



Dinámica cuántica condicional disipativa en dímeros controlados ópticamente

Conditional quantum dynamics in dissipative optical control dimers

Cristian E. Susa y John H. Reina

Departamento de Física, Universidad del Valle, A.A. 25360, Cali, Colombia

Recibido 22 de Oct. 2007; Aceptado 2 de Sep. 2009; Publicado en línea 30 de Oct. 2009

Resumen

Reportamos el cálculo del espectro energético de moléculas individuales acopladas a un campo láser externo en un arreglo de moléculas de terrileno inmersas en un cristal de para-terfenilo. Se realiza el cálculo numérico exacto de la dinámica cuántica disipativa de dichas moléculas en el formalismo de la matriz densidad. Nuestros resultados ilustran el comportamiento de los autoestados del sistema y de las poblaciones en función de la intensidad de la interacción entre moléculas, de los mecanismos disipativos y del acoplamiento al láser externo. Mostramos que es posible inducir una dinámica cuántica condicional disipativa en el dímero debido a la acción del campo externo coherente y de la interacción intermolecular. Como aplicación directa, realizamos la simulación de las compuertas lógicas cuánticas CNOT y SWAP.

Palabras Clave: Moléculas individuales, interacción dipolar, dinámica cuántica disipativa, matriz densidad, compuertas lógicas cuánticas

Abstract

We calculate the energy spectrum of a pair of two-level single terrylene molecules in a paraterphenyl crystal, which are coupled via the dipole-dipole interaction and externally driven with a laser field. We give the full numerical solution of the dissipative quantum master equation and describe the population dynamics and the system's eigenstate behaviour as a function of the strength of the intermolecular interactions, the decay mechanisms, and the external driving field. From these, we show how to induce a dissipative conditional quantum dynamics and, in particular, to simulate the two-qubit logic gates CNOT and SWAP in such a dimer.

Keywords: Single molecules, dipolar interaction, dissipative quantum dynamics, density matrix, quantum logic gates

©2009. Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

1. Introducción

Las vastas aplicaciones de la teoría cuántica y los avances experimentales en áreas como la óptica [1], han despertado en los últimos años un gran interés hacia el estudio de nanosistemas y su posible implementación como procesadores de información y como recurso cru-

cial para cómputo cuántico. La evidencia experimental de la interacción dipolar entre moléculas individuales y de los procesos de emisión cooperativa de radiación [2] han puesto de manifiesto el interés por entender las propiedades disipativas presentes en tales sistemas, como por ejemplo la influencia de las tasas de emisión espontánea de una molécula sobre las tasas de emisión de la otra cuando estas están acopladas entre si [3].

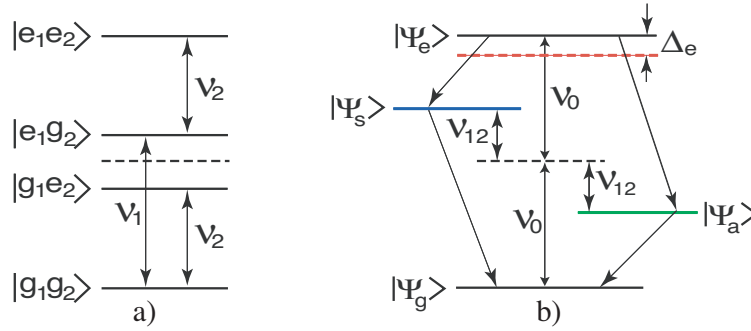


Figura 1. Esquema de energía para las moléculas acopladas en a) ausencia y b) presencia de la interacción dipolar. Los estados $\{|gg_2\rangle, |g_1e_2\rangle, |e_1g_2\rangle, |e_1e_2\rangle\}$ forman la base computacional estándar. $\nu_{1,2}$ son las frecuencias de transición de las moléculas 1 y 2. Nótese en b) el corrimiento en las autoenergías debido a la interacción dipolar V_{12} , y $|\Psi_a\rangle$, y $|\Psi_s\rangle$ denotan los estados antisimétrico y simétrico, respectivamente, y $h\Delta_e$ denota el corrimiento en la energía experimentado por el estado doblemente excitado, donde h representa la constante de Planck.

El descubrimiento del campo electromagnético fluctuante, aún en ausencia de campos externos (las llamadas fluctuaciones cuánticas del vacío) [4], ha posibilitado entender muchos procesos básicos en la física de la interacción materia-radiación. Lamb y Retherford [4] observaron experimentalmente, en 1947, la ausencia de degeneración en la estructura fina del segundo estado cuántico del átomo de Hidrógeno. La explicación a esto se encontró en el acoplamiento de los átomos a las fluctuaciones del campo electromagnético, como lo demostró Bethe [4]. Este efecto, conocido como corrimiento Lamb, hace parte de la configuración molecular presente en el espectro energético medido para un arreglo de moléculas de terrileno en un cristal de paraterfenilo [2], nanoestructura objeto de estudio de este trabajo. En [2] se reportó la propiedad de excitación simultánea que presenta el par de moléculas, mediante el espectro de fluorescencia [5].

En la sección 2 introducimos el sistema físico considerado y presentamos el marco teórico utilizado en su descripción. Hacemos uso del formalismo de la matriz densidad en el régimen disipativo, considerando que el sistema interactúa con los modos del vacío. En la sección 3 presentamos los resultados obtenidos y su correspondiente discusión: analizamos el espectro energético que presenta el sistema y realizamos, a partir del cálculo de la matriz densidad, el estudio de la dinámica condicional que se puede inducir sobre el sistema disipativo.

2. Modelo

La configuración bajo estudio consta de un par de moléculas individuales de dos niveles ópticamente activos acopladas entre sí via la interacción dipolar y a su vez, a un campo láser externo de amplitud $\ell^{(i)}$ y frecuencia de excitación ν_L . Las moléculas, de frecuen-

cias de transición ν_i ($i = 1, 2$), se consideran fijas en las posiciones \mathbf{r}_i , e inmersas en un medio disipativo de índice de refracción n . El esquema energético en ausencia y presencia de la interacción dipolar es presentado en la Fig. 1. El Hamiltoniano que describe las energías del sistema viene dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{12} + \hat{H}_L, \quad (1)$$

donde $\hat{H}_0 = \hat{H}_0^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \hat{1}^{(1)} \otimes \hat{H}_0^{(2)}$, con $\hat{H}_0^{(i)} = \frac{h\nu_i}{2} [\hat{P}_{22}^{(i)} - \hat{P}_{11}^{(i)}]$ denotando el Hamiltoniano no perturbado de la molécula i , y \hat{P}_{kl}^i los operadores de proyección; $\hat{H}_{12} = hV_{12} [\hat{P}_{21}^{(1)} \otimes \hat{P}_{12}^{(2)}] + hV_{12}^* [\hat{P}_{12}^{(1)} \otimes \hat{P}_{21}^{(2)}]$ es la energía debido a la interacción entre los dipolos de las moléculas, y $H_L = h\ell^{(i)} [\hat{P}_{12}^{(i)} e^{i\omega_L t} + \hat{P}_{21}^{(i)} e^{-i\omega_L t}]$ es la interacción debida al campo láser externo.

El Hamiltoniano aquí descrito incluye además, fenomenológicamente, el corrimiento Lamb, $h\Delta_e$, asociado al corrimiento en la energía del estado doblemente excitado $|\Psi_e\rangle$ reportado en [2]. Como resultado de la interacción entre los dipolos asociados a las moléculas, el sistema exhibe absorción cooperativa resonante [3], permitiendo la excitación simultánea por absorción de dos fotones. Representamos la tasa de emisión espontánea de tales excitaciones como $\Gamma_{12} = \Gamma_{21}$. La intensidad V_{12} de la interacción dipolo-dipolo ($d-d$), responsable del corrimiento energético de los niveles mostrados en la Fig. 1(b), se puede calcular en las aproximaciones Markoviana y de onda rotante como [1,3]

$$\frac{V_{12}}{C_{12}} = - \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - (\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}) \right] \frac{\cos z}{z} + \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}) \right] \left[\frac{\cos z}{z^3} + \frac{\sin z}{z^2} \right] \quad (2)$$

donde $z = nk_0 r_{12}$, $ck_0 \equiv 2\pi\nu_0 = 2\pi(\nu_1 + \nu_2)/2$, $\hat{\mathbf{r}}_{12}$ es el vector posición relativo entre las dos moléculas,

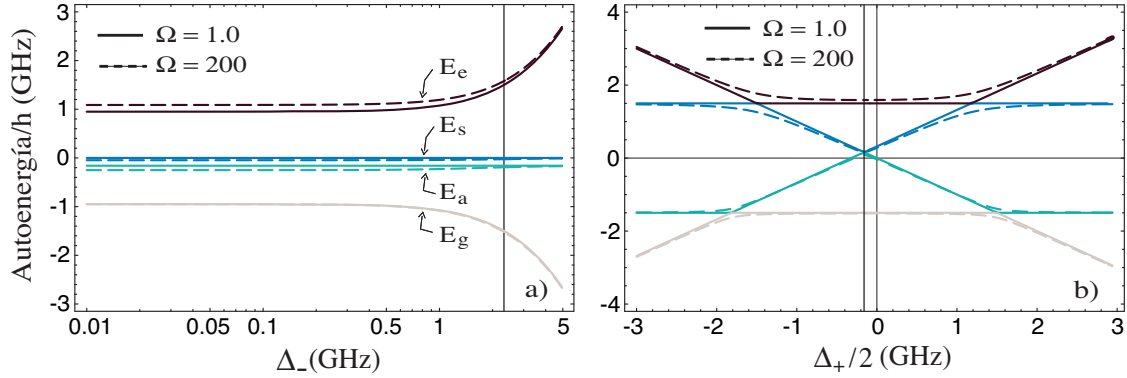


Figura 2. Energías del sistema molecular como función de a) $\Delta_- \equiv \nu_1 - \nu_2$, y de b) la desintonización del láser $\Delta_+/2 \equiv (\nu_1 + \nu_2)/2 - \nu_L$. En (a) las moléculas están en “resonancia” con el láser, $\Delta_+ = 0$. La interacción dipolar considerada es de 950 MHz, y el corrimiento $\Delta_e = -160$ MHz. En (b) $\Delta_- = 2320$ MHz. La nomenclatura para denotar las autoenergías en (b) es la misma usada en (a) y estas corresponden a los autoestados de la figura 1(b).

$C_{12} \equiv \frac{3\sqrt{\Gamma_1\Gamma_2}}{8\pi}$, y el operador dipolar atómico tiene la forma general $\hat{\mathbf{d}}_i = \mathbf{d}_i \hat{P}_{12}^{(i)} + \mathbf{d}_i^* \hat{P}_{21}^{(i)}$. De otro lado, la tasa de decaimiento colectivo incoherente que da cuenta del acoplamiento de las moléculas a través del campo del vacío (la emisión espontánea de una molécula tiene influencia en la emisión espontánea de la otra) se calcula como

$$\frac{\Gamma_{12}}{C_{12}} = \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - (\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}) \right] \frac{\sin z}{z} + \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}) \right] \left[\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z^3} \right] \quad (3)$$

y $\Gamma_i = nA_{12;i}/2 = n\omega_i^3 \|\mathbf{d}\|^2 / (3\epsilon_0 h c^3)$, donde $A_{12;i}$ ($i = 1, 2$) son los coeficientes de Einstein en el vacío [3]. En el caso en el que la separación r_{12} es muy pequeña comparada con la longitud de onda del láser λ_L (aproximación dipolar, $k_L r_{12} \ll 1$), se obtiene $V_{12} = \frac{3\sqrt{\Gamma_1\Gamma_2}}{8\pi z^3} [\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})]$, y $\Gamma_{12} = \sqrt{\Gamma_1\Gamma_2} \hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2$.

Describimos la dinámica cuántica resolviendo la ecuación maestra para el operador densidad molecular. Dentro de las aproximaciones Markoviana y de onda rotante [3], la parte asociada al operador de Lindblad incorpora el efecto de las tasas de emisión Γ_i , y de la emisión colectiva Γ_{12} :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] + \frac{\Gamma_1}{2} (2S_1^- \rho S_1^+ - \rho S_1^+ S_1^- - S_1^+ S_1^- \rho) \\ & + \frac{\Gamma_2}{2} (2S_2^- \rho S_2^+ - \rho S_2^+ S_2^- - S_2^+ S_2^- \rho) \\ & + \frac{\Gamma_{12}}{2} (2S_1^- \rho S_2^+ - \rho S_1^+ S_2^- - S_1^+ S_2^- \rho) \\ & + \frac{\Gamma_{21}}{2} (2S_2^- \rho S_1^+ - \rho S_2^+ S_1^- - S_2^+ S_1^- \rho), \end{aligned} \quad (4)$$

donde $\hat{S}_i^+ = \hat{P}_{21}^{(i)}$, $\hat{S}_i^- = \hat{P}_{12}^{(i)}$, $\hat{S}_i^+ \hat{S}_i^- = \hat{P}_{22}^{(i)}$, y $\hat{S}_i^- \hat{S}_i^+ = \hat{P}_{11}^{(i)}$ son los operadores de pseudo-espin-1/2 asociados a la i -ésima molécula. El primer término del lado derecho de la Ec. (4) representa la parte reversible de la evolución del sistema y los demás términos dan cuenta de la dinámica disipativa.

3. Resultados

3.1 Autoenergías y autoestados

La Fig. 2 ilustra el espectro energético del sistema molecular como función de a) la diferencia en las frecuencias de transición del par de moléculas, $\Delta_- \equiv \nu_1 - \nu_2$, y de b) la desintonización del láser con respecto a la frecuencia de resonancia del sistema, $\Delta_+ \equiv \nu_1 + \nu_2 - 2\nu_L$. La Fig. 2(a) demuestra que en buena aproximación, hasta $\Delta_- \sim 0,5$ GHz, el sistema acoplado de subsistemas de dos niveles considerado está bien definido y las frecuencias de transición entre autoestados permanece constante.

La Fig. 2(b) muestra explícitamente el corrimiento energético que exhibe el sistema cerca a la energía de punto cero debido al corrimiento Lamb de los estados $|\Psi_a\rangle$, $|\Psi_s\rangle$, y $|\Psi_e\rangle$; corrimiento inducido por las fluctuaciones electromagnéticas del vacío. El cálculo reportado en [6] para esta configuración de moléculas fue de -178 MHz, cercano al valor medido de -160 MHz en [2]. El espectro de energías como función de la desintonización del láser $\Delta_+/2$, muestra que efectivamente la diferencia entre los estados intrincados (estados intermedios en las Figs. 1(b) y 2(b)), es aproximadamente de 3 GHz cuando la diferencia entre las frecuencias de transición de las moléculas es de 2320 MHz [2]. El des-

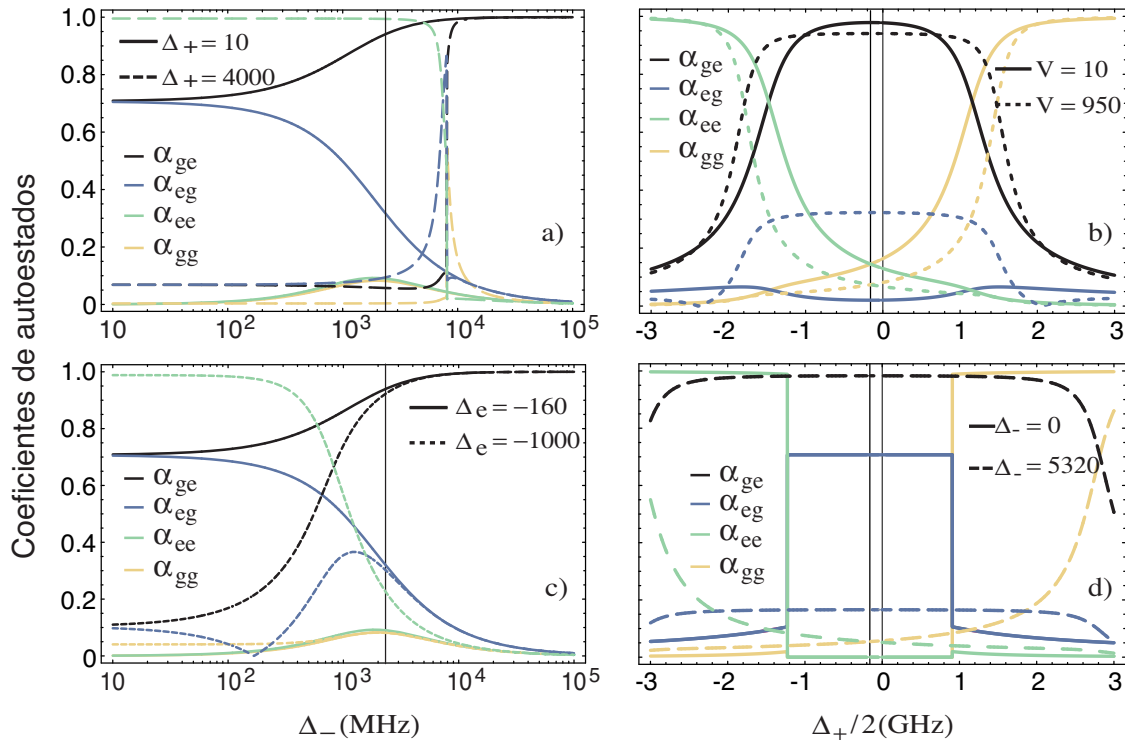


Figura 3. Coeficientes asociados a los autoestados del sistema en presencia del láser como función de a) y c) la diferencia entre las frecuencias de transición de las moléculas, $\nu_1 - \nu_2$, y de b) y d) la desintonización del láser externo, $(\nu_1 + \nu_2)/2 - \nu_L$. a) $V_{12} = 950$ MHz, y $\Delta_e = -160$ MHz, b) $\Delta_- = 2320$ MHz, y $\Delta_e = -160$ MHz, c) $\Delta_+ = 10$ MHz, y $V_{12} = 950$ MHz, y d) $\Delta_e = -160$ MHz, y $V_{12} = 950$ MHz. En las cuatro figuras, $\ell_i \equiv \Omega = 200$; todos los parámetros en MHz.

doblamiento de las energías inducido por el aumento del acople con el campo láser externo, permite un margen de maniobra en el diseño experimental de compuertas lógicas cuánticas [6], dado el estado del arte de la óptica láser coherente [2]. Los anticruces que presentan las autoenergías en la Fig. 2(b) son debidos a los términos fuera de la diagonal que aparecen en el Hamiltoniano cuando actúa el campo láser externo. Al hacerse mayor la diferencia entre las energías de transición de las moléculas, las autoenergías E_e y E_g varían notablemente (ver línea vertical trazada en $\Delta_- = 2320$ MHz, en la Fig. 2(a)), lo que indica que la contribución de los coeficientes de los respectivos autoestados se hace más significativa en una superposición general de la base computacional, como se ilustra en la Fig. 3.

El conjunto de gráficos de la Fig. 3 presenta el comportamiento de los coeficientes de los autoestados del Hamiltoniano bajo la acción del láser. Los coeficientes están asociados a los estados de la base de cómputo de la Fig. 1. Es claro de los gráficos que el sistema puede exhibir estados intrincados dependiendo de la configuración de los parámetros estructurales del sistema. En la Fig. 3(a) mostramos que el comportamiento de los

coeficientes cambia drásticamente al aumentar la desintonización del láser; la información del estado intrincado se pierde por completo. Un comportamiento similar ocurre si se varía la energía debida al corrimiento Lamb, como se aprecia en la Fig. 3(c). Moléculas con igual energía de transición presentan máximo intrincamiento cerca a la resonancia con el láser: la Fig. 3(d) muestra, efectivamente, que las curvas correspondientes a los coeficientes α_{eg} y α_{ge} están superpuestas en el valor $1/\sqrt{2}$ para $|\Delta_+/2| < 1$ GHz. El intervalo en $\Delta_+/2$ para el cual ocurre esta superposición se explica a través de los anticruces en las autoenergías mostradas en la Fig. 2(b). Los estados intrincados pueden permanecer en el sistema por un tiempo apreciable si se realiza una manipulación apropiada de los parámetros de control. Por ejemplo, la sensibilidad de la dinámica del sistema al cociente Δ_-/V_{12} queda manifiesta en la Fig. 3(d), donde para un valor fijo de la energía de interacción dipolar $V_{12} = 950$ MHz, el sistema puede intrincarse o desintrincarse dependiendo del valor de la diferencia en las frecuencias de transición de las moléculas.

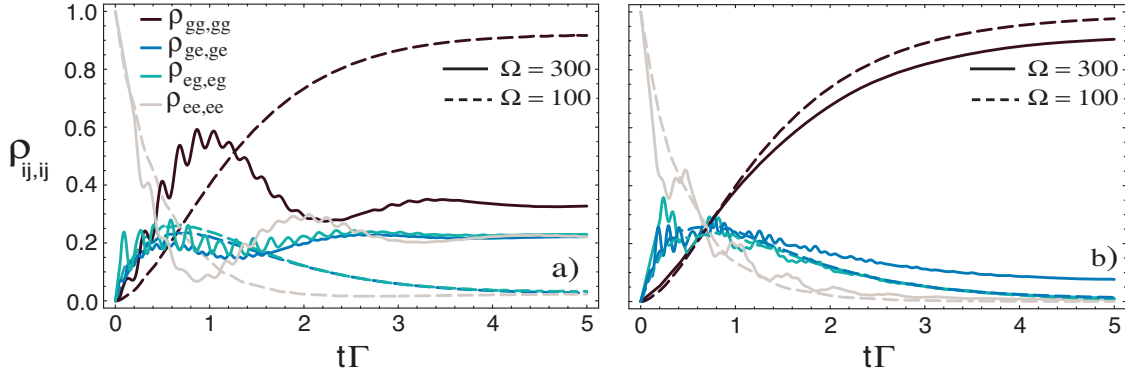


Figura 4. Evolución de las poblaciones del sistema para $2\pi\ell_i/\Gamma \equiv 2\pi\Omega/\Gamma = 6$ (línea continua), y $2\pi\Omega/\Gamma = 2$ (línea punteada). En ambos casos, (a) $2\pi\Delta_e/\Gamma = 0$, y (b) $2\pi\Delta_e/\Gamma = -20$, hemos considerado los valores medidos $\Gamma/2\pi = 50$, y $\Gamma_{12}/\Gamma = 9/50$ [2], $2\pi\Delta_-/\Gamma = \frac{232}{5}$, $2\pi V_{12}/\Gamma = 19$, $\Delta_+/\Gamma = 0$. En esta y en las demás figuras hemos hecho $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma$, y $\Gamma_{12} = \Gamma_{21}$. Todos los parámetros en MHz.

3.2 Dinámica cuántica condicional disipativa

La presencia del láser induce oscilaciones en la dinámica de las poblaciones en un rango transitorio, mostrando así que el sistema puede ser ‘guiado’ externamente. En el rango estacionario, los estados $|ge\rangle$, $|eg\rangle$, y $|ee\rangle$ permanecen poblados dependiendo de la intensidad del acoplamiento entre el sistema molecular y el láser, como se muestra en la Figura 4. La presencia del corrimiento Lamb $\Delta_e \neq 0$ en el estado doblemente excitado juega un papel relevante en la evolución de la dinámica del par de moléculas: de la Fig. 4(b) es claro que un valor finito de Δ_e , compite directamente con la acción del láser, permitiendo una evolución del estado doblemente excitado que es apreciablemente diferente de aquella mostrada en la Fig. 4(a).

Para implementar una dinámica cuántica condicional [7] en el dímero aquí presentado, recurrimos a la acción coherente del pulso láser externo, donde su energía y amplitud son identificadas partiendo de las propiedades físicas del sistema, como la transición de los momentos dipolares, las tasas de decaimiento espontáneo, la separación intermolecular, y las propiedades refractivas del medio. Estos permiten inducir oscilaciones de Rabi sobre las moléculas individuales, y en principio, rotaciones arbitrarias en cada molécula pueden definirse de acuerdo a la energía de transición de cada una de ellas y a las oscilaciones coherentes de sus correspondientes momentos dipolares. Específicamente, el corrimiento Δ_e implica que la frecuencia resonante asociada a las transiciones entre los estados $|g\rangle$ y $|e\rangle$ de una molécula depende del estado de la otra molécula del dímero, y en consecuencia existe una diferencia en la energía de transición entre los estados $|\Psi_a\rangle$ y $|\Psi_g\rangle$ y aquella de los estados $|\Psi_e\rangle$ y $|\Psi_s\rangle$, precisamente debido a los valores

finitos de Δ_e y V_{12} . Así, bajo la consideración física $V_{12}/\Delta_- \ll 1$, es posible inducir una dinámica cuántica condicional que realiza la compuerta lógica cuántica de dos qubits CNOT : $|m\rangle \otimes |n\rangle \mapsto |m\rangle \otimes |m \oplus n\rangle$, donde el símbolo \oplus denota suma módulo 2.

La Fig. (5) muestra distintos escenarios disipativos donde se explora la posibilidad de inducir la anterior dinámica condicional sobre el dímero, utilizando, además de la interacción entre moléculas, la acción de pulsos láser unimodales. La Fig. 5(a) muestra el cambio en el estado base de una partícula (‘fliepo’) que sufre una de las moléculas del dímero en un tiempo $\pi/2(2\pi\Omega)$. Esto corresponde a la realización de la compuerta lógica $|e_1\rangle |g_2\rangle \mapsto |e_1\rangle |e_2\rangle$ a través de la iluminación del qubit o molécula de control con un pulso $\pi_{\Omega_{12}}$ de frecuencia $\Omega_{12} = \nu_2 + \Delta_e - V_{12}^2/\Delta_-$. En este caso hemos considerado moléculas de igual momento dipolar, de tal forma que la acción del láser es ‘equivalente’ para ambas. Esta evolución particular permite la implementación de la compuerta lógica cuántica CNOT sobre la segunda molécula, donde la primera actúa como control condicional en el fliepo de la segunda. En ausencia de canales disipativos, la compuerta se realiza con fidelidad $\mathcal{F} \equiv \sqrt{\langle \psi_m | \rho | \psi_m \rangle} = 1$ (máxima posible) en 1.25 ns. En la definición, $|\psi_m\rangle$ es el estado que se desea generar dinámicamente. Para el caso de tasas finitas de decaimiento, como se muestra en las Figs. 5 (a) y (b), existe un ligero error en la realización de la compuerta el cual depende de los valores de las tasas de decaimiento, del cociente V_{12}/Δ_- , y de Δ_e . En este caso, $|\psi_m\rangle \equiv |e_1\rangle |e_2\rangle$ y el estado inicial considerado es $|\psi_0\rangle \equiv |e_1\rangle |g_2\rangle$. En la Fig. 5(a), la dinámica condicional se realiza para $V_{12}/\Delta_- = 5/232$, lo cual corresponde, según la Fig. 3, a la situación donde sólo los estados del dímero $\alpha_{eg} |eg\rangle$ y $\alpha_{ee} |ee\rangle$ intercambian poblaciones de manera coherente (en ausencia de disi-

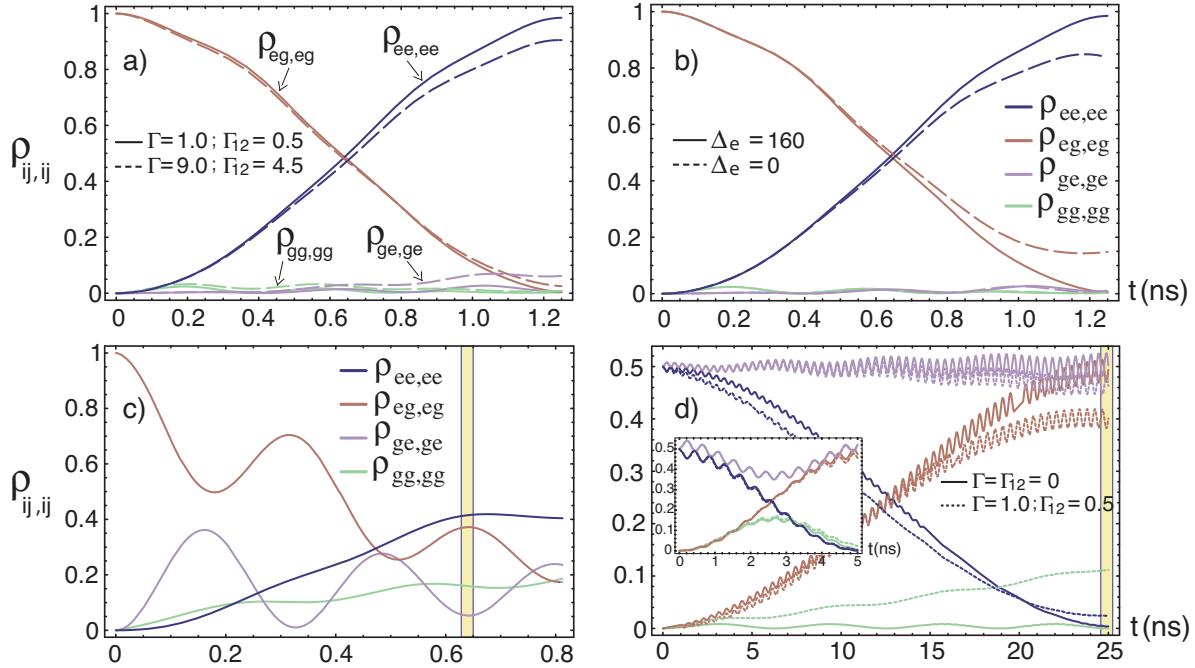


Figura 5. Dinámica cuántica condicional disipativa de las moléculas acopladas. (a) $\Delta_- = -160$ MHz, y (b) $\Gamma/2\pi = 1,0$, $\Gamma_{12}/2\pi = 0,5$, muestran la realización de la compuerta CNOT, para moléculas con igual momento dipolar, y estado inicial $|\Psi_0\rangle = |eg\rangle$. En ambos casos se aplicó un pulso láser $\pi_{\Omega_{12}}$, $\ell_i \equiv \Omega = 200$, para una frecuencia de interacción dipolar $V_{12} = 50$, bajo la condición $V_{12}/\Delta_- \approx 10^{-2}$. (c) $V_{12} = 950$, $\Gamma/2\pi = 50$, $\Gamma_{12}/2\pi = 9$, $\Omega = 200$. (d) Poblaciones en la realización del estado máximamente intrincado $\frac{1}{\sqrt{2}}(|ge\rangle + |eg\rangle)$ generado a partir del estado inicial separable $\frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle)|e\rangle$, para campo de intensidad (baja) $\Omega = 10$ y $V_{12} = 50$. En el recuadro en (d), $\Omega = 50$, y $V_{12} = 50$. En todos los gráficos, $\Delta_+ = 2638$, y $\Delta_- = 2320$. Todos los parámetros están en MHz.

pación). En la medida en que se incrementan las tasas de decaimiento en la Fig. 5(a) aparece una pequeña contribución debido a las poblaciones $\rho_{gg,gg}$ y $\rho_{ge,ge}$. Es claro entonces que el desempeño o la fidelidad en la realización de la compuerta lógica se ve afectado por las tasas de emisión espontánea de las moléculas y por la posible desintonización del láser externo. Sin embargo, esta puede ser mejorada ajustando los parámetros V_{12}/Δ_- , Δ_e , y escogiendo apropiadamente la intensidad del láser.

La aplicación de pulsos láser apropiados también nos permite la posibilidad de preparar el sistema en un estado máximamente intrincado, como mostramos en la Fig. 5(d), donde se ha preparado el dímero en el estado inicial separable $\frac{1}{\sqrt{2}}(|g_1\rangle + |e_1\rangle)|e_2\rangle$, y se ha aplicado un pulso láser $\pi_{\Omega_{12}}$ durante un tiempo $\pi/2(2\pi\Omega)$. Se obtiene, como resultado final, la generación del estado máximamente intrincado $|\psi_m\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_1e_2\rangle + |e_1g_2\rangle)$ tal como se indica en la barra vertical trazada en la figura; sin embargo, la pérdida de información debido a los factores antes descritos es notable en esta operación: nótese la sensibilidad en la generación del estado intrincado debido a un ligero incremento en las tasas de

decaimiento, y que la escala de tiempo necesitada en la generación de dichos estados es apreciablemente mayor a la requerida en Figs. 5(a) y (b). El recuadro en la Fig. 5(d) permite visualizar la influencia de la intensidad del láser sobre la dinámica condicional: en efecto, se muestra que para las mismas tasas de decaimiento de la Fig. 5(d), pero diferente valor de Ω , es posible mejorar la fidelidad en la realización del estado intrincado. Situaciones de este tipo han despertado gran interés, y debido a esto es posible, en la actualidad, realizar ingeniería para el control de tales tasas de emisión [8].

En la Fig. 5(c) mostramos que para los valores de la interacción dipolar, de Δ_- , de las tasas de decaimiento, y de Δ_e medidos experimentalmente en [2], no es posible inducir la compuerta lógica CNOT. Esto es fácilmente entendible si tenemos en cuenta que para este caso la relación $V_{12}/\Delta_- \ll 1$ no se satisface, y en consecuencia hay una contribución importante debido a la interacción V_{12} que precluye que el efecto antes importante asociado a Δ_e siga siendo efectivo en la realización de la compuerta CNOT: nótese de la Fig. 5(b), donde hemos realizado la compuerta en presencia y ausencia del corrimiento Lamb, que este es crucial en

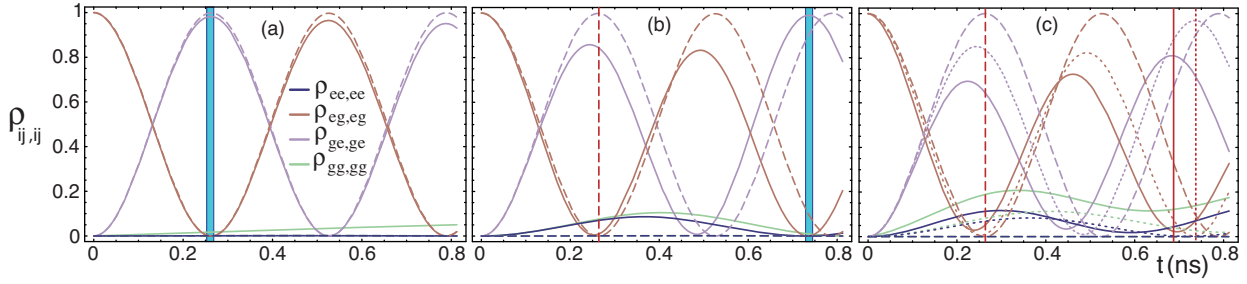


Figura 6. Dinámica cuántica condicional disipativa de las moléculas acopladas: realización de la compuerta SWAP. (a) Acción de las tasas de decaimiento; curva punteada: $\Gamma = \Gamma_{12} = 0$, curva continua: $\Gamma/2\pi = 10$, $\Gamma_{12}/2\pi = 1,8$; $V_{12} = 950$, $\Delta_e = -160$, $\Delta_+ = \Delta_- = 10$, $\Omega = 20$. (b) Efecto de la intensidad del láser; curva punteada: $\Omega = 20$, curva continua: $\Omega = 200$; $\Gamma/2\pi = \Gamma_{12}/2\pi = 0$, demás parámetros como en (a). (c) Acción combinada de las tasas de decaimiento y del láser aplicado; $V_{12} = 950$, $\Delta_e = -160$, $\Delta_+ = \Delta_- = 0$. Curva punteada, trazo largo: $\Gamma = \Gamma_{12} = 0$, $\Omega = 0$; curva punteada, trazo corto: $\Gamma/2\pi = 5$, $\Gamma_{12}/2\pi = 0,9$, $\Omega = 200$; curva continua: $\Gamma/2\pi = 50$, $\Gamma_{12}/2\pi = 9$, $\Omega = 300$. La convención de (a) se sigue para todas las curvas y todos los parámetros considerados están en MHz.

la generación de la dinámica condicional. Volviendo a la Fig. 5(c), la barra vertical señala el valor del tiempo para el cual $\rho_{ee,ee}$ alcanza su máxima contribución. En este instante también hay contribuciones significativas de las componentes $\rho_{gg,gg}$ y $\rho_{ge,ge}$, por tanto no se tiene una transferencia coherente de poblaciones entre los qubits de control (molécula 1) y blanco (molécula 2), es decir, entre las poblaciones $\rho_{eg,eg}$ y $\rho_{ee,ee}$, lo cual impide la realización de la compuerta.

Sin embargo, el hecho de que la interacción dipolar reportada en [2] sea considerablemente mayor que Δ_e y casi del mismo orden de magnitud que Δ_- , conlleva a otra posibilidad de realización de compuerta lógica, como se muestra en la Fig. 6. Para valores del cociente V_{12}/Δ_- arbitrarios, es posible la realización de la compuerta de intrincamiento U_{xy} : $|m\rangle \otimes |n\rangle \mapsto i^{|m-n|} |n\rangle \otimes |m\rangle$ [9], donde hemos escrito la interacción entre moléculas $\hat{H}_{12} = \hbar V_{12} [\hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y] \equiv \hat{H}_{xy}$ (véase Ec. (1)). Para este \hat{H}_{xy} , uno puede definir la compuerta de intrincamiento *óptima* U_{xy} para la interacción $d-d$, simplemente dejando evolucionar el sistema bajo \hat{H}_{xy} por el tiempo $t_{xy} = \pi/4(2\pi V_{12})$ [9]. La compuerta U_{xy} así definida es la compuerta de intrincamiento *natural* asociada a la interacción dipolar \hat{H}_{12} y puede verse como una combinación de compuertas CNOT y SWAP. Esta compuerta, en conjunto con transformaciones locales (rotaciones arbitrarias de un qubit) que actúan sobre cada molécula por separado, son suficientes para construir un conjunto *universal* de compuertas lógicas para cómputo cuántico [10].

En la Fig. 6 describimos la realización de la compuerta SWAP, de acuerdo a la discusión anterior. La Fig. 6(a) muestra que la compuerta SWAP se realiza de manera ‘natural’ cuando la intensidad del láser es débil comparada con la magnitud de la interacción dipolar V_{12} . Las moléculas intercambian energía de manera coher-

ente, efectuando la transformación SWAP: $|eg\rangle \mapsto |ge\rangle$. Nótese que la presencia de disipación inducida por las tasas de emisión conlleva a que la compuerta no se realice con la máxima fidelidad posible (véase la ligera diferencia en la altura alcanzada por las curvas en la barra vertical, la cual ha sido trazada centrada en el tiempo mínimo requerido para realizar la compuerta, $\tau_g \approx 0,26$ ns). Las oscilaciones introducidas por un láser de intensidad alta, retarda el tiempo en el que se lleva a cabo la compuerta, como ilustramos en la Fig. 6(b), donde la inclusión de un láser con $\Omega = 200$ MHz produce que la compuerta SWAP se realice ahora en un tiempo aproximado de $2,8\tau_g$, tiempo indicado por la barra vertical.

Hemos reunido los dos efectos discutidos anteriormente en la Fig. 6(c) para ilustrar cómo el incremento de las tasas de emisión disminuye la posibilidad de tener una fidelidad máxima en la generación de esta compuerta. Por otra parte, las oscilaciones adicionales en la ejecución de la compuerta, debidas al láser, incrementan el tiempo de ejecución τ_g ; el control de dicho tiempo de operación de compuerta es de gran interés en relación a los tiempos de decaimiento característicos del sistema. La línea vertical punteada, de trazo largo, indica que en el caso ‘libre’, cuando las moléculas no interactúan con el láser, ni están influenciadas por emisión espontánea, el tiempo de operación de compuerta es mas corto que en el caso en el que los anteriores factores son incluidos. En la Fig. 6(c), las curvas continuas han sido calculadas para las tasas de decaimiento medidas en [2]; para estas, los tiempos de operación característicos de la compuerta SWAP están en la escala de los picosegundos, y al comparar estos con los de las tasas de decaimiento mas rápidas, encontramos que la figura de mérito asociada al tiempo de compuerta τ_g y el de decaimiento $\tau_d \equiv 2\pi/\Gamma$ es $\tau_g/\tau_d \sim 10^{-3}$, requerimiento crucial para efectos de procesamiento de información en redes cuánticas [10].

Conclusiones

Hemos estudiado la dinámica disipativa de un sistema de moléculas individuales acopladas en interacción con un campo láser externo. El control dinámico del espectro energético y de los autoestados del sistema ha sido modelado en términos de la interacción dipolar, del corrimiento energético del estado doblemente excitado, y de la intensidad y frecuencia del láser externamente aplicado como inductor de la dinámica condicional.

La selectividad energética de las compuertas CNOT y SWAP están determinadas por Δ_- , Δ_e y V_{12} , y las escalas de tiempo de operación características se pueden ajustar siguiendo el procedimiento explicado en las Figs. 5 y 6, para diferentes conjuntos de parámetros físicos. Hemos dado así, una prescripción precisa para la generación de compuertas lógicas de dos qubits y, en general, para la generación de estados intrincados en sistemas de dímeros que es posible ser implementada en el laboratorio con tecnología actual. Las ideas aquí exploradas son factibles de ser aplicadas en otros sistemas como puntos cuánticos [11] y arquitecturas biomoleculares [12].

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado parcialmente por Colciencias a través de los proyectos de investigación 1106-

452-21296 y 1106-14-17903, y el programa de intercambio científico PROCOL (DAAD-Colciencias).

Referencias

- [1] Z. Ficek y S. Swain, *Quantum Interference and Coherence: Theory and Experiments*, Springer Series in Optical Sciences, Springer (2005)
- [2] C. Hettich, C. Schmitt, J. Zitzmann, S. Kuhn, I. Gerhardt, y V. Sandoghdar, *Science* **298**, 385 (2002)
- [3] G. S. Agarwal, *Quantum statistical theories of spontaneous emission and their relations to other approaches*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 70, editado por G. Höhler, Springer-Verlag, Berlin (1974)
- [4] J. Schwinger, *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, New York, Publicaciones Dover (1958)
- [5] G. V. Varada y G. S. Agarwal, *Phys. Rev. A* **45**, 9 (1992)
- [6] J. H. Reina, R. G. Beausoleil, T. P. Spiller, y W. J. Munro, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 250501 (2004)
- [7] A. Barenco, D. Deutsch, A. Ekert, y R. Jozsa, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4083 (1995)
- [8] B. C. Buchler, T. Kalkbrenner, C. Hettich, y V. Sandoghdar, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 063003 (2005)
- [9] K. Hammerer, G. Vidal, e I. Cirac, *Phys. Rev. A* **66**, 062321 (2002)
- [10] M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge, Cambridge University Press (2000)
- [11] J. H. Reina, L. Quiroga, y N. F. Johnson, *Phys. Rev. A* **62**, 012305 (2000); B. W. Lovett, J. H. Reina, A. Nazir, y A. Briggs, *Phys. Rev. B* **68**, 205319 (2003)
- [12] M. Thorwart, J. Eckel, J. H. Reina, y S. Weiss, *Preprint arXiv:0808.2906*; J. Eckel, J. H. Reina, y M. Thorwart, *Preprint arXiv:0903.2936*