



Arquitecturas Moleculares de Copolímeros π -conjugados para Cómputo Cuántico Global

Molecular architectures based on π -conjugated copolymers for global quantum computing

César A. Mujica Martínez ^{a,b}, Julio C. Arce ^a y John H. Reina ^c,

^aGrupo de Química Teórica y Computacional, Departamento de Química, Universidad del Valle, A.A. 25360, Cali, Colombia

^bInstitut für Theoretische Physik, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, 40225 Düsseldorf, Germany

^cGrupo de Tecnología, Información y Complejidad Cuántica, Departamento de Física, Universidad del Valle, A.A. 25360, Cali, Colombia

Recibido 26 de Oct. de 2008; Aceptado 2 de Sep. de 2009; Publicado en línea 30 de Oct. 2009

Resumen

Proponemos una arquitectura molecular de nueve bloques PPP-PDA-PPP-PA-(CCH-aceno)-PA-PPP-PDA-PPP (cada bloque conteniendo varias unidades oligoméricas), como hardware para la implementación de un esquema de computación cuántica global basada en el mecanismo de barreras de espín. Los portadores físicos de la información son electrones que se acoplan a través de la interacción Coulombiana. El mecanismo de barrera hace uso un tercer estado accesible por la acción de un laser externo, por lo que el control es enteramente óptico. Los resultados sugieren que el sistema propuesto es un candidato confiable y escalable para la implementación física de esquemas de control cuántico global.

Palabras Clave: Polímeros π -conjugados, heteroestructuras orgánicas, computación cuántica, control óptico

Abstract

We propose a molecular architecture of nine-blocks PPP-PDA-PPP-PA-(CCH-acene)-PA-PPP-PDA-PPP (where each block contains various oligomeric units) as a hardware for the physical implementation of a spin-barrier scheme for global quantum computation. The physical carriers of information are electrons coupled through the Coulomb interaction. The barrier mechanism uses a third state which is externally accessed by a coherent laser field, which leads to an all-optical control. The results suggest that the proposed system for global quantum control is both scalable and reliable.

Keywords: π -conjugated polymers, organic heterostructures, quantum computation, optical control

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

1. Introducción

El procesamiento cuántico de la información ha causado gran impacto desde el punto de vista de sus potenciales usos, al punto de hablarse de una “segunda revolución cuántica” [1]. Una de las ventajas de estas tecnologías es su capacidad de encriptar información con extrema seguridad y de evitar la interceptación de comunicaciones entre dos puntos remotos [2]. Otra ventaja

es la posibilidad de realizar cómputo cuántico, el cual explota el principio de interferencia y la existencia de correlaciones no-locales entre objetos cuánticos interactuantes, los cuales han llegado ser recursos físicos fundamentales (como lo es la energía, por ejemplo) en el desarrollo de protocolos de información cuántica. Esto permitiría, a un eventual computador cuántico, ejecutar tareas que son imposibles para una computador clásico (p.ej., la factorización de un número primo grande [3] o la evaluación de todo el dominio de una función en un

solo paso computacional [2,4]); sin embargo, el desafío experimental que conlleva construir esta clase de dispositivos radica en la dificultad al controlar la dinámica cuántica de los bits cuánticos (qubits) y al fenómeno de decoherencia causado por las interacciones con el entorno [5,6,7].

Un qubit es un sistema cuántico en el cual los estados Booleanos (bits clásicos) 0 y 1 son representados por un par de estados cuánticos ortonormales identificados como $|0\rangle$ y $|1\rangle$; los dos estados forman una base computacional, y cualquier otro estado del qubit puede escribirse como una superposición $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, siendo α y β números complejos en general, tal que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Físicamente, un qubit puede ser un sistema microscópico como un átomo [7,8], un espín nuclear [10], un fotón polarizado [11], o estructuras más complejas como puntos cuánticos [12,13,14], estructuras moleculares [15,16], complejos biomoleculares fotosintéticos [17], entre muchos otros. Los puntos cuánticos presentan la ventaja de una industria existente y su facilidad de incorporación en los dispositivos optoelectrónicos actuales [18], además, hay reportes de esquemas de computación cuántica usando puntos cuánticos [12,19,13,14,20,21]. Estos puntos cuánticos pueden construirse a partir de semiconductores inorgánicos u orgánicos, siendo estos últimos de especial interés debido a trabajos previos en este tipo de sistemas [22], en donde los puntos cuánticos son realmente heteroestructuras orgánicas (copolímeros de bloque), las cuales son más fáciles de construir que los sistemas inorgánicos, ya que no requieren de costosos equipos como los requeridos para hacer epitaxia de haces moleculares o deposición química de vapor organometálico y, en principio, es posible construir una variedad ilimitada de heteroestructuras orgánicas, puesto que la interface entre materiales es un enlace químico carbono-carbono, a diferencia de las inorgánicas, en donde se requiere que los materiales presenten constantes de red similar para evitar el estrés interfacial [23], lo que limita grandemente la variedad de heteroestructuras que se pueden obtener.

Actualmente pueden encontrarse abundantes esquemas teóricos para computación cuántica en estado sólido. Computación cuántica universal requiere controlar la dinámica de qubits individuales y las interacciones entre ellos, siendo esto último la principal causa de decoherencia (pérdida de coherencia entre superposiciones cuánticas) debido a la introducción de mecanismos de control externos al sistema. El uso de pulsos electromagnéticos como mecanismo de control no causa decoherencia severa por lo que se han propuesto esquemas de computación cuántica enteramente óptica [24,25,26].

2. Modelo

Varios esquemas de control han sido propuestos para controlar la decoherencia, entre los que se destaca el de barreras de espín [7,25,26], el cual emplea dos tipos de sistemas de dos niveles en un arreglo lineal: unos que portan la información (qubits) y otros que actúan como barreras pasivas de control global entre qubits. En este trabajo proponemos la implementación de un modelo basado la siguiente arquitectura [26]: La Fig. 1(a) muestra un arreglo lineal de qubits (especies "A") y de unidades de control (especies "B") las cuales poseen un tercer nivel adicional $|T\rangle$ de energía Zeeman muy por fuera de resonancia con los niveles de los qubits computacionales (estados $\{|0\rangle, |1\rangle\}$) como se muestra en la Fig. 1(a). El arreglo lineal se ilustra esquemáticamente en la parte inferior de la Fig. 1(a), donde los círculos denotan las "barreras" y los octógonos los qubits (W, X, Y, Z) computacionales.

La Fig. 1(b) muestra el bloque básico ABA de la Fig. 1(a) en funcionamiento. En este, la barrera es preparada en el estado $|T\rangle$ por la excitación con un láser externo, por lo que no hay interacción entre los qubits laterales X y Y (Fig. 1(b)) debido a que $|T\rangle$ está fuera de resonancia respecto a X y Y . Para llevar a cabo una compuerta lógica, el sistema central decae al subespacio $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ (Fig. 1(c)), y los tres sistemas se intrincan bajo evolución libre, lo que permite la realización de compuertas cuánticas (Fig. 1(c)). Para "apagar" la interacción, se hace incidir nuevamente la fuente láser de tal forma que el estado $|T\rangle$ sea poblado de nuevo, lo que restaura la barrera, tal como se muestra en la Fig. 1(d), donde se ha vuelto a recuperar un estado producto entre los qubits, ahora denotado por $|X'\rangle \otimes |Y'\rangle$.

3. Arquitectura molecular de copolímeros de multibloque π -conjugados

En este trabajo implementamos el modelo antes ilustrado en arquitecturas constituidas por copolímeros de multibloque π -conjugados [22] dopados negativamente, donde los portadores físicos de la información son electrones que interactúan a través de la fuerza Coulombiana. La arquitectura tiene la ventaja de permitir un acople fuerte entre qubits, por ser moleculares [26], interactuar débilmente con los fonones, por ser cuasi-lineales [22], y ser escalables.

A través de la variación sistemática de los sistemas pozo-barrera se ha obtenido la arquitectura de nueve bloques 8 PPP-7 PDA-8 PPP-3 PA-7 (CCH aceno)-3 PA-8 PPP-7 PDA-8 PPP, donde PPP, PDA, PA y CCH

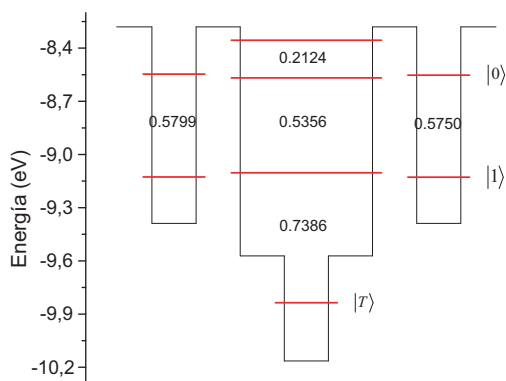


Figura 2. Perfil de la banda de conducción y niveles mono-electrónicos de la arquitectura molecular calculados usando el método de Hückel extendido. Las energías están dadas en eV.

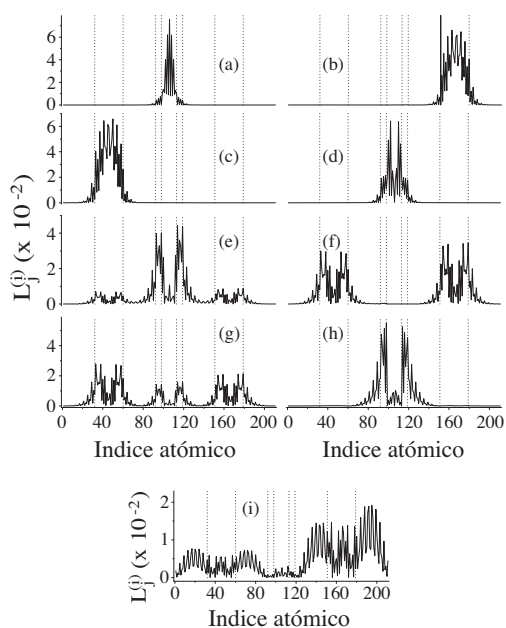


Figura 3. Comportamiento del parámetro de localización (2) para los OMs de la banda de conducción de la heteroestructura. (a) LUMO, (b) LUMO+1, (c) LUMO+2, (d) LUMO+3, (e) LUMO+4, (f) LUMO+5, (g) LUMO+6, (h) LUMO+7, (i) LUMO+8. Las líneas punteadas indican la posición de los límites de cada pozo.

Conclusiones. Los resultados obtenidos indican que la arquitectura propuesta es un sistema plausible para la implementación física de esquemas de computo cuántico global; además, cumple el requisito de escalabilidad y el control de la dinámica puede llevarse a cabo usando pulsos del orden de picosegundos, lo que permite llevar a cabo eficazmente transformaciones unitarias de uno y dos qubits, requisitos primarios en la realización de una dinámica cuántica condicional.

Agradecimientos. Este trabajo fue financiado parcialmente por Colciencias a través de los proyectos de

investigación 1106-45-221296 y 1106-14-17903, y el programa de intercambio científico PROCOL (DAAD-Colciencias).

Referencias

- [1] J. P. Dowling y G. J. Milburn, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **361**, 1655 (2003)
- [2] M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge, Cambridge University Press (2000)
- [3] A. Acín, *Investigación y Ciencia* **360**, 74 (2006)
- [4] D. Deutsch y R. Jozsa, *Proc. R. Soc. London A* **439**, 553 (1992)

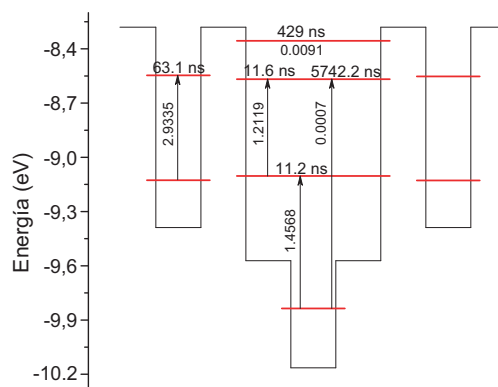


Figura 4. Tiempos de vida media (en ns) y fuerzas del oscilador para la arquitectura molecular, calculados usando el método semiempírico ZINDO/S

- [5] G. Massimo Palma, K.-A. Suominen y A. K. Ekert, *Proc.: Math., Phys. Eng. Sci.* **452**, 567 (1996)
- [6] J. H. Reina, L. Quiroga, and N. F. Johnson, *Phys. Rev. A* **65**, 032326 (2002)
- [7] S. C. Benjamin, *New J. Phys.* **6**, 61 (2004)
- [8] J. I. Cirac y P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4091 (1995)
- [9] H.-J. Briegel et al., *J. Mod. Opt.* **47**, 415 (2000)
- [10] J. A. Jones y M. Mosca, *J. Chem. Phys.* **109**, 1648 (1998)
- [11] J. L. O'Brien, *Science* **318**, 1567 (2007)
- [12] D. Loss y D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998)
- [13] J. H. Reina, L. Quiroga, and N. F. Johnson, *Phys. Rev. A* **62**, 012305 (2000)
- [14] B. Lovett, J. H. Reina, A. Nazir, and A. Briggs, *Phys. Rev. B* **68**, 205319 (2003)
- [15] N. Gershenfeld e I. L. Chuang, *Sci. Am.* June 1998
- [16] C. M. Tesch y R. Vivie-Riedle, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 157901 (2002)
- [17] M. Thorwart, J. Eckel, J. H. Reina y S. Weiss, arXiv: cond-mat.mes-hall/0808.2906 (2008)
- [18] M. A. Reed, *Sci. Am.* January (1993)
- [19] G. Chen et al., *Science* **289**, 1906 (2000)
- [20] D. P. DiVincenzo, *Science* **309**, 2173 (2005)
- [21] J. Berezovsky, *Science* **320**, 349 (2008)
- [22] C. A. Mujica, *Teoría del Orbital Molecular de Masa Efectiva Aplicada a Poliácenos Cuasi-Unidimensionales y sus Heteroestructuras*, Trabajo de Grado (Química), Universidad del Valle (2006)
- [23] P. T. Yu y M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Material Properties*, 2ed, Berlin, Springer-Verlag (1999)
- [24] T. Calarco et al., *Phys. Rev. A* **68**, 012310 (2003)
- [25] S. C. Benjamin y S. Bose, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 247901 (2003)
- [26] S. C. Benjamin, B. W. Lovett y J. H. Reina, *Phys. Rev. A* **70**, 060305R (2004)
- [27] R. Hoffmann, *J. Chem. Phys.* **39**, 1397 (1963)
- [28] J. L. McHale, *Molecular Spectroscopy*, New York, Prentice Hall (1999)