x}\hat{p}_x}{\beta\hbar} + \frac{i\hat{p}_x\beta\hat{x}}{\beta\hbar} + \frac{\hat{p}_x^2}{\beta^2\hbar^2} \right) - \left( \beta^2\hat{x}^2 + \frac{i\beta\hat{x}\hat{p}_x}{\beta\hbar} - \frac{i\hat{p}_x\beta\hat{x}}{\beta\hbar} + \frac{\hat{p}_x^2}{\beta^2\hbar^2} \right) \right] \\
&= \frac{1}{2\hbar} [-2i\hat{x}\hat{p}_x - 2i\hat{p}_x\hat{x}],
\end{aligned}$$

recordando que  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = -i\hbar$ , se tiene

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^+] &= -\frac{i}{\hbar}(i\hbar) \\
[\hat{a}, \hat{a}^+] &= 1.
\end{aligned}$$

□

En forma analoga, para los operadores  $\hat{b}$  y  $\hat{b}^+$  se tiene

$$[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1.$$

**Teorema 3.**  $[\hat{a}, \hat{b}] = 0$

*Demostración.*

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{b}] &= \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a} \\
&= \frac{1}{2} \left( \beta\hat{x} + \frac{i\hat{p}_x}{\beta\hbar} \right) \left( \beta\hat{y} + \frac{i\hat{p}_y}{\beta\hbar} \right) - \frac{1}{2} \left( \beta\hat{y} + \frac{i\hat{p}_y}{\beta\hbar} \right) \left( \beta\hat{x} + \frac{i\hat{p}_x}{\beta\hbar} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left[ \beta^2\hat{x}\hat{y} + \frac{i\beta\hat{x}\hat{p}_y}{\beta\hbar} + \frac{i\hat{p}_x\beta\hat{y}}{\beta\hbar} + \frac{\hat{p}_x\hat{p}_y}{\beta^2\hbar^2} - \beta^2\hat{y}\hat{x} - \frac{i\beta\hat{y}\hat{p}_x}{\beta\hbar} - \frac{i\hat{p}_y\beta\hat{x}}{\beta\hbar} - \frac{\hat{p}_y\hat{p}_x}{\beta^2\hbar^2} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \beta^2(\hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x}) + \frac{i}{\hbar}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{x}) - \frac{i}{\hbar}(\hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y}) + \frac{1}{\beta^2\hbar}(\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_x) \right]
\end{aligned}$$

considerando que  $[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$  se tiene

$$[\hat{a}, \hat{b}] = 0.$$

□

**Teorema 4.**  $[\hat{a}^+, \hat{b}] = 0$

*Demostración.*

$$\begin{aligned}
[\hat{a}^+, \hat{b}] &= \hat{a}^+ \hat{b} - \hat{b} \hat{a}^+ \\
&= \frac{1}{2} \left( \beta \hat{x} - \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right) \left( \beta \hat{y} + \frac{i \hat{p}_y}{\beta \hbar} \right) - \frac{1}{2} \left( \beta \hat{y} + \frac{i \hat{p}_y}{\beta \hbar} \right) \left( \beta \hat{x} - \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left[ \beta^2 \hat{x} \hat{y} + \frac{i \beta \hat{x} \hat{p}_y}{\beta \hbar} - \frac{i \hat{p}_x \beta \hat{y}}{\beta \hbar} + \frac{\hat{p}_x \hat{p}_y}{\beta^2 \hbar^2} - \beta^2 \hat{y} \hat{x} + \frac{i \beta \hat{y} \hat{p}_x}{\beta \hbar} - \frac{i \hat{p}_y \beta \hat{x}}{\beta \hbar} - \frac{\hat{p}_y \hat{p}_x}{\beta^2 \hbar^2} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \beta^2 (\hat{x} \hat{y} - \hat{y} \hat{x}) + \frac{i}{\hbar} (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{x}) + \frac{i}{\hbar} (\hat{y} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{y}) + \frac{1}{\beta^2 \hbar} (\hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x) \right]
\end{aligned}$$

considerando que  $[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$  se tiene

$$[\hat{a}^+, \hat{b}] = 0.$$

□

**Teorema 5.**  $[\hat{a}, \hat{b}^+] = 0$

*Demostración.*

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{b}^+] &= \hat{a} \hat{b}^+ - \hat{b}^+ \hat{a} \\
&= \frac{1}{2} \left( \beta \hat{x} + \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right) \left( \beta \hat{y} - \frac{i \hat{p}_y}{\beta \hbar} \right) - \frac{1}{2} \left( \beta \hat{y} - \frac{i \hat{p}_y}{\beta \hbar} \right) \left( \beta \hat{x} + \frac{i \hat{p}_x}{\beta \hbar} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left[ \beta^2 \hat{x} \hat{y} - \frac{i \beta \hat{x} \hat{p}_y}{\beta \hbar} + \frac{i \hat{p}_x \beta \hat{y}}{\beta \hbar} - \frac{\hat{p}_x \hat{p}_y}{\beta^2 \hbar^2} - \beta^2 \hat{y} \hat{x} - \frac{i \beta \hat{y} \hat{p}_x}{\beta \hbar} + \frac{i \hat{p}_y \beta \hat{x}}{\beta \hbar} + \frac{\hat{p}_y \hat{p}_x}{\beta^2 \hbar^2} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \beta^2 (\hat{x} \hat{y} - \hat{y} \hat{x}) - \frac{i}{\hbar} (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{x}) - \frac{i}{\hbar} (\hat{y} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{y}) - \frac{1}{\beta^2 \hbar} (\hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x) \right]
\end{aligned}$$

considerando que  $[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$  se tiene

$$[\hat{a}, \hat{b}^+] = 0.$$

□

# Apéndice B. Interacción Espín Orbita

## B.1. Hamiltoniano de la Interacción Espín Orbita

Suponiendo que el hamiltoniano de la interacción espín-orbita es una pequeña perturbación a nuestro sistema de un punto cuántico con un electrón bajo la acción de un campo magnético externo, es posible determinar el aporte energético al sistema. Para calcularlo, se hace uso de la teoría de perturbaciones, considerando para ello que el átomo artificial monoeléctrico se encuentra en el estado fundamental y no presenta degenerancia. Este electrón se ubica en la banda de conducción del GaAs, de tal forma que su energía potencial según el hamiltoniano (4.5) esta representada por

$$U(r) = \left[ \frac{1}{2} \omega_c (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) + \frac{1}{2} \mu \Omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) \right]. \quad (\text{B.1})$$

A partir de este termino, se construye la ecuación (5.9). Para ello, se introduce la función  $\varphi$  tal que

$$\nabla \varphi = \mathbf{E} = -\frac{\nabla U(r)}{q_e} = -\frac{1}{q_e} \left[ \frac{\partial U(r)}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial U(r)}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial U(r)}{\partial z} \mathbf{k} \right]. \quad (\text{B.2})$$

Expresando el producto vectorial entre  $\nabla \varphi$  con el operador  $\hat{\sigma}$  se tiene

$$\begin{aligned} \nabla \varphi \times \hat{\sigma} = & -\frac{1}{q_e} \left[ \left( -\frac{\omega_c \hat{p}_x}{2} + \mu \Omega \hat{y} \right) \hat{\sigma}_z \mathbf{i} - \left( \frac{\omega_c \hat{p}_y}{2} + \mu \Omega \hat{x} \right) \hat{\sigma}_z \mathbf{j} \right] \\ & - \frac{1}{q_e} \left[ \left( \frac{\omega_c \hat{p}_y}{2} + \mu \Omega \hat{x} \right) \hat{\sigma}_y - \left( -\frac{\omega_c \hat{p}_x}{2} + \mu \Omega \hat{y} \right) \hat{\sigma}_x \right] \mathbf{k}, \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

y el producto escalar con el operador momento esta representado por

$$\begin{aligned} (\nabla \varphi \times \hat{\sigma}) \cdot \hat{p} = & -\frac{1}{q_e} \left[ \left( -\frac{\omega_c \hat{p}_x^2}{2} + \mu \Omega \hat{y} \hat{p}_x \right) \hat{\sigma}_z - \left( \frac{\omega_c \hat{p}_y^2}{2} + \mu \Omega \hat{x} \hat{p}_y \right) \hat{\sigma}_z \right] \\ & - \frac{1}{q_e} \left[ \left( \frac{\omega_c \hat{p}_y \hat{p}_z}{2} + \mu \Omega \hat{x} \hat{p}_z \right) \hat{\sigma}_y - \left( -\frac{\omega_c \hat{p}_x \hat{p}_z}{2} + \mu \Omega \hat{y} \hat{p}_z \right) \hat{\sigma}_x \right], \quad (\text{B.4}) \end{aligned}$$

multiplicando este hamiltoniano en ambos extremos por  $\xi' = \frac{qe\hbar}{4\mu^2c^2}$ , renombrando  $\xi = \frac{\xi'}{qe}$  y expresando los operadores de posición y momentum del hamiltoniano de perturbación (B.4) en términos de los operadores  $\hat{a}, \hat{a}^+, \hat{b}, \hat{b}^+$  descritos en (B.1) se tiene

$$\begin{aligned} \hat{H}_{s-o} = \xi' (\nabla\varphi \times \hat{\sigma}) \cdot \hat{p} = & \xi \frac{\omega_c \beta^2 \hbar^2}{4} (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 \hat{\sigma}_z + \xi \frac{\mu \Omega^2 \hbar}{2i} (\hat{b}^+ \hat{a} - \hat{a}^+ \hat{b}) \hat{\sigma}_z \\ & + \xi \frac{\omega_c \beta^2 \hbar^2}{4} (\hat{b} - \hat{b}^+)^2 \hat{\sigma}_z + \xi \left[ \frac{\omega_c \beta \hbar}{2\sqrt{2}i} (\hat{b} - \hat{b}^+) + \frac{\mu \Omega^2}{\sqrt{2}\beta} (\hat{a}^+ + \hat{a}) \right] \hat{\sigma}_y \hat{p}_z \\ & - \xi \left[ \frac{\omega_c \beta \hbar}{2\sqrt{2}i} (\hat{a} - \hat{a}^+) + \frac{\mu \Omega^2}{\sqrt{2}\beta} (\hat{b}^+ + \hat{b}) \right] \hat{\sigma}_x \hat{p}_z, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

simplificando aun más este hamiltoniano se definen algunas constantes así

$$\alpha = \xi \frac{\omega_c \beta^2 \hbar^2}{4}; \quad \lambda = \xi \frac{\mu \Omega^2 \hbar}{2i}; \quad \theta = \xi \frac{\omega_c \beta \hbar}{2\sqrt{2}i}; \quad \Lambda = \frac{\mu \Omega^2}{\sqrt{2}\beta} \quad (\text{B.6})$$

por consiguiente,  $\hat{H}_{s-o}$  toma la forma

$$\begin{aligned} \hat{H}_{s-o} = & \alpha (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 \hat{\sigma}_z + \frac{\lambda}{i} (\hat{b}^+ \hat{a} - \hat{a}^+ \hat{b}) \hat{\sigma}_z + \frac{\theta}{i} (\hat{b} - \hat{b}^+)^2 \hat{\sigma}_z \\ & + \left[ \frac{\theta}{i} (\hat{b} - \hat{b}^+) + \Lambda (\hat{a}^+ + \hat{a}) \right] \hat{\sigma}_y \hat{p}_z - \left[ \frac{\theta}{i} (\hat{a} - \hat{a}^+) + \Lambda (\hat{b}^+ + \hat{b}) \right] \hat{\sigma}_x \hat{p}_z. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Por otro lado, si tenemos en cuenta la definición dada en el capítulo anterior de los operadores  $\hat{A}, \hat{A}^+, \hat{B}, \hat{B}^+$ , así como unas nuevas constantes dadas por

$$k = 2\alpha; \quad q = \theta \frac{\sqrt{2}}{2}; \quad R = \Lambda \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad (\text{B.8})$$

finalmente el hamiltoniano  $\hat{H}_{s-o}$  toma la forma

$$\begin{aligned} \hat{H}_{s-o} = & k \left( \hat{A}\hat{B} - \hat{A}^+\hat{A} - \hat{B}^+\hat{B} + \hat{A}^+\hat{B}^+ - 1 \right) \hat{\sigma}_z + \lambda \left( \hat{B}^+\hat{B} - \hat{A}^+\hat{A} \right) \hat{\sigma}_z \\ & - Q \left( \hat{B} - \hat{A} + \hat{B}^+ - \hat{A}^+ \right) \hat{\sigma}_y \hat{p}_z - iQ \left( \hat{A}^+ + \hat{B}^+ - \hat{A} - \hat{B} \right) \hat{\sigma}_x \hat{p}_z \\ & + R \left( \hat{A} + \hat{B} + \hat{A}^+ + \hat{B}^+ \right) \hat{\sigma}_y \hat{p}_z + iR \left( \hat{B} - \hat{A} + \hat{A}^+ - \hat{B}^+ \right) \hat{\sigma}_x \hat{p}_z. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

# Apéndice C. Evaluación del Término de Intercambio J

## C.1. Evaluación de $\Upsilon_1$

$$\begin{aligned} \Upsilon_1 = & \langle A(1) | H_1 | A(1) \rangle \langle B(2) | B(2) \rangle + \langle B(2) | H_2 | B(2) \rangle \langle A(1) | A(1) \rangle \\ & + \langle B(1) | H_1 | B(1) \rangle \langle A(2) | A(2) \rangle \langle A(2) | H_2 | A(2) \rangle \langle B(1) | B(1) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Evaluamos en primera instancia los términos  $\langle A(j) | A(j) \rangle$  y  $\langle B(j) | B(j) \rangle$ , con  $j = 1, 2$ . Expresando en forma extendida estos términos se tiene

$$\begin{aligned} \langle A(j) | A(j) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^{*(1)}(x_j, y_j) \phi_0^{(1)}(x_j, y_j) dx_j dy_j \\ &= \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar}x_j^2} dx_j \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar}y_j^2} dy_j \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\langle A(j) | A(j) \rangle = 1. \quad (\text{C.2})$$

En forma análoga para el término  $\langle B(j) | B(j) \rangle$  se tiene

$$\begin{aligned} \langle B(j) | B(j) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^{*(2)}(x_j, y_j) \phi_0^{(2)}(x_j, y_j) dx_j dy_j \\ &= \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar}x_j^2} dx_j \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar}y_j^2} dy_j \\ &= 1 \end{aligned}$$

estos dos últimos resultados indican que las autofunciones asociadas a cada puntos cuánticos están normalizadas.

Por otra parte, se tiene que

$$\hat{H}_1 |A(j)\rangle = E_{01} |A(j)\rangle, \quad (\text{C.3})$$

donde  $E_{01}$  es el autovalor de energía fundamental asociado a la autofunción  $|A(j)\rangle$  de  $\hat{H}_1$ . En forma similar, para  $\hat{H}_2$  se tiene

$$\hat{H}_2 |B(j)\rangle = E_{02} |B(j)\rangle. \quad (\text{C.4})$$

Para calcular los dos términos restante de  $\Upsilon_1$ , es necesario determinar los valores esperados de  $\hat{H}_1$  y  $\hat{H}_2$  con las funciones  $B(1)$  y  $A(2)$  respectivamente. Sin perdida de generalidad, se considera inicialmente el primer término, es decir  $\langle B(1) | \hat{H}_1 | B(1) \rangle$ . Debido a que  $B(1)$  no es una autofunción de  $\hat{H}_1$ , debemos intentar expresar  $|B(1)\rangle$  como una traslación del estado  $|A(1)\rangle$ , o equivalentemente, realizar una traslación sobre el hamiltoniano  $\hat{H}_2$  que quede en función de  $\hat{H}_1$ , en términos de las variables  $(x_j, y_j)$ . Esta traslaciones deben ser tanto en  $\hat{r}$  como en  $\hat{p}$ , tales que la diferencia de la cantidad de movimiento entre  $\hat{H}_1$  y  $\hat{H}_2$  sea cero y que el término de confinamiento tipo oscilador armónico en  $x$  sea de  $2a$ . Las traslaciones son

$$\hat{x}_j \rightarrow \hat{x}_j + 2a; \quad \hat{p}_{y_j} \rightarrow \hat{p}_{y_j} + \frac{q_e B a}{c}, \quad (\text{C.5})$$

El hamiltoniano  $\hat{H}_2$ , después de aplicarle la traslación queda de la forma

$$\hat{U}_{2j} \hat{H}_2(x_j, y_j) \hat{U}_{2j}^* = \hat{H}_1(x_j, y_j) + 2Ea. \quad (\text{C.6})$$

Realizando ahora una traslación inversa queda

$$\hat{H}_2(x_j, y_j) = \hat{U}_{2j}^* \hat{H}_1(x_j, y_j) \hat{U}_{2j} + 2Ea. \quad (\text{C.7})$$

Lo anterior indica que las autofunciones  $|B(j)\rangle$  asociadas a  $\hat{H}_2(x_j, y_j)$  pueden ser expresadas como una traslación de la función de onda asociada con  $\hat{H}_1(x_j, y_j)$  así

$$|B(j)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \left( -\frac{q_e B a}{c} \hat{y}_j - 2a \hat{p}_{y_j} \right)} |A(j)\rangle \quad (\text{C.8})$$

aplicando esta relación a  $\langle B(1) | \hat{H}_1 | B(1) \rangle$  se tiene

$$\begin{aligned} \langle B(1) | \hat{H}_1 | B(1) \rangle &= \\ \langle A(1) | e^{-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{q_e B a}{c} y_j + 2a \hat{p}_{y_j} \right)} \hat{H}_1(x_1, y_1) e^{-\frac{i}{\hbar} \left( -\frac{q_e B a}{c} y_j - 2a \hat{p}_{y_j} \right)} | A(1) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

donde

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{q_e B a}{c} y_j + 2a \hat{p}_{y_j} \right)} \hat{H}_1(x_1, y_1) e^{-\frac{i}{\hbar} \left( -\frac{q_e B a}{c} y_j - 2a \hat{p}_{y_j} \right)} = \hat{H}_1(x_1, y_1) + \frac{\mu \omega_0^2}{2} [4a \hat{x}_{-1} + 4a^2], \quad (\text{C.10})$$

por lo cual, finalmente se obtiene

$$\langle B(1) | \hat{H}_1 | B(1) \rangle = E_{01} + 4a^2 \frac{\mu\omega_0^2}{2}. \quad (\text{C.11})$$

Tomando ahora el término  $\langle A(2) | \hat{H}_2 | A(2) \rangle$ , donde las traslaciones son de la forma

$$\hat{x}_j \rightarrow \hat{x}_j - 2a; \quad \hat{p}_{y_j} \rightarrow \hat{p}_{y_j} - \frac{qeBa}{c}, \quad (\text{C.12})$$

y el operador traslación es

$$\hat{U}_{1j} = e^{-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{qeBa}{c} y_j + 2a\hat{p}_{y_j} \right)} \quad (\text{C.13})$$

al realizar el mismo proceso que para la evaluación de  $\langle A(2) | \hat{H}_2 | A(2) \rangle$  se obtiene

$$\hat{H}_1(x_j, y_j) = \hat{U}_{1j}^* \hat{H}_2(x_j, y_j) \hat{U}_{1j} - 2Ea, \quad (\text{C.14})$$

por lo tanto la función de onda toma la forma

$$|A(j)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{qeBa}{c} \hat{y}_j + 2a\hat{p}_{y_j} \right)} |B(j)\rangle, \quad (\text{C.15})$$

que al ser introducida en  $\langle A(2) | \hat{H}_2 | A(2) \rangle$  conduce a

$$\langle A(2) | \hat{H}_2 | A(2) \rangle = E_{02} + 4a^2 \frac{\mu\omega_0^2}{2}. \quad (\text{C.16})$$

Con todos estos elementos, se obtiene la forma de  $\Upsilon_1$  así

$$\Upsilon_1 = 2(E_{01} + E_{02}) + 4\mu a^2 \omega_0^2 \quad (\text{C.17})$$

## C.2. Evaluación de $\Upsilon_2$

$$\begin{aligned} \Upsilon_2 = & \langle A(1) | H_1 | B(1) \rangle \langle B(2) | A(2) \rangle + \langle B(2) | H_2 | A(2) \rangle \langle A(1) | B(1) \rangle \\ & + \langle B(1) | H_1 | A(1) \rangle \langle A(2) | B(2) \rangle \langle A(2) | H_2 | B(2) \rangle \langle B(1) | A(1) \rangle, \quad (\text{C.18}) \end{aligned}$$

La evaluación de esta segunda expresión ofrece poca dificultad, ya que la mayoría de términos que la componen fueron encontrados al determinar  $\Upsilon_1$  a excepción de

$\langle A(j)|B(j)\rangle$  y  $\langle B(j)|A(j)\rangle$ , los cuales al ser desarrollados en forma integral conducen al término

$$\langle A(j)|B(j)\rangle = \langle B(j)|A(j)\rangle = e^{-\frac{\mu\Omega a^2}{\hbar} - \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\mu\hbar\Omega c^2}} = S. \quad (\text{C.19})$$

Esto significa que los orbitales atómicos no son ortogonales entre si y que entre ellos existe un solapamiento representado en la ecuación 6.22 y el cual es igual al valor de  $\langle A(j)|B(j)\rangle$  y  $\langle B(j)|A(j)\rangle$ .

Todo lo anterior conduce a

$$\Upsilon_2 = 2 S^2 (E_{01} + E_{02}) \quad (\text{C.20})$$

### C.3. Evaluación de $\Upsilon_3$

$$\Upsilon_3 = \langle A(1)B(2)|V_{12}|A(1)B(2)\rangle + \langle A(2)B(1)|V_{12}|A(2)B(1)\rangle, \quad (\text{C.21})$$

Debido a la complejidad matemática requerida para determinar la cantidad representada por  $\Upsilon_3$ , en esta sección realizamos una descripción detallada de la evaluación de este factor.

En primera instancia, se denota por  $\beta_1$  al primer término de  $\Upsilon_3$ , mientras que  $\beta_2$  al término remanente de la misma ecuación, por lo tanto

$$\Upsilon_3 = \beta_1 + \beta_2, \quad (\text{C.22})$$

donde  $\beta_1 = \langle A(1)B(2)|V_{12}|A(1)B(2)\rangle$  y  $\beta_2 = \langle A(2)B(1)|V_{12}|A(2)B(1)\rangle$ .

Consideremos el primer término, es decir  $\beta_1$ . En forma extendida, este término presenta la forma

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \phi_0^{*(1)}(x_1, y_1) \phi_0^{*(2)}(x_2, y_2) \frac{q_e^2}{\kappa |\hat{r}_1 - \hat{r}_2|} \phi_0^{(1)}(x_1, y_1) \phi_0^{(2)}(x_2, y_2) dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 \\ &= \left( \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{q_e^2}{\kappa} \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|} e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar}(x_{-1}^2 + x_{+2}^2 + y_{-1}^2 + y_{+2}^2)} dx_1 dx_2 dy_1 dy_2. \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

Introduciendo el concepto de centro de masa, coordenadas relativas dadas por

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2); \\ X &= \frac{1}{2}(x_1 + x_2); \\ Y &= \frac{1}{2}(y_1 + y_2); \end{aligned} \right\} \text{Centro de Masa} \quad (\text{C.24})$$

y

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r} &= (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2); \\ x &= (x_1 - x_2); \\ y &= (y_1 - y_2); \end{aligned} \right\} \text{Coordenadas Relativas} \quad (\text{C.25})$$

si adicionalmente estas nuevas coordenadas las expresamos en coordenadas polares así

$$\begin{aligned} X &= R \cos \Phi; & Y &= R \sen \Phi; \\ x &= r \cos \phi; & y &= r \sen \phi; \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

donde  $r = \frac{1}{2}\sqrt{(x_1 + x_2)^2 + (y_1 + y_2)^2}$ ,  $R = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$  y jacobiano  $Rr$ . Empleando todo lo anterior,  $\beta_1$  toma la forma

$$\beta_1 = \left( \frac{e\mu\Omega}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{\kappa} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} a^2 + \frac{e^2 E^2}{\mu^2 \omega_0^2}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar} 2X^2 + \frac{4EX}{\mu\Omega_0^2}} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} Y^2} dY \right] dX \right\} \cdot \underbrace{\left( \int_0^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega r^2}{2\hbar}} \underbrace{\left[ \int_0^{2\pi} e^{-\frac{2a\mu\Omega r \cos \phi}{\hbar}} d\phi \right]}_{\mathfrak{C}_1} dr \right)}_{\mathfrak{C}_2} \quad (\text{C.27})$$

la evaluación de las integrales  $\mathfrak{C}_1$  y  $\mathfrak{C}_2$  ofrece un mayor grado de interés que el resto de los términos que constituyen a  $\beta_1$ . ello debido a la utilización de ciertas funciones especiales poco comunes.

Inicialmente, para determinar  $\mathfrak{C}_1$ , se considera la serie<sup>1</sup>

$$e^{-\vartheta \cos \phi} = \mathbf{I}_0(\vartheta) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \mathbf{I}_k(\vartheta) \cos(k\phi) \quad (\text{C.28})$$

<sup>1</sup>Abramowitz e at. ref [68], página 376, formulas 9.6.34 y 9.6.38

por lo tanto al expresar el integrando de  $\mathfrak{C}_1$  con esta expansión y evaluando la integral se obtiene

$$\mathfrak{C}_1 = 2\pi \mathbf{I}_0 \left( \frac{2\mu a r \Omega}{\hbar} \right) \quad (\text{C.29})$$

Ahora, empleando el resultado anterior,  $\mathfrak{C}_2$  queda representado por

$$\mathfrak{C}_2 = 2\pi \int_0^\infty e^{-\frac{\mu\Omega r^2}{2\hbar}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{2\mu a r \Omega}{\hbar} \right) dr. \quad (\text{C.30})$$

Para evaluar esta integral se considera la expansión<sup>2</sup> representada por

$$2\pi \int_0^\infty e^{-\alpha^2 t^2} \mathbf{I}_\nu(bt) dt = \frac{\pi^{1/2}}{2\alpha} e^{b^2/8\alpha^2} \mathbf{I}_{\frac{1}{2}\nu} \left( \frac{b^2}{8\alpha^2} \right), \quad (\text{C.31})$$

donde  $Re(\nu) > -1$  y  $Re(\alpha^2) > 0$ . Por lo cual  $\mathfrak{C}_2$  queda expresado por

$$\mathfrak{C}_2 = \pi \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\mu\Omega}} e^{\frac{\mu\Omega\alpha^2}{\hbar}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{\mu\Omega\alpha^2}{\hbar} \right). \quad (\text{C.32})$$

Las otras dos integrales que constituyen a  $\beta_1$  fácilmente son evaluadas con ayuda de las propiedades de la función gamma. Para la integral dependiente de  $Y$  se tiene

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} Y^2} dY = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\mu\Omega}} \quad (\text{C.33})$$

mientras que para la integral dependiente de  $X$ , al completar el cuadrado del exponencial se tiene

$$e^{\frac{2q_e^2 E^2 \Omega}{\hbar\mu\omega_0^4}} \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} X + \frac{q_e E}{\mu\omega_0}}{}^2 dX = e^{\frac{2q_e^2 E^2 \Omega}{\hbar\mu\omega_0^4}} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\mu\Omega}} \quad (\text{C.34})$$

por lo tanto,  $\beta_1$  queda expresado como

$$\beta_1 = \left( \frac{\pi\mu\Omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \frac{q_e^2}{\kappa} e^{-\frac{\mu\alpha\Omega}{\hbar}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{\mu\Omega\alpha^2}{\hbar} \right). \quad (\text{C.35})$$

Este mismo proceso es empleado para evaluar al término  $\beta_2$ , el cual esta dado por

$$\beta_2 = \left( \frac{e\mu\Omega}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{\kappa} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} a^2 + \frac{e^2 E^2}{\mu^2 \omega_0^2}} \left\{ \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar} 2X^2 + \frac{4EX}{\mu\Omega_0^2}} \left[ \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} Y^2} dY \right] dX \right\} \cdot \underbrace{\left( \int_0^\infty e^{-\frac{\mu\Omega r^2}{2\hbar}} \underbrace{\left[ \int_0^{2\pi} e^{\frac{2a\mu\Omega r \cos\phi}{\hbar}} d\phi \right]}_{\mathfrak{C}_3} dr \right)}_{\mathfrak{C}_4}, \quad (\text{C.36})$$

<sup>2</sup>Abramowitz e at. ref [68], página 487, formulas 11.4.31

este término, se diferencia de  $\beta_1$  en que el exponencial del integrando de  $\mathfrak{C}_3$  es el inverso multiplicativo del exponencial del integrando de  $\mathfrak{C}_1$ , por lo tanto, al realizar la representación en series del integrando de  $\mathfrak{C}_3$  como

$$e^{\frac{2\mu ar\Omega}{\hbar} \cos \phi} = \mathbf{I}_0 \left( \frac{2\mu ar\Omega}{\hbar} \right) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{I}_k \left( \frac{2\mu ar\Omega}{\hbar} \right) \cos(k\phi), \quad (\text{C.37})$$

$\mathfrak{C}_3$  es

$$\mathfrak{C}_3 = 2\pi \mathbf{I}_0 \left( \frac{2\mu ar\Omega}{\hbar} \right) \quad (\text{C.38})$$

por lo tanto  $\mathfrak{C}_1 = \mathfrak{C}_3$ . Como los términos restantes en  $\beta_2$  son los mismos que en  $\beta_2$ , se tiene que  $\beta_1 = \beta_2$  y por lo tanto

$$\Upsilon_3 = 2 \left( \frac{\pi\mu\Omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \frac{q_e^2}{\kappa} e^{-\frac{\mu a^2 \Omega}{\hbar}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{\mu a^2 \Omega}{\hbar} \right). \quad (\text{C.39})$$

## C.4. Evaluación de $\Upsilon_4$

$$\Upsilon_4 = \langle A(1)B(2) | V_{12} | A(2)B(1) \rangle + \langle A(2)B(1) | V_{12} | A(1)B(2) \rangle, \quad (\text{C.40})$$

Por notación, se simboliza por  $\beta_3$  y  $\beta_4$  cada uno de los dos términos que constituyen a  $\Upsilon_4$  así

$$\Upsilon_4 = \beta_3 + \beta_4, \quad (\text{C.41})$$

donde  $\beta_3 = \langle A(1)B(2) | V_{12} | A(2)B(1) \rangle$  y  $\beta_4 = \langle A(2)B(1) | V_{12} | A(1)B(2) \rangle$ .

Tomando inicialmente  $\beta_3$  se tiene

$$\beta_3 = \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \phi_0^{*(1)}(x_1, y_1) \phi_0^{*(2)}(x_2, y_2) \frac{q_e^2}{\kappa |\hat{r}_1 - \hat{r}_2|} \phi_0^{(1)}(x_2, y_2) \phi_0^{(2)}(x_1, y_1) dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 \quad (\text{C.42})$$

realizando un proceso similar a (C.23) - (C.27), usando las coordenadas de centro de masa (C.24) y coordenadas relativas (C.25) se obtiene

$$\beta_3 = \left( \frac{e\mu\Omega}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{\kappa} e^{-\frac{2\mu a^2 \Omega}{\hbar}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} X^2} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} Y^2} dY \right] dX \right\} \cdot \left( \int_0^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega r^2}{2\hbar}} \left[ \int_0^{2\pi} e^{\frac{ieBa}{\hbar c} r \sin \phi} d\phi \right] dr \right) \quad (\text{C.43})$$

debido a que esta integral es de tipo complejo y debido a que el valor de  $\beta_3$  que es un valor esperado debe ser real, se toma la parte real de esta ecuación, por consiguiente

$$\beta_3 = \text{Re} \left( \frac{e\mu\Omega}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{\kappa} e^{-\frac{2\mu a^2 \Omega}{\hbar}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} X^2} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} Y^2} dY \right] dX \right\} \cdot \underbrace{\left( \int_0^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega r^2}{2\hbar}} \underbrace{\left[ \int_0^{2\pi} e^{\frac{ieBa}{\hbar c} r \sin\phi} d\phi \right]}_{\mathfrak{C}_5} dr \right)}_{\mathfrak{C}_6} \quad (\text{C.44})$$

similar a la evaluación de  $\Upsilon_3$ , las dos integrales que ofrecen una mayor complejidad son las representadas por  $\mathfrak{C}_5$  y  $\mathfrak{C}_6$ .

La integral representada por  $\mathfrak{C}_5$  se encuentra calculada en las tablas de integrales<sup>3</sup>, por lo tanto

$$\mathfrak{C}_5 = \text{Re} \int_0^{2\pi} e^{\frac{ieBa}{\hbar c} r \sin\phi} d\phi = 2\pi \mathbf{J}_0 \left( \frac{eBa}{\hbar c} r \right). \quad (\text{C.45})$$

Al reemplazar esto en  $\mathfrak{C}_6$ , esta integral también se encuentra en las tablas<sup>4</sup>, por lo tanto

$$\mathfrak{C}_6 = 2\pi \int_0^{\infty} e^{-\frac{\mu\Omega r^2}{2\hbar}} \mathbf{J}_0 \left( \frac{eBa}{\hbar c} r \right) dr = 2\pi \sqrt{\frac{\hbar\pi}{2\mu\Omega}} e^{-\left[\frac{eBa}{\hbar c}\right]^2 \frac{\hbar}{4\mu\Omega}} \mathbf{I}_0 \left( \left[ \frac{eBa}{\hbar c} \right]^2 \frac{\hbar}{4\mu\Omega} \right) \quad (\text{C.46})$$

las otras dos integrales restantes son conocidas y fácilmente evaluadas con ayuda de la función gamma, por consiguiente,  $\beta_3$  toma la forma

$$\beta_3 = \sqrt{\frac{\mu\pi\Omega}{2\hbar}} \frac{q_e^2}{\kappa} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} a^2 - \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\hbar c^2 \mu\Omega}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\mu\Omega \hbar c^2} \right) \quad (\text{C.47})$$

Repitiendo este proceso se realiza la evaluación de  $\beta_4$ , donde su parte real es igual al término obtenido en la ecuación (C.47), por consiguiente

$$\Upsilon_4 = 2\sqrt{\frac{\mu\pi\Omega}{2\hbar}} \frac{q_e^2}{\kappa} e^{-\frac{2\mu\Omega}{\hbar} a^2 - \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\hbar c^2 \mu\Omega}} \mathbf{I}_0 \left( \frac{q_e^2 B^2 a^2}{4\mu\Omega \hbar c^2} \right) \quad (\text{C.48})$$

<sup>3</sup>Abramowitz e at. ref [68], página 360, formula 9.1.18

<sup>4</sup>Gradshteyn e at. ref, página 732, formula 6.618(1)

## C.5. Evaluación de $\Upsilon_5$

$$\begin{aligned} \Upsilon_5 &= \langle A(1)B(2) | W_1 + W_2 | A(1)B(2) \rangle + \langle A(2)B(1) | W_1 + W_2 | A(2)B(1) \rangle \\ &- \frac{1}{S^2} [\langle A(2)B(1) | W_1 + W_2 | A(1)B(2) \rangle + \langle A(1)B(2) | W_1 + W_2 | A(2)B(1) \rangle]. \end{aligned} \quad (\text{C.49})$$

En primera instancia se redefine  $\Upsilon_5$  como

$$\Upsilon_5 = \beta_5 + \beta_6 - \frac{1}{S^2} [\beta_7 + \beta_8] \quad (\text{C.50})$$

considerando que  $W_1$  actua sobre  $|A(1)\rangle, |B(1)\rangle$  y  $W_2$  actua sobre  $|A(2)\rangle, |B(2)\rangle$  se tiene que  $\beta_j$  con  $j = 5, 6, 7, 8$  son

$$\begin{aligned} \beta_5 &= \langle A(1) | W_1 | A(1) \rangle + \langle B(2) | W_2 | B(2) \rangle, \\ \beta_6 &= \langle B(1) | W_1 | B(1) \rangle + \langle A(2) | W_2 | A(2) \rangle, \\ \beta_7 &= \langle B(1) | W_1 | A(1) \rangle \langle A(2) | B(2) \rangle + \langle A(2) | W_2 | B(2) \rangle \langle B(1) | A(1) \rangle, \\ \beta_8 &= \langle A(1) | W_1 | B(1) \rangle \langle B(2) | A(2) \rangle + \langle B(2) | W_2 | A(2) \rangle \langle A(1) | B(1) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

Considerando el término  $\beta_5$  así

$$\beta_5 = \langle A(1) | W_1 | A(1) \rangle + \langle B(2) | W_2 | B(2) \rangle \quad (\text{C.52})$$

es posible expresarlo como una función de  $\beta_6$ , para ello realizamos una traslación de  $|B(1)\rangle$  que permita obtener  $|A(1)\rangle$  y  $|A(2)\rangle$  para lograr  $|B(2)\rangle$ , tal como se describe en las ecuaciones (C.8) y (C.15), por lo tanto

$$\begin{aligned} \beta_5 &= \langle B(1) | e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{qeBa}{c}\hat{y}_1 + 2a\hat{p}_{y_1})} W_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{qeBa}{c}\hat{y}_1 + 2a\hat{p}_{y_1})} | B(1) \rangle \\ &+ \langle A(2) | e^{\frac{i}{\hbar}(-\frac{qeBa}{c}\hat{y}_2 - 2a\hat{p}_{y_2})} W_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(-\frac{qeBa}{c}\hat{y}_2 - 2a\hat{p}_{y_2})} | A(2) \rangle \end{aligned} \quad (\text{C.53})$$

para el primer término de  $\beta_5$  se tiene que

$$\varrho_{51} = e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{qeBa}{c}\hat{y}_1 + 2a\hat{p}_{y_1})} W_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{qeBa}{c}\hat{y}_1 + 2a\hat{p}_{y_1})}, \quad (\text{C.54})$$

claramente se observa que esta ecuación representa una traslación  $W_1$  en espacio y momentum. Despues de un poco de algebra se llega a

$$\varrho_{51} = W_1 + \frac{\mu\omega_0}{2} \left[ 4a\hat{x}_1 - \frac{2}{a} (\hat{x}_1 - a)^3 \right]. \quad (\text{C.55})$$

Para el segundo término de  $\beta_5$  se tiene

$$\begin{aligned} \varrho_{52} &= e^{\frac{i}{\hbar}(-\frac{qeBa}{c}\hat{y}_2 - 2a\hat{p}_{y_2})} W_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(-\frac{qeBa}{c}\hat{y}_2 - 2a\hat{p}_{y_2})} \\ &= W_2 - \frac{\mu\omega_0}{2} \left[ 4a\hat{x}_2 - \frac{2}{a}(\hat{x}_2 + a)^3 \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.56})$$

Con lo anterior,  $\beta_5$  toma la forma

$$\begin{aligned} \beta_5 &= \langle B(1) | W_1 | B(1) \rangle + \langle B(1) | \frac{\mu\omega_0}{2} \left[ 4a\hat{x}_1 - \frac{2}{a}(\hat{x}_1 - a)^3 \right] | B(1) \rangle \\ &\quad + \langle A(2) | W_2 | A(2) \rangle - \langle A(2) | \frac{\mu\omega_0}{2} \left[ 4a\hat{x}_2 - \frac{2}{a}(\hat{x}_2 + a)^3 \right] | A(2) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.57})$$

que al ser evaluados estos valores esperados se obtiene

$$\beta_5 = \beta_6 + 4\mu a \omega_o^2 \quad (\text{C.58})$$

por lo tanto, la suma de  $\beta_5 + \beta_6$  se puede expresar solo en función de  $\beta_5$ , así

$$\beta_5 + \beta_6 = 2\beta_5 - 4\mu a \omega_o^2 \quad (\text{C.59})$$

Procedamos ahora a evaluar el término  $\beta_5 = \langle A(1) | W_1 | A(1) \rangle + \langle B(2) | W_2 | B(2) \rangle$ , por lo tanto

$$\begin{aligned} \langle A(1) | W_1 | A(1) \rangle &= \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{\mu\Omega}{\hbar} \left[ x_1 + a + \frac{qeE}{\mu\omega_0^2} x_1^2 + y_1^2 \right]} \\ &\quad \cdot \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{1}{4a^2} (x_1^2 - a^2)^2 - (x_1 + a)^2 \right] dx_1 dy_1 = f(a) \end{aligned} \quad (\text{C.60})$$

y

$$\begin{aligned} \langle B(2) | W_2 | B(2) \rangle &= \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{\mu\Omega}{\hbar} \left[ x_2 - a + \frac{qeE}{\mu\omega_0^2} x_2^2 + y_2^2 \right]} \\ &\quad \cdot \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{1}{4a^2} (x_2^2 - a^2)^2 - (x_2 - a)^2 \right] dx_2 dy_2. \end{aligned} \quad (\text{C.61})$$

Comparando las ecuaciones (C.60) y (C.61), se observa que el término denotado por  $f(a)$  se puede relacionar con la ecuación (C.61) como  $f(-a)$ , donde solo se observa el cambio de esta variable, es decir, considerando  $x_1, x_2, y_1, y_2$  como variables mudas.

La evaluación de la ecuación (C.60) es

$$\begin{aligned}\langle A(1)|W_1|A(1)\rangle &= \frac{\mu\omega_0^2}{\pi\hbar} \left[ \frac{3\hbar^2}{16\mu^2a^2\Omega^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{3\iota^2}{2a^2} + \frac{3\iota}{a} \right) \frac{\hbar}{\mu\Omega_0} + \frac{\iota^3}{a} + \frac{\iota^4}{4a^2} \right] \\ &= f(a);\end{aligned}\quad (\text{C.62})$$

Considerando que  $\langle B(2)|W_2|B(2)\rangle = f(-a)$  se tiene

$$\begin{aligned}\langle B(2)|W_2|B(2)\rangle &= \frac{\mu\omega_0^2}{\pi\hbar} \left[ \frac{3\hbar^2}{16\mu^2a^2\Omega^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{3\iota^2}{2a^2} - \frac{3\iota}{a} \right) \frac{\hbar}{\mu\Omega_0} + \frac{\iota^3}{a} - \frac{\iota^4}{4a^2} \right] \\ &= f(-a).\end{aligned}\quad (\text{C.63})$$

Con esto,  $\beta_5$  toma la forma

$$\beta_5 = \langle A(1)|W_1|A(1)\rangle + \langle B(2)|W_2|B(2)\rangle = \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{3\hbar^2}{8\mu^2a^2\Omega^2} + \frac{3\iota^2\hbar}{2a^2\mu\Omega} + \frac{\iota^4}{2a^2} \right] \quad (\text{C.64})$$

y los dos primeros términos de  $\Upsilon_5$  quedan representados por

$$\beta_5 + \beta_6 = \mu\omega_0^2 \left[ \frac{3\hbar^2}{8\mu^2a^2\Omega^2} + \frac{3\iota^2\hbar}{2a^2\mu\Omega} + \frac{\iota^4}{2a^2} - 4a^2 \right]. \quad (\text{C.65})$$

Calculemos finalmente los dos últimos términos de  $\Upsilon_5$ . Considerando de (C.51) se tiene

$$\begin{aligned}\langle A(1)|W_1|B(1)\rangle &= \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{\mu\Omega}{\hbar} \left[ x_1 + \frac{qeE}{\mu\omega_0^2} \right]^2 + a^2 + y_1^2} \\ &\quad \cdot \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{1}{4a^2} (x_1^2 - a^2)^2 - (x_1 + a)^2 \right] dx_1 dy_1 = g(a)\end{aligned}\quad (\text{C.66})$$

y

$$\begin{aligned}\langle B(2)|W_2|A(2)\rangle &= \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{\mu\Omega}{\hbar} \left[ x_2 + \frac{qeE}{\mu\omega_0^2} \right]^2 + a^2 + y_2^2} \\ &\quad \cdot \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{1}{4a^2} (x_2^2 - a^2)^2 - (x_2 - a)^2 \right] dx_2 dy_2 = g(-a).\end{aligned}\quad (\text{C.67})$$

evaluando estas integrales se obtiene

$$\begin{aligned}\langle A(1)|W_1|B(1)\rangle &= \frac{\mu\omega_0^2}{2} e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar}a^2 - \frac{qeB^2a^2}{4\hbar\mu^2\Omega^2}} \left\{ \frac{3\hbar^2}{16\mu^2a^2\Omega^2} + \left[ \frac{3(\iota - a)^2}{4a^2} + \frac{3(\iota - a)}{2a} \right] \right. \\ &\quad \left. \cdot \frac{\hbar}{\mu\Omega} + \frac{(\iota - a)^4}{4a^2} + \frac{(\iota - a)^3}{a} \right\} = g(a).\end{aligned}\quad (\text{C.68})$$

y

$$\begin{aligned} \langle B(2)|W_2|A(2)\rangle &= \frac{\mu\omega_0^2}{2} e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar}a^2 - \frac{q_e B^2 a^2}{4\hbar\mu^2\Omega^2}} \left\{ \frac{3\hbar^2}{16\mu^2 a^2 \Omega^2} + \left[ \frac{3(\iota+a)^2}{4a^2} - \frac{3(\iota+a)}{2a} \right] \right. \\ &\quad \left. \cdot \frac{\hbar}{\mu\Omega} + \frac{(\iota+a)^4}{4a^2} - \frac{(\iota+a)^3}{a} \right\} = g(-a). \end{aligned} \quad (\text{C.69})$$

los términos  $\langle A(2)|B(2)\rangle$ ,  $\langle B(2)|A(2)\rangle$ ,  $\langle A(1)|B(1)\rangle$ ,  $\langle B(1)|A(1)\rangle$  fueron determinados en (C.19) y al igual que el exponencial  $e^{-\frac{\mu\Omega}{\hbar}a^2 - \frac{q_e B^2 a^2}{4\hbar\mu^2\Omega^2}}$  son equivalentes a  $S$ . Por consiguiente  $\beta_7$  es

$$\begin{aligned} \beta_7 &= \langle B(1)|W_1|A(1)\rangle \langle A(2)|B(2)\rangle + \langle A(2)|W_2|B(2)\rangle \langle B(1)|A(1)\rangle \\ &= S [g(a) + g(-a)] \\ &= S^2 \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{3\hbar^2}{8\mu^2 a^2 \Omega^2} + \frac{3}{2} \left( \frac{\iota^2}{a^2} - 1 \right) \frac{\hbar}{\mu\Omega} + \frac{\iota^4}{2a^2} - 3\iota^2 - \frac{3}{2}a^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.70})$$

debido a que  $\langle A(1)|W_1|B(1)\rangle = \langle B(1)|W_1|A(1)\rangle$  y  $\langle A(2)|W_2|B(2)\rangle = \langle B(2)|W_2|A(2)\rangle$  se tiene que  $\beta_7 = \beta_8$ . Con todos estos elemento finalmente es posible expresar  $\Upsilon_5$  como

$$\begin{aligned} \Upsilon_5 &= \beta_5 + \beta_6 - \frac{1}{S^2} [\beta_7 + \beta_8] \\ &= \mu\omega_0^2 \left[ \frac{3\hbar^2}{8\mu^2 a^2 \Omega^2} + \frac{3\iota^2 \hbar}{2a^2 \mu\Omega} + \frac{\iota^4}{2a^2} - 4a^2 \right] \\ &\quad - \frac{1}{S^2} 2 S^2 \frac{\mu\omega_0^2}{2} \left[ \frac{3\hbar^2}{8\mu^2 a^2 \Omega^2} + \frac{3}{2} \left( \frac{\iota^2}{a^2} - 1 \right) \frac{\hbar}{\mu\Omega} + \frac{\iota^4}{2a^2} - 3\iota^2 - \frac{3}{2}a^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{C.71})$$

reemplazando  $\iota$ , reagrupando y simplificando términos se obtiene finalmente

$$\Upsilon_5 = -4\mu a^2 \omega_0^2 + \mu\omega_0^2 \left[ \frac{3\hbar}{2\mu\Omega} + 3 \left( \frac{q_e E}{\mu\omega_0^2} \right)^2 + \frac{3}{2}a^2 \right] \quad (\text{C.72})$$

# Bibliografía

- [1] Nielsen, Michael and Chuang, Isaac. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 1<sup>st</sup> edition, 2000.
- [2] Deutsch, David. Quantum Theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 400(97), 1985.
- [3] Loss, Daniel and DiVincenzo, David P. Quantum computation with quantum dots. *Phys. Rev. A.*, 57(120), 1998.
- [4] Burkard, Guido; Loss, Daniel and DiVincenzo, David P. Coupled quantum dots as quantum gates. *Phys. Rev. B.*, 59:2070, 1999.
- [5] Mattis, Daniel. *The Theory of Magnetism*. Harper & Row, 1<sup>st</sup> edition, 1965.
- [6] Ashcroft, Neil and Mermin, David. *Solid State Physics*. Saunders College, xxx edition, 1977.
- [7] DiVincenzo, David P. Two-bit gates are universal for quantum computation. *Phys. Rev. A.*, 51:1015, 1995.
- [8] Barenco, Adriano et al. Elementary gates for quantum computation. *Phys. Rev. A.*, 52:3457, 1995.
- [9] Preskill, John. *Lecture Notes for Physics 229: Quantum Information and Computation*. California Institute of Technology, 1998.
- [10] Feynman, Richard. Simulating physics with computer. *International Journal of Theoretical Physics*, 21(6/7):467–488, 1982.
- [11] Williams, Colin and Clearwater, Scott. *Explorations in Quantum Computing*. Springer-Verlag - TELOS, 1<sup>st</sup> edition, 1998.
- [12] Feynman, Richard and Hibbs, Albert. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, 1<sup>st</sup> edition, 1965.

- [13] Dirac, Paul. *Principios de Mecánica Cuántica*. Editorial Ariel, 1967.
- [14] Kreyszig, Erwin. *Introductory functional analysis with applications*. Jhon Wiley & Sons, 1<sup>st</sup> edition, 1978.
- [15] Steeb, William. *Hilbert Spaces, Wavelets, Generalized Functions and Modern Quantum Mechanics, Mathematics and its applications*. Klumer Academics Publishers, 1<sup>st</sup> edition, 1998.
- [16] Feynman, Richard. et al. *The Feynman Lectures on Physics*. Addison-Wesley, 1<sup>st</sup> edition, 1965.
- [17] Cohen-Tannoudji, Claude et al. *Quantum Mechanics Vol. I*. Hermann and John Wiley & Sons, 1<sup>st</sup> edition, 1977.
- [18] Benioff, Paul. Quantum mechanical hamiltonian models of turing machines. *J. Stat. Phys*, 29:515, 1982.
- [19] Deutsch, David; Barenco, Adriano and Ekert, Artur. Universality in quantum computation. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 449(1937):669, 1995.
- [20] Lloyd, Set. Almost any quantum logic gate is universal. *Phys. Rev. Lett*, 75(346-349), 1995.
- [21] Feynman, Richard. *Feynman Lectures on Computation*. Perseus Publishing, 1<sup>st</sup> edition, 1999.
- [22] Bennett, Charles H. Thermodynamics of computation. *International Journal of Theoretical Physics*, 21:905, 1982.
- [23] Einstein, Albert; Podolsky, Boris and Rosen, Natan. Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, 47:777, 1935.
- [24] Bell, J. S. On the einstein-podolsky-rosen paradox. *Phys*, 1:195, 1964.
- [25] Bell, J. S. On the problem of hidden variables in quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys*, 38:447, 1966.
- [26] Jack, C. Sherlock holmes investigates the epr paradox. *Phys. World*, 8:39–42, 1995.
- [27] Aspect, A.; Dalibard, J. and G.Roger. Experimental test of bell's inequalities using timevarying analyzers. *Phys. Rev. Lett*, 49:1804, 1982.

- [28] Aspect, A.; Grangier, P. and G.Roger. Experimental tests of realistic local theories via bell's theorem. *Phys. Rev. Lett.*, 47:460, 1981.
- [29] Aspect, A. Testing bell's inequalities. *Europhys. News*, 22:73, 1991.
- [30] Zurek, W.H. Decoherence, einselection, and the quantum origin of the classical. *Rev. Mod. Phys.*, 75:715, 2003.
- [31] Schlosshauer, M. Decoherence, the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 76:1267, 2004.
- [32] John Davies. *The Physics of Low Dimensional Semiconductor*. Cambridge University Press, 1<sup>st</sup> edition, 1998.
- [33] Millman, Jacob and Halkias, Christos C. *Electrónica Integrada*. Editorial Hispano Europea, 1 edition, 1976.
- [34] Tocci, Ronald J. et al. *Sistemas Digitales: principios y aplicaciones*. Pearson Educación, 8 edition, 2003.
- [35] Reed, M. Quantum dots. *Scientific American*, 268:98, 1993.
- [36] Rossetti, R.; Nakahara, S. and Brus, L.E. Quantum size effects in the redox potentials, resonance raman spectra, and electronic spectra of cds crystallites in aqueous solution. *Journal of Chemical Physics*, 79:1086, 1983.
- [37] Reed, M. et al. Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure. *Phys. Rev. Lett*, 60:535, 1988.
- [38] Tarucha, S. et al. Shell filling and spin effects in a few electron quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 77:3613, 1996.
- [39] Mowbray, D. J. et al. New physics and devices based on self-assembled semiconductor quantum dots. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 38(13), 2005.
- [40] <http://pr.fujitsu.com/en/news/2002/07/29.html>. Consultado 9 de enero de 2006.
- [41] <http://www.playstation.com>. Consultado 9 de enero de 2006.
- [42] Landauer, Rolf. Irreversibility and heat generation in the computing process. *IBM J. Res. Dev.*, 5:183, 1961.
- [43] Shor, Peter. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. *Proceedings 35<sup>th</sup> Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, page 124, 1994.

- [44] Grover, Lov. A fast quantum mechanical algorithm for database search. *Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing*, pages 212–219, 1996.
- [45] Cirac, Jose Ignacio and Zoller, Peter. Quantum computation with cold trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, 74:4091, 1995.
- [46] Sleator, T. and Weinfurter, H. Realizable universal quantum logic gates. *Phys. Rev. Lett.*, 75:4087, 1995.
- [47] Cory, David; Fahmy, Amr F. and Havel, Timothy F. Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 94:1634, 1997.
- [48] Shnirman, et al. A. Quantum manipulations of small josephson junctions. *Phys. Rev. Lett.*, 79:2371, 1997.
- [49] Kane, B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer. *Nature*, 393:133, 1998.
- [50] Privman, V. et al. Quantum computation in quantum-hall systems. *Phys. Lett A*, 239:141–146, 1998.
- [51] Barenco, Adriano et al. Conditional quantum dynamics and logic gates. *Phys. Rev. Lett.*, 74:4083, 1995.
- [52] Sleator, T. and Weinfurter, H. Realizable universal quantum logic gates. *Phys. Rev. Lett.*, 75:4087, 1995.
- [53] Barnes, C.H.W. et al. Quantum computation using electrons trapped by surface acoustic waves. *Phys. Rev. B.*, 62:8410, 1995.
- [54] Bao, J. et al. Elementary gates for quantum computation. *Nature Materials*, 2:175, 2003.
- [55] DiVincenzo, David P. The physical interpretation of quantum computation. *Fortschr. Phys.*, 48:771, 2000.
- [56] Marcus, C. M. et al. Coulomb blockade and electron spin in quantum dots. *Proceedings of the XXXVIth Rencontres de Moriond Electronic Correlations: From Meso- to Nano-physics*, 2001.
- [57] Satyadev, Rajesh Patel. *Electronics Ground State Properties of Coulomb Blocked Quantum Dots*. PhD thesis, Stanford University, Department of Physics, 2002.

- [58] Burkard Guido; Engel, Hans-Andreas and Loss, Daniel. Spintronics and quantum dots for quantum computing and quantum communication. *Fortschr. Phys.*, 48:965, 2000.
- [59] Kouwenhoven, L. P. et al. Excitation spectra of circular, few-electron quantum dots. *Science*, 278:1788, 1997.
- [60] Lucjan, Jacak; Pawel, Hawrylak and Wójs, Arkadiusz. *Quantum Dots*. Springer-Verlag, 1<sup>st</sup> edition, 1998.
- [61] Tobon, Ramiro. *Introducción a la Mecánica Cuántica*. Notas de Clase, Universidad del Valle, 1975.
- [62] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*, chapter 14. Plenum Press, New York, 1<sup>st</sup> edition, 1994.
- [63] Hanson, R. et al. Single-shot readout of electron spin states in a quantum dot using spin-dependent tunnel rates. *Phys. Rev. Lett.*, 95:196802–1, 2005.
- [64] Spinel, María Carolina. *Introducción al Formalismo de la Mecánica Cuántica no Relativista*. Notas de Clase, Universidad Nacional de Colombia - Bogotá, 1<sup>st</sup> edition, 2001.
- [65] Eisber, Robert and Resnick, Robert. *Física Cuántica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos y Partículas*. Limusa Noriega Editores, 2002.
- [66] Cohen-Tannoudji, Claude et al. *Quantum Mechanics Vol. II*. Hermann and John Wiley & Sons, 1<sup>st</sup> edition, 1977.
- [67] Kaputkina N.E. and Lozovik Yu E. Horizontal and vertical quantum-dot molecules. *Phys. Sol. Sta.*, 40:1929, 1998.
- [68] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, 8 printing edition, 1964.

# PRESENTACIONES EN EVENTOS ACADÉMICOS

## INTERNACIONALES

---

- 12 Latin American Congress of Surface Science and its Applications: *Exchange Energy in Coupled Quantum Dots*, 5-9 Dec 2005, Brasil.

## NACIONALES

---

- XXI Congreso Nacional de Física: *Exchange of Energy in Quantum Dots as Universal Quantum Gates*, 24-28 Oct 2005, Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia.
- II Encuentro Nacional de Computación e Información Cuántica: *Quantum Dots: Applications in Quantum Computing*, 25-27 May 2005, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia
- 5<sup>th</sup> Escuela Nacional de la Materia Condensada: *Discos Cuánticos en Presencia de un Campo Magnético*, 27-29 Oct 2004, Medellín, Colombia
- II Encuentro del Sur Occidente de Semilleros de Investigación: *Elementos de Computación Cuántica*, 10-11 Sep 2004, Universidad del Cauca, Colombia.
- I Seminario de Investigación Interdisciplinaria: *Ingeniería de un Computador Cuántico*, 22-23 May 2003, Universidad del Cauca, Colombia.
- XIX Congreso Nacional de Física: *En Busca de una Nueva Tecnología: Desafíos en Spintronics*, 24-28 Sep 2001, Universidad Nacional, Manizales, Colombia.

# PUBLICACIONES

## EFECTIVAS

---

- *Intercambio de Energía en Puntos Cuánticos como Compuertas Cuánticas Universales*, H.E. Caicedo-Ortiz y S.T. Perez-Merchancano, Revista Colombiana de Física, Vol 38, Num 1, Pag 297, Colombia, (2006).
- *Discos Cuánticos en Presencia de un Campo Magnético*, H.E. Caicedo-Ortiz y S.T. Perez-Merchancano, Revista Colombiana de Física, Vol 37, Num 1, Pag 118, Colombia, (2005).
- *Spintronics*, Hernando Efraim Caicedo Ortiz y Servio Tulio Perez Merchancano, Revista Unicauca Ciencia Num. 8, Pag 49, (2005).

## SOMETIDAS

---

- *Exchange Energy in Coupled Quantum Dots*, H.E. Caicedo-Ortiz and S.T. Perez-Merchancano, Enviado a Brazilian Journal of Physics, Brazil, (2006). arXiv:quant-ph/0603211
- *Aspectos Matemáticos y Modelos Físicos para Computación Cuántica*, H.E. Caicedo-Ortiz y S.T. Perez-Merchancano, Aceptado con correcciones en IEEE Transactions Latin American, Brasil, (2006).
- *Puntos Cuánticos: Aplicaciones en Computación Cuántica*, H.E. Caicedo-Ortiz y S.T. Perez-Merchancano, enviado a Unicauca Ciencia, Colombia, (2005).