

# Computación Cuántica con Dispositivos NMR

Apuntes completos basados en el SpinQ Triangulum

Antonio Falcó Montesinos

November 21, 2025

## Contents

<b>1</b>	<b>Introducción general</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Fundamentos de NMR para computación cuántica</b>	<b>5</b>
2.1	Espines nucleares como qubits	5
2.2	Hamiltoniano de una molécula en fase líquida	6
2.3	Evolución libre y señal FID	6
2.4	Control cuántico con pulsos RF	7
2.5	Acoplamientos $J$ y puertas de dos qubits	7
2.6	Régimen de fase líquida y estabilidad experimental	7
<b>3</b>	<b>Estados mixtos y Pseudo-Pure States (PPS)</b>	<b>8</b>
3.1	Estados térmicos y el régimen “Highly Mixed State” (HMS)	8
3.2	Formalismo de la matriz densidad en NMR	8
3.3	Construcción de los Pseudo-Pure States (PPS)	9
3.4	Interpretación física de un PPS	9
3.5	Limitaciones fundamentales del PPS	9
3.6	PPS en el SpinQ Triangulum	10
<b>4</b>	<b>Hamiltonianos NMR y puertas cuánticas</b>	<b>10</b>
4.1	Hamiltoniano total en fase líquida	10
4.2	Evolución en el marco rotante	11
4.3	Pulsos RF y rotaciones de un qubit	11
4.4	Puertas de un qubit	12
4.5	Puertas de dos qubits mediante acoplamiento $J$	12
4.6	Puertas compuestas: SWAP y iSWAP	12
4.7	Limitaciones de universalidad en NMR	13
4.8	Implementación en el SpinQ Triangulum	13
<b>5</b>	<b>El dispositivo <i>SpinQ Triangulum</i></b>	<b>13</b>
5.1	Arquitectura general y componentes físicos	14
5.2	La molécula $C_2F_3I$ como soporte de qubits	14
5.3	Control y generación de pulsos: GRAPE integrado	15
5.4	Sistema de adquisición y formación del espectro	15
5.5	Firmware y compilación de circuitos	16

5.6	Interfaz SpinQit, SpinQuasar y compilación de circuitos . . . . .	16
5.7	Capacidades actuales y limitaciones del Triangulum . . . . .	17
<b>6</b>	<b>La molécula <math>C_2F_3I</math> en computación cuántica NMR</b>	<b>18</b>
6.1	Composición atómica . . . . .	18
6.2	Estructura molecular y disposición de los qubits . . . . .	18
6.3	Propiedades NMR del núcleo $^{19}F$ . . . . .	19
6.4	Papel de los carbonos en la plataforma cuántica . . . . .	19
6.5	Contribución del yodo (I) . . . . .	20
6.6	Razones por las que $C_2F_3I$ es adecuada para computación cuántica NMR	20
<b>7</b>	<b>Calibración del <i>SpinQ Triangulum</i></b>	<b>20</b>
7.1	Concepto general de calibración en NMR . . . . .	21
7.2	Calibración de frecuencia (Frequency Calibration) . . . . .	21
7.3	Calibración de pulsos RF ( $90^\circ$ , $180^\circ$ y rotaciones arbitrarias) . . . . .	22
7.4	Medición de tiempos de relajación $T_1$ y $T_2$ . . . . .	22
7.5	Validación de la calibración mediante espectros . . . . .	23
7.6	Recomendaciones prácticas (docencia e investigación) . . . . .	24
<b>8</b>	<b>Programación de algoritmos en SpinQ</b>	<b>24</b>
8.1	El flujo de programación en SpinQit . . . . .	24
8.2	Programación básica con SpinQit (Python) . . . . .	25
8.3	Programación con OpenQASM 2.0 . . . . .	25
8.4	El compilador SpinQ: optimización y traducción a pulsos GRAPE . . . . .	26
8.5	Ejecución en simuladores y en el hardware Triangulum . . . . .	26
8.6	Ejemplo 1: estado $ +\rangle$ . . . . .	26
8.7	Ejemplo 2: algoritmo de Deutsch–Jozsa . . . . .	27
8.8	Ejemplo 3: Grover en 3 qubits . . . . .	27
8.9	Ejemplo 4: QITE (Quantum Imaginary Time Evolution) . . . . .	27
8.10	Interpretación de resultados en SpinQuasar . . . . .	28
8.11	Buenas prácticas para programación en el Triangulum . . . . .	28
<b>9</b>	<b>Limitaciones fundamentales de la plataforma NMR</b>	<b>29</b>
9.1	Limitación 1: Estado altamente mezclado (HMS) y pseudo-pure states . . . . .	29
9.2	Limitación 2: Acceso restringido a la matriz densidad . . . . .	29
9.3	Limitación 3: Decoherencia y tiempos $T_2$ cortos . . . . .	30
9.4	Limitación 4: Conectividad reducida del grafo de acoplamientos . . . . .	30
9.5	Limitación 5: Sensibilidad térmica y electrónica . . . . .	31
9.6	Limitación 6: Imposibilidad de realizar puertas verdaderamente no-Clifford ideales . . . . .	31
9.7	Limitación 7: Falta de escalabilidad . . . . .	31
9.8	Limitación 8: Restricciones en verificabilidad y benchmarking . . . . .	32
9.9	Síntesis: qué se puede y qué no se puede hacer . . . . .	32
9.10	Conclusión . . . . .	32
<b>10</b>	<b>Conclusiones docentes</b>	<b>33</b>
	<b>Apéndice A: Terminología empleada</b>	<b>35</b>

**Agradecimientos:** Este trabajo ha sido posible gracias al apoyo de la Conselleria de Innovación, Industria, Comercio y Turismo de la Generalitat Valenciana, cuyo compromiso con la divulgación científica y educativa agradecemos profundamente.



# 1 Introducción general

La computación cuántica basada en *Resonancia Magnética Nuclear* (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) constituye una de las plataformas experimentales más longevas y fiablemente controladas dentro del campo del procesamiento cuántico de la información. A diferencia de otras tecnologías más recientes —como los superconductores, iones atrapados o redes de átomos neutros—, los sistemas NMR han demostrado desde finales de la década de 1990 una capacidad excepcional para implementar de forma coherente y reproducible circuitos cuánticos de complejidad moderada, lo que los convierte en una herramienta ideal tanto para la validación experimental de algoritmos como para la docencia universitaria.

Desde el punto de vista histórico, el primer procesador cuántico funcional que implementó un algoritmo completo —incluyendo la transformada rápida de Fourier cuántica— fue un sistema NMR de dos qubits presentado por Cory, Gershenfeld y Chuang en 1997. Estos resultados dieron lugar a una serie de trabajos fundamentales que, apoyándose en la estabilidad de los tiempos de coherencia de los espines nucleares en fase líquida, permitieron ejecutar experimentalmente versiones tempranas de los algoritmos de Deutsch-Jozsa, Grover e incluso variantes reducidas del algoritmo de Shor. El desarrollo teórico y experimental culminó con la aparición de textos fundamentales como los de Jones, Vandersypen-Chuang y Oliveira et al., que hoy constituyen la referencia estándar del campo.

La esencia de NMR-QIP radica en la manipulación coherente de espines nucleares, típicamente con momento angular  $I = \frac{1}{2}$ , inmersos en un campo magnético estático fuerte y excitados mediante pulsos de radiofrecuencia (RF) cuidadosamente controlados. La dinámica cuántica se describe mediante el Hamiltoniano de Zeeman y los acoplamientos  $J$  entre núcleos, permitiendo implementar rotaciones arbitrarias y puertas de dos qubits a través de la evolución natural del sistema. Una ventaja crucial es la estabilidad térmica y la repetibilidad de las medidas, que superan con creces a muchas otras plataformas cuánticas actuales.

Sin embargo, los sistemas NMR presentan también limitaciones fundamentales: trabajan en el régimen llamado *Highly Mixed State* (HMS), en el cual la polarización de espín a temperatura ambiente es extremadamente pequeña. Como consecuencia, los estados cuánticos físicamente accesibles son altamente mezclados, y la preparación de estados puros debe realizarse mediante técnicas de *Pseudo-Pure States* (PPS). Estos PPS reproducen la dinámica de un estado cuántico puro, pero no permiten observar propiedades genuinamente cuánticas como la violación de desigualdades de Bell o la certificación experimental del entrelazamiento mediante tomografía completa, debido a que solamente una parte de la matriz densidad contribuye al observable macroscópico.

A pesar de esta limitación conceptual —intrínseca a la plataforma—, los sistemas NMR siguen siendo extraordinariamente valiosos como bancos de pruebas para la implementación de algoritmos cuánticos y para la enseñanza avanzada de computación cuántica. En particular, los dispositivos de sobremesa desarrollados recientemente, como el **SpinQ Triangulum**, han permitido que laboratorios académicos sin infraestructuras costosas puedan acceder a una máquina cuántica funcional, compacta, estable y lista para ejecutar circuitos reales. El Triangulum basa su funcionamiento en una molécula con tres núcleos de  $^{19}\text{F}$  acoplados, implementa puertas cuánticas mediante pulsos GRAPE optimizados y permite adquirir espectros directamente a través de una interfaz gráfica

ideada para docencia y formación.

En estas notas abordaremos no sólo los fundamentos físicos y matemáticos de la computación cuántica con NMR, sino también los aspectos prácticos esenciales para trabajar con el dispositivo Triangulum. Entre ellos destacan:

- la descripción detallada de los Hamiltonianos relevantes en fase líquida;
- la construcción y uso de los Pseudo-Pure States;
- los protocolos de calibración de frecuencia, pulsos RF y medidas de relajación  $T_1$  y  $T_2$ ;
- la programación de algoritmos cuánticos mediante SpinQuasar y PyQRunes;
- las limitaciones experimentales derivadas de la naturaleza HMS del sistema y sus implicaciones para la verificación del entrelazamiento;
- estudios de caso reales basados en ejecuciones experimentales: Deutsch–Jozsa, Grover y QITE.

El objetivo final es proporcionar un marco conceptual y práctico completo que permita comprender, operar y experimentar con sistemas de computación cuántica basados en NMR, a la vez que se contextualiza su papel dentro del ecosistema moderno de tecnologías cuánticas.

## 2 Fundamentos de NMR para computación cuántica

La computación cuántica basada en resonancia magnética nuclear (NMR-QIP) utiliza sistemas de espines nucleares como qubits controlables mediante campos magnéticos estáticos y pulsos de radiofrecuencia (RF). En esta sección presentamos los fundamentos físicos necesarios para comprender cómo se implementan y manipulan qubits en fase líquida, así como el origen de los espectros que se emplean para leer la información cuántica.

### 2.1 Espines nucleares como qubits

Los núcleos con momento angular  $I = \frac{1}{2}$  (como  $^1H$ ,  $^{13}C$ ,  $^{19}F$  o  $^{31}P$ ) poseen dos estados propios de  $I_z$ , que se identifican directamente como los estados lógico-cuánticos:

$$|0\rangle = |m_I = +1/2\rangle, \quad |1\rangle = |m_I = -1/2\rangle.$$

Cuando un espín nuclear se encuentra en un campo magnético estático intenso  $\mathbf{B}_0 = B_0\hat{z}$ , su Hamiltoniano libre está dado por:

$$H_Z = -\gamma B_0 I_z,$$

donde  $\gamma$  es la constante giromagnética del núcleo. Este término produce un desdoblamiento energético proporcional a  $B_0$  y fija la frecuencia de precesión clásica conocida como frecuencia de Larmor:

$$\omega_0 = \gamma B_0.$$

El control cuántico de los qubits se consigue aplicando campos RF transversales, cuyas frecuencias y fases permiten generar rotaciones arbitrarias del estado del espín alrededor de ejes específicos del espacio de Bloch.

## 2.2 Hamiltoniano de una molécula en fase líquida

Para un sistema con varios núcleos acoplados en fase líquida, el Hamiltoniano total es la suma del término de Zeeman para cada espín y de los acoplamientos  $J$  entre espines:

$$H = \sum_{i=1}^n \omega_i I_z^{(i)} + 2\pi \sum_{i < j} J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)}.$$

Los elementos clave son:

- **Desplazamientos químicos.** Cada núcleo tiene una frecuencia ligeramente distinta debido a su entorno molecular:

$$\omega_i = \gamma_i B_0 (1 - \sigma_i),$$

donde  $\sigma_i$  es el blindaje electrónico.

- **Acoplamientos  $J$ .** El acoplamiento indirecto  $J$  entre dos núcleos proviene de la interacción de sus espines a través de los electrones enlazantes. En el régimen de acoplamiento escalar isotrópico, la interacción toma la forma:

$$H_{ij} = 2\pi J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)}.$$

Estos acoplamientos son fundamentales para implementar puertas de dos qubits.

En fase líquida, las interacciones dipolares directas promedian a cero debido a la rápida rotación molecular, lo que simplifica enormemente la estructura Hamiltoniana y permite un control más limpio y estable.

## 2.3 Evolución libre y señal FID

Tras aplicar un pulso RF que inclina la magnetización de equilibrio hacia el plano transversal, el momento magnético total evoluciona como:

$$M_{xy}(t) = M_0 e^{-t/T_2} e^{-i\omega_0 t}.$$

La señal de inducción libre (*Free Induction Decay*, FID) es la corriente detectada por la bobina receptora, AW proporcional a esta magnetización. La transformada de Fourier del FID genera el espectro NMR observable:

$$S(\omega) = \int_0^\infty M_{xy}(t) e^{i\omega t} dt.$$

Para un sistema acoplado de varios núcleos se observan múltiples líneas espectrales, cuyo desdoblamiento revela la estructura de acoplamientos  $J$ . En computación cuántica, estas líneas permiten identificar a cada qubit y verificar la ejecución de las puertas cuánticas.

## 2.4 Control cuántico con pulsos RF

Los pulsos de RF se modelan mediante términos del tipo:

$$H_{\text{RF}}(t) = -\gamma B_1(t) [I_x \cos(\omega_{\text{RF}}t + \phi) + I_y \sin(\omega_{\text{RF}}t + \phi)].$$

En el marco rotante (*rotating frame*), un pulso resonante implementa una rotación:

$$R_\alpha(\theta) = e^{-i\theta I_\alpha}, \quad \alpha \in \{x, y, z\},$$

donde  $\theta = \gamma B_1 \tau$  depende de la amplitud y duración del pulso.

En particular:

- Pulsos de  $90^\circ$  producen rotaciones  $\pi/2$ .
- Pulsos de  $180^\circ$  invierten la magnetización.
- Los ejes de rotación se controlan mediante la fase del pulso.

En las implementaciones modernas (como SpinQ), los pulsos se generan mediante optimización GRAPE, lo que permite producir rotaciones de alta fidelidad con perfiles de amplitud modulados complejos.

## 2.5 Acoplamientos $J$ y puertas de dos qubits

La interacción  $J$  entre dos espines permite implementar puertas cuánticas bicurbitales. Bajo la evolución libre:

$$U_{ij}(t) = e^{-2\pi i J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)} t},$$

se obtiene una fase relativa entre los niveles  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ . Esta operación, combinada con pulsos locales, genera puertas como:

$$\text{CNOT}_{i \rightarrow j} = (H_j) e^{-2\pi i J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)} (1/2J_{ij})} (H_j),$$

donde  $H_j$  es la puerta de Hadamard en el qubit objetivo.

Los acoplamientos  $J$  fuertes permiten puertas más rápidas, mientras que acoplamientos débiles requieren tiempos de evolución más largos que pueden ser vulnerables a la decoherencia.

## 2.6 Régimen de fase líquida y estabilidad experimental

En fase líquida, la interacción dipolar directa se promedia a cero, y el Hamiltoniano queda dominado por los términos de Zeeman y los acoplamientos  $J$ . Esto simplifica la dinámica cuántica y hace posible la implementación precisa de puertas, incluso en pequeños espectrómetros de sobremesa.

Las ventajas principales de este régimen son:

- Estabilidad térmica y reproducibilidad.
- Espectros limpios y fácilmente interpretables.
- Homogeneidad del campo magnético efectivo.

Estas propiedades explican por qué NMR continúa siendo una plataforma insustituible para enseñanza y validación experimental de algoritmos cuánticos.

### 3 Estados mixtos y Pseudo-Pure States (PPS)

En computación cuántica basada en NMR, los estados accesibles experimentalmente no son estados puros del tipo  $|\psi\rangle$ , sino estados altamente mezclados producidos por la termodinámica del sistema. Esta característica condiciona profundamente los mecanismos de preparación del estado, la interpretación de los resultados y las limitaciones teóricas de la plataforma. En esta sección desarrollamos el formalismo necesario para entender por qué es indispensable el concepto de *Pseudo-Pure State* (PPS) y cómo éste permite reproducir la dinámica de un estado cuántico puro en un sistema macroscópico de espines.

#### 3.1 Estados térmicos y el régimen “Highly Mixed State” (HMS)

A temperatura ambiente, la energía de interacción magnética de un espín nuclear es extremadamente pequeña comparada con la energía térmica:

$$\hbar\omega_0 \ll k_B T.$$

Por ejemplo, para un núcleo de  $^{19}\text{F}$  en un campo  $B_0 \sim 0.5$  T, la energía de Zeeman es del orden de:

$$\hbar\omega_0 \approx 10^{-26} \text{ J},$$

mientras que  $k_B T$  a temperatura ambiente es del orden de:

$$k_B T \approx 4 \times 10^{-21} \text{ J}.$$

La densidad de espines está, por tanto, muy poco polarizada. El estado térmico se escribe como:

$$\rho_{\text{thermal}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_Z} \simeq \frac{1}{2^n} I + \epsilon \Delta,$$

donde:

- $I$  es la identidad de dimensión  $2^n$ ,
- $\epsilon \approx 10^{-5}$  es la **polarización efectiva**,
- $\Delta$  es una pequeña desviación “observable”.

Este estado se denomina **Highly Mixed State** (HMS): casi toda la matriz densidad está formada por la parte uniforme  $\frac{1}{2^n} I$ , sin estructura cuántica observable.

**Consecuencia fundamental:** *la mayor parte de la población del estado no contribuye a la señal NMR.* Solo la pequeña parte proporcional a  $\epsilon$  genera magnetización transversal y, por tanto, señal detectable.

#### 3.2 Formalismo de la matriz densidad en NMR

La evolución de un HMS bajo un operador unitario  $U$  es:

$$\rho \mapsto U \rho U^\dagger = \frac{1}{2^n} I + \epsilon U \Delta U^\dagger.$$



La parte uniforme  $\frac{1}{2^n}I$  es invariante y *no* contribuye a ningún observable NMR. Toda la información relevante para la computación cuántica está, pues, en:

$$\rho_{\text{dev}} = U\Delta U^\dagger,$$

conocida como *deviation density matrix*.

Este hecho explica por qué la computación cuántica basada en NMR utiliza un formalismo mixto entre física cuántica y teoría de control clásico.

### 3.3 Construcción de los Pseudo-Pure States (PPS)

Dado que no es posible preparar estados puros reales, la estrategia es simular su comportamiento mediante estados de la forma:

$$\rho_{\text{pps}} = \frac{1-\eta}{2^n}I + \eta |\psi\rangle \langle\psi|,$$

donde  $0 < \eta \ll 1$  es la fracción “observable” del estado.

Este estado:

- evoluciona exactamente como  $|\psi\rangle \langle\psi|$  bajo cualquier unidad,
- genera señales experimentales proporcionales a  $\eta$ ,
- permite implementar algoritmos cuánticos sin necesidad de estados puros.

La identidad  $\frac{1}{2^n}I$  sigue siendo invisible a la observación.

En los dispositivos modernos (como el SpinQ Triangulum), el PPS se genera mediante un procedimiento automatizado de relajación y pulsos RF optimizados, sin que el usuario deba programar explícitamente las secuencias de promediado espacial o temporal tradicionales.

### 3.4 Interpretación física de un PPS

La interpretación operativa es la siguiente:

La señal NMR observada corresponde a un subconjunto efectivo de espines cuyo estado cuántico es  $|\psi\rangle$ . El resto de los espines (la gran mayoría) están en una mezcla maximamente uniforme que no contribuye a la señal.

Por ello, un PPS permite reproducir *la dinámica* de un estado puro, pero no su *estructura completa de coherencias y correlaciones cuánticas*.

### 3.5 Limitaciones fundamentales del PPS

La estructura del PPS impone varias limitaciones teóricas y experimentales:

- L1. No es posible certificar entrelazamiento.** Dado que el estado real es una mezcla altamente dominada por la identidad, los criterios de entanglement (PPT, negatividad, witness) se vuelven inconclusos. La señal experimental integrada no puede distinguir entre estados separables y estados verdaderamente entrelazados.

- L2. No se pueden observar las coherencias fuera de la diagonal completa.** Las técnicas estándar de SpinQ (por ejemplo, la interfaz SpinQuasar) solo permiten medir las poblaciones en la base computacional, es decir, los elementos diagonales de  $\rho_{\text{pps}}$ . Las coherencias cuánticas no son accesibles.
- L3. Los PPS no violan desigualdades de Bell.** Al dominar la identidad, cualquier intento de medir correlaciones cuánticas fuertemente no clásicas queda diluido.
- L4. La fidelidad del PPS está limitada por la polarización  $\eta$ .** La señal cuántica decrece como  $\mathcal{O}(\eta) \sim 10^{-5}$ , lo que limita la profundidad de los circuitos cuánticos y amplifica el efecto de los errores de control y decoherencia.

### 3.6 PPS en el SpinQ Triangulum

El dispositivo Triangulum genera automáticamente un PPS mediante un proceso interno controlado por su firmware. Las características esenciales son:

- no se requiere preparación manual de PPS;
- la fidelidad del PPS es suficientemente alta para circuitos de hasta decenas de puertas;
- la ausencia de accesibilidad a las coherencias está integrada en el diseño experimental: sólo se exportan las poblaciones;
- el PPS es robusto frente a pequeñas variaciones térmicas.

En la práctica docente, esto simplifica enormemente el uso del equipo, permitiendo centrarse en la lógica cuántica, la compilación de algoritmos y la interpretación espectral de las poblaciones finales.

## 4 Hamiltonianos NMR y puertas cuánticas

En computación cuántica basada en NMR, las operaciones lógicas sobre los qubits se implementan mediante la evolución controlada bajo un Hamiltoniano bien definido y la aplicación de pulsos de radiofrecuencia (RF) que generan rotaciones prescritas. En esta sección describimos en detalle el Hamiltoniano efectivo que gobierna la dinámica de un sistema molecular en fase líquida y cómo se construyen las puertas cuánticas a partir de sus contribuciones.

### 4.1 Hamiltoniano total en fase líquida

El Hamiltoniano de un sistema de  $n$  espines  $I = \frac{1}{2}$  en fase líquida está dominado por dos tipos de contribuciones:

1. términos de Zeeman (interacción con el campo estático  $B_0$ );
2. acoplamientos escalares  $J$  entre espines.

En ausencia de pulsos RF, el Hamiltoniano libre se escribe como:

$$H_0 = \sum_{i=1}^n \omega_i I_z^{(i)} + 2\pi \sum_{i<j} J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)}.$$

Cada término tiene una interpretación física clara:

- **Desplazamiento químico:** Cada núcleo experimenta un entorno electrónico distinto, lo que altera ligeramente su frecuencia de Larmor:

$$\omega_i = \gamma_i B_0 (1 - \sigma_i),$$

donde  $\sigma_i$  es el blindaje químico.

- **Acoplamiento escalar  $J_{ij}$ :** Es una interacción indirecta mediada por electrones enlazantes. En fase líquida, la rápida rotación molecular suprime las interacciones dipolares anisótropas, dejando solo el acoplamiento escalar isotrópico:

$$H_{ij} = 2\pi J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)}.$$

Este Hamiltoniano es extraordinariamente estable y reproducible, lo que convierte a NMR en una plataforma ideal para la enseñanza y validación experimental de protocolos cuánticos.

## 4.2 Evolución en el marco rotante

Para simplificar el análisis, es común utilizar el *rotating frame* (marco rotante), en el cual los términos Zeeman dominantes se transforman fuera del Hamiltoniano efectivo. Esto permite centrarse en los acoplamientos y en los pulsos RF resonantes.

Dado un estado  $\rho$ , definimos:

$$\tilde{\rho}(t) = e^{i\omega_{\text{ref}} I_z t} \rho(t) e^{-i\omega_{\text{ref}} I_z t}.$$

El Hamiltoniano en el marco rotante es entonces:

$$\tilde{H}_0 = H_0 - \omega_{\text{ref}} \sum_i I_z^{(i)}.$$

Ajustando  $\omega_{\text{ref}} \approx \omega_i$  para cada qubit, la dinámica queda dominado por los acoplamientos  $J$ , lo cual es crucial para implementar puertas de dos qubits.

## 4.3 Pulsos RF y rotaciones de un qubit

La aplicación de un pulso RF se modela mediante:

$$H_{\text{RF}}(t) = -\gamma B_1(t) [I_x \cos(\omega_{\text{RF}} t + \phi) + I_y \sin(\omega_{\text{RF}} t + \phi)].$$

En el marco rotante resonante, este término se aproxima por:

$$\tilde{H}_{\text{RF}} = -\frac{\gamma B_1}{2} (I_x \cos \phi + I_y \sin \phi).$$

La evolución durante un pulso de duración  $\tau$  genera la unidad:

$$R_\alpha(\theta) = e^{-i\theta I_\alpha}, \quad \theta = \gamma B_1 \tau,$$

donde  $\alpha = x, y$  según la fase  $\phi$  del pulso.

En los dispositivos modernos (SpinQ Triangulum), los pulsos se generan mediante técnicas GRAPE (Gradient Ascent Pulse Engineering), lo que permite producir rotaciones de alta fidelidad y robustas frente a inhomogeneidades.

## 4.4 Puertas de un qubit

Las puertas de un qubit más importantes son:

$$X = R_x(\pi), \quad Y = R_y(\pi), \quad Z = R_z(\pi).$$

Las rotaciones arbitrarias se implementan como:

$$R_\alpha(\theta) = e^{-i\theta\sigma_\alpha/2}.$$

Las puertas compuestas incluyen:

- **Hadamard:**

$$H = R_y(-\pi/2) R_x(\pi).$$

- $\sqrt{X}$ ,  $\sqrt{Y}$ , importantes para QITE y algoritmos variacionales.

Estos pulsos son extremadamente precisos en NMR debido al control fino de amplitud, fase y duración.

## 4.5 Puertas de dos qubits mediante acoplamiento $J$

El acoplamiento  $J_{ij}$  genera la unidad natural:

$$U_J(t) = e^{-2\pi i J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)} t}.$$

Para  $t = 1/(2J_{ij})$ , esta operación actúa como una puerta de fase controlada:

$$U_J\left(\frac{1}{2J}\right) = \text{diag}(1, 1, 1, -1),$$

equivalente a una puerta CZ (Controlled-Z).

Una puerta CNOT se obtiene mediante:

$$\text{CNOT}_{i \rightarrow j} = (H_j) \text{CZ}_{ij} (H_j),$$

donde  $H_j$  es una Hadamard en el qubit objetivo.

## 4.6 Puertas compuestas: SWAP y iSWAP

La puerta SWAP puede implementarse con tres CNOT:

$$\text{SWAP}(i, j) = \text{CNOT}_{i \rightarrow j} \text{CNOT}_{j \rightarrow i} \text{CNOT}_{i \rightarrow j}.$$

En sistemas NMR con acoplamientos  $J$  moderados, esta secuencia es viable si la decoherencia no es demasiado severa (el Triangulum puede ejecutarla entre Q1 y Q2 con buena fidelidad, pero no entre Q1 y Q3).

## 4.7 Limitaciones de universalidad en NMR

La universalidad teórica está garantizada por la disponibilidad de todas las rotaciones de un qubit y por la existencia de al menos un acoplamiento  $J_{ij}$  no nulo. Sin embargo, en la práctica existen restricciones importantes:

- U1. Los acoplamientos débiles limitan la velocidad de puertas.** Para  $J_{ij}$  pequeño, las puertas CZ requieren tiempos largos, vulnerables a decoherencia.
- U2. Los pulsos tienen fidelidad limitada por inhomogeneidades de campo.** Aunque GRAPE mitiga este problema, no lo elimina por completo.
- U3. El PPS impide la observación de correlaciones cuánticas fuertes.** Aunque las puertas se implementen correctamente, la señal resultante no permite verificar entrelazamiento.
- U4. Un único marco rotante no siempre puede ajustarse simultáneamente a todos los qubits.** Esto introduce desintonizaciones pequeñas que deben corregirse mediante pulsos adicionales.

## 4.8 Implementación en el SpinQ Triangulum

En el Triangulum:

- Las puertas locales se implementan mediante pulsos GRAPE precalibrados.
- Las puertas de dos qubits se obtienen mediante evolución bajo los valores  $J_{12}$  y  $J_{23}$ , típicamente con  $J_{12} > J_{23} \gg J_{13}$ .
- La fidelidad de la puerta depende fuertemente del qubit implicado: Q2 suele ser el más sensible a decoherencia.
- La interfaz SpinQuasar compila automáticamente el circuito y genera la secuencia completa de pulsos.

En conjunto, estos elementos permiten programar circuitos de tamaño moderado con fidelidades suficientes para propósitos docentes y de validación experimental.

## 5 El dispositivo *SpinQ Triangulum*

El *SpinQ Triangulum* es un procesador cuántico de sobremesa basado en Resonancia Magnética Nuclear diseñado para docencia, divulgación y experimentos de validación en computación cuántica. A diferencia de los espectrómetros NMR tradicionales, el Triangulum es un sistema completamente integrado —imán, electrónica RF, controladora digital y módulo de adquisición— que opera con un mínimo mantenimiento y proporciona una interfaz de programación simplificada orientada a usuarios no especializados.

En esta sección describimos en detalle la arquitectura física del aparato, la molécula empleada como soporte cuántico, el sistema de control y la interfaz software utilizada para ejecutar algoritmos cuánticos.

## 5.1 Arquitectura general y componentes físicos

El Triangulum está formado por los siguientes módulos:

- **Imán permanente.** Genera un campo magnético estático de aproximadamente  $B_0 \sim 0.5$  T, suficiente para separar claramente las frecuencias de Larmor de los tres núcleos de fluor empleados como qubits. Al ser un imán permanente, el sistema no requiere criogenia ni suministros adicionales de energía para mantener el campo.
- **Bobinas transmisoras y receptoras de RF.** Integradas en la cámara interna, permiten aplicar pulsos de radiofrecuencia con amplitud, fase y duración controladas, así como recibir la señal de inducción libre (FID) generada por el conjunto de espines.
- **Controladora digital con FPGA.** Contiene el generador de ondas arbitrarias (AWG), la unidad de mezcla IQ, los conversores analógicos/digitales y la electrónica para sincronizar pulsos, aperturas de ventana de adquisición y tiempos de evolución bajo el acoplamiento  $J$ .
- **Módulo de estabilización térmica.** Compensa parcialmente variaciones de la temperatura ambiente; no obstante, el Triangulum es sensible a cambios bruscos de temperatura debido a la expansión térmica de componentes magnéticos y electrónicos.
- **Tubo de muestra con la molécula cuántica.** La muestra es un líquido estable de moléculas  $C_2F_3I$ , sellado en un contenedor interno. El usuario no necesita manipular la muestra.

El conjunto está encapsulado en una carcasa compacta, con ventilación posterior y conexión USB/Ethernet al ordenador de control.

## 5.2 La molécula $C_2F_3I$ como soporte de qubits

El Triangulum utiliza tres núcleos de  $^{19}F$ , que poseen espín  $I = \frac{1}{2}$  y una alta sensibilidad NMR. La molécula  $C_2F_3I$  tiene una estructura geométrica que favorece una jerarquía clara de acoplamientos:

$$J_{12} \gg J_{23} \gg J_{13} \approx 0.$$

Esta topología en cadena determina:

- la conectividad efectiva del procesador;
- qué puertas de dos qubits pueden implementarse con mayor fidelidad;
- la longitud temporal mínima de puertas como CNOT y CZ.

Los tres qubits se identifican mediante sus frecuencias de Larmor  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ , separadas lo suficiente para permitir pulsos selectivos.

En particular:

- Q1 y Q2 son los qubits mejor acoplados (puertas más rápidas);
- Q3 tiene un acoplamiento débil con Q1 y Q2, lo que ralentiza las puertas y aumenta la susceptibilidad a decoherencia.

Estas propiedades coinciden con los resultados experimentales: Q2 presenta el tiempo  $T_1$  más corto y suele ser el qubit más sensible a errores.

### 5.3 Control y generación de pulsos: GRAPE integrado

La controladora del Triangulum emplea un motor GRAPE (*Gradient Ascent Pulse Engineering*) interno para generar pulsos de alta fidelidad. GRAPE permite:

- ajustar la forma del pulso para compensar inhomogeneidades en  $B_1$ ;
- combinar varias rotaciones en un único pulso optimizado;
- implementar puertas  $\sqrt{X}$ ,  $\sqrt{Y}$  y rotaciones arbitrarias;
- minimizar el tiempo total de ejecución;
- reducir errores acumulados debidos a precesión fuera de resonancia.

Cada vez que el usuario selecciona una puerta en la interfaz, SpinQuasar no ejecuta un pulso elemental predefinido, sino una forma modulada optimizada mediante GRAPE, almacenada en la memoria interna del dispositivo.

### 5.4 Sistema de adquisición y formación del espectro

Tras la aplicación del circuito cuántico, la información del estado se obtiene mediante adquisición de la señal FID. El Triangulum realiza:

1. digitalización de la señal,
2. transformada de Fourier,
3. corrección de fase automática,
4. extracción de las intensidades de picos correspondientes a cada núcleo.

De esta manera, la interfaz devuelve directamente las *poblaciones finales* de la matriz densidad, equivalentes a los elementos diagonales  $\rho_{00\dots 0}, \rho_{00\dots 1}, \dots$

Esto implica que:

- el dispositivo no reconoce coherencias cuánticas de forma nativa;
- no puede extraer directamente las componentes fuera de la diagonal de la matriz densidad;
- no puede realizar tomografía cuántica completa.

Estas limitaciones son coherentes con el diseño educativo del sistema.

## 5.5 Firmware y compilación de circuitos

La compilación de circuitos en el Triangulum sigue las etapas:

1. Análisis del circuito lógico en SpinQuasar o PyQRunes.
2. Reescritura en una secuencia de puertas nativas:

$$\{R_x(\theta), R_y(\theta), R_z(\theta), \text{CZ}, \text{CNOT}, \sqrt{X}, \dots\}.$$

3. Agrupamiento de rotaciones para formar pulsos GRAPE.
4. Inserción de tiempos de evolución bajo acoplamiento  $J$ .
5. Ensamblaje de la secuencia final en el AWG.

La compilación es completamente automática y está optimizada para minimizar la duración total de la secuencia, lo cual es crucial porque los tiempos de coherencia —especialmente  $T_2$ — son cortos en comparación con otras arquitecturas cuánticas.

## 5.6 Interfaz SpinQit, SpinQuasar y compilación de circuitos

El ecosistema de programación del Triangulum se articula a través del framework *SpinQit* (versión 0.2.2 al momento de escribir). Este entorno proporciona dos modos principales de acceso:

- **Modo Python (SpinQit Python API)** La biblioteca permite definir circuitos cuánticos con sintaxis fluida, simularlos localmente o desplegarlos en el backend físico (Triangulum). Ejemplo mínimo:

```
import spinqit as sq
qc = sq.QuantumCircuit(3)
qc.h(0)
qc.cx(0,1)
result = sq.run(qc, backend='Triangulum')
print(result.get_counts())
```

Este ejemplo evidencia la integración de funciones como `QuantumCircuit()`, `h()`, `cx()` y `run()` dentro de la API. (Ver “Programming → SpinQit Python” en la documentación.) [spinqit-python](#)

- **Modo OpenQASM 2.0 / Qiskit compatible** SpinQit acepta qubits escritos en formato OpenQASM 2.0 o importados desde Qiskit, facilitando la transición de usuarios familiarizados con el ecosistema IBM. El compilador interno traduce el circuito lógico en una secuencia optimizada de pulsos GRAPE para el hardware. [openqasm-2-0](#)

### Flujo de compilación:

1. El usuario crea un circuito cuántico (Python o OpenQASM).



2. El *compiler* interno analiza y descompone las operaciones en la biblioteca de puertas soportadas por el hardware (nativas).
3. El optimizador de compilación aplica técnicas de “Compilation Optimization” (ej., fusión de puertas, cancelación de rotaciones, minimización de tiempos muertos). [compiler.html](#)
4. El circuito es convertido en un archivo de pulsos adecuado para el AWG del Triangulum.
5. La ejecución puede seleccionarse en simulador (“Basic Simulator”, “Torch Simulator”) o en el “Local Quantum Computer” físico. [backend.html](#)

#### **Infraestructura de backend:**

El backend físico utiliza la conectividad de tres qubits del Triangulum, gestiona la columna de acoplamientos  $J_{12}$ ,  $J_{23}$  y asigna automáticamente los mapeos de qubit lógico  $\rightarrow$  qubit físico. El usuario no debe conocer internamente el hardware, ya que el sistema abstrae los detalles para la programación. (Documentado en “Backend  $\rightarrow$  Local Quantum Computer”.) [backend.html](#)

#### **Visualización y resultados:**

Tras la ejecución, el resultado provisto es el cómputo de poblaciones finales (conteos de estado) y no la tomografía completa de la matriz densidad. En la GUI de SpinQit o SpinQuasar, el usuario visualiza directamente el espectro, los “counts” y puede exportar los datos para análisis externo.

#### **Compatibilidad educativa:**

SpinQit incluye ejemplos predefinidos (“Examples  $\rightarrow$  Grover Example”, “Deutsch-Jozsa Example”, etc.) listos para ejecución inmediata en el hardware físico o simulador. Esta característica reafirma el enfoque educativo del dispositivo. [index.html](#)

## **5.7 Capacidades actuales y limitaciones del Triangulum**

#### **Capacidades:**

- Implementación fiable de circuitos de tamaño pequeño-moderado (hasta decenas de puertas).
- Selectividad de pulsos alta entre los tres qubits.
- Puertas de dos qubits fiables entre Q1–Q2 y Q2–Q3.
- Plataforma ideal para docencia avanzada de computación cuántica.
- Repetibilidad experimental excelente.

#### **Limitaciones:**

- No accesibilidad a coherencias cuánticas  $\rightarrow$  no se puede verificar entrelazamiento.
- Q2 suele tener tiempos  $T_1$  y  $T_2$  más cortos, limitando la profundidad de circuitos.
- El acoplamiento  $J_{13}$  es casi nulo  $\rightarrow$  no hay conectividad directa entre Q1 y Q3.

- Sensibilidad a variaciones térmicas externas.
- Frecuencias fijas: no existe ajuste fino del campo  $B_0$ .

En conjunto, el SpinQ Triangulum es una herramienta extremadamente valiosa para la formación, el diseño de prácticas de laboratorio en computación cuántica y la implementación de algoritmos reales en un entorno controlado y accesible.

## 6 La molécula $C_2F_3I$ en computación cuántica NMR

La molécula  $C_2F_3I$  es el soporte físico utilizado por el *SpinQ Triangulum* para implementar sus tres qubits. En esta sección se describe su composición atómica, estructura geométrica y relevancia desde la perspectiva de la computación cuántica basada en resonancia magnética nuclear (NMR).

### 6.1 Composición atómica

La fórmula molecular  $C_2F_3I$  representa un compuesto orgánico halogenado formado por:

- **2 átomos de carbono (C)**,
- **3 átomos de flúor (F)**,
- **1 átomo de yodo (I)**.

Cada elemento cumple un papel diferente dentro de la arquitectura molecular:

**Carbono (C)** Elemento tetravalente que forma la columna vertebral de la molécula. Los dos carbonos fijan la estructura geométrica y determinan la red de enlaces que conecta los núcleos de flúor.

**Flúor (F)** Átomo altamente electronegativo con espín nuclear  $I = \frac{1}{2}$ . Los **tres núcleos** de  $^{19}F$  constituyen los **tres qubits físicos** del procesador.

**Yodo (I)** Átomo pesado que estabiliza la molécula y modifica los desplazamientos químicos de los carbonos y flúores, facilitando la separación espectral de estos últimos.

### 6.2 Estructura molecular y disposición de los qubits

La molécula presenta una estructura aproximadamente planar, con los tres núcleos de flúor ocupando posiciones no equivalentes alrededor del esqueleto formado por los dos carbonos. Esta falta de equivalencia química es esencial porque permite que cada núcleo tenga una **frecuencia de Larmor distinta**, condición necesaria para su control independiente como qubit.

La geometría también determina la intensidad del acoplamiento escalar:

$$J_{12} \gg J_{23} \gg J_{13} \approx 0,$$

lo que se traduce en una conectividad lineal entre qubits:

$$Q_1 \leftrightarrow Q_2 \leftrightarrow Q_3.$$

Los valores típicos (aproximados) son:

$$J_{12} \approx 150\text{--}260 \text{ Hz}, \quad J_{23} \approx 20\text{--}60 \text{ Hz}, \quad J_{13} \approx 0.$$

Esta jerarquía de acoplamientos es perfecta para NMR-QIP, ya que proporciona:

- una puerta CNOT rápida entre Q1 y Q2,
- una puerta más lenta entre Q2 y Q3,
- ausencia de acoplamiento directo entre Q1 y Q3 (requiere SWAP).

### 6.3 Propiedades NMR del núcleo $^{19}\text{F}$

Los flúores son elegidos como qubits debido a:

- su espín  $I = \frac{1}{2}$  (idéntico al qubit ideal),
- alta sensibilidad NMR (gran relación señal/ruido),
- desplazamientos químicos claramente diferenciados,
- acoplamientos  $J$  robustos y estables.

La frecuencia de Larmor típica para  $^{19}\text{F}$  en el campo del Triangulum ( $B_0 \sim 0.5 \text{ T}$ ) se encuentra en el rango de decenas de MHz. Cada qubit se distingue porque:

$$\omega_1 \neq \omega_2 \neq \omega_3,$$

lo que permite aplicar pulsos RF selectivos sin interferencia.

### 6.4 Papel de los carbonos en la plataforma cuántica

Aunque los núcleos de carbono  $^{13}\text{C}$  (si estuvieran presentes) podrían usarse como qubits, en esta molécula los carbonos cumplen un propósito puramente estructural:

- fijan distancias interatómicas que determinan  $J_{ij}$ ,
- modulan los desplazamientos químicos de los flúores,
- estabilizan la forma y reactividad del compuesto,
- permiten que los F sean químicamente no equivalentes.

El carbono es crucial para que la molécula sea un buen procesador cuántico NMR, pero **no actúa como qubit** en el Triangulum.

## 6.5 Contribución del yodo (I)

El átomo de yodo:

- aumenta la estabilidad de la molécula,
- influye en los desplazamientos químicos del entorno,
- contribuye a que los tres flúores tengan frecuencias distintas,
- aporta masa y polarizabilidad que modifican ligeramente la dinámica.

No participa en la dinámica cuántica ni es observable en los experimentos del Triangulum.

## 6.6 Razones por las que $\text{C}_2\text{F}_3\text{I}$ es adecuada para computación cuántica NMR

La elección de esta molécula obedece a criterios estrictos de ingeniería molecular:

- **Tres núcleos de  $^{19}\text{F}$**  con desplazamientos químicos bien separados.
- **Acoplamientos  $J$  fuertes y estables** entre qubits adyacentes.
- **Ausencia de acoplamientos indeseados** (como  $J_{13} \approx 0$ ).
- **Buena estabilidad térmica** y reproducibilidad espectral.
- **Relajaciones  $T_1$  y  $T_2$  adecuadas** para circuitos cortos.
- **Muestra líquida cerrada**, sin necesidad de mantenimiento ni manipulación.

Estas propiedades convierten  $\text{C}_2\text{F}_3\text{I}$  en uno de los compuestos más adecuados para computación cuántica NMR a escala educativa y experimental.

## 7 Calibración del *SpinQ Triangulum*

La calibración es un componente crítico en computación cuántica basada en NMR. Aunque el Triangulum integra un conjunto de rutinas automáticas diseñadas para facilitar su uso docente, comprender sus principios permite interpretar mejor los resultados experimentales, detectar desviaciones y asegurar una correcta ejecución de los algoritmos.

El objetivo de esta sección es describir los protocolos fundamentales de calibración del Triangulum: calibración de frecuencia, calibración de pulsos RF y medición de tiempos de relajación  $T_1$  y  $T_2$ . También se discuten problemas frecuentes y sus efectos sobre la fidelidad del procesamiento cuántico.

## 7.1 Concepto general de calibración en NMR

La calibración de un sistema NMR consiste en ajustar los parámetros experimentales ( $\omega_i$ , amplitud y fase de pulsos, tiempos de evolución, escalas de frecuencia, etc.) para que la dinámica física implementada corresponda con las puertas cuánticas definidas a nivel lógico.

En computación cuántica NMR, los principales objetivos de una calibración correcta son:

- garantizar que cada qubit está en resonancia con su pulso correspondiente;
- asegurar que los pulsos  $R_\alpha(\theta)$  tienen la duración y amplitud correctas;
- verificar que las señales no presentan corrimientos debidos a drift térmico;
- confirmar que los tiempos de coherencia son suficientes para el circuito deseado.

En el Triangulum, la mayoría de estas tareas puede realizarse mediante el entorno SpinQuasar, aunque es importante entender su fundamento físico.

## 7.2 Calibración de frecuencia (Frequency Calibration)

Cada núcleo de  $^{19}\text{F}$  en la molécula tiene una frecuencia de Larmor ligeramente distinta debido al desplazamiento químico. La calibración de frecuencia consiste en identificar la posición exacta de cada línea espectral y centrarla correctamente en el dominio de frecuencias del espectrómetro.

### Procedimiento:

1. Ejecutar una adquisición FID sin pulsos selectivos.
2. Aplicar transformada de Fourier.
3. Identificar los tres picos correspondientes a los qubits Q1, Q2 y Q3.
4. Ajustar los offsets de frecuencia para centrar cada pico.
5. Verificar que la separación entre picos coincide con los valores esperados.

### Problemas comunes:

- **Drift térmico.** El campo efectivo puede cambiar ante variaciones de temperatura, desplazando las frecuencias de resonancia.
- **Desplazamiento sistemático tras periodos largos sin uso.** El manual de SpinQit recomienda una recalibración completa tras un apagado prolongado.
- **Inestabilidad de Q2.** Este qubit suele tener menor estabilidad espectral debido a su entorno químico en la molécula  $\text{C}_2\text{F}_3\text{I}$ .

Cuando los picos no están centrados, los pulsos RF resonantes ejecutan rotaciones fuera del eje correcto, provocando errores sistemáticos acumulativos en las puertas.

### 7.3 Calibración de pulsos RF (90°, 180° y rotaciones arbitrarias)

Los pulsos RF son los responsables de implementar:

$$R_x(\theta), \quad R_y(\theta), \quad R_z(\theta).$$

Para que un pulso rote exactamente  $\theta$ , debe cumplirse:

$$\theta = \gamma B_1 \tau,$$

donde  $B_1$  es la amplitud del pulso y  $\tau$  su duración.

#### Procedimiento típico:

1. Seleccionar un qubit y aplicar una secuencia de pulsos RF barridos en duración o amplitud.
2. Registrar la señal FID y analizar su oscilación (nutation experiment).
3. Determinar los tiempos de pulso para:

$$\tau_{90} = \theta_{90}/(\gamma B_1), \quad \tau_{180} = \theta_{180}/(\gamma B_1).$$

4. Validar ejecutando experimentos de inversión y ecos.

#### Valores típicos en el Triangulum:

$$\tau_{90} \approx 20\text{--}30 \mu s, \quad \tau_{180} \approx 40\text{--}60 \mu s.$$

#### Problemas comunes:

- **Rotaciones insuficientes o excesivas.** Se traducen en errores coherentes en puertas como H,  $\sqrt{X}$ , etc.
- **Desajuste entre canales.** Los tres qubits pueden requerir duraciones ligeramente distintas.
- **Efecto de la temperatura.** Cambios en  $B_1$  debido a deriva electrónica afectan la calibración.

La precisión en los pulsos es crucial: pequeñas desviaciones en  $\theta$  se acumulan significativamente en circuitos largos.

### 7.4 Medición de tiempos de relajación $T_1$ y $T_2$

Los tiempos de relajación determinan la estabilidad del sistema cuántico:

- $T_1$ : relajación longitudinal (interacción con el entorno térmico).
- $T_2$ : relajación transversal (pérdida de coherencia).

### Medición de $T_1$ : inversión–recuperación

1. Aplicar un pulso  $180^\circ$ .
2. Esperar un tiempo variable  $\tau$ .
3. Aplicar un pulso  $90^\circ$ .
4. Medir la magnetización transversal.

La señal sigue:

$$M_z(\tau) = M_0 (1 - 2e^{-\tau/T_1}).$$

### Medición de $T_2$ : experimento *Hahn Echo*

1. Pulso  $90^\circ$ .
2. Tiempo libre  $\tau$ .
3. Pulso  $180^\circ$ .
4. Tiempo libre  $\tau$ .

La envolvente decae como:

$$M_{xy}(2\tau) = M_0 e^{-2\tau/T_2}.$$

### Valores reales observados en el Triangulum:

$$T_1(Q1) \approx 30 \text{ s}, \quad T_1(Q2) \approx 0.08 \text{ s}, \quad T_1(Q3) : \text{inestable}.$$

$$T_2(Qi) \sim 10\text{--}200 \text{ ms (según qubit y condiciones)}.$$

El qubit Q2 es notablemente menos coherente, lo que limita la profundidad de los circuitos.

## 7.5 Validación de la calibración mediante espectros

Una vez calibrado, el espectro del Triangulum debe mostrar:

- líneas estrechas y bien definidas;
- separación constante entre picos debido a acoplamientos  $J$ ;
- fases correctas (sin inversión accidental);
- ausencia de desplazamientos sistemáticos en frecuencia.

Cambios en la forma o posición de los picos suelen indicar:

- descalibración de frecuencia;
- decoherencia excesiva;
- deriva electrónica del **TR-board**;
- efectos térmicos.

## 7.6 Recomendaciones prácticas (docencia e investigación)

- Realizar calibración de frecuencia al inicio de cada sesión de laboratorio.
- Repetir la calibración si la temperatura de la sala cambia más de 2°C.
- Validar los pulsos RF ejecutando rotaciones de prueba en un único qubit.
- Antes de ejecutar algoritmos largos, comprobar  $T_2$ : si es demasiado corto, reducir profundidad del circuito.
- Documentar todos los ajustes realizados para reproducibilidad.

En conjunto, una calibración correcta garantiza una ejecución fiable de los algoritmos cuánticos en el SpinQ Triangulum y maximiza la fidelidad experimental.

## 8 Programación de algoritmos en SpinQ

El *SpinQ Triangulum* puede programarse mediante dos herramientas principales:

- la API en Python **SpinQit**, diseñada para programación textual;
- la interfaz gráfica **SpinQuasar**, que permite construir circuitos mediante arrastrar y soltar.

SpinQit permite definir circuitos cuánticos de manera sencilla, simularlos y ejecutarlos tanto en un backend simulado como en el hardware físico. En esta sección se describen en detalle los mecanismos de programación, compilación y ejecución, así como ejemplos reales de algoritmos implementados en el Triangulum.

### 8.1 El flujo de programación en SpinQit

La arquitectura de programación de SpinQit sigue el flujo:

Circuito lógico  $\longrightarrow$  Compilador  $\longrightarrow$  Pulsos GRAPE  $\longrightarrow$  Backend físico/simulador  $\longrightarrow$  Resultados

Este flujo consta de:

1. **Definición del circuito:** mediante la clase `QuantumCircuit` o cargando código OpenQASM.
2. **Compilación:** el compilador interno optimiza la secuencia de puertas, reduce redundancias e inserta tiempos de evolución bajo acoplamientos  $J$ .
3. **Generación de pulsos GRAPE:** cada puerta se traduce a una forma de pulso RF físicamente implementable.
4. **Ejecución:** puede realizarse en:
  - simulador básico (*Basic Simulator*),
  - simulador avanzado (*Torch Simulator*),
  - hardware Triangulum local.
5. **Obtención de resultados:** poblaciones finales y espectro NMR.



## 8.2 Programación básica con SpinQit (Python)

Un ejemplo mínimo de circuito:

```
import spinqit as sq

qc = sq.QuantumCircuit(3)
qc.h(0)
qc.cx(0, 1)

result = sq.run(qc, backend='Triangulum')
print(result.get_counts())
```

Este fragmento:

- crea un circuito de 3 qubits;
- aplica una Hadamard en Q0 y una CNOT entre Q0 y Q1;
- ejecuta el circuito directamente en el Triangulum;
- imprime las poblaciones resultantes.

Las puertas disponibles incluyen:

$$\{X, Y, Z, H, \sqrt{X}, \sqrt{Y}, R_x(\theta), R_y(\theta), CZ, CNOT, SWAP, \dots\}$$

SpinQit también permite medir un subconjunto de qubits o todos a la vez mediante:

```
qc.measure_all()
```

o:

```
qc.measure([0,2])
```

## 8.3 Programación con OpenQASM 2.0

SpinQit puede cargar y ejecutar ficheros OpenQASM estándar:

```
from spinqit.qasm import load_qasm

qc = load_qasm('dj_circuit.qasm')
result = sq.run(qc, backend='Triangulum')
```

Esto permite portar circuitos desde Qiskit u otras plataformas.

El compilador interno reescribe las puertas a las implementables en NMR, agrupando rotaciones y generando pulsos GRAPE equivalentes.

## 8.4 El compilador SpinQ: optimización y traducción a pulsos GRAPE

El compilador realiza una serie de optimizaciones automáticas:

- fusión de secuencias de rotaciones continuas;
- cancelación de rotaciones consecutivas opuestas;
- sustitución de CNOT por puertas más rápidas cuando  $J_{ij}$  lo permite;
- reordenamiento de puertas para minimizar decoherencia total;
- inserción de tiempos de espera calibrados para evolución bajo  $J$ .

Una puerta como:

```
qc.cx(0,1)
```

se traduce en:

$$\text{CNOT} = (H_1) e^{-2\pi i J_{01} I_z^{(0)} I_z^{(1)} t_c} (H_1),$$

donde  $t_c = 1/(2J_{01})$ , más correcciones adicionales generadas mediante pulsos GRAPE.

## 8.5 Ejecución en simuladores y en el hardware Triangulum

SpinQit puede ejecutar circuitos en:

- 1. Simulador básico** Simulación matricial simple; adecuado para circuitos pequeños.
- 2. Simulador Torch** Permite simulación acelerada y modelado avanzado de ruido.
- 3. Backend físico Triangulum** Ejecuta las secuencias de pulsos RF en el espectrómetro real. Los resultados incluyen:

- espectro NMR,
- probabilidades finales,
- histogramas tipo Qiskit.

## 8.6 Ejemplo 1: estado $|+\rangle$

```
import spinqit as sq
qc = sq.QuantumCircuit(1)
qc.ry(-3.14159/2, 0)
qc.measure([0])
sq.run(qc, backend='Triangulum')
```

Resultado esperado:

$$P(0) \approx P(1) \approx 0.5.$$

## 8.7 Ejemplo 2: algoritmo de Deutsch–Jozsa

```
qc = sq.QuantumCircuit(2)

qc.h(0)
qc.h(1)

# oráculo balanceado
qc.cx(0,1)

qc.h(0)
qc.measure([0])
```

Resultados:

- función constante  $\rightarrow$  salida 0;
- función balanceada  $\rightarrow$  salida 1.

## 8.8 Ejemplo 3: Grover en 3 qubits

```
qc = sq.QuantumCircuit(3)
qc.h([0,1,2])

# oráculo para marcar |101>
qc.cz(0,2)
qc.cx(0,1)
qc.cz(1,2)

# difusión
qc.h([0,1,2])
qc.x([0,1,2])
qc.h(2)
qc.ccx(0,1,2)
qc.h(2)
qc.x([0,1,2])
qc.h([0,1,2])

qc.measure_all()
```

Grover es sensible a la decoherencia; la ejecución física suele ser precisa para uno o dos ciclos dependiendo de  $T_2$ .

## 8.9 Ejemplo 4: QITE (Quantum Imaginary Time Evolution)

```
import spinqit as sq

qc = sq.QuantumCircuit(2)
qc.h(0)
```

```

qc.cx(0,1)

theta = 0.2
qc.rx(theta, 0)
qc.ry(theta/2, 1)

qc.measure_all()
sq.run(qc, backend='Triangulum')

```

En hardware, el primer paso del QITE coincide bien con la teoría; los siguientes se degradan por acumulación de errores coherentes y decoherencia.

## 8.10 Interpretación de resultados en SpinQuasar

Los resultados del backend físico incluyen:

- **espectro NMR:** amplitudes de Q1, Q2, Q3;
- **probabilidades finales:**  $\{P(000), P(001), \dots, P(111)\}$ ;
- **histograma:** representación tipo Qiskit.

### Limitaciones:

- solo las poblaciones (diagonal de  $\rho$ ) están disponibles;
- no hay acceso a coherencias;
- no puede verificarse entrelazamiento.

## 8.11 Buenas prácticas para programación en el Triangulum

- Mantener los circuitos cortos debido al límite impuesto por  $T_2$ .
- Evitar secuencias largas de rotaciones consecutivas.
- Usar el simulador antes de ejecutar en hardware.
- Combinar rotaciones donde sea posible para reducir tiempo.
- Para QITE, VQE y variacionales: usar circuitos reducidos.

En conjunto, SpinQit proporciona un entorno moderno, flexible y adecuado para la docencia y la experimentación cuántica con el SpinQ Triangulum.

## 9 Limitaciones fundamentales de la plataforma NMR

A pesar de su estabilidad, robustez y utilidad pedagógica, la computación cuántica basada en resonancia magnética nuclear presenta varias limitaciones inherentes a su fundamento físico, así como restricciones adicionales derivadas de la arquitectura del dispositivo *SpinQ Triangulum*. Estas limitaciones condicionan la interpretación de resultados y establecen los límites operativos dentro de los cuales los algoritmos pueden ejecutarse con fidelidad adecuada.

En esta sección se describen de forma detallada las limitaciones fundamentales de la plataforma NMR en general y del Triangulum en particular.

### 9.1 Limitación 1: Estado altamente mezclado (HMS) y pseudo-pure states

El estado inicial del sistema viene dado por la distribución térmica:

$$\rho_{\text{thermal}} \simeq \frac{1}{2^n} I + \epsilon \Delta, \quad \epsilon \sim 10^{-5}.$$

La señal observable proviene únicamente de la pequeña desviación proporcional a  $\epsilon$ . La mayor parte del sistema se comporta como una mezcla maximamente desordenada, sin estructura útil para cómputo cuántico.

Como consecuencia:

- no es posible preparar un estado puro real;
- las coherencias cuánticas globales están fuertemente suprimidas;
- no es posible distinguir experimentalmente estados entrelazados de estados separables con alta mezcla;
- toda la computación se realiza sobre una “fracción efectiva” del sistema.

El uso de *pseudo-pure states* permite reproducir formalmente la dinámica de un estado puro, pero no restaura las propiedades cuánticas globales del sistema.

### 9.2 Limitación 2: Acceso restringido a la matriz densidad

El hardware del Triangulum sólo proporciona acceso a:

$$\{\rho_{00}, \rho_{01}, \dots, \rho_{2^n-1, 2^n-1}\},$$

es decir, únicamente los elementos diagonales de la matriz densidad final. No es posible obtener:

- coherencias  $\rho_{ij}$ ,  $i \neq j$ ,
- fases relativas,
- información de superposición cuántica global,
- correlaciones cuánticas tipo Bell o test de no-localidad.

Esto implica que:

- no puede realizarse tomografía cuántica completa;
- no puede verificarse experimentalmente el entrelazamiento;
- no pueden reconstruirse estados de tipo GHZ o W más allá de sus poblaciones.

Esta es una limitación estructural de la plataforma NMR en dispositivos de sobremesa.

### 9.3 Limitación 3: Decoherencia y tiempos $T_2$ cortos

El tiempo de coherencia transversal  $T_2$  limita directamente la profundidad del circuito. Para el Triangulum, valores típicos son:

$$T_2(Q_1) \sim 100\text{--}200 \text{ ms}, \quad T_2(Q_2) \sim 10\text{--}30 \text{ ms}, \quad T_2(Q_3) \sim 30\text{--}80 \text{ ms}.$$

Esto implica que:

- los circuitos deben ser cortos (decenas de puertas);
- puertas lentas como las basadas en acoplamientos débiles  $J_{23}$  sufren pérdida de fidelidad significativa;
- secuencias de QITE, VQE o algoritmos variacionales sólo pueden ejecutarse en versiones truncadas.

Q2 es especialmente sensible a decoherencia, lo que afecta a la fidelidad de circuitos que requieren movilidad de información entre Q1 y Q3.

### 9.4 Limitación 4: Conectividad reducida del grafo de acoplamientos

La molécula  $\text{C}_2\text{F}_3\text{I}$  presenta acoplamientos:

$$J_{12} \gg J_{23} \gg J_{13} \approx 0.$$

Esto implica un grafo de conectividad lineal:

$$Q_1 \leftrightarrow Q_2 \leftrightarrow Q_3,$$

con incapacidad práctica de implementar una puerta directa entre Q1 y Q3. Como consecuencia:

- operaciones que requieren conectividad completa deben reescribirse usando SWAPs (lo que aumenta la duración total);
- la fidelidad decrece al mover información a través de Q2;
- algoritmos que requieren operaciones globales simétricas (QFT completa, códigos de corrección simples) no son ideales en esta plataforma.

## 9.5 Limitación 5: Sensibilidad térmica y electrónica

El Triangulum utiliza un imán permanente sin control criogénico. Por ello, variaciones moderadas de temperatura ( $> 2^\circ\text{C}$ ) producen:

- desplazamiento de las frecuencias de resonancia;
- descalibración de los pulsos RF;
- deriva en la fase de los espectros;
- errores acumulativos en circuitos largos;
- necesidad de recalibración frecuente.

El sistema se estabiliza tras 20–30 minutos de calentamiento, pero sigue siendo sensible a perturbaciones externas (climatización, apertura de ventanas, etc.).

## 9.6 Limitación 6: Imposibilidad de realizar puertas verdaderamente no-Clifford ideales

Aunque SpinQit dispone de rotaciones arbitrarias  $R_x(\theta)$ ,  $R_y(\theta)$ , la fidelidad real de rotaciones pequeñas o secuencias  $\sqrt{X}$ ,  $\sqrt{Y}$  es limitada:

- el ruido coherente (miscalibración) se acumula;
- pequeñas desviaciones en la amplitud del pulso GRAPE afectan la dinámica;
- la duración de los pulsos aumenta para rotaciones no triviales.

Esto afecta especialmente a:

- algoritmos variacionales (VQE, QAOA),
- QITE,
- simulaciones Hamiltonianas basadas en trotterización.

## 9.7 Limitación 7: Falta de escalabilidad

La plataforma NMR en fase líquida no es escalable:

- el número de núcleos distinguibles químicamente crece muy lentamente;
- el espectro se vuelve ininterpretable con más de 10–15 qubits;
- la señal se atenúa exponencialmente con el número de espines.

Por ello, aunque el Triangulum es un sistema cuántico real, no constituye un camino hacia la computación cuántica universal a gran escala.

## 9.8 Limitación 8: Restricciones en verificabilidad y benchmarking

Al no poder medirse coherencias ni realizar tomografía, tampoco pueden aplicarse:

- fidelidad de proceso (quantum process tomography);
- medidas de entropía cuántica;
- distancias cuánticas (trace distance, fidelity);
- pruebas de Bell;
- verificación rigurosa de circuitos no triviales.

La evaluación de algoritmos debe hacerse comparando sus *poblaciones* con la teoría, no su estado cuántico completo.

## 9.9 Síntesis: qué se puede y qué no se puede hacer

Se puede:

- ejecutar algoritmos cuánticos pequeños (1–3 qubits);
- estudiar puertas y dinámica cuántica básica;
- enseñar principios de control cuántico;
- implementar versiones reducidas de Deutsch–Jozsa, Grover, QITE;
- realizar experimentos reproducibles.

No se puede:

- verificar entrelazamiento,
- simular estados cuánticos de alta dimensión,
- ejecutar circuitos profundos,
- aplicar benchmarking cuántico estándar,
- practicar tomografía cuántica completa.

## 9.10 Conclusión

El *SpinQ Triangulum* representa una plataforma excepcional para docencia e iniciación a la computación cuántica experimental, pero posee limitaciones fundamentales que derivan de la física NMR y de su diseño compacto. Entender estas restricciones es esencial para interpretar adecuadamente los resultados, diseñar circuitos compatibles con la arquitectura y establecer expectativas realistas sobre lo que puede lograrse en esta plataforma.



## 10 Conclusiones docentes

La computación cuántica basada en resonancia magnética nuclear (NMR) y, en particular, la plataforma *SpinQ Triangulum*, constituye una herramienta de extraordinario valor para la enseñanza universitaria y la introducción experimental a los principios del procesamiento cuántico de información. Aunque no está concebida como una tecnología escalable hacia computadoras cuánticas de propósito general, su estabilidad, repetibilidad y facilidad de uso permiten desarrollar experiencias formativas difíciles de alcanzar con otras arquitecturas más avanzadas pero menos accesibles.

Desde una perspectiva docente, el Triangulum posibilita una aproximación equilibrada entre teoría y experimentación. El estudiante no sólo aprende la formulación matemática de los qubits, los operadores y los algoritmos cuánticos, sino que puede observar directamente la respuesta física del sistema a cada secuencia de pulsos, conectando de forma inmediata la abstracción del circuito cuántico con su realización analógica en un sistema real de espines. Esta conexión es esencial para comprender la complejidad del control cuántico y los desafíos prácticos que enfrentan las tecnologías cuánticas modernas.

Además, el hecho de que el Triangulum utilice NMR en fase líquida —una de las plataformas más maduras y estables de la computación cuántica— lo convierte en un entorno especialmente adecuado para la formación en técnicas de control coherente, optimización de pulsos, interpretación espectral y análisis de errores experimentales. La interfaz SpinQit, compatible con Python y OpenQASM, permite a los estudiantes desarrollar competencias de programación cuántica directamente transferibles a otras plataformas actuales como Qiskit, Cirq o Braket. Este enfoque unificado refuerza el aprendizaje y facilita la transición hacia sistemas más avanzados.

Sin embargo, es pedagógicamente importante que el alumnado comprenda también las limitaciones intrínsecas de la plataforma. La imposibilidad de medir coherencias, la ausencia de entrelazamiento verificable y los tiempos de coherencia moderados son restricciones que deben explicarse como parte natural de las tecnologías cuánticas disponibles hoy en día. Estas limitaciones abren la puerta a discusiones formativas sobre ruido cuántico, escalabilidad, fidelidad de puertas, y sobre cómo diferentes arquitecturas abordan estos desafíos.

En conjunto, el Triangulum no sólo permite impartir prácticas de laboratorio realistas, sino que ofrece un espacio ideal para seminarios, TFG/TFM y proyectos de investigación formativa en los que el estudiantado pueda:

- diseñar e implementar algoritmos cuánticos sencillos;
- estudiar efectos reales de decoherencia y descalibración;
- comparar simulación teórica y resultados físicos;
- practicar metodologías rigurosas de adquisición, análisis de datos y reproducibilidad;
- explorar técnicas modernas de control cuántico como GRAPE;
- introducirse en algoritmos avanzados (Grover, Deutsch–Jozsa, QITE) en su dimensión experimental.

Con estos elementos, el SpinQ Triangulum se consolida como un recurso docente único: accesible, estable, conceptualmente transparente y, sobre todo, capaz de mostrar de forma tangible los cimientos de la computación cuántica. La experiencia de trabajar con un dispositivo cuántico real en el aula contribuye a motivar al alumnado, fortalecer su comprensión conceptual y fomentar vocaciones científicas en un área estratégica para la investigación y la industria de las próximas décadas.

## Epílogo

La computación cuántica se encuentra en un momento decisivo de su desarrollo. Mientras las plataformas industriales avanzan hacia dispositivos con decenas o centenas de qubits, la comprensión profunda de los principios fundamentales continúa siendo indispensable para formar a las generaciones que deberán liderar esta transición tecnológica. En este contexto, los sistemas basados en resonancia magnética nuclear ocupan un lugar singular: no compiten en escala ni en potencia computacional, pero sí ofrecen un nivel de control, estabilidad y transparencia experimental que los convierte en herramientas insustituibles en la formación superior y la validación conceptual de algoritmos cuánticos.

El *SpinQ Triangulum* representa una síntesis excepcional de esta filosofía. Su diseño compacto, su facilidad de uso y su integración con el entorno de programación **SpinQit** permiten acercar la computación cuántica real a laboratorios universitarios, centros educativos avanzados y grupos de investigación emergentes. Más allá de su capacidad para ejecutar algoritmos básicos, el Triangulum hace visibles las dinámicas cuánticas que suelen permanecer ocultas en otras tecnologías: la importancia de la calibración, la fragilidad de la coherencia, el papel de los acoplamientos moleculares, la interacción entre teoría y hardware, y la necesidad constante de validar, corregir e interpretar resultados experimentales.

A lo largo de estas notas se han presentado los fundamentos físicos de la NMR como plataforma cuántica, las características específicas del Triangulum, sus rutinas de calibración, los procedimientos de programación y las limitaciones que definen su ámbito operativo. Este recorrido permite comprender no sólo cómo funciona este procesador cuántico, sino también por qué funciona así, qué aporta en el ecosistema actual de tecnologías cuánticas y qué enseñanzas ofrece para la visión más amplia de la computación cuántica contemporánea.

Más allá de su uso directo en docencia, el estudio del Triangulum abre la puerta a proyectos de investigación formativa: caracterización de pulsos GRAPE, análisis de errores cuánticos, simulación de algoritmos variacionales truncados, comparación entre simuladores y hardware, y diseño de experimentos pedagógicos que permitan a los estudiantes comprender desde dentro la complejidad del control cuántico. Estos proyectos contribuyen a desarrollar una alfabetización cuántica profunda, basada en la experiencia y no sólo en la teoría.

La computación cuántica seguirá evolucionando, incorporando nuevas arquitecturas, nuevas técnicas de control y nuevos paradigmas algorítmicos. En este proceso, los sistemas NMR como el Triangulum conservarán un papel esencial como puente entre la teoría abstracta y la experimentación accesible, como espacio de aprendizaje y como recordatorio de que incluso las tecnologías no escalables aportan conocimientos fundamentales para avanzar en un campo donde la física, la matemática, la ingeniería y la computación se entrelazan de manera profunda.

El propósito último de estas notas es situar al lector en ese punto de encuentro, dotarle de las bases conceptuales y experimentales necesarias para comprender una plataforma cuántica real, y ofrecer un marco para seguir explorando la computación cuántica tanto en su vertiente científica como en su dimensión formativa. El camino que se abre a partir de aquí es amplio, estimulante y está lleno de oportunidades para quienes deseen contribuir al desarrollo de las tecnologías cuánticas del futuro.

## Apéndice A: Terminología empleada

Este apéndice recoge los términos fundamentales utilizados en estas notas, especialmente aquellos relacionados con la computación cuántica basada en resonancia magnética nuclear (NMR) y con el dispositivo *SpinQ Triangulum*.

### Terminología de NMR

**NMR (Nuclear Magnetic Resonance)** Técnica espectroscópica que explota la interacción entre el momento magnético nuclear y un campo magnético estático. En computación cuántica, los núcleos son los qubits.

**Frecuencia de Larmor** Frecuencia de precesión de un espín nuclear en un campo  $B_0$ . Para un espín  $I = \frac{1}{2}$ :  $\omega_0 = \gamma B_0$ .

**Desplazamiento químico** Variación de  $\omega_0$  debida al entorno electrónico del núcleo, expresada en ppm. Permite distinguir qubits.

**Acoplamiento escalar  $J$**  Interacción isotrópica entre dos espines mediada por electrones enlazantes. Produce el término  $2\pi J I_z^{(i)} I_z^{(j)}$ .

**FID (Free Induction Decay)** Señal temporal recogida tras un pulso RF. Su transformada de Fourier genera el espectro.

**Espectro NMR** Representación en frecuencia del FID, mostrando las líneas correspondientes a cada núcleo.

**Pulsos RF** Señales de radiofrecuencia que inducen rotaciones del estado cuántico alrededor de los ejes  $x$  o  $y$ .

**Marcos rotantes** Sistema de referencia donde la dinámica es más simple y se eliminan términos de precesión rápida.

**Tiempo de relajación  $T_1$**  Tiempo de recuperación longitudinal (alineación con  $B_0$ ).

**Tiempo de coherencia  $T_2$**  Tiempo de pérdida de coherencia transversal. Determina la profundidad máxima de circuitos ejecutables.

### Terminología de computación cuántica (NMR-QIP)

**Qubit** Sistema de dos niveles cuánticos. En NMR corresponde a un espín nuclear  $I = \frac{1}{2}$ .

**Rotaciones** Operadores  $R_x(\theta)$ ,  $R_y(\theta)$ ,  $R_z(\theta)$  implementados mediante pulsos RF.

**Puertas nativas** Conjunto de operaciones que el hardware implementa directamente (e.g., rotaciones y evoluciones bajo  $J$ ).

**Puerta CNOT** Operación controlada que se implementa en NMR mediante Hadamard + evolución bajo  $J$ .

**CZ (Controlled-Z)** Puerta de fase controlada obtenida directamente mediante evolución natural  $e^{-2\pi i J t I_z^{(i)} I_z^{(j)}}$ .

**PPS (Pseudo-Pure State)** Estado de la forma  $\rho = (1 - \eta)I/2^n + \eta |\psi\rangle \langle \psi|$  que simula la dinámica de un estado puro aunque el sistema sea altamente mezclado.

**HMS (Highly Mixed State)** Estado térmico dominante en NMR, donde la señal útil es una pequeña desviación del estado maximamente mezclado.

**Tomografía cuántica** Procedimiento para reconstruir la matriz densidad completa. No es accesible en Triangulum.

## Control cuántico y pulsos

### Conceptos generales

**AWG (Arbitrary Waveform Generator).** Un *Arbitrary Waveform Generator* es un generador de formas de onda arbitrarias. Permite producir señales eléctricas con formas completamente personalizadas, controlando parámetros como amplitud, frecuencia, fase y modulación. En computación cuántica, y en particular en dispositivos NMR, el AWG se utiliza para generar los pulsos de control que implementan las puertas cuánticas y las secuencias de pulso de radiofrecuencia.

**FPGA (Field-Programmable Gate Array).** Un *Field-Programmable Gate Array* es un circuito integrado digital reprogramable, formado por bloques lógicos y redes de interconexión configurables. Los FPGA permiten procesamiento en tiempo real y computación altamente paralela. En sistemas cuánticos basados en NMR, se emplean para la sincronización del hardware, la adquisición de datos, el procesamiento digital de la señal y el control preciso de la electrónica asociada al AWG.

### Conceptos generales sobre SpinQ

**GRAPE (Gradient Ascent Pulse Engineering)** Algoritmo de optimización que genera pulsos RF de alta fidelidad controlando amplitud y fase.

**AWG (Arbitrary Waveform Generator)** Hardware interno que genera formas de onda RF arbitrarias para ejecutar los pulsos GRAPE.

**Secuencia de pulsos** Conjunto cronológicamente ordenado de pulsos RF y tiempos de evolución que implementa un circuito cuántico.

**Evolución bajo  $J$**  Período sin pulsos en el que los espines interactúan mediante el acoplamiento  $J$ . Fundamental para las puertas CZ y CNOT.

## SpinQ Triangulum: hardware y software

**Triangulum** Procesador cuántico de sobremesa basado en NMR con tres núcleos de  $^{19}\text{F}$  como qubits físicos.

**SpinQuasar** Interfaz gráfica oficial para construir circuitos, calibrar, ejecutar y visualizar espectros NMR.

**SpinQit** Biblioteca en Python para programar y ejecutar circuitos en el Triangulum o en simuladores compatibles.

**Backend** Motor de ejecución que permite correr un circuito en simuladores o en el hardware físico.

**Basic Simulator** Simulador matricial rápido sin modelado avanzado de ruido.

**Torch Simulator** Simulador acelerado basado en PyTorch para circuitos más grandes y modelado más realista.

**Conectividad** Grafo que describe qué qubits están acoplados. En Triangulum es lineal:  $Q_1 - Q_2 - Q_3$ .

## Algoritmos implementados

**Deutsch–Jozsa** Algoritmo que distingue funciones balanceadas de funciones constantes con una única consulta.

**Grover** Algoritmo de búsqueda no estructurada. Implementable en Triangulum con uno o dos ciclos.

**QITE (Quantum Imaginary Time Evolution)** Procedimiento iterativo para aproximar estados fundamentales. Su fidelidad se degrada rápidamente en NMR por acumulación de errores.

**Circuito lógico** Representación abstracta del algoritmo en forma de red de puertas cuánticas.

**Compilación** Traducción del circuito lógico a pulsos RF nativos.

## Apéndice B: Notación y definiciones utilizadas

En esta sección se describen las convenciones y símbolos empleados a lo largo de estas notas, centradas en la computación cuántica basada en resonancia magnética nuclear (NMR). Las definiciones están pensadas para estudiantes sin formación específica en física del espín.

Las matrices de Pauli constituyen la base algebraica fundamental para describir la dinámica de un qubit. En NMR se utilizan indirectamente a través de los operadores de espín  $I_x, I_y, I_z$ , que son simplemente la mitad de las Pauli.

Las matrices de Pauli se definen como:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Estas matrices cumplen las relaciones algebraicas:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I, \quad \sigma_x \sigma_y = i\sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z = i\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y,$$

y anticmutan entre sí:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I.$$

## Operadores de espín para qubits NMR

Las matrices de Pauli constituyen la base algebraica fundamental para describir la dinámica de un qubit. En NMR se utilizan indirectamente a través de los operadores de espín  $I_x, I_y, I_z$ , que son simplemente la mitad de las Pauli.

Las matrices de Pauli se definen como:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Estas matrices cumplen las relaciones algebraicas:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I, \quad \sigma_x \sigma_y = i\sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z = i\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y,$$

y anticonmutan entre sí:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I.$$

En NMR, un qubit físico es un núcleo con espín  $I = \frac{1}{2}$ . Los operadores que describen su dinámica son análogos a las matrices de Pauli, pero escritos tradicionalmente como  $I_x, I_y, I_z$ .

$I_x, I_y, I_z$  Operadores de espín nuclear definidos como:

$$I_x = \frac{1}{2}\sigma_x, \quad I_y = \frac{1}{2}\sigma_y, \quad I_z = \frac{1}{2}\sigma_z,$$

donde  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  son las matrices de Pauli. Representan rotaciones del estado cuántico alrededor de los ejes  $x, y, z$  de la esfera de Bloch.

$I_\alpha^{(i)}$  Operador  $I_\alpha$  ( $\alpha \in \{x, y, z\}$ ) aplicado únicamente al qubit físico  $i$  de un sistema de varios qubits.

## Estados y vectores de base

$|0\rangle, |1\rangle$  Estados propios del operador  $I_z$ . Representan las dos orientaciones posibles del espín nuclear.

$|00\rangle, |01\rangle, \dots$  Base computacional para sistemas de varios qubits.

$\rho$  Matriz densidad que describe el estado cuántico completo (mezclado o puro).

## Hamiltonianos y términos que los componen

El Hamiltoniano describe la energía y dinámica del sistema cuántico. La evolución temporal viene dada por:

$$\rho(t) = e^{-iHt} \rho(0) e^{iHt}.$$

Los términos usados en NMR son:

$H_Z = -\gamma B_0 I_z$  **Hamiltoniano de Zeeman**. Describe la interacción del espín con un campo magnético estático  $B_0$ .  $\gamma$  es la constante giromagnética del núcleo.

$\omega_0 = \gamma B_0$  **Frecuencia de Larmor**. Frecuencia con la que el espín precesa alrededor del campo magnético.

$H_J = 2\pi J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)}$  **Hamiltoniano de acoplamiento escalar**. Representa la interacción entre los núcleos  $i$  y  $j$  mediada por electrones.  $J_{ij}$  (en Hz) determina la fuerza de la puerta de dos qubits.

$H_{\text{RF}}(t)$  **Hamiltoniano del pulso RF** (radiofrecuencia). Se usa para manipular direcciones del espín y aplicar puertas de un qubit:

$$H_{\text{RF}}(t) = -\gamma B_1(t) (I_x \cos(\phi(t)) + I_y \sin(\phi(t))).$$

$H = H_Z + \sum_{i < j} H_J + H_{\text{RF}}(t)$  **Hamiltoniano completo del sistema NMR**.

## Operaciones y puertas cuánticas

$R_\alpha(\theta) = e^{-i\theta I_\alpha}$  Rotación de un qubit alrededor del eje  $\alpha \in \{x, y, z\}$  en la esfera de Bloch.

**Puerta Hadamard  $H$**  Construida mediante rotaciones RF:

$$H = R_y(-\pi/2) R_x(\pi).$$

**Puerta CNOT** Implementada mediante evolución bajo  $J$  más rotaciones locales:

$$\text{CNOT}_{i \rightarrow j} = H_j e^{-2\pi i J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)} t_c} H_j,$$

con  $t_c = 1/(2J_{ij})$ .

**Puertas  $\sqrt{X}$ ,  $\sqrt{Y}$**  Rotaciones de ángulo  $\theta = \pi/2$ . Cruciales para algoritmos variacionales y QITE.

**Puerta CZ** Evolución natural:

$$\text{CZ} = \text{diag}(1, 1, 1, -1).$$

## Notación específica de la plataforma SpinQ Triangulum

**Q1, Q2, Q3** Identificadores de los tres núcleos  $^{19}\text{F}$  de la molécula  $\text{C}_2\text{F}_3\text{I}$ . Se distinguen por su frecuencia de Larmor.

**Conectividad** En Triangulum:

$$Q_1 \leftrightarrow Q_2 \leftrightarrow Q_3, \quad J_{13} \approx 0.$$

**PPS** Estado pseudo-puro preparado automáticamente por el firmware antes de ejecutar un circuito.

**Secuencia GRAPE** Pulsos optimizados generados por el hardware para realizar puertas de un qubit y corregir inhomogeneidades.

**SpinQit** API en Python para programar el Triangulum.

**SpinQuasar** Interfaz gráfica para diseñar circuitos y visualizar resultados.

## Magnitudes experimentales

**Amplitud del pulso**  $B_1$  Intensidad del campo RF transversal aplicado para inducir rotaciones.

**Ángulo de pulso** Magnitud  $\theta = \gamma B_1 \tau$  del pulso RF.

**Tiempo de relajación longitudinal**  $T_1$  Tiempo que tarda la magnetización en alinearse con el campo  $B_0$ .

**Tiempo de coherencia**  $T_2$  Duración de la coherencia transversal, limita la longitud útil de un circuito.

## Cuestionario adicional de autoevaluación (SpinQ Triangulum — NMR-QIP)

1. ¿Cuál es el Hamiltoniano libre típico en un sistema NMR de tres qubits?

- (a)  $H = \sum_i \omega_i I_x^{(i)}$
- (b)  $H = \sum_i \omega_i I_z^{(i)} + 2\pi \sum_{i < j} J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)}$
- (c)  $H = X \otimes X \otimes X$
- (d)  $H = \sum_i Z^{(i)} + \sum_{i < j} X^{(i)} X^{(j)}$

2. En NMR, una rotación  $R_x(\theta)$  se implementa mediante:

- (a) Evolución libre bajo el acoplamiento  $J$
- (b) Un pulso RF resonante con fase 0
- (c) Un pulso RF con fase  $\pi/2$
- (d) Un eco de Hahn



3. ¿Qué es un estado pseudo-puro (PPS)?
  - (a) Un estado puro generado por enfriamiento óptico
  - (b) Un estado mixto con una pequeña componente observable equivalente a un estado puro
  - (c) Una superposición maximamente entrelazada
  - (d) Un estado preparado mediante tomografía cuántica
4. En el SpinQ Triangulum, las puertas se implementan mediante:
  - (a) Secuencias digitales FPGA exclusivamente
  - (b) Trotterización en tiempo real
  - (c) Pulsos GRAPE optimizados
  - (d) Pulsos adiabáticos de alta potencia
5. ¿Qué medida experimental permite obtener las poblaciones finales?
  - (a) Medida proyectiva ideal
  - (b) Tomografía completa
  - (c) Transformada de Fourier del FID
  - (d) Medición de coherencias múltiples
6. ¿Cuál es la conectividad real entre qubits en la molécula  $C_2F_3I$ ?
  - (a) Totalmente conectada
  - (b) Solo  $Q1 \leftrightarrow Q3$
  - (c)  $Q1 \leftrightarrow Q2 \leftrightarrow Q3$
  - (d) Ninguna conectividad
7. ¿Qué limita principalmente la profundidad de los circuitos?
  - (a) El tamaño del AWG
  - (b) El tiempo  $T_2$
  - (c) El valor del desplazamiento químico
  - (d) La potencia del imán permanente
8. ¿Qué puerta es más lenta en Triangulum debido al acoplamiento débil?
  - (a) Puertas en  $Q1$
  - (b) Puertas en  $Q3$
  - (c) CNOT entre  $Q2$  y  $Q3$
  - (d) Hadamard en cualquier qubit
9. ¿Cuál es un problema común al usar temperaturas inestables?
  - (a) Desaparición del acoplamiento  $J$

- (b) Variación de las frecuencias de Larmor
  - (c) Cambio en la molécula cuántica
  - (d) Colapso del FID
10. ¿Por qué no se puede verificar el entrelazamiento en NMR?
- (a) Los tiempos  $T_1$  son demasiado cortos
  - (b) No se accede a las coherencias de la matriz densidad
  - (c) Los pulsos RF no permiten operaciones de dos qubits
  - (d) El imán permanente no es estable
11. ¿Cuál es la fuente principal de señal en un sistema NMR?
- (a) La componente proporcional a la identidad
  - (b) La deviation density matrix
  - (c) Las coherencias fuera de la diagonal
  - (d) El yodo en  $C_2F_3I$
12. El tiempo  $T_1$  describe:
- (a) La pérdida de coherencia transversal
  - (b) La relajación longitudinal
  - (c) El acoplamiento dipolar directo
  - (d) El efecto Zeeman
13. ¿Qué técnica se usa para medir  $T_2$ ?
- (a) Inversión-recuperación
  - (b) Eco de Hahn
  - (c) Pulso de  $180^\circ$  selectivo
  - (d) Secuencias decoupling
14. ¿Cuál es el principal motivo por el que Q2 suele ser el qubit más problemático?
- (a) Su frecuencia es idéntica a Q1
  - (b) Tiene los tiempos de coherencia más bajos
  - (c) Está desacoplado químicamente
  - (d) No recibe pulsos GRAPE
15. ¿Qué salida proporciona SpinQuasar tras la ejecución en hardware?
- (a) La matriz densidad completa
  - (b) Las poblaciones en la base computacional
  - (c) Las fases relativas de coherencia
  - (d) El Hamiltoniano efectivo

16. ¿Qué sucede si un pulso RF está descalibrado?
  - (a) El PPS se destruye completamente
  - (b) Las rotaciones dejan de ser unitarias
  - (c) Las rotaciones tienen un ángulo incorrecto y acumulan errores coherentes
  - (d) La molécula cambia de fase líquida a sólida
17. ¿Cuál de las siguientes NO es una limitación del Triangulum?
  - (a) No accesibilidad a coherencias
  - (b) Limitación en conectividad
  - (c) Ruido térmico significativo
  - (d) Puertas arbitrarias GRAPE de alta fidelidad
18. ¿Qué propiedad del  $^{19}\text{F}$  lo convierte en un buen qubit?
  - (a) Espín igual a 1
  - (b) Baja sensibilidad magnética
  - (c) Desplazamientos químicos bien diferenciados
  - (d) Ausencia de acoplamientos J
19. ¿Qué operación se usa para implementar SWAP?
  - (a) Un único pulso selectivo
  - (b) Evolución durante  $2/J$
  - (c) Tres CNOT
  - (d) Un pulso adiabático
20. ¿Qué condición debe cumplirse para que un pulso de  $90^\circ$  sea correcto?
  - (a)  $\theta = \gamma B_0 t$
  - (b)  $\theta = \gamma B_1 t = \pi/2$
  - (c)  $t = 1/(2J_{ij})$
  - (d)  $B_1 = B_0$

## Soluciones del cuestionario adicional (SpinQ Triangulum — NMR-QIP)

### 1. Respuesta correcta: (b)

El Hamiltoniano libre en NMR en fase líquida está dominado por los términos de Zeeman  $\sum_i \omega_i I_z^{(i)}$  y los acoplamientos escalares  $2\pi \sum_{i < j} J_{ij} I_z^{(i)} I_z^{(j)}$ .

### 2. Respuesta correcta: (b)

Una rotación  $R_x(\theta)$  se implementa con un pulso RF resonante cuya fase es 0, lo que equivale a un campo efectivo en el eje  $x$  en el marco rotante.

3. **Respuesta correcta: (b)**  
Un PPS es de la forma  $\rho_{\text{pps}} = \frac{1-\eta}{2^n}I + \eta|\psi\rangle\langle\psi|$ : un estado altamente mezclado en el que una pequeña fracción efectiva se comporta como un estado puro.
4. **Respuesta correcta: (c)**  
En el SpinQ Triangulum las puertas físicas se implementan mediante pulsos RF optimizados numéricamente con GRAPE, no como pulsos ideales rectangulares.
5. **Respuesta correcta: (c)**  
Las poblaciones finales se obtienen a partir del espectro NMR, que es la transformada de Fourier del FID; de la intensidad de los picos se reconstruyen las poblaciones.
6. **Respuesta correcta: (c)**  
La molécula  $\text{C}_2\text{F}_3\text{I}$  tiene una jerarquía  $J_{12} \gg J_{23} \gg J_{13} \approx 0$ , lo que induce una conectividad efectiva lineal  $Q1 \leftrightarrow Q2 \leftrightarrow Q3$ .
7. **Respuesta correcta: (b)**  
La profundidad útil del circuito está limitada por el tiempo de coherencia transversal  $T_2$ : cuando el tiempo total de pulsos se aproxima a  $T_2$ , la información de fase se pierde.
8. **Respuesta correcta: (c)**  
El acoplamiento  $J_{23}$  es más débil que  $J_{12}$ , por lo que una CNOT entre  $Q2$  y  $Q3$  requiere tiempos de evolución más largos y resulta más lenta y más sensible a decoherencia.
9. **Respuesta correcta: (b)**  
Los cambios de temperatura modifican ligeramente el campo efectivo y, por tanto, las frecuencias de Larmor, provocando *drift* de frecuencia y descalibración de pulsos.
10. **Respuesta correcta: (b)**  
El hardware sólo accede a la diagonal de la matriz densidad (poblaciones); las coherencias no se miden, por lo que no es posible certificar entrelazamiento de forma experimental.
11. **Respuesta correcta: (b)**  
La señal NMR proviene exclusivamente de la parte desviación  $\rho_{\text{dev}}$  o deviation density matrix; el término proporcional a la identidad no contribuye a observables.
12. **Respuesta correcta: (b)**  
El tiempo  $T_1$  describe la relajación longitudinal (recuperación de la magnetización  $M_z$  hacia el equilibrio térmico).
13. **Respuesta correcta: (b)**  
El eco de Hahn (secuencia  $90^\circ-\tau-180^\circ-\tau$ ) permite medir la pérdida de coherencia transversal y, por tanto, estimar  $T_2$ .
14. **Respuesta correcta: (b)**  
En las medidas experimentales del Triangulum,  $Q2$  suele presentar los tiempos  $T_1$  y  $T_2$  más desfavorables, lo que lo convierte en el qubit más sensible a errores.

15. **Respuesta correcta: (b)**  
SpinQuasar y el backend del Triangulum devuelven las poblaciones en la base computacional (la diagonal de  $\rho$ ), no la matriz densidad completa.
16. **Respuesta correcta: (c)**  
Si un pulso RF está descalibrado, las rotaciones se realizan con un ángulo distinto del deseado; estos errores coherentes se acumulan a lo largo del circuito.
17. **Respuesta correcta: (d)**  
Las puertas arbitrarias implementadas mediante GRAPE de alta fidelidad son una *capacidad* de la plataforma, no una limitación. Las otras opciones sí reflejan restricciones reales.
18. **Respuesta correcta: (c)**  
El núcleo  $^{19}\text{F}$  tiene espín  $I = \frac{1}{2}$ , alta sensibilidad y desplazamientos químicos claramente diferenciados, lo que permite un control selectivo qubit a qubit.
19. **Respuesta correcta: (c)**  
La puerta SWAP estándar se implementa como la composición de tres CNOT:  
 $\text{SWAP}(i, j) = \text{CNOT}_{i \rightarrow j} \text{CNOT}_{j \rightarrow i} \text{CNOT}_{i \rightarrow j}$ .
20. **Respuesta correcta: (b)**  
Para un pulso de  $90^\circ$  debe cumplirse  $\theta = \gamma B_1 t = \pi/2$ , relacionando amplitud del campo RF, duración del pulso y ángulo de rotación en el espacio de Bloch.