

GRADO EN FÍSICA

**Parametrización de la Ecuación de Dirac con
Computación Cuántica y Estimación de la Energía del
Átomo de Hidrógeno**

Presentado por:

Ángel Gómez González

Dirigido por:

Ezequiel Valero Lafuente

CURSO ACADÉMICO 2024-2025

Índice

1. Introducción	1
2. Objetivos	2
3. Marco Teórico	2
3.1. Fundamentos Matemáticos	3
3.1.1. Teoría de Grupos	3
3.1.2. Álgebra Tensorial en Mecánica Cuántica	16
3.2. Espinores	27
3.2.1. Espinores de Weyl	27
3.2.2. Espinores de Dirac	28
3.3. Ecuación de Dirac	28
3.4. Fundamentos de la Computación Cuántica	33
4. Metodología	38
4.1. Métodos Matemáticos	38
4.1.1. Trotterización	38
4.1.2. Operator Splitting	39
4.1.3. Quantum Walk	43
4.2. Métodos Informáticos	45
5. Implementación	46
5.1. Inicialización en el Estado Fundamental $1s$	47
5.2. Operador Traslación	49
5.3. Operador Masa	52
5.4. Operador Potencial	53
5.5. Medición de la Energía	54

6. Resultados	55
7. Conclusiones	58
7.1. Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS)	59
A. Puertas Cuánticas Utilizadas	61
B. Deducción de la Matriz de Rotación 2D	62
C. Estructura de las Matrices del Grupo SU(2)	63
D. Evolución de un Sistema Bajo Hamiltonianos Locales	64
E. Desarrollo de la Ecuación de Lie-Trotter	66
F. Representación de Majorana	67
G. Random Walk	68
H. Parametrización de Matrices	71
I. Código del Circuito Cuántico	78

Índice de cuadros

1. Energías Obtenidas en hartrees y electronvoltios junto al valor real.	58
2. Puertas Cuánticas Utilizadas	61

Índice de figuras

1. Visualización de un estado arbitrario en la Esfera de Bloch (qiskit).	34
2. Puerta de Pauli- X aplicada al qubit q_0	35
3. Generación de $ \phi^+\rangle$ mediante Hadamard en q_0 y CNOT($q_0 \rightarrow q_1$).	37

4.	Distribución de probabilidad del estado $ \psi_{1s}\rangle$ para 10 y 5 qubits respectivamente. . .	49
5.	Parametrización de los Coin-Flip.	50
6.	Operadores Incremento y Decremento de la traslación.	51
7.	Operador T actuando para $d = 3$	52
8.	Circuito Cuántico Completo.	54
9.	Distribución de los datos obtenidos con el circuito de 8 qubits.	56
10.	Distribución de los datos obtenidos con el circuito de 11 qubits.	57
11.	Distribución de los datos obtenidos con el circuito de 14 qubits.	58
12.	Funcionamiento del Random Walk en una dimensión.	69
13.	Parametrización de una matriz 2x2 en un circuito (en qiskit).	74
14.	Representación del estado en la esfera de Bloch (en qiskit).	75

Resumen

En este trabajo se presenta una propuesta para parametrizar la ecuación de Dirac mediante computación cuántica. Esta ecuación, fundamental en la mecánica cuántica relativista, plantea importantes desafíos computacionales. Aprovechando las capacidades de paralelismo inherentes a los sistemas cuánticos, se construye un circuito cuántico capaz de representar los distintos operadores involucrados mediante herramientas como Qiskit y PennyLane.

La metodología se basa en técnicas como la Trotterización y el Quantum Walk, que permiten aproximar la evolución temporal del sistema en términos de puertas lógicas cuánticas. Como aplicación concreta, se estima la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno. Los resultados obtenidos muestran un buen grado de consistencia con los valores teóricos y sirven como punto de partida para posibles extensiones a sistemas más complejos.

Este enfoque no solo tiene interés académico, sino que también se vincula con los ODS 4, 7, 9 y 17, al fomentar la innovación, la educación avanzada y el uso eficiente de recursos tecnológicos.

Palabras clave: Computación Cuántica, Mecánica Cuántica Relativista.

Abstract

This work explores the use of quantum computation to parameterise the Dirac equation. As a fundamental element of relativistic quantum mechanics, the Dirac equation presents significant computational challenges. By leveraging the inherent parallelism of quantum systems, a quantum circuit is constructed to represent the relevant operators, using tools such as Qiskit and PennyLane.

The methodology is based on techniques such as Trotterisation and quantum walk, which allow for an efficient approximation of the system's time evolution through quantum logic gates. As a practical application, the energy of the ground state of the hydrogen atom is estimated. The results show strong agreement with theoretical values and offer a solid foundation for potential extensions to more complex systems.

This approach is not only of academic interest but also aligns with SDGs 4, 7, 9, and 17, by promoting innovation, advanced education, and the efficient use of technological resources.

Keywords: Quantum Computing, Relativistic Quantum Mechanics.

1. Introducción

«And I'm not happy with all the analyses that go with just the classical theory, because nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy. Thank you.»

- Richard Feynman [1].

La ecuación de Dirac, formulada en 1928 por Paul Dirac, marcó un hito en la física teórica al ofrecer una descripción relativista de partículas con espín $1/2$. A diferencia de la ecuación de Schrödinger, que es no relativista, la ecuación de Dirac incorpora la invarianza de Lorentz de manera natural, asegurando consistencia con la teoría de Einstein. Además, su formalismo espinorial no solo describe el espín de forma intrínseca, sino que también predijo la existencia de la antimateria, concretamente la existencia del positrón, que fue posteriormente confirmado experimentalmente en 1932 por Carl Anderson.

A pesar de su importancia, la ecuación de Dirac plantea desafíos computacionales debido a su estructura matricial y a la necesidad de trabajar con espinores en cuatro dimensiones. Resolverla de manera eficiente, especialmente en sistemas de muchas partículas o en presencia de campos electromagnéticos fuertes, requiere el uso de técnicas numéricas avanzadas. En este sentido, la computación clásica enfrenta limitaciones significativas al tratar con la naturaleza cuántica de estos sistemas, lo que motiva la exploración de nuevas estrategias de simulación.

La computación cuántica ofrece algunas ventajas en ciertos problemas con respecto a la computación clásica. Desde sus primeras conceptualizaciones en la década de 1980 por Richard Feynman y David Deutsch, la computación cuántica ha evolucionado significativamente, permitiendo la simulación eficiente de sistemas cuánticos mediante el uso de qubits, superposición y entrelazamiento cuántico. En particular, los algoritmos cuánticos pueden ofrecer mejoras exponenciales en la complejidad computacional, reduciendo el tiempo de ejecución desde $\mathcal{O}(n^k)$ en métodos clásicos—común en la solución de ecuaciones diferenciales parciales y la simulación de sistemas

físicos complejos—hasta $\mathcal{O}(\text{poly}(n))$ en ciertos casos. Esta ventaja, convierte a la computación cuántica en una herramienta ideal para el estudio eficiente de la ecuación de Dirac.

En este trabajo, se explora la parametrización de la ecuación de Dirac utilizando computación cuántica, analizando los enfoques actuales y las ventajas potenciales frente a los métodos clásicos. Se examina el uso de algoritmos cuánticos específicos para lograr la discretización del Hamiltoniano de Dirac. Finalmente, se aplica esta parametrización al átomo de Hidrógeno para estimar su energía en el estado fundamental.

2. Objetivos

La ecuación de Dirac, que combina relatividad especial y mecánica cuántica, es computacionalmente exigente debido a su naturaleza hiperbólica y multidimensional. El objetivo principal de este trabajo es parametrizar la ecuación de Dirac dentro de un circuito cuántico mediante una serie de puertas lógicas cuánticas para aprovechar el paralelismo cuántico. Para ello, se buscará una representación adecuada de los términos de la ecuación en términos de operadores cuánticos, de manera que puedan ser implementados en un sistema de qubits. Como objetivo adicional, se explorará la estimación de la energía del átomo de hidrógeno.

3. Marco Teórico

En este apartado se exponen las herramientas matemáticas necesarias para abordar el Hamiltoniano de Dirac y, al mismo tiempo, se introducen los conceptos fundamentales de la computación cuántica necesarios para su implementación.

3.1. Fundamentos Matemáticos

3.1.1. Teoría de Grupos

Para una mejor comprensión del contexto matemático relativo a la ecuación de Dirac, se van a introducir brevemente conceptos de Teoría de Grupos, explicando los grupos de Lie y sus álgebras asociadas más relevantes en física teórica. Para ello, se va comenzar introduciendo el concepto de grupo.

Definición 1 (Grupo) *Un conjunto de elementos $\{g_i, g_j, g_k, \dots\}$ (conocidos como elementos de grupo) junto a una operación de combinación \circ (conocida como multiplicación de grupo) forman un grupo G si se cumplen los siguientes axiomas:*

1. **Composición interna:** $\forall g_i, g_j \in G, g_i \circ g_j \in G$.
 2. **Asociatividad:** $\forall g_i, g_j, g_k \in G, (g_i \circ g_j) \circ g_k = g_i \circ (g_j \circ g_k)$.
 3. **Elemento unidad:** $\exists e \in G / \forall g_i \in G, e \circ g_i = g_i \circ e = g_i$.
 4. **Elemento inverso:** $\forall g_i \in G, \exists g_i^{-1} \in G / g_i \circ g_i^{-1} = g_i^{-1} \circ g_i = e$.
- (1)

Si además la multiplicación de grupo es conmutativa, se le conoce como abeliano [2].

La estructura geométrica de un grupo surge de la identificación de cada elemento en el grupo con un punto en un espacio topológico: $g_i \rightarrow g(x)$. Este espacio es una *variedad diferenciable* (también conocido como *Manifold*).

Definición 2 (Variedad Diferenciable) *Una variedad diferenciable es un conjunto S que localmente se comporta como un espacio euclidiano, esto es, puede ser cubierto por un conjunto de coordenadas locales denominadas cartas [3]. Formalmente, una variedad diferenciable M^n consta de [4]:*

1. Un espacio topológico T que incluye una colección de conjuntos abiertos U_α que cubren T :

$$\bigcup_{\alpha} U_\alpha = T. \quad (2)$$

2. Una colección de cartas ϕ_α con

$$\phi_\alpha(U_\alpha) = V_\alpha \subset \mathbb{R}^n. \quad (3)$$

Cada carta es un homeomorfismo¹ de U_α a V_α que permiten la construcción de sistemas de coordenadas en los conjuntos abiertos U_α . A una colección de cartas que cubre la variedad se le conoce como atlas.

3. Los homeomorfismos

$$\phi_\alpha \circ \phi_\beta^{-1} : \phi_\beta(U_\alpha \cap U_\beta) \rightarrow \phi_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta), \quad (4)$$

de conjuntos abiertos en \mathbb{R}^n son 1 : 1, invertibles y diferenciables.

Definición 3 (Grupo de Lie) Un grupo de Lie es una variedad diferenciable \mathcal{M}^n que parametriza las operaciones del grupo $g(x)$, con $x \in \mathcal{M}^n$, junto con una operación combinatoria definida por

$$g(x) \circ g(y) = g(z), \quad (5)$$

donde la coordenada $z \in \mathcal{M}^n$ depende de las coordenadas $x, y \in \mathcal{M}^n$ a través de una función diferenciable $z = \phi(x, y)$ [4]. Estos grupos cumplen dos axiomas topológicos:

1. **Diferenciabilidad de la aplicación de composición:** La aplicación de composición del grupo, dada por $z = \phi(x, y)$ y definida por $g(x) \circ g(y) = g(z)$, es diferenciable.

2. **Diferenciabilidad de la aplicación de inversión:** La aplicación de inversión del grupo, dada por $y = \psi(x)$ y definida por $g(x)^{-1} = g(y)$, es diferenciable.

¹Un homeomorfismo es una función de un espacio topológico a otro que satisface tres condiciones: es biyectiva, es continua y su inversa también es continua.

Los *grupos de Lie* proporcionan el marco matemático para describir las *simetrías continuas* de un sistema, es decir, transformaciones que dejan invariante una propiedad física o geométrica. Su relevancia radica en [4]:

- **Transformaciones infinitesimales:** el álgebra de Lie asociado genera las transformaciones elementales que integran todas las simetrías continuas.
- **Conservación de magnitudes:** la invarianza de la acción bajo un subgrupo de Lie produce, por el teorema de Nöether, cantidades conservadas (como el momento lineal para traslaciones, el momento angular para rotaciones, etc.).
- **Clasificación de sistemas:** identificar el grupo de simetría distingue y clasifica modelos físicos (por ejemplo, la invarianza rotacional caracteriza a los sistemas isotrópicos).
- **Estructura de teorías gauge:** las interacciones fundamentales se construyen *exigiendo* que las simetrías internas del sistema sean *locales*, es decir, que los parámetros de transformación dependan de la posición x^μ . Esta exigencia fija casi por completo la forma de la teoría [5].

Antes de continuar, conviene revisar dos teoremas fundamentales de la teoría de representaciones unitarias de grupos, necesarios para la correcta comprensión de la mecánica cuántica.

Teorema 1 (Teorema de Reductibilidad Completa) *Sea $\pi : G \rightarrow U(\mathcal{H})$ una representación unitaria de un grupo G sobre un espacio \mathcal{H} . Cualquier representación (subespacio) π puede ser escrita como una suma directa de representaciones irreducibles:*

$$\pi = \pi_1 \oplus \pi_2 \oplus \dots \oplus \pi_m. \quad (6)$$

Teorema 2 (Reductibilidad en Grupos Conmutativos) *Si G es conmutativo, todas sus representaciones irreducibles son unidimensionales.*

También conviene repasar el concepto de *campo*, pues este sienta las bases de muchos grupos.

Definición 4 (Definición Formal de Campo) *Un campo \mathbb{F} es un conjunto de al menos dos elementos y dos operaciones, adición y multiplicación, que cumple las siguientes propiedades:*

1. $(x + y) + z = x + (y + z), \forall x, y, z \in \mathbb{F}.$
 2. $x + y = y + x, \forall x, y \in \mathbb{F}.$
 3. $\exists 0 / x + 0 = 0 + x = x, \forall x \in \mathbb{F}.$
 4. $\forall x \in \mathbb{F}, \exists -x \in \mathbb{F} / x + (-x) = 0.$
 5. $(xy)z = x(yz), \forall x, y, z \in \mathbb{F}.$
 6. $xy = yx, \forall x, y \in \mathbb{F}.$
 7. $\exists 1 / x1 = 1x = x, \forall x \in \mathbb{F}.$
 8. $\forall x \in \mathbb{F}, \exists x^{-1} \in \mathbb{F} / xx^{-1} = x^{-1}x = 1.$
 9. $(x + y)z = xz + yz, \forall x, y, z \in \mathbb{F}.$
 10. $x(y + z) = xy + xz, \forall x, y, z \in \mathbb{F}.$
- (7)

Dos campos importantes sobre los que vamos a trabajar son el conjunto de números reales \mathbb{R} y el conjunto de números complejos \mathbb{C} [6].

A continuación, se presentan brevemente los grupos necesarios para la comprensión de este trabajo [2, 4, 7, 8]:

Grupos Lineales Generales $GL(n, \mathbb{F})$

Definición 5 (Definición Formal del Álgebra $\mathfrak{gl}(n, \mathbb{F})$)

$$\mathfrak{gl}(n, \mathbb{F}) = \{M \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{F})\}, \tag{8}$$

Estos grupos consisten en matrices no singulares $n \times n$ sobre un campo \mathbb{F} . El determinante de una matriz A con elementos A_i^j viene definido como

$$\det(A) = \sum_i \sum_j \frac{1}{n!} \epsilon^{i_1 i_2 \dots i_n} \epsilon_{j_1 j_2 \dots j_n} A_{i_1}^{j_1} A_{i_2}^{j_2} \dots A_{i_n}^{j_n}, \tag{9}$$

donde $\epsilon^{i_1 i_2 \dots i_n}$ y $\epsilon_{j_1 j_2 \dots j_n}$ son los símbolos de Levi-Civita en forma covariante y contravariante. Las familias de grupos que son de nuestro interés aparecen como subgrupos de $GL(n, \mathbb{F})$ con restricciones adicionales.

Grupo U(1)**Definición 6 (Definición Formal del Álgebra $\mathfrak{u}(1)$)**

$$\mathfrak{u}(1) = \{e^{i\theta} \in \mathbb{C} \mid \theta \in \mathbb{R}\}. \quad (10)$$

Se trata de un grupo de rotaciones de un plano con elementos parametrizados por una única variable, el ángulo de rotación θ . Resulta de utilidad la identificación de los elementos del grupo con vectores unitarios $e^{i\theta}$ en el plano complejo. A este grupo se le denomina $U(1)$ debido a que estos números complejos pueden ser considerados como matrices unitarias de dimensión 1.

Los elementos de este grupo se representan mediante puntos en el círculo unitario, los cuales pueden identificarse con un número complejo unitario $e^{i\theta}$ o bien por un ángulo $\theta \in \mathbb{R}$ donde θ y $\theta + 2\pi N$ (con $N \in \mathbb{Z}$) identifican el mismo elemento del grupo.

Teorema 3 (Clasificación de las Representaciones Irreducibles de U(1)) *Todas las representaciones irreducibles de $U(1)$ son unitarias y están dadas por:*

$$\pi_k : e^{i\theta} \in U(1) \mapsto \pi_k(e^{i\theta}) = e^{ik\theta} \in U(1) \subset GL(1, \mathbb{C}) \simeq \mathbb{C}^*, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (11)$$

Mediante los *Teoremas 1 y 3*, cualquier representación unitaria de $U(1)$ sobre \mathcal{H} se puede escribir como una suma directa de representaciones irreducibles:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{q_1} \oplus \mathcal{H}_{q_2} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{q_n} \equiv \bigoplus_{i=1}^n \mathcal{H}_{q_i}, \quad (12)$$

para un conjunto de enteros q_j donde \mathcal{H}_{q_j} es un subespacio unidimensional de \mathcal{H} isomorfo a \mathbb{C} . En él, $U(1)$ actúa por la representación π_{q_j} como:

$$\pi_{q_j} : U(1) \mapsto U(\mathcal{H}_{q_j}) \simeq U(1), \quad \pi_{q_j}(e^{i\theta}) = e^{iq_j\theta}. \quad (13)$$

Definición 7 (Operador Hermítico) *Un operador $\hat{O} \in \mathcal{H}$ se denomina hermítico (o autoadjunto)*

si cumple que:

$$\hat{O} = (\hat{O}^*)^T \equiv \hat{O}^\dagger \implies \langle \hat{O}f | g \rangle = \langle f | \hat{O}g \rangle. \quad (14)$$

con $|g\rangle \in \mathcal{H}$ y $\langle f| \in \mathcal{H}^*$. Esta propiedad garantiza que las transformaciones cuánticas sean reversibles y conserven la norma de los estados cuánticos. Además, representan observables cuyo valor medido es real [9].

Definición 8 (Operador Carga) El operador carga \hat{Q} para el grupo $U(1)$ es el operador lineal hermítico en \mathcal{H} que actúa multiplicando q_j en cada subespacio \mathcal{H}_{q_j} . Escogiendo una base en la que cada vector pertenezca a uno de los subespacios de \mathcal{H}_{q_j} , podemos escribir el operador carga como

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} q_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & q_n \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Considerando \mathcal{H} como un espacio de estados en mecánica cuántica, el operador \hat{Q} es un observable. Los estados en los subespacios \mathcal{H}_{q_j} serán autovectores de \hat{Q} con autovalor q_j . Un estado general será una superposición lineal de estados de diferentes subespacios \mathcal{H}_{q_j} y \hat{Q} no tendrá un valor bien definido en dicho estado. La acción del grupo $U(1)$ sobre \mathcal{H} viene dada por la multiplicación por i y la exponenciación, esto es,

$$\pi(e^{i\theta}) = e^{i\hat{Q}\theta} = \begin{pmatrix} e^{iq_1\theta} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{iq_2\theta} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{iq_n\theta} \end{pmatrix} \in U(n). \quad (16)$$

La terminología estándar en física es que « \hat{Q} es el generador del grupo $U(1)$ », y determina el álgebra de Lie del grupo $U(1)$, denotado como $\mathfrak{u}(1)$.

Finalmente, se puede demostrar brevemente que como consecuencia de la simetría de este

grupo, la carga q_j se conserva. Partiendo de un tiempo $t_0 = 0$ en un estado en el subespacio \mathcal{H}_{q_j} con un valor definido q_j , no existe ninguna razón para que la evolución temporal la conserve. Esta evolución temporal de estados viene dada por la ecuación de Schrödinger (definida en la **sección 3.1.2**):

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (17)$$

Para un Hamiltoniano independiente del tiempo, la solución a esta ecuación viene dada exponenciando el operador con el operador evolución temporal $\hat{U}(t)$ que se definirá en la **sección 3.1.2**:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(t_0)\rangle, \quad (18)$$

donde el operador evolución temporal se puede realizar una expansión de Taylor como:

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}t + \frac{(-it)^2}{\hbar^2 2!}\hat{H}^2 + \dots \quad (19)$$

Luego, si el Hamiltoniano y el operador carga conmutan, entonces este último conmutará con todas las potencias del hamiltoniano, lo que implica que conmutará con el operador evolución temporal:

$$[\hat{U}(t), \hat{Q}] = \hat{U}(t)\hat{Q} - \hat{Q}\hat{U}(t) = 0 \implies \hat{U}(t)\hat{Q} = \hat{Q}\hat{U}(t), \quad (20)$$

lo que nos permite apreciar como un valor definido q_j en t_0 tendrá el mismo valor en t :

$$\hat{Q} |\psi(t)\rangle = \hat{Q}\hat{U}(t) |\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t)\hat{Q} |\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t)q_j |\psi(t_0)\rangle = q_j\hat{U}(t) |\psi(t_0)\rangle = q_j |\psi(t)\rangle. \quad (21)$$

Esto es un fenómeno general, *si un observable conmuta con el hamiltoniano, se obtiene una ley de conservación*. Esta ley de conservación establece que, si uno comienza en un estado con un valor numérico bien definido para el observable, permanecerá en tal estado sin que el valor cambie. En el Modelo Estándar, $U(1)_Y$ es la simetría de gauge abeliana que origina la interacción electromagnética cuyo campo mediador es el *fotón*.

Grupos SO(2) y SO(3)**Definición 9 (Definición Formal del Álgebra $\mathfrak{so}(n)$)**

$$\mathfrak{so}(n) = \{A \in \mathbb{R}^n | A^T = -A\}. \quad (22)$$

Estos grupos caracterizan las rotaciones en 2 y 3 dimensiones respectivamente. Comenzando con SO(2), se puede demostrar que cualquier rotación se puede expresar como

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = e^{G\theta} \in \text{SO}(2), \quad G = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (23)$$

con G el generador de las rotaciones en dos dimensiones, este fundamenta el álgebra de Lie $\mathfrak{so}(2)$. El desarrollo explícito se encuentra en el **Apéndice B**.

De manera similar al caso anterior², se pueden obtener las matrices generadoras de $\mathfrak{so}(3)$, estas son

$$L_1 = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_3 = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

lo que nos permite escribir cualquier rotación infinitesimal como:

$$R(\theta) = e^{i \sum_{i=1}^3 \theta_i L_i} \in \text{SO}(3). \quad (25)$$

con los conmutadores:

$$[L_1, L_2] = i L_3, \quad [L_2, L_3] = i L_1, \quad [L_3, L_1] = i L_2. \quad (26)$$

²En este caso se considera $A \simeq \mathbb{I} + iL$, con i un coeficiente de normalización.

Estas relaciones se pueden escribir de forma compacta usando el símbolo de Levi–Civita ϵ_{ijk} :

$$[L_i, L_j] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} L_k, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (27)$$

Los coeficientes ϵ_{ijk} son los *constantes de estructura* de $\mathfrak{so}(3)$.

En general, un álgebra de Lie \mathfrak{g} de dimensión d se define como un espacio real de dimensión d con una base $\{T_a\}_{a=1}^d$ y un conmutador

$$[T_a, T_b] = \sum_{c=1}^d c_{ab}^c T_c, \quad (28)$$

donde c_{ab}^c son sus constantes de estructura, antisimétricas en los índices bajos.

Grupo SU(2)

Definición 10 (Definición Formal del Álgebra $\mathfrak{su}(2)$)

$$\mathfrak{su}(2) = \{X \in \mathbb{C}^2 \mid X^\dagger = -X, \text{Tr } X = 0\}. \quad (29)$$

Para un sistema con un espacio de estados de dos dimensiones $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, los observables son operadores hermíticos en \mathbb{C}^2 que corresponden a matrices que pueden describirse como una combinación lineal de cuatro matrices:

$$M = c_0 \mathbb{I} + c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 + c_3 \sigma_3, \quad (30)$$

con $c_j \in \mathbb{R}$, y con los elementos de la base (por convención) las matrices de Pauli:

$$\mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (31)$$

La última tiene dos autovectores:

$$\sigma_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (32)$$

con autovalores ± 1 . En computación cuántica estos autovectores son denominados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ respectivamente, y constituyen los sistemas de qubits debido a su analogía con los bits clásicos (se desarrolla en las **secciones 3.1.2 y 3.4**). Estos autoestados proporcionan una base para \mathbb{C}^2 de modo que un vector arbitrario en \mathcal{H} puede escribirse como

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (33)$$

para $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Se puede comprobar que cualesquiera dos de las matrices de Pauli σ_j y σ_k (con $j \neq k$) conmutan. Esto implica que no existen vectores que sean autovectores simultáneos de dos matrices diferentes. En consecuencia, aunque podamos preparar un estado con un valor perfectamente definido de una sola de las σ_j , ese mismo estado no tendrá un valor bien definido para las otras dos, porque sus operadores correspondientes no conmutan. Esta imposibilidad de «medir al mismo tiempo» dos observables no conmutativas es precisamente la base del *principio de incertidumbre* en mecánica cuántica.

Para extraer su álgebra de Lie, al igual que se ha hecho en el **Apéndice B** con el grupo $SO(2)$, consideramos una expansión de primer orden alrededor de la identidad:

$$U = \mathbb{I}_2 + X + \mathcal{O}(X^2), \quad X \in \mathbb{C}. \quad (34)$$

La condición de unitariedad $(\mathbb{I} + X)^\dagger(\mathbb{I} + X) = \mathbb{I}$ implica

$$X^\dagger + X = 0, \quad (35)$$

es decir, X debe ser una matriz *antihermítica*³. Por otra parte,

$$\det U = \det(I + X) = 1 + \text{Tr } X + \mathcal{O}(X^2) = 1 \implies \text{Tr } X = 0, \quad (36)$$

por lo que U ha de ser además *trazacero*⁴.

Una base habitual se obtiene tomando las matrices de Pauli y definiendo

$$T_i = \frac{\sigma_i}{2}, \quad i \in \{x, y, z\}. \quad (37)$$

siendo T_i los generadores de rotaciones del grupo. Entonces cualquier elemento de $\mathfrak{su}(2)$ se escribe

$$X = i \sum_{i=1}^3 \alpha_i T_i, \quad \alpha_i \in \mathbb{R}. \quad (38)$$

El conmutador de estos generadores reproduce la estructura del álgebra:

$$[T_i, T_j] = \frac{1}{4} [\sigma_i, \sigma_j] = \frac{i}{2} \epsilon_{ijk} \sigma_k = i \epsilon_{ijk} T_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3, \quad (39)$$

Así,

$$[T_i, T_j] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} T_k. \quad (40)$$

Estas mismas relaciones definen el álgebra $\mathfrak{so}(3)$; de hecho $\mathfrak{su}(2) \simeq \mathfrak{so}(3)$, aunque los grupos $SU(2)$ y $SO(3)$ no son isomorfos, sino que $SU(2)$ es su *recubridor doble*.

Definición 11 (Recubridor doble) Sea G y H dos grupos de Lie. Un recubridor doble es un homomorfismo

$$\pi : G \rightarrow H. \quad (41)$$

tal que cada elemento de H corresponde exactamente a dos elementos distintos de G .

³Cumple la misma propiedad que una matriz hermítica pero con signo opuesto.

⁴Esto es, la suma de los elementos de la diagonal principal han de ser 0.

Además, se ha desarrollado en el **Apéndice C** que las matrices que forman este grupo tienen la forma

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}. \quad (42)$$

En el Modelo Estándar, $SU(2)_L$ es la simetría de gauge no abeliana responsable de la interacción débil mediada por los *bosones* \mathbf{W}^\pm y \mathbf{Z}^0 .

Grupo $SL(2, \mathbb{C})$

Definición 12 (Definición Formal del Álgebra $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$)

$$\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C}) = \{X \in \mathbb{C}^2 \mid \text{Tr}(X) = 0\}. \quad (43)$$

El grupo $SL(2, \mathbb{C})$ está formado por todas las matrices 2×2 con entradas complejas y determinante igual a 1. Es decir,

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2, \quad ad - bc = 1. \quad (44)$$

La importancia de este grupo radica en que actúa naturalmente sobre ciertos objetos matemáticos llamados *espinores de Weyl* (ver **sección 3.2.1**).

A diferencia de $\mathfrak{su}(2)$, no requiere que estas matrices sean antihermíticas. Esto significa que los generadores de $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ pueden tener entradas complejas arbitrarias, siempre que la suma de sus elementos diagonales sea cero.

Una base típica de esta álgebra se puede construir a partir de los generadores del grupo $SU(2)$ (37) y considerando también sus versiones multiplicadas por i para generar una base completa sobre \mathbb{C} . Así, una base posible está formada por los seis elementos $\{T_1, T_2, T_3, iT_1, iT_2, iT_3\}$, que permiten generar cualquier matriz de traza cero compleja mediante combinaciones lineales.

Además, al igual que $\mathfrak{su}(2)$ está relacionado con $\mathfrak{so}(3)$, se cumple que $SL(2, \mathbb{C})$ es el

recubridor doble del grupo $SO^+(1, 3)$, que es la parte conexa con la identidad del grupo de Lorentz. Esto quiere decir que a cada transformación de Lorentz le corresponden dos matrices en $SL(2, \mathbb{C})$, lo cual permite describir de forma precisa cómo se transforman los espinores (descritos en la **sección 3.2**) bajo rotaciones y boosts relativistas.

Grupo $SO(1, 3)$ (Grupo de Lorentz)

Definición 13 (Definición Formal del Álgebra $\mathfrak{so}(1, 3)$)

$$\mathfrak{so}(1, 3) = \{M \in \mathbb{R}^4 \mid \eta M^T + M\eta = 0\}. \quad (45)$$

El grupo $SO(1, 3)$ (grupo de Lorentz) describe las transformaciones lineales que conservan el intervalo del espacio-tiempo en relatividad especial. Esto equivale a preservar la forma dada por la métrica de Minkowski:

$$\eta = \text{diag}(1, -1, -1, -1). \quad (46)$$

Una transformación Λ pertenece a $SO(1, 3)$ si cumple:

$$\Lambda^T \eta \Lambda = \eta. \quad (47)$$

Este grupo incluye tanto rotaciones espaciales como *boosts*⁵. Tiene dimensión 6: tres generadores asociados a rotaciones (J_i) y tres a boosts (K_i).

La estructura del álgebra de Lie $\mathfrak{so}(1, 3)$ está determinada por los siguientes conmutadores:

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k, \quad [J_i, K_j] = i\epsilon_{ijk}K_k, \quad [K_i, K_j] = -i\epsilon_{ijk}J_k. \quad (48)$$

Estos generadores pueden representarse mediante matrices reales 4×4 que actúan sobre vectores de Minkowski $(t, x, y, z) \in \mathbb{R}^4$. Los J_i generan rotaciones en planos espaciales y los K_i , boosts en los planos espacio-tiempo.

⁵Estas son transformaciones que cambian entre sistemas de referencia en movimiento relativo.

Su topología presenta múltiples componentes. La componente conectada con la identidad se denota como $SO^+(1, 3)$. Como se ha comentado anteriormente, esta se relaciona con el grupo $SL(2, \mathbb{C})$ mediante un *recubrimiento doble*.

Grupo de Poincaré

Definición 14 (Definición Formal del Álgebra $\mathfrak{iso}(1, 3)$)

$$\mathcal{P} = \mathbb{R}^{1,3} \rtimes SO(1, 3), \quad (49)$$

Por último, para describir completamente las simetrías del espacio-tiempo en física relativista, no basta con considerar solo rotaciones y boosts ($SO(1, 3)$). También es necesario incluir las *traslaciones* en el espacio y el tiempo. El grupo que combina estas simetrías es el *grupo de Poincaré* cuya álgebra $\mathfrak{iso}(1, 3)$ está definida por los siguientes conmutadores:

$$\begin{aligned} [J_{\mu\nu}, J_{\rho\sigma}] &= i(\eta_{\nu\rho}J_{\mu\sigma} - \eta_{\mu\rho}J_{\nu\sigma} + \eta_{\mu\sigma}J_{\nu\rho} - \eta_{\nu\sigma}J_{\mu\rho}), \\ [J_{\mu\nu}, P_\rho] &= i(\eta_{\nu\rho}P_\mu - \eta_{\mu\rho}P_\nu), \quad [P_\mu, P_\nu] = 0, \end{aligned} \quad (50)$$

donde $J_{\mu\nu}$ son los generadores de Lorentz, P_μ los generadores de traslaciones.

3.1.2. Álgebra Tensorial en Mecánica Cuántica

La computación cuántica se fundamenta en operaciones sobre espacios vectoriales (concretamente de Hilbert), por tanto, debemos hacer una breve introducción a todo el marco algebraico lineal, incluyendo los espacios vectoriales, las transformaciones lineales, el concepto de tensor y el producto tensorial.

Espacios Vectoriales

El elemento fundamental de la mecánica cuántica es el espacio de estados sobre \mathbb{C} , que es en esencia un *espacio vectorial*. A continuación se van a explicar los conceptos necesarios para

entender los espacios vectoriales [9, 6, 10] y su importancia en el marco de la mecánica cuántica.

Definición 15 (Espacio Vectorial) Sea V un conjunto y \mathbb{F} un campo. Decimos que V es un espacio vectorial sobre \mathbb{F} si están definidas dos operaciones

$$(+): V \times V \longrightarrow V, \quad (\cdot): \mathbb{F} \times V \longrightarrow V, \quad (51)$$

tales que, para todo vector $u, v, w \in V$ y todo escalar $\alpha, \beta \in \mathbb{F}$, se cumplen los siguientes axiomas:

Cierre y conmutatividad de la suma:	$u + v \in V, \quad u + v = v + u.$	
Asociatividad de la suma:	$(u + v) + w = u + (v + w).$	
Elemento neutro aditivo:	$\exists 0 \in V / u + 0 = u.$	
Inverso aditivo:	$\forall u \in V, \exists -u \in V / u + (-u) = 0.$	(52)
Compatibilidad escalar:	$\alpha(\beta u) = (\alpha\beta)u.$	
Distributividad:	$\alpha(u + v) = \alpha u + \alpha v, \quad (\alpha + \beta)u = \alpha u + \beta u.$	
Neutro escalar:	$1 \cdot u = u.$	

Este conjunto de axiomas proporciona la estructura algebraica necesaria para manipular vectores.

En el contexto de la mecánica cuántica, cada vector representa un estado posible del sistema, y las operaciones estas operaciones permiten combinar y ponderar estos estados.

Definición 16 (Espacio dual) Sea V un espacio vectorial sobre un campo \mathbb{F} . El espacio dual de V , denotado V^* , es el espacio de aplicaciones lineales sobre V :

$$V^* = \{ f : V \rightarrow \mathbb{F} \mid f \text{ es lineal} \}, \quad (53)$$

Es decir, V^* es el conjunto de todas las funciones lineales que, dado un vector $v \in V$, devuelven un escalar $\alpha \in \mathbb{F}$.

Los elementos que componen un campo vectorial son vectores, mientras que los elementos que componen su dual son covectores. En mecánica cuántica normalmente empleamos la notación

de Dirac, esta es, ket para expresar un vector en un espacio vectorial y bra para un covector en su dual:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}, \quad \langle\psi| = \left(\psi_1^* \quad \cdots \quad \psi_n^* \right). \quad (54)$$

En notación de Dirac, las amplitudes $\psi_i \in \mathbb{C}$ codifican probabilidades e interferencias. El producto interno, que se trata más adelante, se define usando estas amplitudes y tiene un papel muy importante en el cálculo de probabilidades de transición entre estados.

Definición 17 (Subespacio Vectorial) *Sea V un espacio vectorial sobre un campo \mathbb{F} . Un subconjunto $W \subseteq V$ se dice subespacio vectorial de V si, con las mismas operaciones de suma y multiplicación escalar de V , cumple:*

$$\forall |u\rangle, |v\rangle \in W, \forall \alpha \in \mathbb{F} : |u\rangle + |v\rangle \in W, \quad \alpha |u\rangle \in W. \quad (55)$$

Definición 18 (Combinación Lineal) *Sea V un espacio vectorial sobre un campo \mathbb{F} . Dado un conjunto finito de vectores $\{|v_1\rangle, \dots, |v_k\rangle\} \subseteq V$ y escalares $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{F}$, se llama combinación lineal de $\{|v_i\rangle\}$ al vector que se obtiene al sumar productos de escalares entre el campo y vectores del conjunto, es decir,*

$$\alpha_1 |v_1\rangle + \alpha_2 |v_2\rangle + \cdots + \alpha_k |v_k\rangle \in V. \quad (56)$$

La combinación lineal es la herramienta que nos permite construir cualquier vector del espacio a partir de un conjunto básico. Esto es, *estamos creando una superposición de estados.*

Definición 19 (Conjunto generador (Spanning Set)) *Sea V un espacio vectorial y $S \subseteq V$. Decimos que S es un conjunto generador de V si cualquier $|v\rangle \in V$ puede expresarse como combinación lineal finita de elementos de S :*

$$|v\rangle = \alpha_1 |s_1\rangle + \alpha_2 |s_2\rangle + \cdots + \alpha_k |s_k\rangle, \quad |s_i\rangle \in S, \alpha_i \in \mathbb{F}. \quad (57)$$

Un conjunto generador minimiza la complejidad al permitir describir todo el espacio con unos pocos vectores básicos.

Empleando las **definiciones 17, 18 y 19** podemos definir un concepto fundamental en el marco de la mecánica cuántica, el concepto de *base* de un espacio.

Definición 20 (Base de un Espacio Vectorial) *Sea V un espacio vectorial sobre un campo \mathbb{F} . Un conjunto finito B de vectores forman una base de V si cumple los siguientes axiomas:*

1. Generación: B es un conjunto generador de V .

2. Independencia lineal: B es linealmente independiente:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i |v_i\rangle = 0 \implies \alpha_i = 0, \forall i \in \mathbb{R}. \quad (58)$$

La base de un espacio vectorial proporciona un sistema de coordenadas único para cada vector. Finalmente, conviene introducir el concepto de operador lineal, que se ha empleado en la **sección 3.1.1** y es necesario para describir las puertas lógicas cuánticas.

Definición 21 (Operador Lineal) *Sean V y W dos espacios vectoriales sobre un mismo campo \mathbb{F} . Se define un operador lineal como una función*

$$\hat{A} : V \longrightarrow W, \quad (59)$$

que satisface, $\forall |v_1\rangle, |v_2\rangle \in V; \alpha, \beta \in \mathbb{F}$, la condición de linealidad:

$$\hat{A}(\alpha |v_1\rangle + \beta |v_2\rangle) = \alpha \hat{A}|v_1\rangle + \beta \hat{A}|v_2\rangle. \quad (60)$$

Los operadores lineales pueden representarse de forma matricial, y modelan cualquier transformación cuántica determinista, incluyendo las puertas de un circuito cuántico. Uno de los operadores lineales de nuestro interés es el *Operador Evolución Temporal*, puesto que este marca la

evolución de todo el sistema cuántico con el tiempo. Pero antes conviene definir la *Ecuación de Schrödinger*, la cual cabe resaltar que no incluye efectos relativistas.

Definición 22 (Ecuación de Schrödinger) Sea \mathcal{H} un espacio vectorial y $\hat{H}(t)$ un Hamiltoniano que describe la energía total del sistema. El estado del sistema en el tiempo t viene dado por un vector $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$, cuya evolución está regida por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (TDSE):

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (61)$$

sujeto a la condición inicial $|\psi(t_0)\rangle$ en un tiempo de referencia t_0 .

Cuando el Hamiltoniano \hat{H} es independiente del tiempo (TISE), las soluciones separables de la ecuación dependiente dan lugar a la forma estacionaria

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad (62)$$

donde $\{|\phi_n\rangle\}$ son los autoestados de energía y E_n los correspondientes autovalores. Cualquier solución general se expresa como combinación lineal de estos autoestados:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} |\phi_n\rangle.$$

Esta última definición es importante en este trabajo puesto que es el modo en el que se va a obtener la energía del átomo de hidrógeno.

Definición 23 (Operador Evolución Temporal) Sea \mathcal{H} un espacio vectorial y $\hat{H}(t)$ el Hamiltoniano que gobierna la dinámica de un sistema. El operador evolución temporal $\hat{U}(t, t_0)$ viene definido como una solución de la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (63)$$

Para un Hamiltoniano independiente del tiempo, se puede obtener mediante integración:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}. \quad (64)$$

También es conveniente revisar los conceptos de *operador normal* y *teorema espectral* para la parametrización de operadores en puertas cuánticas.

Teorema 4 (Teorema Espectral) Sea $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ un operador normal, $AA^\dagger = A^\dagger A$. Entonces existe una matriz unitaria U y una matriz diagonal $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ tales que

$$A = U \Lambda U^\dagger. \quad (65)$$

Las columnas de U son autovectores ortonormales de A y λ_k son los autovalores (que son reales si $A = A^\dagger$, es decir, si A es hermítico). Sea f una función analítica en un entorno del espectro de A . Definimos $f(A)$ mediante la serie de potencias $f(A) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m A^m$. Con la misma unidad U de (65) se verifica

$$f(A) = U f(\Lambda) U^\dagger, \quad f(\Lambda) = \text{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)). \quad (66)$$

Por tanto, $f(A)$ es diagonal en la base propia de A y sus autovalores son $f(\lambda_k)$.

Espacios de Hilbert

Hasta ahora, en la **sección 3.1.1**, se ha estado haciendo referencia a un espacio \mathcal{H} , este es el *Espacio de Hilbert*, y tiene unas características concretas que lo hacen conveniente a la hora de trabajar con estados cuánticos, y es en el que trabajamos en computación cuántica. No obstante, antes de definir qué es un espacio de Hilbert, debemos conocer que es el producto interno o producto escalar [9, 10].

Definición 24 (Producto Interno) Sea V un espacio vectorial sobre \mathbb{C} . Un producto interno (o

producto escalar) es una aplicación

$$(\cdot, \cdot): V \times V \longrightarrow \mathbb{C}, \quad (67)$$

que, dados $|v\rangle, |w\rangle, |u\rangle \in V$ y $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, satisface los siguientes axiomas:

1. **Linealidad en el segundo argumento:** $(|v\rangle, \alpha |w\rangle + \beta |u\rangle) = \alpha (|v\rangle, |w\rangle) + \beta (|v\rangle, |u\rangle)$.
 2. **Conjugación hermítica:** $(|v\rangle, |w\rangle) = (|w\rangle, |v\rangle)^*$.
 3. **Positividad definida:** $(|v\rangle, |v\rangle) \geq 0 \Leftrightarrow |v\rangle = 0$.
- (68)

En notación de Dirac, normalmente expresamos el producto interno como

$$(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) \equiv \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \equiv \int_a^b \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx. \quad (69)$$

El producto interno es uno de los pilares principales de la mecánica cuántica, ya que caracteriza su naturaleza probabilística, y tiene una serie de consecuencias a tener en cuenta:

- **Normalización y probabilidades:** Cada vector de estado debe estar normalizado, esto es, debe cumplir

$$\langle \psi | \psi \rangle \equiv \int |\psi|^2 dx = 1, \quad (70)$$

de modo que el cuadrado de la amplitud $|\langle \phi | \psi \rangle|^2$ se interprete como probabilidad de medir el estado $|\phi\rangle$ a partir del estado $|\psi\rangle$. Esta interpretación no se puede demostrar, ya que es uno de los postulados fundamentales de la mecánica cuántica [11].

- **Ortogonalidad e interferencia:** Dos estados $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$ son ortogonales si

$$\langle \phi | \psi \rangle = 0, \quad (71)$$

lo que garantiza su distinción en una medida y anula cualquier término de interferencia cruzada.

Para una superposición

$$|\chi\rangle = \alpha |\phi\rangle + \beta |\psi\rangle, \quad (72)$$

la probabilidad de proyectar sobre un estado $|\xi\rangle$ viene dada por

$$\begin{aligned} |\langle\xi|\chi\rangle|^2 &= |\alpha \langle\xi|\phi\rangle + \beta \langle\xi|\psi\rangle|^2 = (\alpha \langle\xi|\phi\rangle + \beta \langle\xi|\psi\rangle)(\alpha^* \langle\phi|\xi\rangle + \beta^* \langle\psi|\xi\rangle) \\ &= |\alpha|^2 |\langle\xi|\phi\rangle|^2 + |\beta|^2 |\langle\xi|\psi\rangle|^2 + \alpha\beta^* \langle\xi|\phi\rangle \langle\psi|\xi\rangle + \alpha^*\beta \langle\phi|\xi\rangle \langle\xi|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (73)$$

donde los términos cruzados pueden producir interferencia constructiva o destructiva según la fase relativa de α y β . Cuando $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$ son ortogonales, dichos términos desaparecen y la probabilidad se reduce a la suma de probabilidades individuales:

$$|\langle\xi|\chi\rangle|^2 = |\alpha|^2 |\langle\xi|\phi\rangle|^2 + |\beta|^2 |\langle\xi|\psi\rangle|^2. \quad (74)$$

- **Ortonormalidad:** Para una base ortonormal, es decir, una base cuyos vectores base son ortogonales entre si, tenemos que el producto interno es igual a una delta de Kronecker:

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}. \quad (75)$$

Definición 25 (Norma o Módulo de un Vector) Sea V un espacio vectorial sobre \mathbb{C} . La norma de un vector $v \in V$ se define a partir del producto interno como:

$$\|v\| \equiv \sqrt{\langle v|v\rangle}. \quad (76)$$

La norma de un vector se usa para construir un vector de longitud uno. En mecánica cuántica, este requisito es necesario porque así se garantiza que la probabilidad de medir cualquier estado base es siempre 1.

Habiendo definido lo que es un campo vectorial (**definición 15**) y lo que es el producto

interno (**definición 24**), podemos finalmente definir el espacio de trabajo de la mecánica cuántica, el *espacio de Hilbert*.

Definición 26 (Espacio de Hilbert) Sea \mathcal{H} un espacio vectorial sobre \mathbb{C} . Diremos que \mathcal{H} es un espacio de Hilbert si cumple

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}, \quad (77)$$

es decir, si está dotado de un producto interno.

Por otro lado, es necesario introducir también el *proyector* de un estado. Este, a diferencia del producto interno, no devuelve un escalar, sino una matriz, por lo suele ser considerado un operador [11].

Definición 27 (Proyector) Sean dos espacios vectoriales $V, W \in \mathbb{C}$ dotados de producto interno, y sean dos vectores $|v\rangle \in V$ y $|w\rangle \in W$. Se define el proyector

$$|w\rangle\langle v| : V \longrightarrow W, \quad (78)$$

como el operador lineal que actúa sobre un vector arbitrario $|u\rangle \in V$ según

$$(|w\rangle\langle v|) |u\rangle = |w\rangle \langle v|u\rangle. \quad (79)$$

La *relación de completitud* para una base ortonormal $\{|i\rangle\}$ de un espacio vectorial V se escribe

$$\mathcal{P}(i) = \sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{I}. \quad (80)$$

Su demostración es trivial, sea un vector arbitrario $|v\rangle \in V$. Puesto que $\{|i\rangle\}$ es base ortonormal, podemos descomponer:

$$|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle, \quad v_i = \langle i|v\rangle. \quad (81)$$

Aplicando el operador $\sum_i |i\rangle\langle i|$ sobre $|v\rangle$ obtenemos:

$$\left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right) |v\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i| \left(\sum_j v_j |j\rangle\right) = \sum_{i,j} v_j |i\rangle \langle i|j\rangle = \sum_i v_i |i\rangle = |v\rangle. \quad (82)$$

Como este operador deja invariante a todo $|v\rangle$, debe ser el operador identidad \mathbb{I} [10].

En el formalismo de la mecánica cuántica, el operador proyector aplicado a un estado $|u\rangle$ selecciona la componente alineada con $|v\rangle$, con probabilidad $p(v) = |\langle v|u\rangle|^2$, y colapsa el sistema al subespacio generado por $|v\rangle$. Esto es lo que se conoce como el *postulado del colapso*:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(v) |u\rangle &= (|v\rangle\langle v|) |u\rangle = |v\rangle \langle v|u\rangle, \\ p(v) &= |\langle v|u\rangle|^2 = \langle v|u\rangle \langle u|v\rangle, \\ |u'\rangle &= \frac{\mathcal{P}(v) |u\rangle}{\sqrt{p(v)}} = \frac{|v\rangle \langle v|u\rangle}{\sqrt{|\langle v|u\rangle|^2}} = |v\rangle. \end{aligned} \quad (83)$$

Es decir, al aplicar el proyector $\mathcal{P}(v)$ sobre el estado $|u\rangle$, la probabilidad de obtener el resultado asociado a $|v\rangle$ está dada por $p(v) = |\langle v|u\rangle|^2$, y tras la medición el estado colapsa a $|v\rangle$.

Tensores y Producto Tensorial

Para entender correctamente la computación cuántica, es necesario familiarizarse con el concepto de tensor, en particular con el producto tensorial, una herramienta del álgebra tensorial que permite describir sistemas cuánticos compuestos, como aquellos formados por múltiples qubits.

Definición 28 (Tensor) Sea V un espacio vectorial sobre un campo \mathbb{F} y V^* su espacio dual. Un tensor de tipo (r, s) es una aplicación multilineal

$$T: \underbrace{V^* \times \cdots \times V^*}_r \times \underbrace{V \times \cdots \times V}_s \longrightarrow \mathbb{F}.$$

- Un tensor $(0, 0)$ es un escalar.
- Un tensor $(1, 0)$ es un vector en V , y uno $(0, 1)$ un covector en V^* .

- Un tensor $(1, 1)$ equivale a una matriz.

En el contexto de un espacio de Hilbert, los operadores se pueden expresar como tensores. Por ejemplo, las componentes de un operador lineal \hat{T} en una base ortonormal $\{|e_i\rangle\}$ se definen como:

$$T_j^i = \langle e_i | \hat{T} | e_j \rangle, \quad (84)$$

donde T_j^i representa un tensor de rango 2 que describe la acción de \hat{T} sobre vectores del espacio. Bajo un cambio de base $|e'_i\rangle = A_i^k |e_k\rangle$, donde A_i^k son los elementos de una matriz unitaria de transformación, las componentes de \hat{T} en la nueva base se transforman como:

$$T_j'^i = \langle e'_i | \hat{T} | e'_j \rangle = (A^{-1})_i^k A_j^l \langle e_k | \hat{T} | e_l \rangle = (A^{-1})_i^k A_j^l T_l^k. \quad (85)$$

En el contexto de la computación cuántica, \hat{T} podría ser un operador correspondiente a una puerta cuántica, y los estados de la base podrían ser, por ejemplo, los de la base computacional de un qubit: $|e_0\rangle = |0\rangle$ y $|e_1\rangle = |1\rangle$.

Esta definición nos permite dar paso a definir el *producto tensorial*, necesario para describir los estados compuestos de varios qubits. El producto tensorial es una operación que combina dos espacios vectoriales, como los espacios de Hilbert de qubits individuales, para formar un espacio vectorial mayor que representa el sistema compuesto. Formalmente, dados dos espacios de Hilbert V y W de dimensiones m y n respectivamente, el producto tensorial $V \otimes W$ se define como un nuevo espacio vectorial de dimensión $m \cdot n$, generado por todas las combinaciones lineales de elementos de la forma $v \otimes w$, donde $v \in V$ y $w \in W$, y satisface las propiedades de bilinearidad:

- 1. Linealidad en el Primer Factor:** $(v_1 + v_2) \otimes w = v_1 \otimes w + v_2 \otimes w.$
- 2. Linealidad en el Segundo Factor:** $v \otimes (w_1 + w_2) = v \otimes w_1 + v \otimes w_2.$ (86)
- 3. Homogeneidad:** $(cv) \otimes w = v \otimes (cw) = c(v \otimes w), \forall c \in \mathbb{C}.$

En términos de bases, si $\{v_1, \dots, v_m\}$ es una base de V y $\{w_1, \dots, w_n\}$ es una base de W , entonces

$\{v_i \otimes w_j / i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n\}$ es una base de $V \otimes W$, que tiene dimensión $m \cdot n$ [10].

3.2. Espinores

En mecánica cuántica relativista, un *espinor* es el objeto matemático mínimo capaz de describir partículas de espín 1/2 (fermiones). A continuación, se da una breve introducción a este concepto sin entrar en cálculos complejos, puesto que es un tema que va mucho más allá del objetivo de este trabajo.

3.2.1. Espinores de Weyl

Un espinor de Weyl es un objeto de *dos componentes* que transforma según una de las dos representaciones irreducibles (izquierda o derecha) del grupo de Lorentz, escritas en términos de $SU(2) \otimes SU(2)$. Se denotan como ϕ_L (left) y ϕ_R (right):

$$\phi_L = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \phi_R = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (87)$$

Estos espinores poseen unas propiedades importantes a destacar:

- *Quiralidad*: ϕ_L y ϕ_R poseen helicidad bien definida, esto es espín alineado o anti-alineado con el momento respectivamente.
- *Partículas sin masa*: Un solo espinor de Weyl describe coherentemente fermiones *sin masa* (como neutrinos en el límite $m \rightarrow 0$).
- *Violación de paridad*: Bajo paridad ($x \rightarrow -x, \dots$), $\phi_L \leftrightarrow \phi_R$, por lo que un solo espinor de Weyl rompe la simetría de paridad⁶.

⁶Si en una teoría solo hay un espinor de Weyl, al transformarlo bajo paridad obtendríamos el opuesto, que se encontraría fuera de la teoría.

3.2.2. Espinores de Dirac

Un espinor de Dirac es un objeto de *cuatro componentes* que combina dos espinores de Weyl de quiralidad opuesta:

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi_L \\ \phi_R \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (88)$$

Estos espinores permiten describir fermiones masivos con varias propiedades importantes:

- *Término de masa:* al combinar ϕ_L y ϕ_R se puede añadir un término de masa sin romper la simetría de paridad.
- *Conservación de paridad:* bajo paridad $(t, \mathbf{x}) \rightarrow (t, -\mathbf{x})$ intercambia $\phi_L \leftrightarrow \phi_R$, y al estar ambos presentes la teoría es invariante.

3.3. Ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac describe el comportamiento de las funciones de onda de un solo electrón en la mecánica cuántica relativista. La interacción con los campos electromagnéticos clásicos suele incluirse mediante un potencial en términos de un cuadri-vector según el esquema de acoplamiento mínimo. Dado un estado inicial, la ecuación invariante lorentz resultante dicta la evolución temporal de manera única, aunque en la mayoría de los casos es difícil de resolver, especialmente para potenciales que dependan arbitrariamente del tiempo [12].

Para derivar su ecuación, en su paper original [13], Dirac partió de la ecuación de Klein-Gordon, la cual surge de la *Ecuación de Hamilton-Jacobi* (HJE) (89), una formulación equivalente a otras descripciones del movimiento, como las *Leyes de Newton*, la *Mecánica Lagrangiana* o la *Mecánica Hamiltoniana*, pero con una particularidad que la hace especialmente relevante en el

desarrollo de la mecánica cuántica, con HJE el movimiento de una partícula puede interpretarse en términos de una función de acción que se comporta como una onda [14].

$$\frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + eA_0 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (89)$$

Sin embargo, esta ecuación no es relativista, por lo que para extenderla al marco de la relatividad especial, Oskar Klein y Walter Gordon utilizaron la Ecuación de Hamilton-Jacobi relativista (RHJE). En relatividad, la relación entre la energía y el momento para una partícula libre de masa m viene dada por:

$$W^2 = (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 c^2 + m^2 c^4, \quad (90)$$

donde W es la energía total de la partícula y \mathbf{p} es su momento generalizado en presencia de un campo electromagnético. Esta ecuación representa la versión clásica de la ecuación de Klein-Gordon y describe correctamente la relatividad, pero aún no está formulada en términos cuánticos.

Para obtener una ecuación de onda compatible con la mecánica cuántica, aplicaron la *cuantización canónica*, sustituyendo las variables clásicas de energía y momento por los correspondientes operadores diferenciales cuánticos:

$$\hat{W} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{p}_r \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (91)$$

Al introducir estas sustituciones en la ecuación (90), se obtiene la ecuación de Klein-Gordon en presencia de un campo electromagnético (92), la cual describe partículas relativistas de espín cero.

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{c\partial t} + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 - \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - m^2 c^2 \right] \psi = 0. \quad (92)$$

No obstante, Dirac se percató de que la ecuación en cuestión presentaba problemas, principalmente porque algunas de sus soluciones describían paquetes de onda que se movían como partículas con carga $-e$ mientras que otras soluciones describían paquetes que se movían como partículas con carga $+e$ debido a su naturaleza cuadrática. En el contexto de la época, las antipartículas aún no se

habían descubierto, lo que planteaba una interpretación problemática.

Para resolver este problema, Dirac trató de obtener una ecuación de onda invariante Lorentz equivalente, por lo que planteó una ecuación lineal acorde a la relatividad para el caso en el que no hay campo:

$$(-\hat{p}_0^2 + \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 c^2)\psi = 0, \quad \text{con } \hat{p}_0 = \frac{\hat{W}}{c} = i\hbar \frac{\partial}{c\partial t}, \quad (93)$$

lo que lo llevó a una ecuación lineal de la forma:

$$(\hat{p}_0 + \hat{\alpha}_1 \hat{p}_1 + \hat{\alpha}_2 \hat{p}_2 + \hat{\alpha}_3 \hat{p}_3 + \hat{\beta})\psi = 0, \quad (94)$$

donde $\hat{\alpha}_i \forall i \in \{1, 2, 3\}$ y $\hat{\beta}$ son operadores que no dependen de \hat{p}_0 ni $\hat{\mathbf{p}}$. Estos operadores deben satisfacer unas condiciones para que la ecuación lineal propuesta sea consistente con (92):

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_i^2 &= 1 \quad (\text{reversible}), \\ \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i &= 0 \quad (\text{con } i \neq j) \quad (\text{anticomutación}), \\ \hat{\beta}^2 &= m^2 c^2, \\ \hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i &= 0 \quad (\text{anticomutación}). \end{aligned} \quad (95)$$

Estas relaciones de anticomutación coinciden con las de los generadores de la álgebra de Lie de $SL(2, \mathbb{C})$, recubridor doble del grupo de Lorentz (**sección 3.1.1**). De este modo, la ecuación resultante es explícitamente *invariante bajo transformaciones de Lorentz*. Además, introduciendo las matrices de Pauli (31) que cumplen con las dos primeras condiciones de (95), y extendiéndolas a matrices 4×4 ($\mathbb{I} \otimes \sigma_a$) e introduciendo las matrices $\hat{\rho}_i \forall i \in \{1, 2, 3\}$, las cuales se obtienen intercambiando las segundas y terceras filas y columnas de σ_i obtenemos el siguiente conjunto de matrices:

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\sigma}_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\sigma}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\
\hat{\rho}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\rho}_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\rho}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{96}$$

Tomando a continuación las siguientes definiciones:

$$\hat{\alpha}_1 = \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_1, \quad \hat{\alpha}_2 = \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_2, \quad \hat{\alpha}_3 = \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_3, \quad \hat{\alpha}_4 = \hat{\rho}_3 \equiv \hat{\beta}, \tag{97}$$

las condiciones (95) se satisfacen y Dirac obtuvo la primera formulación de su famosa ecuación⁷ [13]:

$$[\hat{p}_0 + \hat{\rho}_1(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{p}) + \hat{\rho}_3 mc] \psi = 0. \tag{98}$$

Aquí ψ es un *espinor de Dirac* (sección 3.2.2). Finalmente, el Hamiltoniano que nos interesa para este trabajo, el Hamiltoniano para un electrón en un campo electromagnético, se obtiene al sustituir $\hat{p}_0 \rightarrow \hat{p}_0 + \frac{e}{c}A_0$ y $\hat{p} \rightarrow \hat{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(t)$ en la ecuación (98):

$$\left[\hat{p}_0 + \frac{e}{c}A_0 + \hat{\rho}_1 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left(\hat{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(t) \right) + \hat{\rho}_3 mc \right] \psi = 0, \tag{99}$$

donde $\mathbf{A}(t)$ es el potencial vector y $A_0(t)$ es el potencial escalar. El potencial escalar representa un campo eléctrico homogéneo independiente del tiempo, es invariante ante traslaciones y no depende de la posición. Dado además que $\hat{p}_0 = \frac{\hat{W}}{c}$ y $\hat{W} = i\hbar\partial_t$, podemos sustituir $\hat{p}_0 = \frac{i\hbar}{c}\partial_t$ en (99) y

⁷En esta ecuación, $(\boldsymbol{\sigma}, \hat{p})$ es la notación de la época para expresar el producto escalar entre el vector de matrices de Pauli y el vector de momento, para adaptarlo se va a emplear la notación actual $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{p})$.

podemos multiplicar toda la ecuación por c para expresar la energía en términos de \hat{W} :

$$c \left[\frac{i\hbar\partial_t}{c} + \frac{e}{c}A_0 + \hat{\rho}_1 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left(\hat{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(t) \right) + \hat{\rho}_3 mc \right] \psi = 0. \quad (100)$$

Reorganizando y simplificando:

$$i\hbar\partial_t\psi = - \left[eA_0 + c\hat{\rho}_1 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(t) \right) + \hat{\rho}_3 mc^2 \right] \psi. \quad (101)$$

A partir de la *Ecuación de Schrödinger* (61) podemos obtener el Hamiltoniano:

$$\hat{H} = - \left(c\hat{\rho}_1 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(t) \right) + \hat{\rho}_3 mc^2 + eA_0 \right). \quad (102)$$

Para expresar \hat{H} en la convención usual, empleamos $\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \hat{\rho}_1 \hat{\boldsymbol{\sigma}}$, $\hat{\beta} = \hat{\rho}_3$ y $A_0 = \mathbb{I}_4 V(\mathbf{x}, t)$ ⁸.

$$\hat{H} = - \left[\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (c\hat{p} - e\mathbf{A}(t)) + \hat{\beta} mc^2 + e\mathbb{I}_4 V(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (103)$$

Este Hamiltoniano es hermítico y, por tanto, genera una evolución unitaria que conserva la norma del espinor según el producto interno de Hilbert. Dado que multiplicar la ecuación por un factor global -1 no altera la física⁹, podemos redefinir la ecuación de modo que obtenemos el hamiltoniano a parametrizar en el circuito [15]:

$$\hat{H} = \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (c\hat{p} - e\mathbf{A}(t)) + \hat{\beta} mc^2 + e\mathbb{I}_4 V(\mathbf{x}, t). \quad (104)$$

⁸Para mantener la consistencia matricial en la ecuación de Dirac, donde ψ es un espinor de 4 componentes, $V(\mathbf{x}, t)$ debe multiplicarse por la matriz identidad \mathbb{I}_4 .

⁹Esto se explica porque cualquier función de onda es invariante ante una transformación de fase global $\psi \rightarrow e^{i\theta}\psi$; el caso $\theta = \pi$ corresponde exactamente a multiplicar por -1 . Esta simetría de fase global es la que define el grupo $U(1)$ y se relaciona con la conservación de la carga, y se puede aplicar puesto que el hamiltoniano conmuta con el operador carga, es decir, respeta la simetría de fase (**sección 3.1.1**).

3.4. Fundamentos de la Computación Cuántica

La computación cuántica es una disciplina que fusiona principios de la mecánica cuántica con la teoría de la computación, ofreciendo ventajas en ciertos ámbitos frente a la computación clásica. Mientras que los ordenadores clásicos operan con *bits* que representan estados discretos de 0 o 1, los ordenadores cuánticos utilizan *qubits*, que aprovechan propiedades cuánticas como la *superposición* y el *entrelazamiento* para procesar información. A continuación, se describen brevemente los fundamentos de esta [10].

Definición 29 (Qubit) *Un qubit es la unidad básica de información cuántica. Formalmente, es un vector unitario*

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_2 \simeq \mathbb{C}^2, \quad (105)$$

que en la base computacional ortonormal $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ se expresa como una superposición de ambos estados de la base

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \quad (106)$$

con la condición de normalización

$$\langle\psi|\psi\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (107)$$

Teniendo en cuenta que la base computacional está definida por los estados

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (108)$$

Gracias a la condición de normalización, podemos reescribir un estado arbitrario como

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle = e^{i\gamma} \left(\cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right) \equiv \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle, \quad (109)$$

con θ, φ y γ números reales, no obstante, podemos omitir el factor $e^{i\gamma}$ debido a la simetría del grupo

$U(1)$. Los factores θ y φ permiten describir un punto en una esfera tridimensional, esta es conocida como *Esfera de Bloch* (**Figura 1**), y permite visualizar el estado de un qubit.

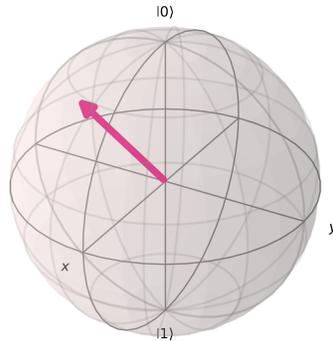


Figura 1: Visualización de un estado arbitrario en la Esfera de Bloch (qiskit).

Con n qubits, el espacio de Hilbert pasa de \mathbb{C}^2 a $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^2)^{\otimes n} \simeq \mathbb{C}^{2^n}$, de modo que la función de onda tiene 2^n amplitudes que evolucionan en paralelo, esto se conoce como *paralelismo cuántico*¹⁰, el cual otorga una ventaja computacional en ciertos problemas con respecto a la computación clásica, como la factorización de números primos con el *algoritmo de Shor* [16], que factoriza números enteros grandes en tiempo polinómico frente al tiempo exponencial requerido por métodos clásicos, la búsqueda de elementos en estructuras de datos con el *algoritmo de Grover* [17], o la simulación de sistemas cuánticos, que es nuestro caso de interés, entre otros.

Las operaciones en un ordenador cuántico se realizan mediante puertas cuánticas aplicadas a los qubits. Estas puertas cuánticas son operadores lineales *unitarios*¹¹ que actúan sobre el espacio de Hilbert de los qubits y pueden representarse mediante matrices unitarias:

$$|\psi'\rangle = U |\psi\rangle, \quad U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{I}. \quad (110)$$

Estas operaciones corresponden a rotaciones en la *esfera de Bloch*, y pueden escribirse como

¹⁰El paralelismo cuántico permite a los ordenadores cuánticos evaluar una función $f(x)$ para muchos valores diferentes de x de manera simultánea gracias a la superposición.

¹¹Esto permite la reversibilidad del circuito. En computación cuántica normalmente se hace un abuso de notación y se expresan los operadores sin el acento circunflejo $\hat{O} \equiv O$.

exponenciales de elementos del álgebra de Lie $\mathfrak{su}(2)$:

$$U = e^{iH}, \quad H = H^\dagger \in \mathfrak{su}(2). \quad (111)$$

donde el operador hermítico H se expresa como una combinación de los generadores del grupo $SU(2)$. Por esta razón, las puertas cuánticas corresponden a rotaciones generadas por X, Y, Z , estas son las matrices de Pauli, que forman una base del álgebra de Lie $\mathfrak{su}(2)$. Cualquier puerta más compleja puede descomponerse como un producto de estas rotaciones básicas como se muestra en el **Apéndice H**.

Un caso especial muy sencillo de implementar es un operador diagonal D . Este actúa sobre la base computacional como

$$D |j\rangle = e^{i\theta_j} |j\rangle, \quad (112)$$

es decir, no mezcla amplitudes, solo modifica las fases de cada base. Este tipo de operadores se puede expresar como

$$D = \sum_j e^{i\theta_j} |j\rangle\langle j|, \quad (113)$$

y puede implementarse mediante una secuencia de puertas $RZ(\theta_j)$ (**Apéndice A**).

Un ejemplo visual de un operador X aplicado sobre un qubit en un circuito cuántico se puede ver en la Figura 2.

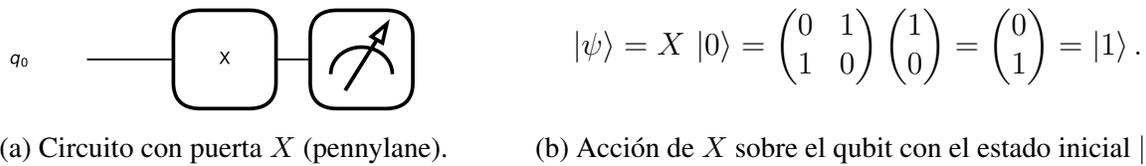


Figura 2: Puerta de Pauli- X aplicada al qubit q_0 .

El *entrelazamiento* se trata de un tipo de correlación que no puede reproducirse con variables aleatorias clásicas. Dos subsistemas A y B —por ejemplo, dos qubits— están entrelazados cuando su estado conjunto $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ no puede factorizarse como un producto tensorial de dos estados

locales ($|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$). En ese caso, la información sobre A y B se codifica de forma irreducible en el sistema global; medir una parte afecta instantáneamente a la otra, sin violar la causalidad relativista (no hay transmisión de información más rápida que la luz).

El concepto de entrelazamiento nos permite distinguir entre dos tipos de estado, los estados *puros* y los estados *mezcla*. Para distinguirlos, es conveniente introducir un nuevo formalismo distinto del de los vectores de estado empleado hasta ahora, el *formalismo de la matriz densidad*.

Definición 30 (Operador Densidad) *Sea un sistema cuántico definido por un conjunto de probabilidades p_i y unos vectores de estado $|\psi_i\rangle$, cumpliendo $\sum_i p_i = 1$, se define el operador densidad como*

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (114)$$

caracterizado por

$$\rho^\dagger = \rho, \quad \rho \geq 0, \quad \text{Tr}(\rho) = 1. \quad (115)$$

Definición 31 (Estado puro) *Un estado puro se define como un estado sin incertidumbre clásica, es decir, solo cuenta con un estado. Este es descrito por el operador densidad de manera que*

$$\rho_p = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (116)$$

y satisface

$$\rho_p^2 = \rho_p \iff \text{Tr}(\rho_p^2) = 1. \quad (117)$$

Definición 32 (Estado mezcla) *Un estado mezcla se define como una distribución de probabilidad clásica $\{p_i\}$ ($p_i \geq 0$, $\sum_i p_i = 1$) sobre estados puros $|\psi_i\rangle$, representada por el operador densidad*

$$\rho_m = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (118)$$

y satisface

$$\rho_m^2 \neq \rho_m, \quad 0 < \text{Tr}(\rho_m^2) < 1. \quad (119)$$

Una forma más sensible de medir el grado de correlación es la *entropía de von Neumann*.

Esta se mide como

$$S(\rho_A) = -\text{Tr}(\rho_A \log_2 \rho_A). \quad (120)$$

$$S(\rho_A) = \begin{cases} 0 & \text{(separable),} \\ \in [0, 1] & \text{(dos qubits entrelazados),} \\ 1 & \text{(entrelazamiento máximo: Estado de Bell).} \end{cases} \quad (121)$$

Un estado de Bell se trata de un estado puro con entrelazamiento máximo. Un ejemplo de estado de Bell es el estado $|\phi^+\rangle$:

$$|\phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (122)$$

el cual se puede reconstruir en un circuito como se muestra en la Figura 3.

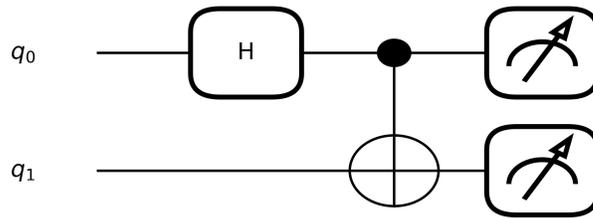


Figura 3: Generación de $|\phi^+\rangle$ mediante Hadamard en q_0 y CNOT($q_0 \rightarrow q_1$).

La parte final de un circuito cuántico es la *medida* (puede visualizarse en las Figuras 2 y 3). Este es un proceso no reversible que afecta directamente al estado del sistema: al medir un observable, el estado colapsa a uno de sus autovalores, y se pierde toda información sobre las demás componentes del estado original. Esta pérdida de coherencia limita la información que puede extraerse de un sistema sin alterarlo.

Cuando un qubit se acopla al entorno su evolución deja de ser perfectamente unitaria: las fases que distinguen las superposiciones se desvanecen y el estado pasa de *puro* a *mezcla*. Este proceso, denominado *decoherencia*, se caracteriza experimentalmente por dos tiempos: T_1 (relajación de energía, $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$) y T_2 (pérdida de coherencia de fase). Si la duración de un circuito se acerca a T_2 , la información cuántica se degrada y el cálculo pierde fidelidad. Por ello la computación

cuántica práctica requiere hardware con $T_{1,2}$ largos y, a gran escala, códigos de corrección de errores que detecten y corrijan las perturbaciones antes de que perturben el resultado.

4. Metodología

En esta sección se describen los métodos empleados para desarrollar e implementar el algoritmo cuántico orientado a resolver la ecuación de Dirac. La metodología combina herramientas informáticas de computación cuántica, como *Qiskit* y *PennyLane*, junto a técnicas matemáticas como la *trotterización*, el *operator splitting* y el *quantum walk*.

4.1. Métodos Matemáticos

El núcleo del algoritmo cuántico se apoya en tres técnicas matemáticas: el *operator splitting*, la *trotterización* y el *quantum walk*. Estas técnicas permiten discretizar la evolución temporal de la ecuación de Dirac y mapearla a operaciones cuánticas.

4.1.1. Trotterización

La Trotterización es la aproximación más sencilla para simular la evolución temporal de un sistema cuántico [18, 19]. Partiendo del operador evolución temporal (**Definición 23**), donde se asume que el hamiltoniano puede escribirse como una combinación lineal de términos locales¹²:

$$H = \sum_{l=1}^L H_l, \quad (123)$$

es decir, cada H_l actúa solo en una parte del sistema total y se consideran hermíticos y pueden ser exponenciados de manera directa

$$e^{-iHt} = e^{-i\sum_l H_l t}. \quad (124)$$

¹²Al hamiltoniano se le conoce como *k-local* cuando actúa sobre m qubits y cada H_l actúa de manera no trivial en un máximo de k qubits del total de m . La mayoría de los hamiltonianos presentes en la naturaleza son *k-locales*.

Puesto que cada término $e^{-iH_l t}$ puede representarse en el circuito, todo el sistema puede representarse también, no obstante, esto solo se puede realizar si cada uno de los hamiltonianos *conmuta* con el resto (demostración en el **Apéndice D**).

Sin embargo, la fórmula de Lie-Trotter (también conocida como Trotter-Suzuki) muestra que para dos operadores A y B que no conmutan ($[A, B] \neq 0$), se cumple que

$$e^{i(A+B)t} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-iA \frac{t}{n}} e^{-iB \frac{t}{n}} \right)^n. \quad (125)$$

(demostración en el **Apéndice E**). Esto implica que aunque dos hamiltonianos locales no conmuten, se pueden llegar a parametrizar en un circuito si se aplican un número n muy alto, es decir, se puede parametrizar

$$e^{-i \sum_{l=1}^L H_l t} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\prod_{l=1}^L e^{-iH_l \frac{t}{n}} \right)^n. \quad (126)$$

Es evidente que no se puede aplicar un número $n \rightarrow \infty$ de veces en un circuito cuántico, tenemos que truncar las series, lo que introducirá un error en la simulación. El hecho de truncar esta fórmula y aplicarla en la simulación de un hamiltoniano es lo que se conoce como *Trotterización*:

$$U(t) = e^{-i \sum_{l=1}^L H_l t} \approx \left(\prod_{l=1}^L e^{-iH_l \frac{t}{n}} \right)^n + \mathcal{O}\left(\frac{t^2}{n}\right), \quad (127)$$

donde $\mathcal{O}\left(\frac{t^2}{n}\right)$ es el *error de Trotter* y n es el número de pasos de la trotterización. Esto implica que para un $t \ll n$, una evolución temporal se puede simular repitiendo n veces el circuito, a mayor n , menor error y más precisión en el resultado.

4.1.2. Operator Splitting

Este método numérico se utiliza para resolver ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, como la ecuación de Dirac, descomponiendo el Hamiltoniano total en términos más simples que se aplican secuencialmente. En este trabajo, se va a aplicar este método para discretizar el tiempo y el espacio [15].

■ Discretización Temporal

Para la discretización espacial, se parte de la solución formal de la ecuación de Dirac:

$$\psi(t_{n+1}) = T e^{-i \int_{t_n}^{t_{n+1}} H(t) dt} \psi(t_n) = e^{-i \Delta t (H(t_n) + \mathcal{T})} \psi(t_n), \quad (128)$$

con T el operador ordenación temporal, $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ el «time step» y $\mathcal{T} = i \overleftarrow{\partial}_{t_n}$ el operador desplazamiento temporal izquierdo. Esta expresión se puede describir empleando la trotterización a primer orden como

$$\psi(t_{n+1}) = e^{-i \Delta t \mathcal{T}} e^{-i \Delta t \sum_{j=1}^N H_j(t_n)} \psi(t_n) = e^{-i \Delta t \mathcal{T}} \prod_{j=1}^N e^{-i \Delta t H_j(t_n)} \psi(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (129)$$

donde ahora tenemos una parametrización del operador desplazamiento temporal izquierdo y N de los distintos hamiltonianos locales. Ahora se van a definir de manera conveniente los diferentes hamiltonianos locales como

$$\begin{aligned} H_1 = H_x &= -i c \alpha_x \partial_x, & H_4 = H_m &= \beta m c^2, \\ H_2 = H_y &= -i c \alpha_y \partial_y, & H_5 = H_V(t) &= e \mathbb{I}_4 V(\mathbf{x}, t), \\ H_3 = H_z &= -i c \alpha_z \partial_z, & H_6 = H_{\mathbf{A}}(t) &= -e \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}(t). \end{aligned} \quad (130)$$

Esto nos permite describir la solución de la ecuación en función de las puertas cuánticas que posteriormente se definirán en la **sección 5**:

$$\begin{aligned} \psi(t_{n+1}) &= e^{-i \Delta t \mathcal{T}} e^{-i \Delta t H_{\mathbf{A}}(t_n)} e^{-i \Delta t H_V(t_n)} e^{-i \Delta t H_m} e^{-i \Delta t H_z} e^{-i \Delta t H_y} e^{-i \Delta t H_x} \psi(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= Q_{\mathbf{A}}(t_n, \Delta t) Q_V(t_n, \Delta t) Q_m(\Delta t) Q_z(\Delta t) Q_y(\Delta t) Q_x(t_n) \psi(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^2), \end{aligned} \quad (131)$$

donde cada Q_i corresponde con cada una de las exponenciales y se omite Q_T . Esta descomposición es muy conveniente porque el efecto de cada operador Q_i puede obtenerse de manera exacta. Para

$a = x, y, z$, definimos los siguientes operadores unitarios normales:

$$S_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta + \alpha_a). \quad (132)$$

Estos operadores transforman las matrices de Dirac a una *representación de Majorana* (**Apéndice F**) mediante el *Teorema Espectral* (4), donde

$$\tilde{\alpha}_a = S_a^\dagger \alpha_a S_a = \beta, \quad (133)$$

es diagonal con autovalores ± 1 . Por tanto, puesto que $S_a S_a^\dagger = \mathbb{I}$, podemos expresar Q_a en función de matrices diagonales aplicando series de Taylor (vistas en **ecuación** (D.5)):

$$\begin{aligned} Q_a &= S_a^\dagger S_a Q_a S_a^\dagger S_a = S_a^\dagger S_a e^{-ic\alpha_a \partial_a} S_a^\dagger S_a = S_a^\dagger S_a \sum_n \frac{1}{n!} (-ic\alpha_a \partial_a)^n S_a^\dagger S_a \\ &= S_a^\dagger \sum_n \frac{1}{n!} (-icS_a \alpha_a S_a^\dagger \partial_a)^n S_a = S_a^\dagger \sum_n \frac{1}{n!} (-ic\beta \partial_a)^n S_a = S_a^\dagger e^{-ic\beta \partial_a} S_a \equiv S_a^\dagger T_a S_a, \end{aligned} \quad (134)$$

donde se ha definido $T_a(\Delta t) = e^{-ic\beta \partial_a}$ como el operador traslación sobre la dirección a . Este último operador traslada los componentes del espinor ϕ y χ una cantidad $\mp c\Delta t \equiv l$ respectivamente. Finalmente, hemos obtenido una expresión de la solución de la ecuación de Dirac con el tiempo discreto (válida para $\Delta t \ll 1$):

$$\begin{aligned} \psi(t_{n+1}) &= Q_A(t_n, c\Delta t) Q_V(t_n, c\Delta t) Q_m(c\Delta t) [S_z T_z(c\Delta t) S_z^{-1}] \\ &\quad \times [S_y T_y(c\Delta t) S_y^{-1}] [S_x T_x(c\Delta t) S_x^{-1}] \psi(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (135)$$

■ Discretización Espacial

Para la discretización espacial, se emplea una malla cúbica en la que en cada celda la función de onda se considera constante. Para ello, el espacio se divide en cubos del mismo tamaño ℓ en

todas las direcciones: $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \ell$. Esto da paso a definir la función de onda discretizada:

$$\psi_\ell(t, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \mathbf{1}_i(x) \mathbf{1}_j(y) \mathbf{1}_k(z) \psi(t, \tilde{\mathbf{x}}_{i,j,k}), \quad (136)$$

donde N_a , es el número de intervalos en cada dirección y las funciones $\mathbf{1}_i(a)$ tienen un valor de 1 en el intervalo i y 0 fuera de este. Luego el término $\tilde{\mathbf{x}}_{i,j,k}$ corresponde con el vector apuntando al centroide de cada elemento de volumen, definido como:

$$\tilde{\mathbf{x}}_{i,j,k} = \left(x_{\min} + \left(i + \frac{1}{2} \right) \ell, y_{\min} + \left(j + \frac{1}{2} \right) \ell, z_{\min} + \left(k + \frac{1}{2} \right) \ell \right), \quad (137)$$

con x_{\min} , y_{\min} y z_{\min} las coordenadas mínimas de la red. Esta discretización nos permite evaluar la condición de normalización en términos de una Suma de Riemann:

$$\int d^3 \mathbf{x} \psi_\ell^\dagger(t, \mathbf{x}) \psi_\ell(t, \mathbf{x}) = 1 \quad \mapsto \quad \ell^3 \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \psi^\dagger(t, \tilde{\mathbf{x}}_{i,j,k}) \psi(t, \tilde{\mathbf{x}}_{i,j,k}) = 1. \quad (138)$$

esto quiere decir que las amplitudes deben respetar $|\psi(t, \tilde{\mathbf{x}}_{i,j,k})| \leq \frac{1}{\sqrt{\ell^3}}$. Para definir ℓ , recurrimos a una condición de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) [20].

Definición 33 (Condición CFL) *Sea v la velocidad característica del problema, Δt el paso temporal y Δx el paso espacial de un esquema numérico explícito para una ecuación en derivadas parciales hiperbólica. Definimos el número de Courant*

$$C = \frac{v \Delta t}{\Delta x}. \quad (139)$$

El número de Courant C indica cuántas celdas espaciales recorre la información física en un único paso temporal. En nuestro caso, la información viaja a velocidad máxima c , de modo que en un paso de tiempo Δt recorre una distancia

$$d = c \Delta t. \quad (140)$$

Para que el método sea estable y convergente, esta distancia no debe exceder el número entero N^* de celdas espaciales de tamaño ℓ :

$$c \Delta t \leq N^* \ell. \quad (141)$$

Si ajustamos la discretización espacial al límite permisible obtenemos:

$$c \Delta t = N^* \ell. \quad (142)$$

En este caso el número de Courant es N^* , y puede ser cualquier número semientero¹³ ($\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots$), sin embargo, a mayor N^* , más grande es Δt y peor resulta la Trotterización, por tanto se suele escoger el primer valor no decimal, esto es $N^* = 1$.

Esto nos permite obtener una definición de la función de onda con el espacio y el tiempo discretizados:

$$\begin{aligned} \psi(t_{n+1}) = & Q_{\mathbf{A}}(t_n, \Delta t) Q_V(t_n, \Delta t) Q_m(\Delta t) [S_z T_z(N^* \ell) S_z^{-1}] \\ & \times [S_y T_y(N^* \ell) S_y^{-1}] [S_x T_x(N^* \ell) S_x^{-1}] \psi(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (143)$$

4.1.3. Quantum Walk

Los *random walks* clásicos (**Apéndice G**) son empleados en física estadística y teoría de la computación: describen desde procesos de difusión hasta algoritmos de muestreo y búsquedas sobre grafos. Los *quantum walks* aprovechan la superposición y la interferencia cuántica para acelerar este proceso. A continuación, se va a describir una breve introducción teórica de estos algoritmos [21].

Sea P el operador momento. Suponiendo un paquete de ondas $|\psi_{x_0}\rangle$ localizado en x_0 ,

¹³Los semienteros surgen de evaluar la función en los puntos centrales de cada celda.

podemos representar un paso de longitud ℓ mediante el operador unitario

$$T_\ell = e^{-\frac{i}{\hbar} P \ell} \quad / \quad T_\ell |\psi_{x_0}\rangle = |\psi_{x_0-\ell}\rangle. \quad (144)$$

Ahora asumamos que la partícula se trata de un fermión, es decir, tiene spin $\frac{1}{2}$. Sea S_z el operador spin en la dirección z :

$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \xrightarrow{\hbar=1} \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \xrightarrow{\hbar=1} -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle. \quad (145)$$

donde se definen¹⁴ $|\uparrow\rangle \equiv |0\rangle$, $|\downarrow\rangle \equiv |1\rangle$. Los fermiones son espinores descritos de manera genérica por $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\tilde{\psi}^\uparrow\rangle & |\tilde{\psi}^\downarrow\rangle \end{pmatrix}^T$. Estos se pueden también expresar como

$$|\psi\rangle = \alpha^\uparrow |\uparrow\rangle \otimes |\psi^\uparrow\rangle + \alpha^\downarrow |\downarrow\rangle \otimes |\psi^\downarrow\rangle, \quad (146)$$

donde el producto tensorial separa los dos grados de libertad, spin y espacio. Puesto que ahora tenemos 2 grados de libertad, y además el autovalor de S_z es $\pm\frac{1}{2}$, podemos expresar el operador de desplazamiento mediante:

$$T_\ell = e^{-2iS_z \otimes P \ell}. \quad (147)$$

Este operador introduce una traslación condicionada de la partícula dependiendo del spin:

$$\begin{cases} |\tilde{\psi}^\uparrow\rangle : |\uparrow\rangle \otimes |\psi_{x_0}^\uparrow\rangle \xrightarrow{T_\ell} |\uparrow\rangle \otimes |\psi_{x_0-\ell}^\uparrow\rangle, \\ |\tilde{\psi}^\downarrow\rangle : |\downarrow\rangle \otimes |\psi_{x_0}^\downarrow\rangle \xrightarrow{T_\ell} |\downarrow\rangle \otimes |\psi_{x_0+\ell}^\downarrow\rangle. \end{cases} \quad (148)$$

Si además el estado inicial no es un autoestado de S_z sino una superposición de estados, el operador de traslación actúa de forma

$$|\psi\rangle = (\alpha^\uparrow |\uparrow\rangle + \alpha^\downarrow |\downarrow\rangle) \otimes |\psi_{x_0}\rangle, \quad T_\ell |\psi\rangle = \alpha^\uparrow |\uparrow\rangle \otimes |\psi_{x_0-\ell}\rangle + \alpha^\downarrow |\downarrow\rangle \otimes |\psi_{x_0+\ell}\rangle. \quad (149)$$

¹⁴Esta notación se emplea para no confundir los estados de la base computacional con estados $|i\rangle$ arbitrarios.

Si en este momento midiésemos el spin de la partícula en la base S_z , esta estaría en el estado $\alpha^\uparrow |\uparrow\rangle \otimes |\psi_{x_0-\ell}\rangle$ localizada cerca de $x_0 + \ell$ con probabilidad $p^\uparrow = |\alpha^\uparrow|^2$ o en el estado $\alpha^\downarrow |\downarrow\rangle \otimes |\psi_{x_0+\ell}\rangle$ localizada cerca de $x_0 - \ell$ con probabilidad $p^\downarrow = |\alpha^\downarrow|^2$. Esta es la base que fundamenta el quantum walk. A continuación, se tratará el quantum walk de una dimensión.

Formalmente, un quantum walk unidimensional se define en el espacio de Hilbert

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_P, \quad (150)$$

donde \mathcal{H}_C es el *coin space*, que toma el rol del espacio de spines, y $\mathcal{H}_P = \{|i\rangle : i = 0 \dots N - 1\}$ el espacio de posiciones de la partícula. La traslación condicional del sistema (147) puede describirse como:

$$S = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \sum_i |i+1\rangle\langle i| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes \sum_i |i-1\rangle\langle i|. \quad (151)$$

Este operador transforma el estado base $|\uparrow\rangle \otimes |i\rangle$ a $|\uparrow\rangle \otimes |i+1\rangle$ y $|\downarrow\rangle \otimes |i\rangle$ a $|\downarrow\rangle \otimes |i-1\rangle$. Cada paso del quantum walk se obtiene aplicando primero una rotación en el *coin-space*, al que se le llama por analogía al random walk clásico como *coin-flip* C , con ciertas probabilidades asignadas a cada estado (en nuestro caso de interés, todos los estados son equiprobables), y a continuación la traslación condicional S . Por tanto, el random walk se puede expresar mediante un operador de desplazamiento U como

$$U = S (C \otimes \mathbb{I}). \quad (152)$$

4.2. Métodos Informáticos

Para la construcción, simulación y optimización de los circuitos cuánticos necesarios en este trabajo, se utilizan dos bibliotecas de código abierto: Qiskit y PennyLane.

- **PennyLane** es una biblioteca de Python especializada en programación cuántica diferenciable. Su diseño permite ejecutar y entrenar programas cuánticos en diversos backends, integrándose con frameworks de machine learning como NumPy's autograd, JAX, PyTorch y TensorFlow. Penny-

lane gestiona automáticamente la comunicación con dispositivos, la compilación de circuitos y la elección de estrategias para el cálculo de gradientes, lo que facilita la creación de pipelines híbridos cuántico-clásicos [22]. Todo este trabajo se hace empleando esta biblioteca.

- **Qiskit** es una librería desarrollada por IBM, diseñada para construir, manipular y transpilar circuitos cuánticos con un alto rendimiento. Según pruebas extensivas realizadas por IBM, Qiskit se destacó como el SDK (kit de desarrollo de software) cuántico más eficiente entre los evaluados. En particular, Qiskit completó más pruebas que cualquier otro SDK. Adicionalmente, Qiskit está diseñado para ejecuciones potentes en ordenadores cuánticos de IBM y también soporta hardware de proveedores externos, lo que amplía su aplicabilidad y flexibilidad en diferentes entornos de computación cuántica [23, 24]. A pesar de que todo el algoritmo se desarrolle usando PennyLane, en este trabajo se emplea Qiskit para algunas visualizaciones, debido a que pone más facilidades en ese aspecto.

5. Implementación

La ecuación (143) muestra que la evolución en un paso Δt puede factorizarse en seis operadores unitarios. En esta sección se detalla el mapeo explícito de cada uno a puertas cuánticas elementales, siguiendo el esquema de *Fillion-Gourdeau et al.* [15].

Para comenzar, el estado $|\psi_n\rangle$ de n qubits es un vector en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}_n = \bigotimes_i^n \mathcal{H}_i$ de dimensión 2^n . Este estado puede escribirse como

$$|\psi_n\rangle = \sum_{s_1=0}^1 \cdots \sum_{s_n=0}^1 \alpha_{s_1 \dots s_n} \bigotimes_{l=1}^n |s_l\rangle, \quad (153)$$

con $\alpha_{s_1 \dots s_n}$ coeficientes complejos y los índices $s_1 \dots s_n$ números binarios. Estos coeficientes cumplen la condición de normalización:

$$\sum_{s_1=0}^1 \cdots \sum_{s_n=0}^1 |\alpha_{s_1 \dots s_n}|^2 = 1. \quad (154)$$

Es conveniente dividir el espacio de Hilbert de la función de onda en 4 partes: $\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_{n_x} \otimes \mathcal{H}_{n_y} \otimes \mathcal{H}_{n_z}$, siendo el primero \mathcal{H}_S el correspondiente al grado de libertad de los espinores y los otros tres la dependencia espacial de la función de onda. Puesto que hay cuatro componentes del espinor, se necesitará $2^n = 4 \rightarrow n = \log_2 4 = 2$ qubits para mapearlos. Por lo tanto, el estado del registro cuántico puede escribirse como

$$|\psi_n\rangle = \sum_{S=1}^4 \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \alpha_{S,i,j,k} |S\rangle \otimes |i, j, k\rangle, \quad (155)$$

con i, j, k recorriendo todo el espacio y

$$|S\rangle = |s_1\rangle \otimes |s_2\rangle, \quad (156)$$

siendo $s_1 = \phi, \chi$ el término que define el espinor de Weyl y $s_2 = 1, 2$ el término que define el elemento de cada espinor. Es decir, atendiendo a la discretización temporal vista en la **sección 4.1.2**, hemos conseguido mapear la función de onda como:

$$\begin{cases} \mathbf{1}_i(x) \mapsto |i\rangle, \\ \mathbf{1}_j(y) \mapsto |j\rangle, \\ \mathbf{1}_k(z) \mapsto |k\rangle. \end{cases} \quad \sqrt{\ell^3} \psi_S(t, \tilde{\mathbf{x}}_{i,j,k}) \mapsto \alpha_{S,i,j,k}. \quad (157)$$

Antes de continuar, es necesario aclarar que en toda la implementación se van a emplear unidades atómicas: $\hbar = m_e = c = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$. Además, se va a considerar que no hay campo magnético externo, por lo que $\mathbf{A} = 0$, de modo que no se empleará el operador Q_A .

5.1. Inicialización en el Estado Fundamental 1s

El primer paso antes de adentrarse en el propio algoritmo es inicializar el registro a un estado relevante $\psi_{S,\text{init}}(\mathbf{x})$, para lo que se ha de emplear los coeficientes $\alpha_{S,i,j,k}$ que codifican la función de onda. En este caso, se busca obtener una representación discreta del estado fundamental del átomo

de hidrógeno. Esta representación se basa en la forma analítica de la función de onda del estado 1s. En unidades atómicas, la función de onda del estado 1s del átomo de hidrógeno está dada por una *función de Slater* (Slater-type orbitals) [25]:

$$|\psi_{nlm}\rangle = Nr^{n^*-1}e^{-\frac{(Z-s)r}{n^*}}Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (158)$$

donde n, l, m son los números cuánticos principal, orbital y magnético, r, θ, ϕ son las coordenadas esféricas del electrón, Z es el número atómico, s la constante de apantallamiento, n^* el número cuántico principal efectivo, N la constante de normalización radial e $Y_{lm}(\theta, \phi)$ los armónicos esféricos. Sin entrar en el desarrollo, la función de onda para el orbital 1s viene dada por [9]:

$$|\psi_{1s}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}. \quad (159)$$

donde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ es la distancia radial al núcleo. Esta función describe una distribución esféricamente simétrica, con máxima densidad de probabilidad en $r = 0$ y decaimiento exponencial con la distancia. Se muestra en **Figura 4** fijando $z = 0$ para visualizarla bidimensionalmente.

Para representar numéricamente esta función de onda, se discretiza el espacio tridimensional como se ha descrito en la **sección 4.1.2** en una malla cúbica uniforme de $N \times N \times N$ puntos dentro de un dominio de tamaño finito $[-L, L]^3$ (en este trabajo se escoge $L = 10$). El número de puntos N se define en función de la dimensión de la parte espacial del registro, este viene dado como $N = 2^d$ siendo d el número de qubits por cada dimensión, a mayor d más resolución pero más coste computacional. En cada punto de esta malla, se evalúa la función:

$$\psi(x_i, y_j, z_k) = \sqrt{\ell^3}e^{-r_{ijk}}, \quad r_{ijk} = \sqrt{x_i^2 + y_j^2 + z_k^2 + \varepsilon}. \quad (160)$$

donde $\varepsilon \ll 1$ es un pequeño valor introducido para evitar posibles indeterminaciones en el origen y el término de normalización pasa de $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$ a $\sqrt{\ell^3}$ al discretizar el espacio, no obstante se suele escoger $\ell = 1$ para hacer celdas de longitud 1.

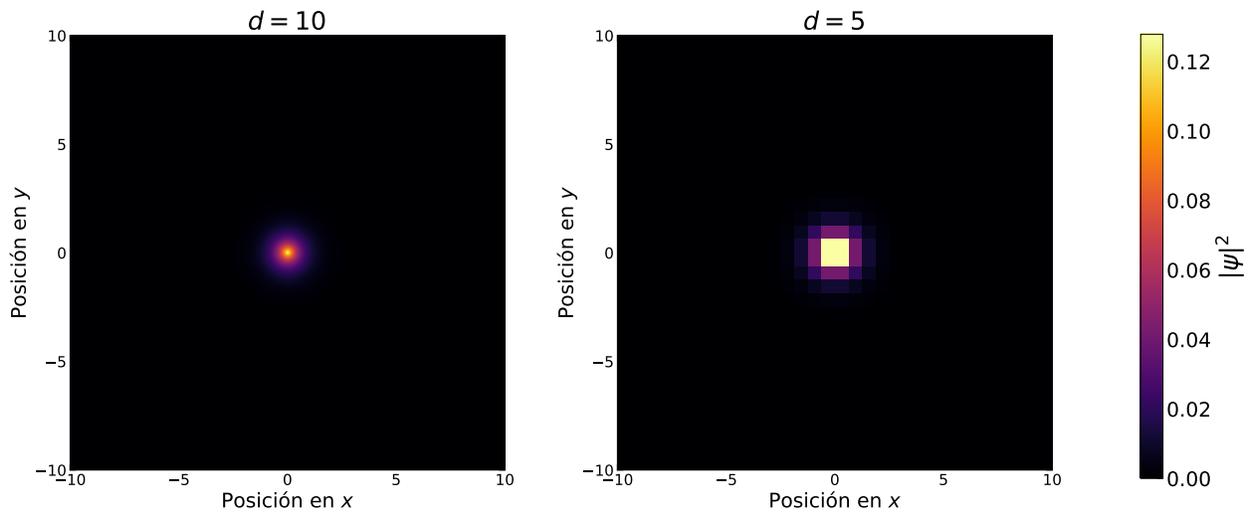


Figura 4: Distribución de probabilidad del estado $|\psi_{1s}\rangle$ para 10 y 5 qubits respectivamente.

Una vez se tiene el valor de la función de onda en cada punto discreto, se inicializa el registro de modo que $|S\rangle = |00\rangle$ y $|i_1 \dots i_n\rangle = |\psi_{1s}\rangle$ mediante las funciones `BasisState()` y `StatePrep()` de pennylane.

5.2. Operador Traslación

Iniciando el algoritmo, debemos comenzar aplicando el operador traslación, que describe los operadores Q_x , Q_y y Q_z . Para ello, partimos del desarrollo realizado en la **sección 4.1.2**, donde se ha obtenido una expresión para el operador traslación tal que

$$U = S_a T_a (N^* \ell) S_a^{-1}. \quad (161)$$

Este operador se puede parametrizar eficientemente empleando un Quantum Walk [15].

Para ello, como se ha desarrollado en la **sección 4.1.3**, tenemos que expresar el operador desplazamiento U en función de un operador moneda C y un operador de traslación condicional S como se muestra en la ecuación (152). El coin-flip se debe realizar únicamente en los registros de

los espinores, esto es en $|S\rangle$, y debe representar la expresión vista en (132):

$$S_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & \sigma_a \\ \sigma_a & -\mathbb{I}_2 \end{pmatrix}. \quad (162)$$

Esta puerta se puede descomponer en:

$$S_a = C(\sigma_a)(H \otimes \mathbb{I}_2)C(\sigma_a), \quad (163)$$

donde $C(\sigma_a)$ es una puerta σ_a controlada sobre cada eje ($CNOT$, CY y CZ , se pueden ver en forma matricial en el **apéndice A**), y H es una puerta Hadamard. Estas se muestran en la **Figura 5**.

Se puede comprobar fácilmente que esta descomposición se cumple, por ejemplo, para $a = x$:

$$\begin{aligned} S_x = CNOT \cdot (H \otimes \mathbb{I}_2) \cdot CNOT &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & \sigma_x \\ \sigma_x & -\mathbb{I}_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

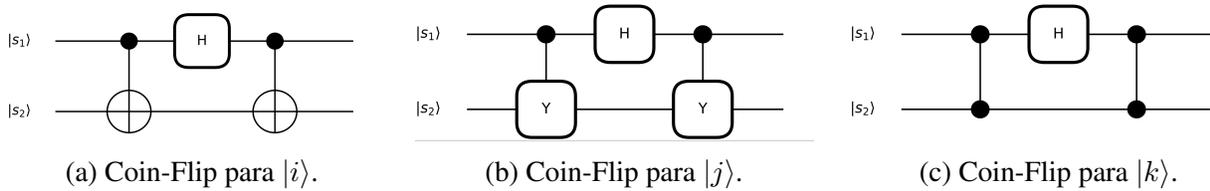


Figura 5: Parametrización de los Coin-Flip.

Con ello, se ha definido la parametrización del operador C , nos restaría parametrizar la

propia traslación condicionada $T(N^*l)$, que actúe como se ha visto en (151), es decir:

$$\begin{aligned}
 T_x |\phi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j, k\rangle &= |\phi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i \ominus l, j, k\rangle, \\
 T_x |\chi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j, k\rangle &= |\chi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i \oplus l, j, k\rangle, \\
 T_y |\phi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j, k\rangle &= |\phi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j \ominus l, k\rangle, \\
 T_y |\chi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j, k\rangle &= |\chi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j \oplus l, k\rangle, \\
 T_z |\phi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j, k\rangle &= |\phi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j, k \ominus l\rangle, \\
 T_z |\chi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j, k\rangle &= |\chi\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |i, j, k \oplus l\rangle,
 \end{aligned}
 \tag{164}$$

donde l es el número de celdas de la malla que se avanzan, que coincide con el número de Courant N^* escogido anteriormente, e $|i, j, k\rangle$ recorriendo todos los qubits de la parte espacial del registro, es decir, los $3 \cdot d$ qubits. Para ello se va a emplear el quantum walk descrito por *Douglas y Wang* [26] que utiliza únicamente puertas Toffoli, de modo que se puede expresar la traslación en función de otros dos operadores:

$$T = I |1\rangle + D |0\rangle,
 \tag{165}$$

siendo I el operador Incremento, D el operador Decremento. Ambos operadores se construyen igual, pero cambiando el valor de control (I tiene el valor 1 de color negro y D el valor 0 de color blanco)¹⁵. Estos dos operadores pueden visualizarse en la **Figura 6**.

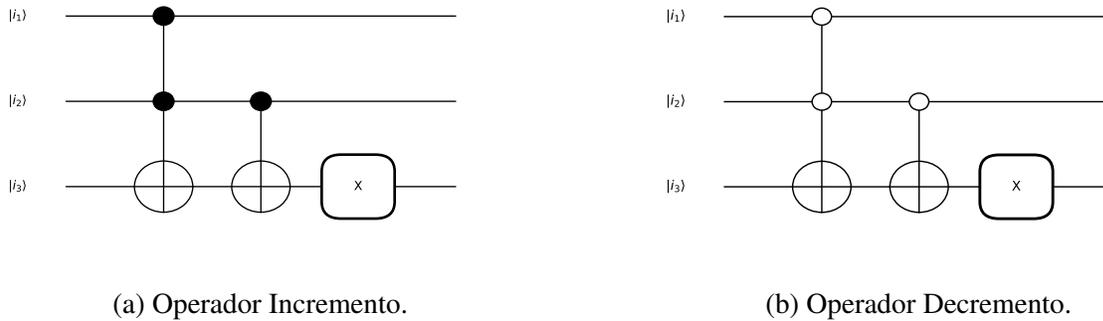


Figura 6: Operadores Incremento y Decremento de la traslación.

¹⁵Para cambiar el valor de control basta con rodearlo con dos puertas X .

Sin embargo, aquí no estamos teniendo en cuenta el resultado del flip-coin, para ello el qubit $|s_1\rangle$ también debe de controlar el paso, este lo hace añadiendo un control con valor 0 en la puerta I y un control de valor 1 en la puerta D para cumplir con lo visto en (164), se puede ver todo el operador T en la **Figura 7**.

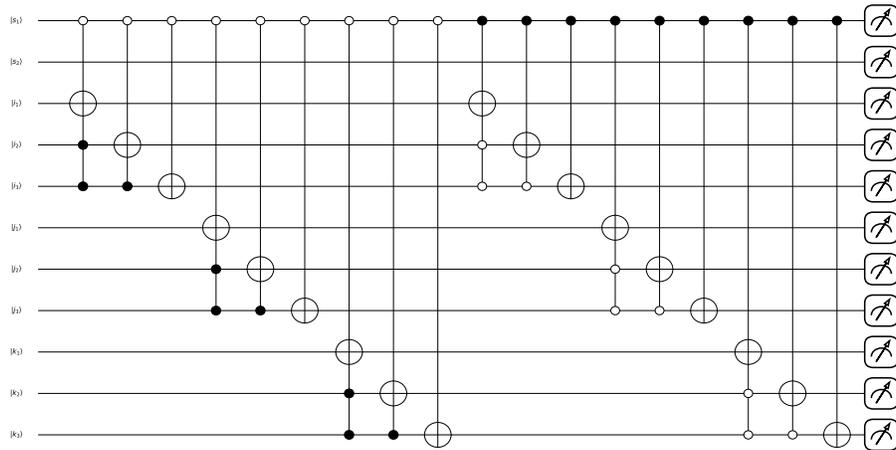


Figura 7: Operador T actuando para $d = 3$.

5.3. Operador Masa

Respecto al operador correspondiente a la masa, hemos visto que

$$Q_m(\Delta t) = e^{-i\Delta t\beta mc^2}, \tag{166}$$

con β es diagonal. Que esta fase sea diagonal implica que la implementación de Q_m es directa mediante una puerta RZ sobre el qubit $|s_1\rangle$ correspondiente a los espinores:

$$Q_m(\Delta t) = RZ(2mc^2\Delta t) \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \dots \otimes \mathbb{I}_2, \tag{167}$$

donde se añade el factor 2 a la fase para compensar el factor $\frac{1}{2}$ de la puerta de rotación.

5.4. Operador Potencial

En la mecánica cuántica el átomo de hidrógeno se define como un electrón que siente el potencial electrostático de un protón, por tanto para parametrizar correctamente este átomo debemos tener en cuenta este potencial, de lo contrario estaríamos parametrizando un electrón libre. Para ello, se debe parametrizar el potencial de Coulomb:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \xrightarrow{\text{U.Atom.}} -\frac{1}{r} \approx -\frac{1}{\sqrt{r^2 + \epsilon}}, \quad (168)$$

donde de nuevo se añade un término $\epsilon \ll 1$ con el fin de que no dé indeterminaciones en el origen. La aplicación de este potencial es muy similar a lo visto en la **sección 5.1** al inicializar el registro en el orbital 1s, puesto que del mismo modo se va a calcular el potencial en cada punto de la malla:

$$V(r) = -\frac{1}{\sqrt{x_i^2 + y_j^2 + z_k^2 + \epsilon}}, \quad (169)$$

para posteriormente aplicar el operador Q_V . Este, puesto que el potencial depende solo de la posición, se puede representar como un operador diagonal en la base $|i, j, k\rangle$ por el Teorema Espectral (**Teorema 4**), es decir, asumiendo $d = 3$:

$$Q_V = \sum_{i,j,k} e^{-iV(r_{i,j,k}\Delta t)} |i, j, k\rangle\langle i, j, k| = \begin{pmatrix} e^{-iV_{000}\Delta t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-iV_{001}\Delta t} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-iV_{777}\Delta t} \end{pmatrix}. \quad (170)$$

Esta matriz se puede implementar mediante la función `QubitUnitary()` de `pennylane`, que dada una matriz devuelve una puerta, no obstante, se puede parametrizar cualquier matriz en función de las puertas X, Y, Z tal y como se puede ver en el **Apéndice H**.

Con todo ello, ya tenemos todo el circuito necesario para medir la energía del átomo de hidrógeno, este se puede visualizar completo en la **Figura 8**.

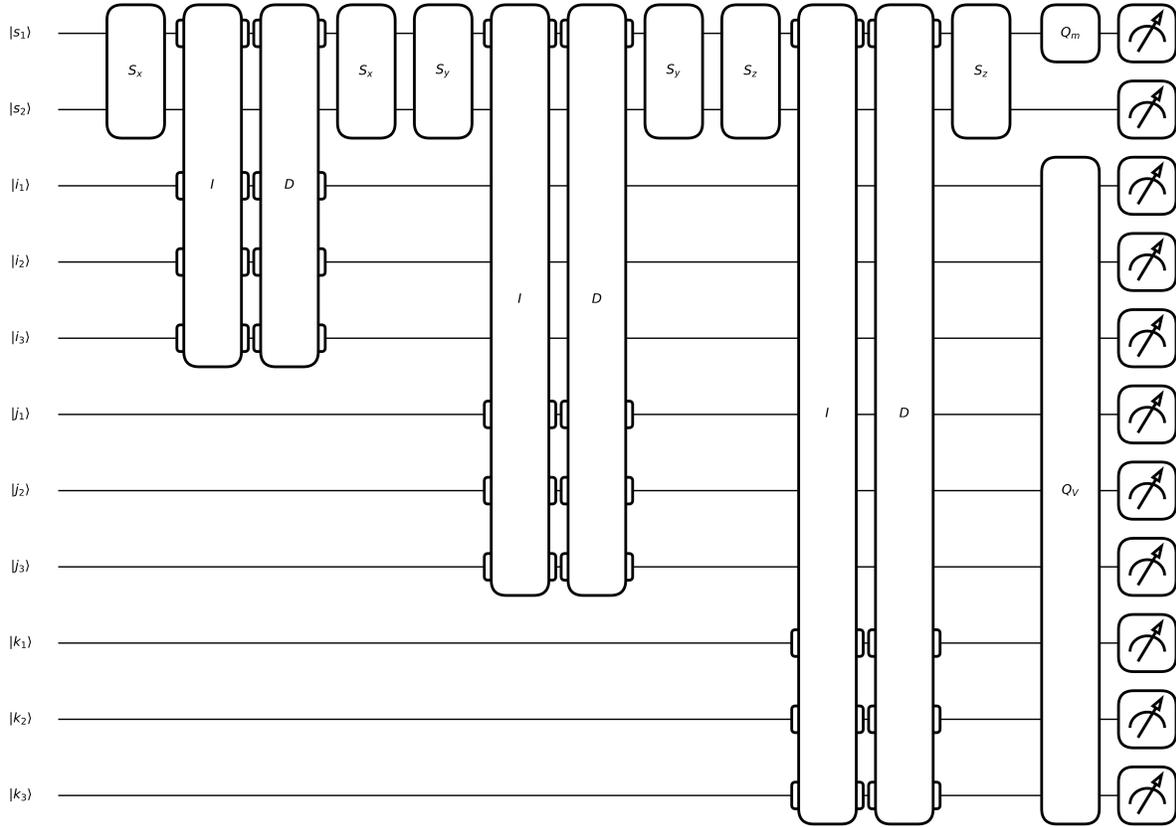


Figura 8: Circuito Cuántico Completo.

5.5. Medición de la Energía

El circuito termina devolviendo el estado final $|\psi(T)\rangle$. Si la función de onda es autoestado del hamiltoniano, la evolución temporal se trata de un cambio de fase, es decir:

$$\langle\psi(0)|\psi(T)\rangle = \langle\psi(0)| e^{-iET} |\psi(0)\rangle = e^{-iET} \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = e^{-iET}, \quad (171)$$

con $|\psi(0)\rangle \equiv |\psi_{1s}\rangle$, es decir, la fase es $-ET$, por lo que podemos obtener la energía como:

$$E = -\frac{\arg(\langle\psi(0)|\psi(T)\rangle)}{T}. \quad (172)$$

En este caso se va a considerar que la función de onda es un autoestado del hamiltoniano. En el caso contrario, habría que recurrir a otras subrutinas para aproximar la energía.

6. Resultados

Se ha evaluado el circuito para configuraciones de 8, 11 y 14 qubits, variando de uno en uno los qubits asignados al registro espacial (2, 3 y 4 respectivamente) con unos valores fijos de $\Delta t = 0,001$ y $\varepsilon = 10^{-6}$.

En este análisis se estudiará la tendencia de los datos con el objetivo de estimar su convergencia mediante un modelo de media móvil (Moving Average), ya que esta nos permitirá observar con mayor claridad si la energía simulada converge hacia un valor estable, eliminando oscilaciones numéricas propias del entorno simulado.

Además, cabe mencionar que al inicio de la ejecución, independientemente del número de qubits, los valores de energía fluctúan enormemente, por lo que no se visualizan en las gráficas con el fin de tener una mejor visualización de la distribución de datos. Además, estos no afectan al estadístico en cuestión, pues solo se tendrá en cuenta de la media móvil estabilizada, por lo que no son relevantes en el análisis.

8 Qubits

El circuito de 8 qubits es el más simple de todos. Este se compone por 2 qubits para el registro de espinores y 6 para el registro espacial (2 por eje). En este caso tenemos una resolución espacial de 4 posiciones en cada dirección (2^2), lo que implica que existen un total de 64 posiciones posibles en la malla en las que se analiza la energía. A pesar de ser el experimento con menor resolución, tras 2 000 pasos en la trotterización las mediciones parecen converger en $-0,688$ Ha como se puede apreciar en la **Figura 9**, lo que da un error relativo de 0,376.

Por otro lado, a diferencia de los otros dos experimentos, esta distribución tiene una alta tendencia a valores negativos en el inicio del experimento, pero a partir de aproximadamente 700 repeticiones en la trotterización se estabiliza en el intervalo $[0,5, -2]$.

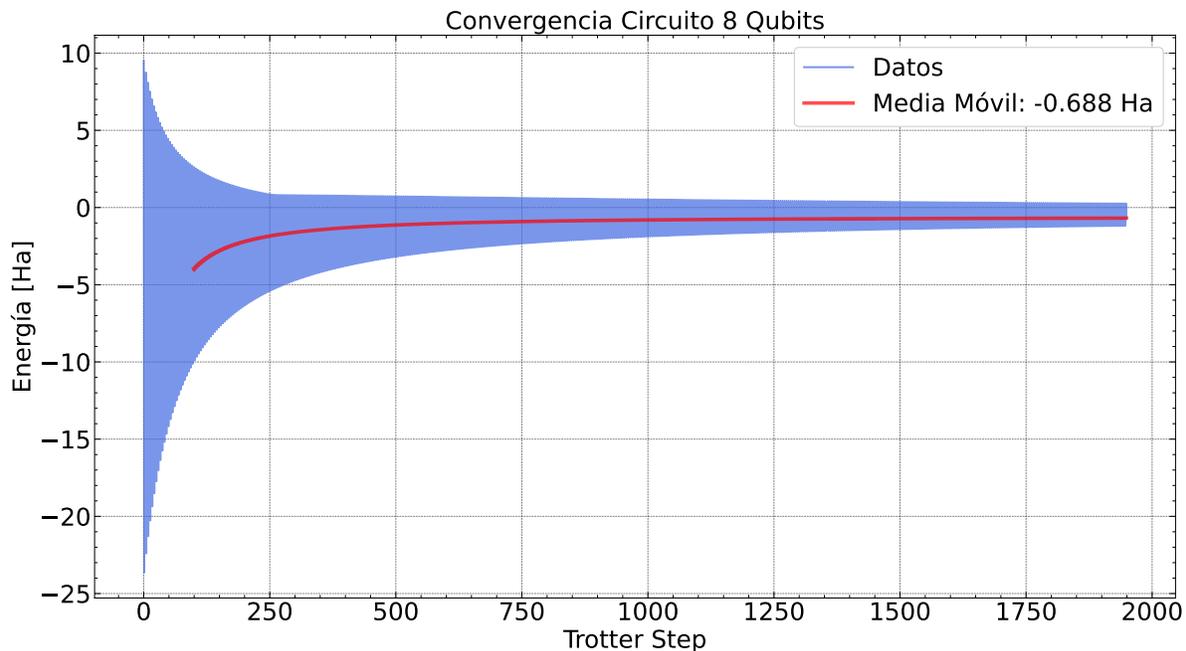


Figura 9: Distribución de los datos obtenidos con el circuito de 8 qubits.

11 Qubits

Aumentando un qubit más el registro espacial el algoritmo consta de 8 posiciones en cada dirección, esto es 512 posiciones posibles para analizar la energía. Como es de esperar, con este experimento se obtiene un valor más preciso de la energía, puesto que los valores parecen converger en $-0,495$ Ha como se puede apreciar en la **Figura 10**, lo que da un error relativo de 0,01, que es la estimación más precisa de estos experimentos.

14 Qubits

Finalmente, aumentando otro qubit más el registro espacial el algoritmo consta con 16 posiciones en cada dirección, lo que equivalen a 4 096 posiciones posibles en la malla tridimensional. En este caso la ejecución del circuito se hace mucho más lenta que en los experimentos anteriores, puesto que se están realizando cálculos de matrices de dimensión 16 384 (comparadas con las de dimensión 2 048 para 11 qubits y 256 para 8 qubits), lo que afecta directamente al consumo de memoria. Es por ello que no se ha podido realizar el mismo número número de Trotter Steps

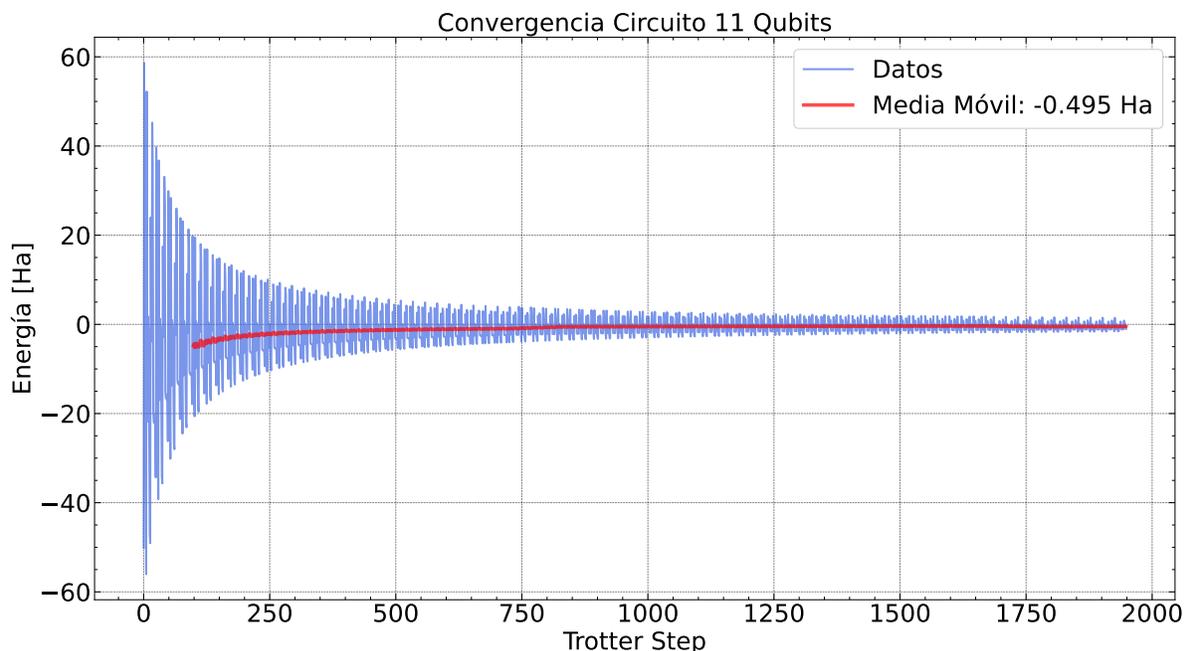


Figura 10: Distribución de los datos obtenidos con el circuito de 11 qubits.

que para los dos casos anteriores, por lo que el valor obtenido podría acercarse más al real si se aumentase el número de pasos.

Sin embargo, a pesar de lo anterior, la distribución de datos parece converger entorno a los $-0,7$ Ha, lo que resulta en un error relativo de 0,4, que es una buena aproximación al valor real.

Se trató de medir resultados para el circuito de 17 qubits para una mejor resolución. Este circuito permitiría 32 posiciones en cada dirección, lo que equivaldría a 32 768 posiciones en la malla. Sin embargo, esta configuración consistía en operaciones de matrices de orden 131 072, por lo que tanto la RAM como la VRAM que se empleó en la medición colapsaron y no pudo ser posible.

Una vez mostrados los resultados en unidades de hartree, se puede obtener el valor en electronvoltios mediante el factor de conversión mostrado en la **ecuación** (173). Los valores obtenidos de la energía en ambas unidades se muestran en la **Tabla 1** junto con los valores reales.

$$1 \text{ Ha} = 27,2114 \text{ eV} \quad (173)$$

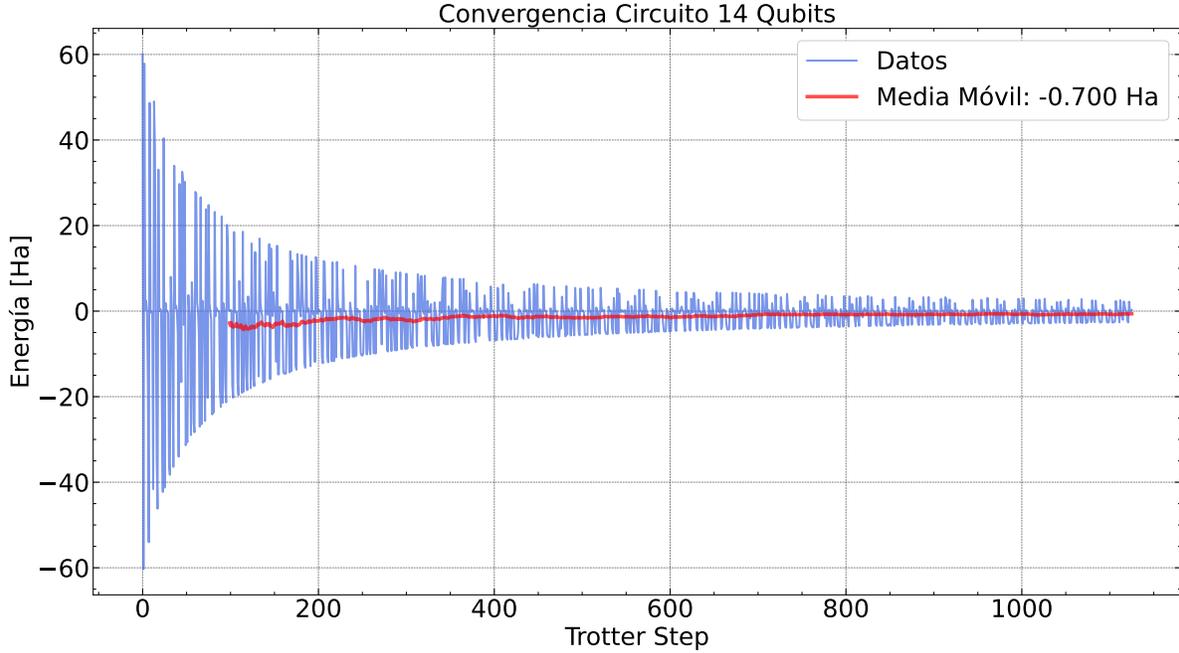


Figura 11: Distribución de los datos obtenidos con el circuito de 14 qubits.

Energía	Valor Real	8 Qubits	11 Qubits	14 Qubits
Ha	-0.5	-0.688	-0.495	-0.7
eV	-13.6	-18.721	-13.47	-19.048

Cuadro 1: Energías Obtenidas en hartrees y electronvoltios junto al valor real.

7. Conclusiones

En este trabajo se ha considerado una función de Slater, que es no relativista, para parametrizar el átomo de hidrógeno, no obstante se podría mejorar el resultado escogiendo la función de onda relativista para el estado fundamental del hidrógeno [27]:

$$|\psi\rangle = \frac{(2m\alpha)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{1+\gamma}{2\Gamma(1+2\gamma)}} (2m\alpha r)^{\gamma-1} e^{-m\alpha r} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{i(1-\gamma)}{\alpha} \cos\theta \\ \frac{i(1-\gamma)}{\alpha} \sin\theta e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad (174)$$

con $\gamma = \sqrt{1 - \alpha^2}$ y $\alpha \approx \frac{1}{137}$ la constante de estructura fina.

Además, se ha considerado que dicha función es autoestado del hamiltoniano, lo cual podría no ser correcto. En este caso habría que recurrir a otro tipo de mediciones mediante algoritmos como el *Quantum Phase Estimator* o el *Método de Feit-Fleck* [28].

A pesar de ello, se ha obtenido una muy buena estimación de la energía para el átomo de hidrógeno.

7.1. Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS)

A pesar de que este trabajo tiene un enfoque teórico y técnico, es importante poner en contexto su posible aportación a objetivos más amplios. En particular, hay varios Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) con los que este proyecto guarda relación.

- **ODS 4: Educación de calidad:** a través de este trabajo he podido aprender y aplicar conceptos complejos de física, matemáticas y computación cuántica. El acceso a herramientas de código abierto como Qiskit y PennyLane también demuestra cómo se puede fomentar una educación científica avanzada, accesible y actualizada.
- **ODS 7: Energía asequible y no contaminante:** la computación cuántica tiene una ventaja directa en términos de eficiencia energética. Los algoritmos cuánticos, en ciertos problemas, pueden ser mucho más rápidos y eficientes que los métodos clásicos. Esto se traduce en que, en lugar de consumir grandes cantidades de recursos computacionales (y por tanto de energía), pueden alcanzar resultados similares usando menos pasos y menos potencia. En un mundo donde el consumo energético de los centros de datos no para de crecer, esta eficiencia es una ventaja importante que puede contribuir a reducir la huella de carbono del sector tecnológico.
- **ODS 9: Industria, innovación e infraestructura:** la computación cuántica todavía está en una fase muy temprana, pero tiene un enorme potencial para cambiar la forma en la que resolvemos ciertos problemas físicos y matemáticos. Este tipo de investigación, aunque básica, contribuye a sentar las bases para tecnologías más eficientes y potentes en el futuro.

- **ODS 17: Alianzas para lograr los objetivos:** Uno de los aspectos más interesantes de trabajar con computación cuántica es que muchas herramientas y recursos son colaborativos y están disponibles de forma abierta. Esto permite que personas de diferentes países y disciplinas puedan contribuir al avance de este campo.

Apéndices

A. Puertas Cuánticas Utilizadas

Puerta	Matriz	Representación
Hadamard	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$	
X	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	
Y	$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$	
Z	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	
RZ	$\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}$	
CX (CNOT)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	
CY	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}$	
CZ	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	

Cuadro 2: Puertas Cuánticas Utilizadas

B. Deducción de la Matriz de Rotación 2D

Una rotación por definición deja invariante el módulo de un vector, afectando solo a su dirección, por tanto al aplicar una rotación a un vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ se tiene que

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

el módulo se conserva

$$s^2 = (\mathbf{x})^T \cdot \mathbf{x} = (\mathbf{x}')^T \cdot (\mathbf{x}') \equiv x_1^2 + x_2^2 = (x'_1)^2 + (x'_2)^2. \quad (\text{B.2})$$

Desarrollando un poco podemos obtener que la matriz de rotación ha de ser unitaria:

$$\begin{aligned} (\mathbf{x})^T \cdot \mathbf{x} &= (\mathbf{x}')^T \cdot (\mathbf{x}') \rightarrow (\mathbf{x})^T \cdot \mathbf{x} = (R\mathbf{x})^T \cdot (R\mathbf{x}) \rightarrow (\mathbf{x})^T \cdot \mathbf{x} = R^T(\mathbf{x})^T \cdot R\mathbf{x} \\ &\rightarrow (\mathbf{x})^T \cdot \mathbf{x} = (\mathbf{x})^T R^T R \mathbf{x} \rightarrow R^T R = \mathbb{I}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Teorema 5 (Exponenciación del Generador Infinitesimal) *Rotar un ángulo θ equivale a rotar N veces un ángulo infinitesimal ϵ :*

$$\theta = N\epsilon \rightarrow \epsilon = \frac{\theta}{N}. \quad (\text{B.4})$$

Además, una sola rotación infinitesimal de ϵ equivale a no rotar junto a una pequeña rotación:

$$R(\epsilon) = \mathbb{I} + A + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (\text{B.5})$$

Por el **Teorema 5**, se puede expresar una rotación de un ángulo θ en función de un ángulo infinitesimal como

$$R(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[R \left(\frac{\theta}{N} \right) \right]^N = \lim_{N \rightarrow \infty} [\mathbb{I} + A]^N. \quad (\text{B.6})$$

Luego recordando que la matriz de rotación es unitaria, llegamos a la conclusión de que la matriz A es antisimétrica:

$$R(\epsilon) \approx \mathbb{I} + A \rightarrow R(\epsilon)^T R(\epsilon) = (\mathbb{I} + A)^T (\mathbb{I} + A) = \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{I} + A + A^T + \mathcal{O}(A^2) \approx \mathbb{I} \rightarrow A + A^T = 0. \quad (\text{B.7})$$

despreciando términos de orden superior. Esto implica que la matriz de rotación para un ángulo ϵ es

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \epsilon G \implies R(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} [\mathbb{I} + \epsilon G]^N. \quad (\text{B.8})$$

Se puede ahora hacer un desarrollo de Taylor de la matriz de rotación de modo que

$$R(\theta) \approx R(0) + R'(\theta)\theta + \frac{1}{2!}R''(\theta)\theta^2 + \dots \approx \mathbb{I} + G\theta + \frac{1}{2!}G^2\theta^2 + \dots \approx e^{G\theta}. \quad (\text{B.9})$$

Finalmente, distinguiendo la serie de $\sin \theta$ y $\cos \theta$ en la serie de e^θ , obtenemos la matriz de rotación en SO(2):

$$\begin{aligned} R(\theta) &\approx \mathbb{I} + G\theta + \frac{1}{2!} \underbrace{G^2}_{-\mathbb{I}} \theta^2 + \frac{1}{3!} \underbrace{G^3}_{-G} \theta^3 + \frac{1}{4!} \underbrace{G^4}_{\mathbb{I}} \theta^4 + \frac{1}{5!} \underbrace{G^5}_{G} \theta^5 + \dots \\ &= \underbrace{\left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} + \dots\right)}_{\cos \theta} \mathbb{I} + \underbrace{\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} + \dots\right)}_{\sin \theta} G = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{B.10}) \end{aligned}$$

C. Estructura de las Matrices del Grupo SU(2)

Considerando una matriz cualquiera 2×2 :

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}. \quad (\text{C.1})$$

Puesto que es unitaria, la multiplicación por su traspuesta conjugada ha de dar la identidad:

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\alpha} & \bar{\gamma} \\ \bar{\beta} & \bar{\delta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{cases} \alpha\bar{\alpha} + \beta\bar{\beta} = \gamma\bar{\gamma} + \delta\bar{\delta} = 1, \\ \alpha\bar{\gamma} + \beta\bar{\delta} = \gamma\bar{\alpha} + \delta\bar{\beta} = 0. \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

Luego, la ortogonalidad de la base da las relaciones:

$$\gamma\bar{\alpha} + \delta\bar{\beta} = 0 \implies \delta = -\frac{\gamma\bar{\alpha}}{\bar{\beta}}, \quad (\text{C.3})$$

$$\alpha\bar{\alpha} + \beta\bar{\beta} = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (\text{C.4})$$

Finalmente, usando estas dos relaciones y teniendo en cuenta que el determinante ha de ser 1:

$$\alpha\delta - \beta\gamma = -\alpha\frac{\bar{\alpha}\gamma}{\bar{\beta}} - \beta\gamma = -\frac{\gamma}{\bar{\beta}}(\alpha\bar{\alpha} + \beta\bar{\beta}) = -\frac{\gamma}{\bar{\beta}} = 1 \implies \gamma = -\bar{\beta}, \quad \delta = \bar{\alpha}, \quad (\text{C.5})$$

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.6})$$

D. Evolución de un Sistema Bajo Hamiltonianos Locales

Partiendo del hamiltoniano completo definido como combinación lineal de hamiltonianos locales hermíticos:

$$H = \sum_l H_l, \quad (\text{D.1})$$

se va a demostrar que

$$e^{-iHt} = \prod_l e^{-iH_l t}, \quad (\text{D.2})$$

solo si se cumple que

$$[H_i, H_j] = H_i H_j - H_j H_i = 0, \quad \forall i, j. \quad (\text{D.3})$$

Sin pérdida de generalidad, se va a demostrar para el hamiltoniano

$$e^{-i(H_1+H_2)t} = e^{-iH_1t}e^{-iH_2t}. \quad (\text{D.4})$$

Para comenzar, vamos a recurrir a la descomposición de la función exponencial en series de Taylor:

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots, \quad (\text{D.5})$$

es decir, para el caso de análisis es

$$e^{-i(H_1+H_2)t} = e^{-iH_1t}e^{-iH_2t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-itH_1 - itH_2)^n}{n!}. \quad (\text{D.6})$$

Ahora debemos recurrir a la fórmula de la binomial:

$$(x + y)^n = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} x^{n-k} y^k. \quad (\text{D.7})$$

Solo si conmutan, podemos aplicar la binomial y desarrollar

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-itH_1 - itH_2)^n}{n!} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} (-itH_1)^{n-k} (-itH_2)^k \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{(-itH_1)^{n-k}}{(n-k)!} \frac{(-itH_2)^k}{k!}. \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Haciendo de forma explícita:

$$\begin{cases} n = 0 : \frac{(-itH_1)^0}{0!} \frac{(-itH_2)^0}{0!}, \\ n = 1 : \frac{(-itH_1)^1}{1!} \frac{(-itH_2)^0}{0!} + \frac{(-itH_1)^0}{0!} \frac{(-itH_2)^1}{1!}, \\ n = 2 : \frac{(-itH_1)^2}{2!} \frac{(-itH_2)^0}{0!} + \frac{(-itH_1)^1}{1!} \frac{(-itH_2)^1}{1!} + \frac{(-itH_1)^0}{0!} \frac{(-itH_2)^2}{2!}. \end{cases} \quad (\text{D.9})$$

Ahora sacando factor común cada uno de los términos de H_2 :

$$\begin{aligned}
& \frac{(-itH_2)^0}{0!} \left(\frac{(-itH_1)^0}{0!} + \frac{(-itH_1)^1}{1!} + \frac{(-itH_1)^2}{2!} + \dots \right) + \\
& \frac{(-itH_2)^1}{1!} \left(\frac{(-itH_1)^0}{0!} + \frac{(-itH_1)^1}{1!} + \frac{(-itH_1)^2}{2!} + \dots \right) + \\
& \frac{(-itH_2)^2}{2!} \left(\frac{(-itH_1)^0}{0!} + \frac{(-itH_1)^1}{1!} + \frac{(-itH_1)^2}{2!} + \dots \right) + \dots \\
& = \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-itH_1)^q}{q!} \frac{(-itH_1)^r}{r!}.
\end{aligned} \tag{D.10}$$

Aquí podemos apreciar otra vez la serie de Taylor, por lo que podemos deshacerla para finalizar la demostración:

$$\sum_{q=0}^{\infty} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-itH_1)^q}{q!} \frac{(-itH_1)^r}{r!} = e^{-iH_1 t} e^{-iH_2 t}. \tag{D.11}$$

E. Desarrollo de la Ecuación de Lie-Trotter

Partiendo del álgebra de Lie, se va a demostrar que para dos operadores hermíticos A y B se cumple que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{A \frac{t}{n}} e^{B \frac{t}{n}} \right) = e^{i(A+B)t}. \tag{E.1}$$

Comenzando con la expansión en series de Taylor de la exponencial (vista en (D.5)):

$$e^{iA \frac{t}{n}} = \mathbb{I} + \frac{1}{n} iAt + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right), \tag{E.2}$$

podemos desarrollar el producto

$$\begin{aligned}
e^{iA \frac{t}{n}} e^{iB \frac{t}{n}} &= \left[\mathbb{I} + \frac{1}{n} iAt \right] \left[\mathbb{I} + \frac{1}{n} iBt \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) = \mathbb{I} + \frac{1}{n} iAt + \frac{1}{n} iBt - \frac{1}{n^2} AB + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \\
&= \mathbb{I} + \frac{1}{n} i(A+B)t + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right). \tag{E.3}
\end{aligned}$$

Descartando términos de $\mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right)$, elevando el producto a la n -ésima potencia y aplicando de nuevo la fórmula de la binomial (vista en (D.7)):

$$\left(e^{iA\frac{t}{n}}e^{iB\frac{t}{n}}\right)^n = \left(\mathbb{I} + \frac{1}{n}i(A+B)t\right)^n = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{1}{n^k} (i(A+B)t)^k. \quad (\text{E.4})$$

Desarrollando las dos primeras fracciones para k fijo:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{1}{n^k} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{k!} \frac{n(n-1)(n-2)\dots(n-k+1)}{n^k} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{k!} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \left(1 - \frac{2}{n}\right) \dots \left(1 - \frac{k-1}{n}\right) \approx \frac{1}{k!} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right)\right). \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

Finalmente queda demostrada la ecuación de Lie-Trotter:

$$\left(e^{iA\frac{t}{n}}e^{iB\frac{t}{n}}\right)^n = \frac{1}{k!} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right)\right) (i(A+B)t)^k \approx \sum_{k=0}^n \frac{(i(A+B)t)^k}{k!} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right) \approx e^{i(A+B)t}. \quad (\text{E.6})$$

F. Representación de Majorana

La ecuación de Dirac (98) puede reexpresarse en términos de las *Matrices de Dirac* [13] como $\gamma_i \equiv \alpha_i$, con $\alpha_i = \rho_1 \sigma_i$ y $\beta = \rho_3$ (**sección 3.3**):

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ -\sigma_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{F.1})$$

como su versión más conocida:

$$(-i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0. \quad (\text{F.2})$$

Esta ecuación permite soluciones reales e imaginarias por cómo están formuladas las matrices de Dirac. Puesto que la única condición para estas viene definida por el *Álgebra de*

Clifford:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu}, \quad (\text{F.3})$$

existe más de una configuración posible para las matrices γ .

Además de la representación estándar de Dirac, existe la *representación de Majorana*, descubierta por Ettore Majorana, en la cual todas las matrices $\tilde{\gamma}^\mu$ son *puramente imaginarias*. El objetivo es que el operador

$$i \tilde{\gamma}^\mu \partial_\mu - m, \quad (\text{F.4})$$

sea *real* y admita soluciones reales.

Se construye a partir de las matrices de Pauli (σ_y ya es imaginaria, $\sigma_{x,z}$ reales) de modo que las matrices γ resultan [29]:

$$\tilde{\gamma}^0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\gamma}^1 = i \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\gamma}^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\gamma}^3 = i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{F.5})$$

Por construcción, todas las $\tilde{\gamma}^\mu$ tienen entradas imaginarias, de modo que $i \tilde{\gamma}^\mu$ es una matriz real y la ecuación de Dirac queda con coeficientes reales. Esto permite imponer la condición de Majorana

$$\psi = \psi^*, \quad (\text{F.6})$$

definiendo un espinor que coincide con su propia conjugada de carga: el *espinor de Majorana*.

G. Random Walk

El *random walk* constituye un proceso estocástico que representa un trayecto generado por una sucesión de pasos aleatorios dentro de un espacio matemático. Este modelo se construye asignando probabilidades específicas a cada dirección posible y ejecutando iterativamente los desplazamientos.

Este algoritmo es muy utilizado en la simulación de procesos de difusión y transporte, en

métodos de Monte Carlo y en el estudio de fenómenos de dispersión tanto en física clásica como cuántica.

Si suponemos un random walk en una dimensión con la misma probabilidad de avanzar a ambos lados (**Figura 12**), el experimento se asemeja a la *máquina de Galton* y sigue una distribución normal de probabilidad. Se muestra a continuación una implementación simple de un random walk 2D en python empleando pygame.

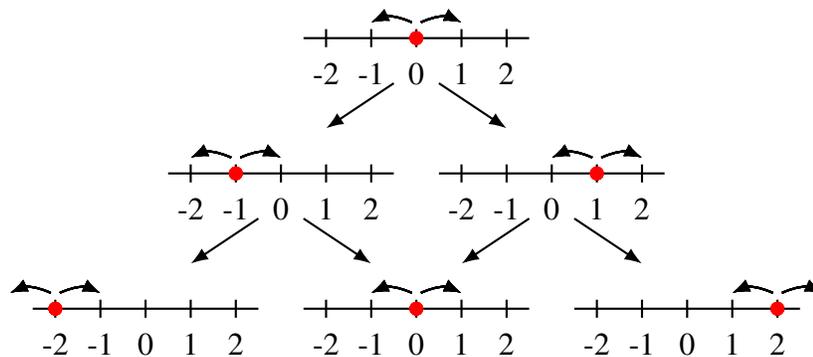


Figura 12: Funcionamiento del Random Walk en una dimensión.

```

1 import pygame
2 import random
3 import sys
4
5 pygame.init()
6
7 WIDTH, HEIGHT = 800, 600
8 SCREEN = pygame.display.set_mode((WIDTH, HEIGHT))
9 pygame.display.set_caption("Random Walk")
10
11 BLACK = (0, 0, 0)
12 WHITE = (255, 255, 255)
13
14 x, y = WIDTH // 2, HEIGHT // 2
15
16 clock = pygame.time.Clock()

```

```
17
18 running = True
19 while running:
20     for event in pygame.event.get():
21         if event.type == pygame.QUIT:
22             running = False
23
24     dx = random.choice([-1, 0, 1]) # Coin x
25     dy = random.choice([-1, 0, 1]) # Coin y
26     x += dx
27     y += dy
28
29     x = max(0, min(WIDTH - 1, x))
30     y = max(0, min(HEIGHT - 1, y))
31
32     pygame.draw.circle(SCREEN, WHITE, (x, y), 2)
33
34     pygame.display.flip()
35
36     clock.tick(60)
37
38 pygame.quit()
39 sys.exit()
```

Listing 1: Implementación de un random walk en 2D.

H. Parametrización de Matrices

Parametrización de una Matriz 2×2

Normalización

Para que una matriz sea representable en un circuito cuántico, esta debe ser unitaria para permitir la reversibilidad ($UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{I}$), por tanto, debe ser normalizada. Para ello, se debe aplicar un factor de normalización $\|A\|$, el cual viene dado como:

$$\|A\| = \sqrt{\text{Tr}(A^\dagger A)}. \quad (\text{H.1})$$

Ejemplo

Dada la matriz M :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad (\text{H.2})$$

se debe calcular primero M^\dagger :

$$M^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 3 \end{pmatrix}.$$

El término de normalización para esta matriz será:

$$\|M\| = \sqrt{\text{Tr} \left(\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \right)} = \sqrt{\text{Tr} \begin{pmatrix} 5 & 9 \\ 9 & 18 \end{pmatrix}} = \sqrt{23}.$$

y por tanto, la matriz normalizada:

$$M = \frac{1}{\sqrt{23}} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}.$$

Descomposición en Matrices de Pauli

Dada la matriz $A = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix}$, podemos expresarla en términos de las matrices de Pauli y la matriz identidad (ver grupo $SU(2)$ en la **sección 3.1.1**) como:

$$A = \sum_{i=0}^3 x_i \sigma_i = x_0 \mathbb{I} + x_1 \sigma_x + x_2 \sigma_y + x_3 \sigma_z, \quad (\text{H.3})$$

Desarrollando:

$$\begin{aligned} A &= x_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + x_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + x_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_0 & 0 \\ 0 & x_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & x_1 \\ x_1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -x_2 i \\ x_2 i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_3 & 0 \\ 0 & -x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 + x_3 & x_1 - x_2 i \\ x_1 + x_2 i & x_0 - x_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{H.4})$$

Si igualamos la matriz original a esta expresión generamos un sistema de ecuaciones que se resuelve de manera trivial:

$$\begin{cases} a_{00} = x_0 + x_3 \\ a_{01} = x_1 - x_2 i \\ a_{10} = x_1 + x_2 i \\ a_{11} = x_0 - x_3 \end{cases} \begin{cases} x_0 = \frac{a_{00} + a_{11}}{2}, \\ x_1 = \frac{a_{01} + a_{10}}{2}, \\ x_2 = \frac{a_{10} - a_{01}}{2i}, \\ x_3 = \frac{a_{00} - a_{11}}{2}. \end{cases}$$

Por lo tanto, la matriz A se puede expresar como:

$$A = \frac{1}{2} \left((a_{00} + a_{11}) \mathbb{I} + (a_{01} + a_{10}) \sigma_x - (a_{10} - a_{01}) i \sigma_y + (a_{00} - a_{11}) \sigma_z \right). \quad (\text{H.5})$$

Es decir, cualquier matriz 2×2 se puede representar como una combinación lineal de los

generadores del grupo $SU(2)$.

Ejemplo

La matriz $M = \frac{1}{\sqrt{23}} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$, empleando la ecuación (H.5), podemos reexpresarla como:

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2\sqrt{23}} ((1+3)\mathbb{I} + (3+2)\sigma_x - (2-3)i\sigma_y + (1-3)\sigma_z) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{23}} (4\mathbb{I} + 5\sigma_x + i\sigma_y - 2\sigma_z) = \frac{1}{2\sqrt{23}} \left(\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 5 \\ 5 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{23}} \begin{pmatrix} 4-2 & 5+1 \\ 5-1 & 4+2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{23}} \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 4 & 6 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{23}} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{cqd.} \end{aligned}$$

Es decir, de aquí podemos saber que la matriz M se puede parametrizar mediante la combinación de los generadores del grupo como $\frac{1}{2\sqrt{23}}(4\mathbb{I} + 5\sigma_x + i\sigma_y - 2\sigma_z)$.

Parametrización en Puertas Cuánticas

Una vez obtenida la descomposición de la matriz normalizada en términos de las matrices de Pauli, debemos aplicar las puertas correspondientes con el coeficiente obtenido. No obstante, podemos obtener coeficientes decimales, pero no podemos tener una fracción de una puerta X , por ejemplo, por tanto tenemos que generalizar estas puertas.

Aplicar una puerta X , Y o Z implica rotar π entorno a su eje, por tanto, podemos generalizar un número decimal como una rotación específica entorno a su eje. Para ello existen las puertas R_x , R_y y R_z , que permiten aplicar rotaciones para unos ángulos determinados, y estos vendrán dados por los coeficientes. Del mismo modo, si aplicamos una rotación de π con estas puertas, el resultado será equivalente a aplicar las puertas correspondientes a las matrices de Pauli.

Además, puesto que estamos trabajando con dimensión $n = 2$ y el número de qubits viene dado como $n_q = \log_2(n)$, el circuito de parametrización solo contará con 1 qubit.

Ejemplo

Para la descomposición obtenida anteriormente,

$$M = \frac{1}{2\sqrt{23}}(4\mathbb{I} + 5\sigma_x + i\sigma_y - 2\sigma_z),$$

vemos que tenemos que aplicar:

- Una rotación de $\frac{5}{2\sqrt{23}}$ sobre el eje X , esto se traduce en $R_x\left(\frac{5}{2\sqrt{23}}\right)$.
- Una rotación de $\frac{1}{2\sqrt{23}}$ sobre el eje Y , esto se traduce en $R_y\left(\frac{1}{2\sqrt{23}}\right)$.
- Una rotación de $\frac{-2}{2\sqrt{23}}$ sobre el eje Z , esto se traduce en $R_z\left(\frac{-2}{2\sqrt{23}}\right)$.

Además, la componente y posee una unidad imaginaria, por lo que además hay que aplicarle una fase asociada, en este caso se puede aplicar con la puerta de fase $P\left(\frac{\pi}{2}\right)$, pero se puede generalizar introduciendo $n \in \mathbb{Z}$ como $P\left(n\frac{\pi}{2}\right)$. Por otro lado, la puerta \mathbb{I} añade una fase global al circuito. Esta fase no afecta al circuito por simetría, por lo que podemos suprimirla. Para este ejemplo, el circuito resultaría¹⁶:

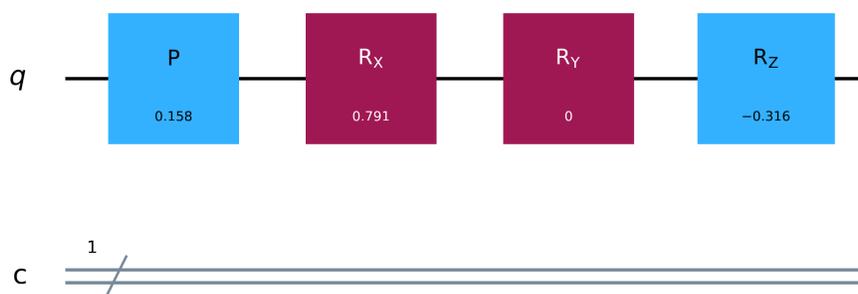


Figura 13: Parametrización de una matriz 2x2 en un circuito (en qiskit).

Con el estado visualizado en la esfera de Bloch¹⁷:

¹⁶Empleo qiskit en este caso ya que en pennylane, al mostrar el circuito, no se ve explícitamente el ángulo de rotación en cada eje, de este modo es más visual.

¹⁷También empleo qiskit para visualizar la esfera de Bloch debido a que esta librería ya posee una función para ello.

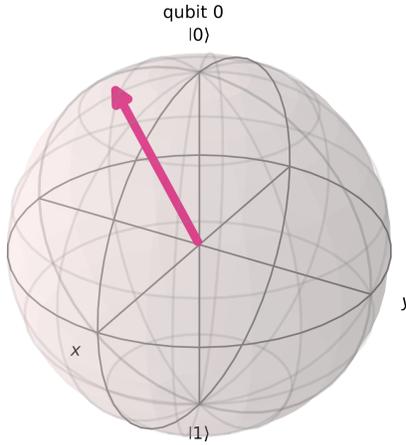


Figura 14: Representación del estado en la esfera de Bloch (en qiskit).

Parametrización de una Matriz 4×4

Para este caso la ecuación (H.3) no sirve, sin embargo se puede parametrizar mediante:

$$A = \sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^3 x_{ij} (\sigma_i \otimes \sigma_j). \quad (\text{H.6})$$

$$\begin{aligned} A &= x_{00}(\sigma_0 \otimes \sigma_0) + x_{01}(\sigma_0 \otimes \sigma_1) + x_{02}(\sigma_0 \otimes \sigma_2) + x_{03}(\sigma_0 \otimes \sigma_3) \\ &\quad + x_{10}(\sigma_1 \otimes \sigma_0) + x_{11}(\sigma_1 \otimes \sigma_1) + x_{12}(\sigma_1 \otimes \sigma_2) + x_{13}(\sigma_1 \otimes \sigma_3) \\ &\quad + x_{20}(\sigma_2 \otimes \sigma_0) + x_{21}(\sigma_2 \otimes \sigma_1) + x_{22}(\sigma_2 \otimes \sigma_2) + x_{23}(\sigma_2 \otimes \sigma_3) \\ &\quad + x_{30}(\sigma_3 \otimes \sigma_0) + x_{31}(\sigma_3 \otimes \sigma_1) + x_{32}(\sigma_3 \otimes \sigma_2) + x_{33}(\sigma_3 \otimes \sigma_3) \\ &= x_{00}(\mathbb{I} \otimes \mathbb{I}) + x_{01}(\mathbb{I} \otimes \sigma_x) + x_{02}(\mathbb{I} \otimes \sigma_y) + x_{03}(\mathbb{I} \otimes \sigma_z) \\ &\quad + x_{10}(\sigma_x \otimes \mathbb{I}) + x_{11}(\sigma_x \otimes \sigma_x) + x_{12}(\sigma_x \otimes \sigma_y) + x_{13}(\sigma_x \otimes \sigma_z) \\ &\quad + x_{20}(\sigma_y \otimes \mathbb{I}) + x_{21}(\sigma_y \otimes \sigma_x) + x_{22}(\sigma_y \otimes \sigma_y) + x_{23}(\sigma_y \otimes \sigma_z) \\ &\quad + x_{30}(\sigma_z \otimes \mathbb{I}) + x_{31}(\sigma_z \otimes \sigma_x) + x_{32}(\sigma_z \otimes \sigma_y) + x_{33}(\sigma_z \otimes \sigma_z) = (\dots) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\dots) = & x_{00} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + x_{01} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + x_{02} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} + x_{03} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 & + x_{10} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + x_{11} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + x_{12} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + x_{13} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & + x_{20} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} + x_{21} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + x_{22} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + x_{23} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & + x_{30} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + x_{31} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} + x_{32} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix} + x_{33} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

$$A = \begin{pmatrix} x_{00} + x_{03} + x_{30} + x_{33} & x_{01} - x_{02}i + x_{31} - x_{32}i & x_{10} + x_{13} - x_{20}i - x_{23}i & x_{11} - x_{12}i - x_{21}i - x_{22} \\ x_{01} + x_{02}i + x_{31} + x_{32}i & x_{00} - x_{03} + x_{30} - x_{33} & x_{11} + x_{12}i - x_{21}i + x_{22} & x_{10} - x_{13} - x_{20}i + x_{23}i \\ x_{10} + x_{13} + x_{20}i + x_{23}i & x_{11} - x_{12}i + x_{21}i + x_{22} & x_{00} + x_{03} - x_{30} - x_{33} & x_{01} - x_{02}i - x_{31} + x_{32}i \\ x_{11} + x_{12}i + x_{21}i - x_{22} & x_{10} - x_{13} + x_{20}i - x_{23}i & x_{01} + x_{02}i - x_{31} - x_{32}i & x_{00} - x_{03} - x_{30} + x_{33} \end{pmatrix}.$$

(H.7)

Por tanto, para una matriz arbitraria

$$A = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & a_{03} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{30} & a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix},$$

tenemos el siguiente sistema de 16 ecuaciones:

$$\begin{cases} a_{00} = x_{00} + x_{03} + x_{30} + x_{33}, \\ a_{01} = x_{01} - x_{02}i + x_{31} - x_{32}i, \\ a_{02} = x_{10} + x_{13} - x_{20}i - x_{23}i, \\ a_{03} = x_{11} - x_{12}i - x_{21}i - x_{22}, \\ a_{10} = x_{01} + x_{02}i + x_{31} + x_{32}i, \\ a_{11} = x_{00} - x_{03} + x_{30} - x_{33}, \\ a_{12} = x_{11} + x_{12}i - x_{21}i + x_{22}, \\ a_{13} = x_{10} - x_{13} - x_{20}i + x_{23}i, \end{cases} \quad \begin{cases} a_{20} = x_{10} + x_{13} + x_{20}i + x_{23}i, \\ a_{21} = x_{11} - x_{12}i + x_{21}i + x_{22}, \\ a_{22} = x_{00} + x_{03} - x_{30} - x_{33}, \\ a_{23} = x_{01} - x_{02}i - x_{31} + x_{32}i, \\ a_{30} = x_{11} + x_{12}i + x_{21}i - x_{22}, \\ a_{31} = x_{10} - x_{13} + x_{20}i - x_{23}i, \\ a_{32} = x_{01} + x_{02}i - x_{31} - x_{32}i, \\ a_{33} = x_{00} - x_{03} - x_{30} + x_{33}. \end{cases} \quad (\text{H.8})$$

Resolviendo este sistema se obtienen las siguientes soluciones:

$$\begin{cases} x_{00} = \frac{1}{4}(a_{00} + a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\ x_{01} = \frac{1}{4}(a_{01} + a_{10} + a_{23} + a_{32}), \\ x_{02} = \frac{i}{4}(a_{01} - a_{10} + a_{23} - a_{32}), \\ x_{03} = \frac{1}{4}(a_{00} - a_{11} + a_{22} - a_{33}), \\ x_{10} = \frac{1}{4}(a_{02} + a_{13} + a_{20} + a_{31}), \\ x_{11} = \frac{1}{4}(a_{03} + a_{12} + a_{21} + a_{30}), \\ x_{12} = \frac{i}{4}(a_{03} - a_{12} + a_{21} - a_{30}), \\ x_{13} = \frac{1}{4}(a_{02} - a_{13} + a_{20} - a_{31}), \end{cases} \quad \begin{cases} x_{20} = \frac{i}{4}(a_{02} + a_{13} - a_{20} - a_{31}), \\ x_{21} = \frac{i}{4}(a_{03} + a_{12} - a_{21} - a_{30}), \\ x_{22} = \frac{1}{4}(-a_{03} + a_{12} + a_{21} - a_{30}), \\ x_{23} = \frac{i}{4}(a_{02} - a_{13} - a_{20} + a_{31}), \\ x_{30} = \frac{1}{4}(a_{00} + a_{11} - a_{22} - a_{33}), \\ x_{31} = \frac{1}{4}(a_{01} + a_{10} - a_{23} - a_{32}), \\ x_{32} = \frac{i}{4}(a_{01} - a_{10} - a_{23} + a_{32}), \\ x_{33} = \frac{1}{4}(a_{00} - a_{11} - a_{22} + a_{33}). \end{cases} \quad (\text{H.9})$$

Y con esto, podemos obtener cualquier matriz 4×4 parametrizada con matrices de Pauli.

Parametrización de una Matriz $N \times N$

Siguiendo la misma lógica, se puede parametrizar cualquier matriz $N \times N$ mediante una generalización de la parametrización vista anteriormente:

$$A = \sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^3 \sum_{k=0}^3 \dots \sum_{w=0}^3 x_{i,j,k,\dots,w} (\sigma_i \otimes \sigma_j \otimes \sigma_k \otimes \dots \otimes \sigma_w). \quad (\text{H.10})$$

I. Código del Circuito Cuántico

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import pennylane as qml
4 from pennylane import numpy as pnp
5
6 def evolution(d, steps):
7
8     ##### Parámetros Iniciales #####
9     N=2**d
10    L=10
11    eps=1e-6
12    dt=0.001
13    m=1
14    c=1
15
16    wires = list(range(3 * d + 2))
17    dev = qml.device('lightning.qubit', wires=wires)
18    # Si se cuenta con GPU >= SM 7.0 (Volta) + Cuda 12.9 + Jax :
19    # dev = qml.device('lightning.gpu', wires=wires)
20
21    ##### Estado 1s #####
22
23    def hydrogen_1s_state_vector(L, eps, N):

```

```
24     coords = np.linspace(-L, L, N)
25     psi = np.zeros((N, N, N))
26
27     for i, x in enumerate(coords):
28         for j, y in enumerate(coords):
29             for k, z in enumerate(coords):
30                 r = np.sqrt(x**2 + y**2 + z**2 + eps)
31                 psi[i, j, k] = np.exp(-r)
32
33     norm_sq = np.sum(np.abs(psi)**2)
34     psi /= np.sqrt(norm_sq)
35     return psi.flatten()
36
37 ##### Operadores #####
38
39 def QV(dt, L, eps, wires, dims=3):
40     n = len(wires)
41     bits_per_dim = n // dims # qubits por eje
42     N = 2 ** bits_per_dim # puntos por eje
43     total = N ** dims # puntos totales
44     l = 2 * L / (N - 1) # paso
45     diag = np.zeros(total, dtype=complex)
46
47     for idx in range(total):
48         coords = []
49         tmp = idx
50         for _ in range(dims): # idx->bit
51             digit = tmp % N
52             coords.append(digit)
53             tmp //= N
54
55         r_squared = 0
56         for digit in coords:
57             x = (digit - (N - 1) / 2) * l # bit->coord
```

```
57         r_squared += x**2 # x**2+y**2+z**2
58
59         V_val = -1.0 / np.sqrt(r_squared + eps) # potencial
60         diag[idx] = np.exp(-1j * V_val * dt) # diagonal de la matriz
61
62     U = np.diag(diag) # matriz final
63     return qml.QubitUnitary(U, wires=wires)
64
65
66 def controlled_decrement(wires):
67     ctrl_wire = wires[0]
68     target_wires = wires[1:]
69     n = len(target_wires)
70
71     inverted = set()
72
73     for i in range(n):
74         ctrl = [ctrl_wire] + target_wires[i+1:]
75         to_invert = ctrl[1:]
76
77         for wire in to_invert:
78             if wire not in inverted:
79                 qml.X(wires=wire)
80                 inverted.add(wire)
81
82         if i == n - 1:
83             qml.CNOT(wires=[ctrl_wire, target_wires[i]])
84         else:
85             qml.MultiControlledX(wires=ctrl + [target_wires[i]])
86
87     future_controls = set()
88     for j in range(i + 1, n):
89         future_controls.update(target_wires[j+1:])
```

```
90
91     to_uninvert = inverted - future_controls
92
93     for wire in to_uninvert:
94         qml.X(wires=wire)
95         inverted.remove(wire)
96
97
98     def controlled_increment(wires):
99         ctrl_wire = wires[0]
100        target_wires = wires[1:]
101        n = len(target_wires)
102        qml.X(wires=ctrl_wire)
103        for i in range(n):
104            ctrl = [ctrl_wire] + target_wires[i+1:]
105            if i == n - 1:
106                qml.CNOT(wires=[ctrl_wire, target_wires[i]])
107            else:
108                qml.MultiControlledX(wires=ctrl + [target_wires[i]])
109        qml.X(wires=ctrl_wire)
110
111     ##### Circuito de Dirac #####
112
113     @qml.qnode(dev)
114     # Si se emplea 'lightning.gpu':
115     #@qml.qnode(dev, interface='jax')
116     def qc():
117         for _ in range(steps):
118             for gate, a in zip([qml.CNOT, qml.CY, qml.CZ], [0, d, 2 * d]):
119                 # Sa
120                 gate(wires=[wires[0], wires[1]])
121                 qml.Hadamard(wires=wires[0])
122                 gate(wires=[wires[0], wires[1]])
```

```

123
124         qwires = [wires[0]] + wires[2 + a:2 + a + d]
125         controlled_increment(qwires) # I
126         controlled_decrement(qwires) # D
127
128         # Sa
129         gate(wires=[wires[0], wires[1]])
130         qml.Hadamard(wires=wires[0])
131         gate(wires=[wires[0], wires[1]])
132
133         qml.RZ(2 * m * c**2 * dt, wires=[0]) # Qm
134         QV(dt, L, eps, wires=range(2, 2 + 3 * d)) # Qv
135
136     return qml.state()
137
138
139     ##### Inicialización #####
140
141     @qml.qnode(dev)
142     # Si se emplea 'lightning.gpu':
143     #@qml.qnode(dev, interface='jax')
144     def prepare_initial_state():
145         qml.BasisState(pnp.array([0, 0]), wires=[0, 1]) # Spinor : |00>
146         psi = hydrogen_1s_state_vector(N, eps, N=2*d,) # Psi en la malla
147         qml.StatePrep(psi, wires=range(2, 2 + 3 * d)) # Psi en |i,j,k>
148         return qml.state()
149
150
151     ##### Medición de Energía #####
152
153     T = steps * dt
154     psi0 = prepare_initial_state()
155     psiT = qc()

```

```
156     overlap = np.vdot(psi0, psiT)
157     phase = np.angle(overlap)
158     energy = phase / T
159     return energy
160
161
162 if __name__ == '__main__':
163
164     ##### Obtención de Datos #####
165
166     for d in [2,3,4,5]:
167         filename = f'd_{d}.txt'
168         with open(filename, 'a') as file:
169             print(f'=== d = {d} ===')
170             for steps in range(1, 10):
171                 energy = evolution(d=d, steps=steps)
172                 print(f'd={d}, steps={steps}: {energy}')
173                 file.write(f'{energy}\n')
174                 file.flush()
```

Listing 2: Código del Circuito Cuántico.

Las librerías necesarias para ejecutar el programa se listan a continuación junto con la versión utilizada para el desarrollo de este trabajo:

Package	Version
-----	-----
custatevec-cul2	1.8.0
jax	0.4.28
jax-cuda12-pjrt	0.4.28
jax-cuda12-plugin	0.4.28
jaxlib	0.4.28
jaxopt	0.8.5

numpy	2.0.1
nvidia-cublas-cu12	12.9.0.13
nvidia-cuda-cupti-cu12	12.9.19
nvidia-cuda-nvcc-cu12	12.9.41
nvidia-cuda-nvrtc-cu12	12.9.41
nvidia-cuda-runtime-cu12	12.9.37
nvidia-cudnn-cu12	8.9.7.29
nvidia-cufft-cu12	11.4.0.6
nvidia-cusolver-cu12	11.7.4.40
nvidia-cuspars-cu12	12.5.9.5
nvidia-nccl-cu12	2.26.5
nvidia-nvjitlink-cu12	12.9.41
PennyLane	0.41.1
PennyLane_Lightning	0.41.1
PennyLane_Lightning_GPU	0.41.1
scipy	1.15.2
scipy-openblas32	0.3.29.0.0

Además de todo lo listado, se ha empleado cuda 12.9 para la compatibilidad de la gpu. Esto es solo necesario si se emplea una gpu con el dispositivo de pennylane `lightning.gpu` con la interfaz `jax`, de lo contrario solo se requiere la versión más actualizada de pennylane.

Referencias

- [1] Richard P. Feynman. «Simulating physics with computers». En: *International Journal of Theoretical Physics* 21.6 (1982), págs. 467-488. ISSN: 1572-9575. DOI: [10.1007/BF02650179](https://doi.org/10.1007/BF02650179). URL: <https://doi.org/10.1007/BF02650179>.
- [2] Robert Gilmore. *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications*. New York: John Wiley & Sons, 1974. ISBN: 978-0-471-30179-0.
- [3] Manfredo P. do Carmo. *Differential Geometry of Curves and Surfaces*. 2nd. Mineola, NY: Dover Publications, 2016. ISBN: 978-0-486-80699-0.
- [4] Robert Gilmore. *Lie Groups, Physics, and Geometry: An Introduction*. Cambridge: Cambridge University Press, 2008. ISBN: 978-0-521-88400-6.
- [5] Michael E. Peskin y Daniel V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Reading, MA: Addison–Wesley, 1995.
- [6] W. Altman y A. M. D. Oliveira. *Physical Components of Tensors*. 1.^a ed. CRC Press, 2014. DOI: [10.1201/9781351228916](https://doi.org/10.1201/9781351228916). URL: <https://doi.org/10.1201/9781351228916>.
- [7] Peter Woit. *Quantum Theory, Groups and Representations: An Introduction*. Springer Cham, 2017. ISBN: 978-3-319-64610-7. DOI: [10.1007/978-3-319-64612-1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-64612-1).
- [8] Richard Chaviguri y Fulgencio Silva. «Simetrías gauge local aplicadas a la física». En: *Revista de Investigación de Física* 14 (jul. de 2011), págs. 1-9. DOI: [10.15381/rif.v14i01.8537](https://doi.org/10.15381/rif.v14i01.8537).
- [9] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. 3.^a ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2018. ISBN: 978-1-107-18963-8.
- [10] Michael A. Nielsen e Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. 10th Anniversary Edition. Cambridge University Press, 2010. ISBN: 9781107002173.

- [11] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Revised Edition. Section 1.2: “State Vectors and Inner Products”. Reading, MA: Addison–Wesley, 1994.
- [12] Guido R. Mocken y Christoph H. Keitel. «FFT-split-operator code for solving the Dirac equation in 2+1 dimensions». En: *Computer Physics Communications* 178.11 (2008), págs. 868-882. ISSN: 0010-4655. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2008.01.042>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465508000611>.
- [13] P. A. M. Dirac. «The Quantum Theory of the Electron». En: *Proceedings of the Royal Society A* 117.778 (1928), págs. 610-624.
- [14] Louis N. Hand y Janet D. Finch. *Analytical Mechanics*. Cambridge, UK; New York, NY: Cambridge University Press, 1998. ISBN: 0-521-57327-0.
- [15] François Fillion-Gourdeau, Steve MacLean y Raymond Laflamme. «Algorithm for the solution of the Dirac equation on digital quantum computers». En: *Physical Review A* 95.4 (abr. de 2017). ISSN: 2469-9934. DOI: [10.1103/physreva.95.042343](https://doi.org/10.1103/physreva.95.042343). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.95.042343>.
- [16] Peter W. Shor. «Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer». En: *SIAM Journal on Computing* 26.5 (1997), págs. 1484-1509. DOI: [10.1137/S0097539795293172](https://doi.org/10.1137/S0097539795293172). URL: <https://doi.org/10.1137/S0097539795293172>.
- [17] Lov K. Grover. «A Fast Quantum Mechanical Algorithm for Database Search». En: *arXiv preprint quant-ph/9605043* (1996). URL: <https://arxiv.org/abs/quant-ph/9605043>.
- [18] Hale F. Trotter. «On the Product of Semi-Groups of Operators». En: *Proceedings of the American Mathematical Society* 10.4 (1959), págs. 545-551. DOI: [10.1090/S0002-9939-1959-0108732-6](https://doi.org/10.1090/S0002-9939-1959-0108732-6).

- [19] Masuo Suzuki. «Generalized Trotter's formula and systematic approximants based on Lie algebra and inner derivations with applications to many-body problems». En: *Communications in Mathematical Physics* 51.2 (1976), págs. 183-190. DOI: [10.1007/BF01609348](https://doi.org/10.1007/BF01609348).
- [20] Randall J. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2002.
- [21] J Kempe. «Quantum random walks: An introductory overview». En: *Contemporary Physics* 44.4 (jul. de 2003), págs. 307-327. ISSN: 1366-5812. DOI: [10.1080/00107151031000110776](https://doi.org/10.1080/00107151031000110776). URL: <http://dx.doi.org/10.1080/00107151031000110776>.
- [22] Xanadu. *PennyLane Documentation*. <https://docs.pennylane.ai/en/stable/introduction/pennylane.html>. 2024.
- [23] Suhare Nur et al. *Announcing the Qiskit Functions Catalog*. <https://www.ibm.com/quantum/blog/qiskit-functions-catalog>. Sep. de 2024.
- [24] IBM Quantum. *Qiskit: The Highest Performing Quantum SDK*. <https://www.ibm.com/quantum/blog/qiskit-performance>. 2024.
- [25] Michael Mueller. *Fundamentals of Quantum Chemistry: Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations*. New York, NY: Springer, 2001. ISBN: 978-0-306-47566-5. DOI: [10.1007/b113924](https://doi.org/10.1007/b113924).
- [26] B. L. Douglas y J. B. Wang. *Efficient quantum circuit implementation of quantum walks*. 2009. arXiv: [0706.0304](https://arxiv.org/abs/0706.0304) [quant-ph]. URL: <https://arxiv.org/abs/0706.0304>.
- [27] Walter Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations*. Springer, 2000. ISBN: 0521818346.
- [28] M.D Feit, J.A Fleck y A Steiger. «Solution of the Schrödinger equation by a spectral method». En: *Journal of Computational Physics* 47.3 (1982), págs. 412-433. ISSN: 0021-9991. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(82\)90091-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(82)90091-2). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999182900912>.

-
- [29] Sidney Coleman. *Notes from Sidney Coleman's Physics 253a*. 2013. arXiv: [1110.5013](https://arxiv.org/abs/1110.5013) [physics.ed-ph]. URL: <https://arxiv.org/abs/1110.5013>.