

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA  
ESCUELA DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICA

# Caminatas cuánticas 1D con decoherencia

*Mariana Elizabet Pérez Muralles*

Carné: 201901040

22 de noviembre de 2024

*Licenciatura en Física Aplicada*

Asesorado por: *M.Sc. José Alfredo de León (IF-UNAM) e*  
*Ing. Rodolfo Samayoa (ICFM-USAC)*

# Índice

<b>Objetivos</b>	<b>2</b>
<b>Introducción</b>	<b>2</b>
<b>Justificación</b>	<b>2</b>
<b>1 Cúbit</b>	<b>3</b>
1.1 Notación de Dirac	3
1.2 Implementaciones físicas de cúbits	4
<b>2 Operador de densidad</b>	<b>5</b>
2.1 La esfera de Bloch	6
2.2 Reformulación de los postulados de la mecánica cuántica empleando el operador de densidad	12
2.2.1 Postulado I: espacio de estados	12
2.2.2 Postulado II: evolución	12
2.2.3 Postulado III: medida	12
2.2.4 Postulado IV: sistemas compuestos	12
2.3 Operador de densidad reducido	12
2.3.1 Traza parcial	13
<b>3 Caminatas cuánticas</b>	<b>14</b>
3.1 Caminatas cuánticas discretas en el tiempo	14
3.1.1 Sistemas cuánticos	14
3.1.2 Operadores de evolución	15
3.2 Procedimiento para hallar la distribución de probabilidad de una DQWL	15
<b>4 Resultados</b>	<b>16</b>
4.1 Estados iniciales puros de la moneda	16
4.1.1 Estados iniciales de la moneda y de la posición no superpuestos en la base computacional	16
4.1.2 Estados iniciales de la moneda superpuestos en la base computacional	17
4.1.3 Estados ubicados sobre un mismo anillo con radio unitario en la esfera de Bloch	18
4.2 Estados iniciales mixtos de la moneda	18
4.2.1 Estados sobre un mismo eje	18
<b>5 Conclusiones y trabajo futuro</b>	<b>26</b>
5.1 Conclusiones	26
5.2 Trabajo futuro	26
<b>A Justificación de la definición de un elemento de matriz del operador de densidad reducido</b>	<b>28</b>
<b>B Efecto del operador de Hadamard sobre los estados de las bases ortonormales sobre el eje <math>x</math> y <math>z</math></b>	<b>28</b>
<b>C Cálculos manuales de pasos de evolución de caminatas cuánticas</b>	<b>29</b>
C.1 DQWL con estado inicial $ \psi\rangle_0 =  0\rangle \otimes  0\rangle$	29
C.1.1 Primer paso de la caminata	29
C.1.2 Segundo paso de la caminata	29
C.2 DQWL con estado inicial $ \psi\rangle_0 =  +\rangle \otimes  0\rangle$	30
C.2.1 Primer paso de la caminata	30
C.2.2 Segundo paso de la caminata	30
C.2.3 Tercer paso de la caminata	30

# Objetivos

## General

Estudiar el comportamiento de una caminata cuántica discreta en una línea, implementando numéricamente el modelo y examinando la influencia del estado inicial en la distribución de probabilidad de las mismas.

## Específicos

- Aprender el formalismo del operador de densidad, así como los fundamentos de la mecánica cuántica utilizando este lenguaje.
- Entender el modelo de caminata cuántica discreta en una línea.
- Implementar numéricamente un modelo de caminata cuántica discreta en una línea.
- Analizar la distribución de probabilidad de la posición del caminante cuántico en función del estado inicial de la moneda.

## Introducción

Este proyecto pretendía en un inicio incluir decoherencia en el modelo de caminatas cuánticas; pero, debido a la extensión del tema, se limitó a trabajar caminatas cuánticas 1D. Las caminatas cuánticas son la contraparte cuántica de las caminatas aleatorias clásicas. Al igual que en el caso clásico, un caminante se desplaza sobre una red de posiciones discretas; sin embargo, en las caminatas cuánticas, su dinámica está regida por los principios de la mecánica cuántica, lo que resulta en una evolución significativamente distinta.

El interés creciente en el estudio de las caminatas cuánticas se debe a que son una herramienta útil en el estudio de la computación e información cuántica y a que poseen además una gran variedad de aplicaciones tales como medir la «cuantidad» de tecnologías emergentes para la creación de computadoras cuánticas [1], crear algoritmos de búsqueda en distintas topologías [2] y medir propiedades cuánticas de sistemas diversos [3, 4].

Este trabajo tiene por objetivo estudiar el comportamiento de la distribución de probabilidad de caminatas cuánticas discretas en una línea bajo distintos estados iniciales de la moneda. Los resultados fueron obtenidos a partir de una implementación realizada en el lenguaje de programación Wolfram Language.

En las secciones 1 y 2 se exponen los conceptos que se requiere conocer previo al concepto de caminatas cuánticas, el cual es el tema principal de este trabajo y el cual se desarrolla en la sección 3. En la sección 4 se explica la forma en la que fueron obtenidos los resultados; además de presentar y analizar los mismos con el fin de describir las similitudes o patrones identificados en las distribuciones de probabilidad de las caminatas cuánticas en función del estado inicial de la moneda. En la sección 5 se presentan las conclusiones y se explica qué se pretende realizar en el futuro para continuar el estudio empezado en este trabajo. Finalmente se incluyen los apéndices A–C con información y cálculos adicionales que permiten una mejor comprensión de los temas expuestos en este documento.

## Justificación

Este trabajo constituye la primera parte de un estudio más amplio que se planea realizar sobre caminatas cuánticas discretas en una línea. Por ello, el propósito principal de este informe es establecer el marco teórico necesario para comprender el modelo de caminata cuántica discreta en una línea y es por dicha razón que en este informe se documenta extensamente lo aprendido sobre el formalismo del operador de densidad y el operador de densidad reducido, pues son herramientas que adquirirán una relevancia aun mayor en la segunda parte del estudio que se desarrollará en el futuro.

Asimismo, en este informe se presentan y analizan los primeros resultados obtenidos mediante una implementación numérica llevada a cabo con un paquete realizado en Wolfram Language, el cual se planea ampliar para permitir el estudio de caminatas cuánticas discretas en una línea incorporando los efectos de la decoherencia, lo cual conformará el estudio a realizar para el trabajo de graduación.

# 1 Cúbit

Este trabajo se centra en el estudio y simulación de caminatas cuánticas discretas en una línea. Para facilitar al lector el entendimiento de este tema, se empezará por explicar conceptos preliminares de computación e información clásica.

El bit, del inglés *binary digit*, es la unidad mínima de información de la computación e información clásica. Este representa uno de dos estados: 0 para apagado o falso y 1 para encendido o verdadero. Un bit puede representar sólo dos valores, por lo que las computadoras emplean cadenas de bits y el sistema binario para representar información más compleja. El sistema binario es un sistema de numeración posicional en el que las cantidades se representan utilizando como base aritmética al número dos. Al ser posicional, el valor relativo de cada dígito depende de su posición dentro del número. De esta forma, el número binario escrito como la concatenación  $b_n b_{n-1} \dots b_1 b_0$ , donde cada  $b_i$  es un bit, es igual a  $b_n \times 2^n + b_{n-1} \times 2^{n-1} + \dots + b_1 \times 2^1 + b_0 \times 2^0$  en representación decimal. De esta forma, con dos bits pueden representarse los números del cero al tres como 00, 01, 10 y 11.

De forma análoga, la computación e información cuántica se basan en el concepto del bit cuántico o cúbit (del inglés *quantum bit* o *qubit*). A diferencia de los bits que solo pueden estar en uno de dos estados, los cúbits pueden estar en dos estados simultáneamente, cada uno con cierta probabilidad. Un cúbit puede encontrarse en el estado  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  o en una superposición de ambos al mismo tiempo. Los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  son dos vectores linealmente independientes en el espacio vectorial complejo de dimensión dos,  $\mathbb{C}^2$ , y son el análogo cuántico del 0 o apagado y 1 o encendido. El estado (puro) más general de un cúbit  $|\psi\rangle$  es:

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

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son números complejos, conocidos como las amplitudes de probabilidad asociadas a los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  respectivamente. Las cantidades  $|\alpha|^2$  y  $|\beta|^2$  corresponden a las probabilidades de que el estado se encuentre en los estados  $|0\rangle$  o  $|1\rangle$ , respectivamente, por lo que deben cumplir con la condición de normalización:  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ .

## 1.1 Notación de Dirac

Los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  introducidos anteriormente están escritos empleando la notación de Dirac, también conocida como notación *bra-ket* [5]. Un «ket» ( $|v\rangle$ ) representa un vector del espacio  $\mathbb{C}^n$  que puede visualizarse como una matriz columna con un número de elementos igual a la dimensión del espacio vectorial:

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}, \quad (2)$$

donde  $z_i \in \mathbb{C}$ . Por otro lado, un «bra» ( $\langle v|$ ) es un funcional lineal sobre  $\mathbb{C}^n$ ; es decir, una transformación lineal que mapea vectores de  $\mathbb{C}^n$  en elementos del campo de los números complejos  $\mathbb{C}$ . Corresponde al adjunto o transpuesto conjugado del ket  $|v\rangle$  y se denota matricialmente como

$$\langle v| = (z_1^* \quad \dots \quad z_n^*), \quad (3)$$

donde  $z_i^*$  es el conjugado complejo de  $z_i$ .

Los estados de un cúbit son vectores del espacio de Hilbert bidimensional complejo  $\mathbb{C}^2$  y se representan mediante kets que satisfacen la condición de normalización [5]. Los vectores

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad y \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

forman una base de  $\mathbb{C}^2$ , lo que implica que  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  son linealmente independientes entre sí y generan a todo el espacio. Esta base es además ortonormal, es decir, que los vectores que la conforman son ortogonales entre sí y su norma es igual a 1. Esta base recibe el nombre de «base computacional» [6].

## 1.2 Implementaciones físicas de cúbits

Un sistema cuántico de dos niveles o de dos estados es un sistema que puede existir en cualquier superposición cuántica de dos estados linealmente independientes. Un ejemplo de sistema cuántico de dos niveles es el cúbit. La independencia lineal entre los estados los hace ser físicamente distinguibles bajo mediciones. Al realizar la medición, se obtiene uno de dichos estados, sin posibilidad de obtener un estado intermedio; entonces se dice que el sistema está cuantizado.

Tanto el bit como el cúbit se han definido hasta ahora como conceptos matemáticos abstractos que permiten representar información. Sin embargo, ¿es posible asegurar que exista un análogo físico a estas formas de representar información? En el caso de los bits clásicos es bien conocido que sus estados pueden estar dados por la presencia o ausencia de voltaje de un circuito eléctrico, aunque no sea el único sistema físico que puede representarlos. Para el caso del cúbit, se analizarán primero los resultados obtenidos con uno de los experimentos más revolucionarios en la historia de la física cuántica: el experimento de Stern–Gerlach.

La versión del experimento que se llevó a cabo en 1927 consistía en hacer pasar un haz de átomos calientes de hidrógeno a través de un campo magnético no uniforme, provocando la desviación de los átomos antes de chocar contra una pantalla [5]. Si el campo estuviera a lo largo de la dirección  $z$ , según la teoría clásica se esperaba observar en la pantalla una banda continua simétrica respecto a  $z = 0$ , pues se entendía que el momento angular podía tomar cualquier valor en una distribución continua. En cambio, según la teoría cuántica conocida hasta ese momento se esperaba que el haz se dividiera en  $2l + 1$  haces, donde  $l$  es el momento angular orbital. Para átomos de hidrógeno en el estado base no se esperaba ninguna desviación del haz, pues en ese caso se tiene  $l = 0$ . Sin embargo, se registraron dos manchas en la pantalla, lo que significaba que el haz se había dividido en dos [5].

El resultado inesperado llevó a postular que el electrón en el átomo de hidrógeno poseía un momento angular intrínseco, el cual recibió el nombre de espín. Pero, lo más destacable para lo que se discute en esta sección es que el experimento de Stern–Gerlach evidenció que el espín está restringido a solo dos valores específicos, por lo que está cuantizado. Esto hace posible concebir al espín como un sistema cuántico de dos niveles natural. Un cúbit físico es un dispositivo físico que se comporta como un sistema cuántico de dos estados. Los cúbits físicos pueden adoptar diversas formas, siendo las modalidades más conocidas los espines de los electrones [7], los cúbits superconductores [8], los cúbits topológicos [9], los átomos neutros y los puntos cuánticos [10].

## 2 Operador de densidad

Un estado cuántico puro es un estado que puede escribirse mediante un vector de estado,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle, \quad (4)$$

donde los  $|\phi_i\rangle$  son estados de la base del espacio de Hilbert y  $c_i$  son las amplitudes de probabilidad asociados a los estados de la base. Existen otro tipo de estados cuánticos, llamados estados mixtos, que corresponden a una mezcla probabilística de estados puros. Estos estados no pueden ser representados de la forma anterior; por lo que, para representarlos se recurre al operador de densidad  $\rho$ , el cual se define mediante un ensamble (o colectividad estadística)  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$  formado por los estados puros  $|\psi_i\rangle$  y sus correspondientes probabilidades estadísticas  $p_i$  [6]:

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (5)$$

Un operador  $\rho$  es llamado operador de densidad asociado a algún ensamble  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$  si y solo si satisface [6]:

- $\text{Tr}(\rho) = 1$  y
- $\rho$  es un operador positivo semidefinido.

Ahora se discute lo que estas condiciones significan desde un punto de vista físico. Sea  $\{|\phi_j\rangle\}$  una base ortonormal, considerando la definición del operador de densidad [c.f. ec. (5)], la traza de  $\rho$  se calcula de la siguiente forma:

$$\text{Tr}(\rho) = \sum_j \langle\phi_j|\rho|\phi_j\rangle, \quad (6a)$$

$$= \sum_j \langle\phi_j| \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \phi_j\rangle, \quad (6b)$$

$$= \sum_j \sum_i p_i \langle\phi_j|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\phi_j\rangle, \quad (6c)$$

$$= \sum_{j,i} p_i \langle\phi_j|\psi_i\rangle(\langle\phi_j|\psi_i\rangle)^\dagger, \quad (6d)$$

$$= \sum_{i,j} p_i |\langle\phi_j|\psi_i\rangle|^2; \quad (6e)$$

donde  $\sum_i p_i |\langle\phi_j|\psi_i\rangle|^2$  es la probabilidad de encontrar al sistema en el estado  $|\phi_j\rangle$ . La suma de las probabilidades de encontrar al sistema en todos los posibles estados debe ser igual a 1, lo cual se traduce en la condición de que la traza de  $\rho$  debe ser igual a 1. Esto es completamente análogo a la normalización del vector de estado, donde la suma de las probabilidades de todos los posibles resultados de una medición debe ser igual a 1. Además, el operador de densidad debe ser positivo semidefinido, es decir, debe poseer valores propios no negativos, pues los valores propios están asociados a las probabilidades de encontrar al sistema en un estado dado; por consiguiente, los valores propios no pueden ser negativos.

**Teorema 1:** Hermiticidad del operador de densidad.

*Todo operador de densidad es hermítico.*

*Demostración.* Para esta demostración será necesario recordar algunas propiedades del operador adjunto: sea  $\lambda$  un número complejo y  $A$  y  $B$ , dos operadores; se cumple que  $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$ ,  $(\lambda A)^\dagger = \bar{\lambda} A^\dagger$  y  $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ . A partir de la definición de operador de densidad [c.f. ec. (5)], es posible calcular el adjunto

de  $\rho$ :

$$\rho^\dagger = \left( \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right)^\dagger, \quad (7a)$$

$$= \sum_i (p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^\dagger, \quad (7b)$$

$$= \sum_i \bar{p}_i (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^\dagger, \quad (7c)$$

$$= \sum_i \bar{p}_i \langle\psi_i|^\dagger |\psi_i\rangle^\dagger, \quad (7d)$$

$$= \sum_i \bar{p}_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (7e)$$

Finalmente, como las  $p_i$  son probabilidades, solo pueden tomar valores reales. Entonces

$$\rho^\dagger = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (8a)$$

$$= \rho; \quad (8b)$$

con lo cual queda completa la demostración.

$\mathcal{Q.E.D.}$

## 2.1 La esfera de Bloch

Cualquier estado puro de un cúbit puede escribirse como [6]

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left( \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \right), \quad (9)$$

donde  $\gamma$ ,  $\theta$ ,  $\phi$  son números reales;  $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$  y  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ . Es posible ignorar el factor  $e^{i\gamma}$  pues no tiene efectos observables, por lo cual (9) puede reescribirse de forma más simple como [6]

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle, \quad (10)$$

donde  $\theta$  y  $\phi$  definen un punto en la superficie de una esfera tridimensional unitaria, conocida como la *esfera de Bloch*. Esta esfera es la representación geométrica de un cúbit y en ella pueden representarse estados cuánticos puros y mixtos empleando un vector tridimensional real, con norma menor o igual a 1, conocido como *vector de Bloch*  $\vec{r}$  [ver fig. 1]. Los puntos en el interior de la esfera unitaria ( $\|\vec{r}\| < 1$ ) representan estados mixtos, mientras que cada punto en la superficie de la esfera ( $\|\vec{r}\| = 1$ ) representa un estado puro.

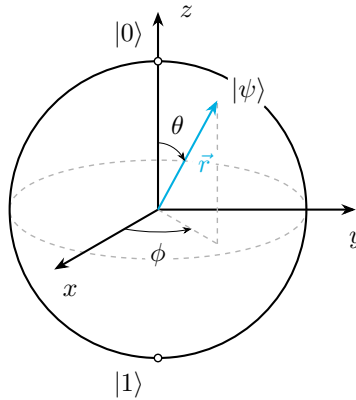


Figura 1: Representación de los estados de un cúbit en la esfera de Bloch. Los ángulos  $\theta$  y  $\phi$  están delimitados por  $0 \leq \theta \leq \pi$  y  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ .

Matemáticamente, puede representarse a todos los estados de un cúbit con el operador de densidad como:

$$\rho = \frac{\mathbb{1} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}}{2}, \quad (11)$$

donde  $\mathbb{1}$  es la identidad y  $\vec{\sigma}$  es un vector tridimensional, cuyas coordenadas son las matrices de Pauli:

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

**Teorema 2:** Representación de Bloch para estados mixtos de un cúbit.

Todo operador de densidad puede ser escrito como en la ec. (11), donde  $\vec{r}$  es real y tiene norma  $\|\vec{r}\| \leq 1$ .

*Demostración.* Se partirá demostrando que el conjunto conformado por la identidad y las tres matrices de Pauli,  $\{\mathbb{1}, X, Y, Z\}$ , es una base del espacio vectorial de los operadores lineales que actúan sobre el espacio de Hilbert de un cúbit. Todo operador lineal que actúe sobre un cúbit puede representarse como una matriz  $2 \times 2$ , por lo que el espacio vectorial que contiene estos operadores posee dimensión cuatro. Entonces, cualquier conjunto de cuatro operadores linealmente independientes formará una base del espacio. Ya que  $\mathbb{1}, X, Y, Z$  son linealmente independientes, es posible escribir cualquier elemento  $\rho$  de dicho espacio como

$$\rho = a_1 \mathbb{1} + a_2 X + a_3 Y + a_4 Z, \quad (13)$$

con  $a_i \in \mathbb{C}$ . A partir de la ec. (13) y recordando que  $\rho$  es un operador hermítico (ver teorema 1), se puede escribir:

$$a_1 \mathbb{1} + a_2 X + a_3 Y + a_4 Z = (a_1 \mathbb{1} + a_2 X + a_3 Y + a_4 Z)^\dagger, \quad (14a)$$

$$= (a_1 \mathbb{1})^\dagger + (a_2 X)^\dagger + (a_3 Y)^\dagger + (a_4 Z)^\dagger, \quad (14b)$$

$$= a_1^* \mathbb{1}^\dagger + a_2^* X^\dagger + a_3^* Y^\dagger + a_4^* Z^\dagger, \quad (14c)$$

$$= a_1^* \mathbb{1} + a_2^* X + a_3^* Y + a_4^* Z. \quad (14d)$$

Para que la igualdad anterior se cumpla se requiere que  $a_i = a_i^*$ , lo que indica que cada una de estas constantes es real.

Por otro lado, para que  $\rho$  sea un operador de densidad, se requiere que  $\text{Tr}(\rho) = 1$ , por lo que

$$1 = \text{Tr}(a_1 \mathbb{1} + a_2 X + a_3 Y + a_4 Z), \quad (15a)$$

$$1 = a_1 \text{Tr}(\mathbb{1}) + a_2 \text{Tr}(X) + a_3 \text{Tr}(Y) + a_4 \text{Tr}(Z), \quad (15b)$$

$$1 = a_1(2) + a_2(0) + a_3(0) + a_4(0), \quad (15c)$$

$$1 = 2a_1, \quad (15d)$$

$$\frac{1}{2} = a_1. \quad (15e)$$

Ahora se calculará  $\rho^2$  partiendo nuevamente de la ec. (13). Como  $\mathbb{1}\sigma_i = \sigma_i\mathbb{1} = \sigma_i$  y  $\sigma_i\sigma_j = \delta_{i,j}\mathbb{1}$  para  $i, j = 1, 2, 3$ ; se obtiene

$$\rho^2 = (a_1 \mathbb{1} + a_2 X + a_3 Y + a_4 Z)^2, \quad (16a)$$

$$= a_1 \mathbb{1} (a_1 \mathbb{1} + a_2 X + a_3 Y + a_4 Z) + a_2 X (a_1 \mathbb{1} + a_2 X) + a_3 Y (a_1 \mathbb{1} + a_3 Y) + a_4 Z (a_1 \mathbb{1} + a_4 Z), \quad (16b)$$

$$= a_1^2 \mathbb{1} + a_1 a_2 X + a_1 a_3 Y + a_1 a_4 Z + a_1 a_2 X + a_2^2 \mathbb{1} + a_1 a_3 Y + a_3^2 \mathbb{1} + a_1 a_4 Z + a_4^2 \mathbb{1}, \quad (16c)$$

$$= 2a_1 (a_2 X + a_3 Y + a_4 Z) + (a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2) \mathbb{1}, \quad (16d)$$

$$= a_2 X + a_3 Y + a_4 Z + \left( \frac{1}{4} + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 \right) \mathbb{1}. \quad (16e)$$



A la cantidad  $\text{Tr}(\rho^2)$  se le conoce como la *pureza* de la matriz de densidad. Para toda matriz de densidad se debe cumplir que  $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$ , por lo que

$$1 \geq \text{Tr}(\rho^2), \quad (17a)$$

$$1 \geq \text{Tr} \left[ a_2 X + a_3 Y + a_4 Z + \left( \frac{1}{4} + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 \right) \mathbb{1} \right], \quad (17b)$$

$$1 \geq \text{Tr}(a_2 X) + \text{Tr}(a_3 Y) + \text{Tr}(a_4 Z) + \text{Tr} \left[ \left( \frac{1}{4} + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 \right) \mathbb{1} \right], \quad (17c)$$

$$1 \geq a_2 \text{Tr}(X) + a_3 \text{Tr}(Y) + a_4 \text{Tr}(Z) + \left( \frac{1}{4} + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 \right) \text{Tr}(\mathbb{1}), \quad (17d)$$

$$1 \geq a_2(0) + a_3(0) + a_4(0) + \left( \frac{1}{4} + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 \right) 2, \quad (17e)$$

$$1 \geq 2 \left( \frac{1}{4} + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 \right), \quad (17f)$$

$$\frac{1}{2} \geq \frac{1}{4} + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2, \quad (17g)$$

$$\frac{1}{4} \geq a_2^2 + a_3^2 + a_4^2, \quad (17h)$$

$$\frac{1}{2} \geq \sqrt{a_2^2 + a_3^2 + a_4^2}, \quad (17i)$$

$$\frac{1}{2} \geq \|\vec{a}\|; \quad (17j)$$

donde  $\vec{a} = (a_2, a_3, a_4)$  es un vector real. Siguiendo con la operatoria, puede reescribirse la ec. (17j) como

$$1 \geq 2\|\vec{a}\|, \quad (18a)$$

$$1 \geq \|2\vec{a}\|. \quad (18b)$$

Definiendo  $\vec{r} = 2\vec{a}$ , se obtiene a partir de la ec. (18b) que

$$1 \geq \|\vec{r}\|; \quad (19)$$

donde  $\vec{r}$  es un vector tridimensional real, pues  $\vec{a}$  también lo es.

Finalmente, tomando la ec. (13) y definiendo  $\vec{\sigma} = (X, Y, Z)$  se obtiene

$$\rho = \frac{1}{2} \mathbb{1} + a_2 X + a_3 Y + a_4 Z, \quad (20a)$$

$$= \frac{1}{2} \mathbb{1} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}, \quad (20b)$$

$$= \frac{1}{2} \mathbb{1} + \frac{2\vec{a}}{2} \cdot \vec{\sigma}, \quad (20c)$$

$$= \frac{1}{2} \mathbb{1} + \frac{\vec{r}}{2} \cdot \vec{\sigma}, \quad (20d)$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(\vec{r} \cdot \vec{\sigma}), \quad (20e)$$

$$= \frac{\mathbb{1} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}}{2}. \quad (20f)$$

Con esto queda completa la demostración.

$\mathcal{Q.E.D.}$

En la representación de la esfera de Bloch se suele emplear la base computacional:  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , tal y como se ejemplifica en la ec. (10). A pesar de ello, es posible demostrar que cada par de puntos diametralmente opuestos sobre la esfera de Bloch corresponde a dos estados ortonormales del espacio de Hilbert bidimensional complejo, lo que implica que forman una base del mismo.

**Teorema 3:** Bases ortonormales visualizadas en la esfera de Bloch.

Cualquier par de puntos antípodas en la superficie de la esfera de Bloch forman una base ortonormal del espacio de Hilbert bidimensional complejo.

*Demostración.* Un punto cualquiera ubicado en la superficie de la esfera de Bloch se representa mediante la ec. (10):

$$|\psi_1\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle. \quad (21)$$

Un punto diametralmente opuesto a  $|\psi_1\rangle$  está dado por

$$|\psi_2\rangle = \cos\left(\frac{\pi-\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i(\phi+\pi)}\sin\left(\frac{\pi-\theta}{2}\right)|1\rangle, \quad (22a)$$

$$= \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle - e^{i\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle. \quad (22b)$$

Es evidente que  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  son vectores normales, pues al hallarse sobre la superficie de la esfera de Bloch (que tiene radio 1), su norma es igual a 1. Para demostrar que  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  son ortogonales, se calcula su producto interno:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) - e^{-i\phi}e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (23a)$$

$$= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (23b)$$

$$= 0. \quad (23c)$$

Con esto se demuestra que  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  son ortogonales, por lo que  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$  es un conjunto ortonormal. Para que un conjunto forme una base de un espacio vectorial es necesario que su cardinalidad sea igual a la dimensión del espacio vectorial y que los vectores que lo conforman sean linealmente independientes entre sí.

El espacio de Hilbert bidimensional complejo, tal como su nombre indica, posee dimensión 2, que es igual a la cantidad de estados en el conjunto  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ . Además, los dos estados son ortogonales, y la ortogonalidad implica independencia lineal siempre y cuando ninguno de los vectores en el conjunto sea el vector nulo. Ya que la norma de  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  es igual a 1, ninguno de los dos es el vector nulo, pues la norma del vector nulo es 0. Con esto queda demostrado que cualquier par de puntos antípodas en la superficie de la esfera de Bloch forman una base ortonormal del espacio de Hilbert bidimensional complejo.  $\mathcal{Q.E.D.}$

Ahora se mostrará cómo se ve la forma matricial del operador de densidad de un estado puro genérico de un cúbit en la base computacional  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ . A partir de la definición del operador de densidad en la ec. (5) y empleando la ec. (10) se obtiene

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (24a)$$

$$= \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle\right)\left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\langle 0| + e^{-i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\langle 1|\right), \quad (24b)$$

$$= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle\langle 0| + e^{-i\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle\langle 1| + e^{i\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle\langle 0| + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle\langle 1|. \quad (24c)$$

Para obtener la representación matricial de  $\rho$  en la base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , se calcula

$$\rho = \begin{matrix} & \begin{matrix} |0\rangle & |1\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} \langle 0| \\ \langle 1| \end{matrix} & \begin{pmatrix} \langle 0|\rho|0\rangle & \langle 0|\rho|1\rangle \\ \langle 1|\rho|0\rangle & \langle 1|\rho|1\rangle \end{pmatrix} \end{matrix}, \quad (25)$$

por lo que  $\rho$  (ec. (24c)) escrita en representación matricial es

$$\rho = \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{-i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Por ejemplo, para hallar la representación matricial del operador de densidad de  $|0\rangle$ , se escribirá primero el operador de densidad de dicho estado. Al ser un estado puro, por la ec. (24a) se tiene que

$$\rho_0 = |0\rangle\langle 0|. \quad (27)$$

Luego, por la ec. (25), la representación matricial de la ec. (27) es

$$\rho_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (28)$$

Siguiendo un procedimiento diferente, se buscarán ahora los valores de  $\theta$  y  $\phi$  que, reemplazados en la ec. (10), produzcan el estado  $|0\rangle$ . Esto es hallar los valores de  $\theta$  y  $\phi$  que satisfagan

$$|0\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle. \quad (29)$$

La ecuación anterior produce el sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = 1 \\ e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = 0 \end{cases}; \quad (30)$$

cuya solución es  $\theta = 0$  y  $\phi \in [0, 2\pi]$ . Si bien  $\phi$  puede tomar cualquier valor en el intervalo anterior, se optará por elegir  $\phi = 0$ . Estos valores pueden verificarse observando la representación geométrica del estado  $|0\rangle$  en la esfera de Bloch, pues este estado corresponde a un vector normal en la dirección positiva del eje  $z$ . En la fig. 2 se hace evidente que  $\phi$  puede tomar cualquier valor debido a la simetría alrededor del eje  $z$ .

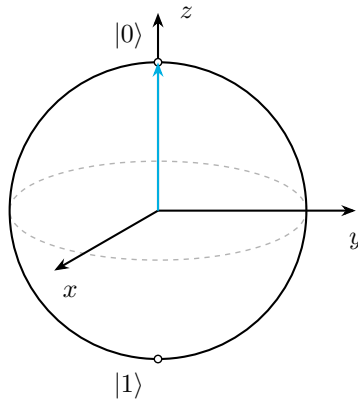


Figura 2: Representación geométrica del estado  $|0\rangle$ .

Al reemplazar en la ec. (26) los valores obtenidos para  $\theta$  y  $\phi$ , se obtiene nuevamente la ec. (28). Se observa que la matriz de densidad  $\rho_0$  es una matriz diagonal, pues todos los términos fuera de la diagonal son ceros.

Análogamente, el operador de densidad para el estado  $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$  es

$$\rho_+ = |+\rangle\langle +|, \quad (31a)$$

$$= \left( \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{\langle 0| + \langle 1|}{\sqrt{2}} \right), \quad (31b)$$

$$= \frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|). \quad (31c)$$

Por (25), la representación matricial de la ec. (31c) es

$$\rho_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Ahora, empleando la ec. (10) se buscarán los valores de  $\theta$  y  $\phi$  que satisfagan

$$|+\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle, \quad (33a)$$

$$\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle. \quad (33b)$$

De la ec. (33b) se obtiene el sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}, \quad (34)$$

cuya solución es  $\theta = \pi/2$  y  $\phi = 0$ . Por lo anterior, la representación geométrica del estado  $|+\rangle$  en la esfera de Bloch corresponde a un vector normal en la dirección positiva del eje  $x$  tal y como ilustra la fig. 3.

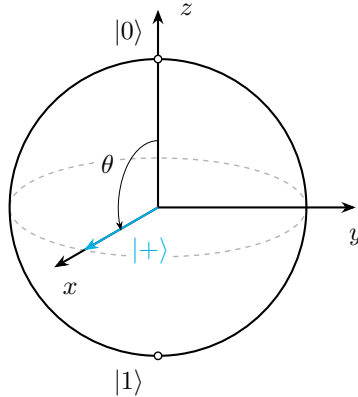


Figura 3: Representación geométrica del estado  $|+\rangle$ .

Sustituyendo los valores obtenidos para  $\theta$  y  $\phi$  y en la ec. (26) se obtiene nuevamente la ec. (31c). Se observa que  $\rho_+$  no es una matriz diagonal. Los términos fuera de la diagonal (en este caso,  $1/2$  en las posiciones  $(1, 2)$  y  $(2, 1)$ ) son conocidos como *coherencias* y representan las interferencias cuánticas entre los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ .

## 2.2 Reformulación de los postulados de la mecánica cuántica empleando el operador de densidad

Con la caracterización del operador de densidad, es posible reformular la mecánica cuántica. Para ello, se requiere expresar cada uno de los postulados de la mecánica cuántica en términos del operador de densidad. A continuación, se seguirá la formulación de Nielsen y Chuang [6].

### 2.2.1 Postulado I: espacio de estados.

Asociado a cualquier sistema físico existe un espacio de Hilbert, el cual es el espacio de estados del sistema. Si un sistema cuántico se halla en el estado  $\rho_i$  con probabilidad  $p_i$ , entonces el sistema está completamente descrito por su *operador de densidad*

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i. \quad (35)$$

### 2.2.2 Postulado II: evolución.

Un sistema cuántico se considera *cerrado* si no intercambia energía ni información con su entorno. En otras palabras, su evolución es completamente aislada del resto del universo. La evolución de un sistema cuántico *cerrado* está dada por

$$\rho' = U \rho U^\dagger, \quad (36)$$

donde  $U$  es una transformación unitaria; es decir, satisface  $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$ .

### 2.2.3 Postulado III: medida.

La medida está descrita por un conjunto  $\{M_m\}$  de operadores de medición. Así, la probabilidad de medir  $m$  está dada por

$$p(m) = \text{Tr}(M_m^\dagger M_m \rho), \quad (37)$$

y el estado después de la medición es

$$\frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\text{Tr}(M_m^\dagger M_m \rho)}. \quad (38)$$

Además, estos operadores cumplen la *ecuación de completitud*

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = \mathbb{1}. \quad (39)$$

### 2.2.4 Postulado IV: sistemas compuestos.

El espacio de estados de un sistema físico compuesto es el producto tensorial de los espacios de los sistemas que lo componen. Así, los estados del sistema conjunto están descritos por operadores de densidad que actúan sobre el espacio de Hilbert

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n, \quad (40)$$

donde  $\mathcal{H}_i$  es el espacio de Hilbert de la  $i$ -ésima partícula y  $\otimes$  denota el producto tensorial.

## 2.3 Operador de densidad reducido

El operador de densidad reducido permite describir el estado de un subsistema de un sistema cuántico compuesto [6]. Suponiendo un sistema cuántico compuesto  $AB$  descrito en un espacio de Hilbert que es el producto tensorial de dos subespacios,  $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , asociados a dos subsistemas  $A$  y  $B$ , respectivamente; si el estado total del sistema se describe mediante un operador de densidad  $\rho^{AB}$  que contiene toda la información cuántica del sistema compuesto, el operador de densidad reducido de uno de los subsistemas (por ejemplo  $A$ ), se obtiene al tomar la traza parcial (trazar) respecto al otro sistema, llamado sistema complementario o entorno (en este caso,  $B$ ). Esto se expresa matemáticamente como

$$\rho^A \equiv \text{Tr}_B(\rho^{AB}). \quad (41)$$

### 2.3.1 Traza parcial

La traza parcial es una generalización de la traza. Mientras que la traza estándar es un operador lineal que asigna un valor escalar a cada operador, la traza parcial es un operador lineal que toma operadores del espacio compuesto  $\mathcal{H}_{AB}$  y devuelve operadores de  $\mathcal{H}_A$  o  $\mathcal{H}_B$ . Está definida de la siguiente forma [6]:

$$\text{Tr}_B(|a_1\rangle\langle a_2| \otimes |b_1\rangle\langle b_2|) \equiv |a_1\rangle\langle a_2| \text{Tr}\{|b_1\rangle\langle b_2|\}, \quad (42)$$

donde  $|a_i\rangle$  y  $|b_i\rangle$  son vectores cualesquiera de los espacios de estados de  $A$  y  $B$ , respectivamente.

El operador de densidad reducido  $\rho_A$  contiene toda la información necesaria para predecir cualquier medida realizada en  $A$  sin importar el sistema  $B$ . Para demostrar que la operación de traza parcial proporciona correctamente las estadísticas de medición asociadas a observables en una parte del sistema cuántico, se seguirá la formulación de Chandra y Ghosh [11]. Considerar un sistema compuesto  $AB$  que se halla en el estado  $\rho^{AB}$ . Suponer que  $\{|\psi_i\rangle\}$  es una base ortonormal del subsistema  $A$  y que  $\{|\phi_j\rangle\}$  es una base ortonormal del subsistema  $B$ . Por lo tanto,  $\{|\psi_i\rangle \otimes |\phi_j\rangle\}$  es una base ortonormal del sistema compuesto.

Considerar un observable  $\Lambda_A$  cualquiera del sistema  $A$ . Para ser físicamente consistente, cualquier estado  $\rho^A$  asociado al sistema  $A$  debe cumplir con que los valores promedio de  $\Lambda_A$  calculados a partir de  $\rho^{AB}$  y a partir de  $\rho^A$  sean iguales. Se calculará primero el valor promedio empleando  $\rho^{AB}$ . Para simplificar la escritura del producto tensorial entre dos vectores se usará la notación  $|a\rangle \otimes |b\rangle = |a, b\rangle$  a partir de aquí.

$$\text{Tr}(\rho^{AB}(\Lambda_A \otimes \mathbb{1}_B)) = \sum_{i,j} \langle \psi_i, \phi_j | \rho^{AB} (\Lambda_A \otimes \mathbb{1}_B) | \psi_i, \phi_j \rangle, \quad (43a)$$

$$= \sum_{i,j} \langle \psi_i, \phi_j | \rho^{AB} \left( \sum_{k,l} |\psi_k, \phi_l\rangle\langle \psi_k, \phi_l| \right) (\Lambda_A \otimes \mathbb{1}_B) | \psi_i, \phi_j \rangle, \quad (43b)$$

$$= \sum_{i,j,k,l} \langle \psi_i, \phi_j | \rho^{AB} |\psi_k, \phi_l\rangle \langle \psi_k, \phi_l | \Lambda_A \otimes \mathbb{1} | \psi_i, \phi_j \rangle, \quad (43c)$$

$$= \sum_{i,j,k,l} \langle \psi_i, \phi_j | \rho^{AB} |\psi_k, \phi_l\rangle \langle \psi_k | \Lambda_A | \psi_i \rangle \langle \phi_l | \mathbb{1}_B | \phi_j \rangle, \quad (43d)$$

$$= \sum_{i,j,k,l} \langle \psi_i, \phi_j | \rho^{AB} |\psi_k, \phi_l\rangle \langle \psi_k | \Lambda_A | \psi_i \rangle \delta_{l,j}, \quad (43e)$$

$$= \sum_{i,j,k} \langle \psi_i, \phi_j | \rho^{AB} |\psi_k, \phi_j\rangle \langle \psi_k | \Lambda_A | \psi_i \rangle. \quad (43f)$$

Antes de continuar, se definirá un elemento de matriz del operador de densidad reducido  $\rho^A$  para el subsistema  $A$  como

$$\langle \psi_i | \rho^A | \psi_k \rangle = \sum_j \langle \psi_i, \phi_j | \rho^{AB} | \psi_k, \phi_j \rangle. \quad (44)$$

La justificación de la definición anterior se detalla en el apéndice A. Al insertar la ec. (44) en (43f) se obtiene

$$\text{Tr}(\rho^{AB}(\Lambda_A \otimes \mathbb{1}_B)) = \sum_{i,k} \langle \psi_i | \rho^A | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \Lambda_A | \psi_i \rangle, \quad (45a)$$

$$= \sum_i \langle \psi_i | \rho^A \left( \sum_k |\psi_k\rangle\langle \psi_k| \right) \Lambda_A | \psi_i \rangle, \quad (45b)$$

$$= \sum_i \langle \psi_i | \rho^A \Lambda_A | \psi_i \rangle, \quad (45c)$$

$$= \text{Tr}(\rho^A \Lambda_A). \quad (45d)$$

Este resultado muestra que el operador de densidad reducido contiene toda la información física accesible de un subsistema individual.

### 3 Caminatas cuánticas

Las caminatas cuánticas (o *quantum walks*, en inglés) son el análogo cuántico de las caminatas aleatorias clásicas. Al igual que en el caso clásico, una caminata cuántica describe la evolución de un sistema en términos de un «caminante» que se desplaza a través de una red de posiciones discretas. Sin embargo, en la versión cuántica, el caminante se rige por principios cuánticos como la superposición y el entrelazamiento, lo que conduce a que el sistema evolucione de forma distinta a una caminata clásica.

Existen dos modelos de caminatas cuánticas de acuerdo con el tipo de paso temporal: caminatas cuánticas continuas en el tiempo y discretas en el tiempo [12]. Ambas se describen a continuación, aunque las segundas en más detalle por ser las que conciernen a este proyecto.

Las caminatas cuánticas continuas en el tiempo, abreviadas usualmente como CTQW (del inglés *Continuous-Time Quantum Walk*), consisten en un sistema cuántico: el *caminante*, junto con un operador de evolución (hamiltoniano) que es aplicado al caminante sin restricciones temporales [12]. Matemáticamente, la dinámica de este modelo se expresa empleando la ecuación de Schrödinger:

$$|\psi\rangle_t = e^{-iHt/\hbar} |\psi\rangle_{t-1}. \quad (46)$$

#### 3.1 Caminatas cuánticas discretas en el tiempo

Abreviadas usualmente como DTQW (del inglés *Discrete-Time Quantum Walks*), consisten en dos sistemas cuánticos: un *caminante* y una *moneda*, junto con un operador de evolución que es aplicado a ambos sistemas en pasos de tiempo discretos [12]. Matemáticamente, la dinámica de este modelo está descrita la siguiente evolución unitaria:

$$|\psi\rangle_t = U |\psi\rangle_{t-1} = S \cdot (C \otimes \mathbb{1}) |\psi\rangle_{t-1}, \quad (47)$$

donde  $|\psi\rangle_t$  representa al estado del sistema en el tiempo  $t$ . Además,  $S$  representa al operador de desplazamiento condicional *shift* y  $C$  al operador de la moneda (del inglés *coin*). En la sección 3.1.2 se discutirán las definiciones matemáticas de estos operadores.

##### 3.1.1 Sistemas cuánticos

El caminante es un sistema cuántico que vive en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_p$  de dimensión infinita contable. Los vectores  $\{|i\rangle\}$  de la base canónica de  $\mathcal{H}_p$  se emplean habitualmente para denotar las posiciones que puede ocupar el caminante. Además de dichos estados de la base, cualquier superposición de la forma  $\sum_i \alpha_i |i\rangle$ , con  $\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$ , conforma un estado válido de la posición; es decir, son valores admisibles de  $|p\rangle_t \in \mathcal{H}_p$ , donde  $|p\rangle_t$  denota el estado de la posición en la que se encuentra el caminante en el tiempo  $t$ .

Las caminatas cuánticas discretas en el tiempo pueden ser unidimensionales o multidimensionales dependiendo de cómo sea disposición de las posiciones. En este proyecto se implementa una DQWL (del inglés *Discrete Quantum Walks on a Line*), las cuales son un caso particular de las DTQW, donde la evolución del sistema ocurre en una línea unidimensional discreta. Por otro lado, las caminatas multidimensionales son aquellas en las que el caminante se mueve sobre una rejilla discreta en un espacio de dimensión mayor a uno.

La moneda es el otro sistema cuántico de las DTQW y este vive en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_c$  de dimensión finita. Puede tomar por estado  $(|c\rangle_t \in \mathcal{H}_c)$  los estados de la base canónica al igual que cualquier superposición de ellos.

El estado total de la caminata cuántica vive en el espacio  $\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c$ . Se acostumbra usar estados producto de  $\mathcal{H}_T$  como estados iniciales de la misma, es decir,  $|\psi\rangle_0 = |c\rangle_0 \otimes |p\rangle_0$  [12]; esto porque los estados producto son más sencillos de preparar y analizar, lo que los hace más prácticos para montajes experimentales y modelos teóricos.

### 3.1.2 Operadores de evolución

En el caso clásico de las caminatas aleatorias, el azar es un componente esencial en la evolución del sistema. En el caso cuántico, la aleatoriedad se introduce realizando una medición en el sistema después de que se ha aplicado un operador de evolución al estado de la moneda, seguido de un operador de desplazamiento condicional al sistema cuántico total [12].

El operador de la moneda, denotado como  $C$  en la ec. (47) actúa únicamente sobre el sistema de la moneda. Este operador coloca a la moneda en un estado de superposición, lo cual resulta análogo a lanzar una moneda en el caso clásico. El operador de moneda puede ser o no homogéneo dependiendo de si es constante a lo largo de toda la caminata, o si varía en el tiempo o según la posición del caminante. Entre los operadores de la moneda, el operador de Hadamard es de los más utilizados [12] y es el que se emplea en la implementación realizada para este proyecto. Este operador es homogéneo y está dado por

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_c \langle 0| + |0\rangle_c \langle 1| + |1\rangle_c \langle 0| - |1\rangle_c \langle 1|). \quad (48)$$

En la ec. (48), el subíndice  $c$  a la derecha de un *ket* indica que dicho *ket* es un estado de  $\mathcal{H}_c$ . De forma similar es para un *bra*, con la diferencia de que el subíndice se coloca al lado izquierdo. Para evitar hacer muy complicada la notación, en medio de un *ket-bra* se coloca un único subíndice.

El operador *shift*, denotado como  $S$  en la ec. (47) actúa sobre el sistema total. Es un operador condicional que dicta cómo se mueve el caminante en la red. En el caso de tener una moneda bidimensional, el *shift* mueve al caminante un paso hacia la derecha o la izquierda dependiendo de si el estado de la moneda es el estado  $|0\rangle$  o  $|1\rangle$ . En este caso, el operador *shift* tiene la forma

$$S = |0\rangle_c \langle 0| \otimes \sum_i |i+1\rangle_p \langle i| + |1\rangle_c \langle 1| \otimes \sum_i |i-1\rangle_p \langle i|. \quad (49)$$

La notación empleada en la ec. (49) es análoga a la empleada en la ec. (48), con la diferencia de que se añade un nuevo subíndice,  $p$ , el cual alude a que se trata un estado de  $\mathcal{H}_p$ . Estos subíndices hacen evidente que el *shift* es un operador que afecta a ambos sistemas, mientras que el operador de la moneda solo afecta al sistema de la moneda.

En consecuencia, el operador sobre el espacio de Hilbert total es  $U = S \cdot (C \otimes \mathbb{1}_p)$  y el estado de la caminata cuántica discreta después de  $t$  pasos es

$$|\psi\rangle_t = U^t |\psi\rangle_0. \quad (50)$$

## 3.2 Procedimiento para hallar la distribución de probabilidad de una DQWL

Para obtener la distribución de probabilidad de una DQWL con estado inicial de la forma  $|\psi\rangle_0 = |c\rangle_0 \otimes |p\rangle_0$ , primero se hace evolucionar la caminata un número  $t$  deseado de pasos. Después de  $t$  pasos, el estado del sistema está dado por la ec. (50). En este caso se ha optado por tomar  $t = 100$  para todos los resultados obtenidos.

Luego, se calcula el operador de densidad que corresponde al estado de la caminata en el tiempo  $t$ , es decir, se calcula  $\rho_{(t)} = |\psi\rangle_t \langle \psi|$ . Posteriormente, se aplica la traza parcial sobre el espacio de la moneda:  $\rho_{p(t)} = \text{Tr}_c(\rho_{(t)})$ , obteniendo la matriz de densidad reducida en el espacio del caminante.

La probabilidad de encontrar al caminante en la posición  $|p\rangle$  tras 100 pasos se obtiene de los elementos de la diagonal de  $\rho_{p(t)}$ :  $P_{(p,t)} = \langle p | \rho_{p(t)} | p \rangle$ . Finalmente, graficar  $P_{(p,t)}$  en función de  $p$  para un valor fijo de  $t$  corresponde a obtener la distribución de probabilidad de la caminata para el tiempo  $t$ .



## 4 Resultados

Para obtener los resultados que se muestran y discuten en esta sección, se implementó numéricamente el modelo de DQWL en el lenguaje Wolfram Language. Este lenguaje fue elegido por ser un lenguaje simbólico, por tener predefinidas varias funciones útiles de álgebra lineal que eran necesarias para la implementación y por permitir crear las gráficas de distribución de probabilidad fácilmente.

A continuación se muestran las distribuciones de probabilidad obtenidas para caminatas cuánticas con distintos estados iniciales de la moneda tanto puros como mixtos.

### 4.1 Estados iniciales puros de la moneda

#### 4.1.1 Estados iniciales de la moneda y de la posición no superpuestos en la base computacional

Se empezó por validar el código realizado buscando reproducir las gráficas de distribución de probabilidad para tres caminatas ampliamente conocidas: DQWL de 100 pasos con estados iniciales  $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$ ,  $|\psi\rangle_0 = |1\rangle \otimes |0\rangle$  y  $|\psi\rangle_0 = |+_y\rangle \otimes |0\rangle$ . Estos resultados fueron comparados con las gráficas incluidas en Venegas-Andraca [12]. Para las primeras dos DQWL [fig. 4] los estados iniciales de la moneda son los estados de la base computacional. Estos primeros resultados hacen evidente que la distribución de probabilidad de la caminata depende del estado inicial de la moneda. Por ello, se varió los estados iniciales de manera sistemática para hallar similitudes o patrones en las distribuciones de probabilidad de la caminata cuántica en función del estado inicial de la moneda.

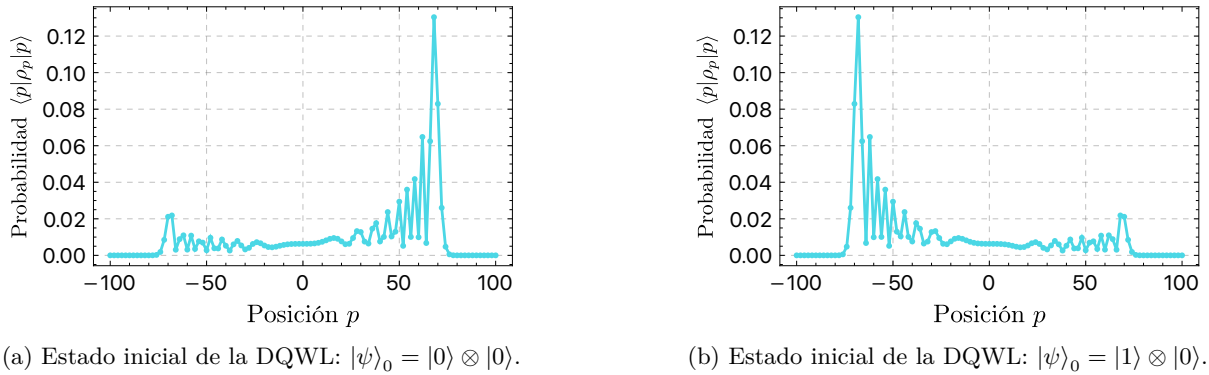


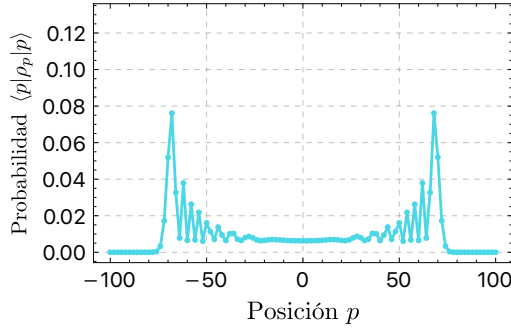
Figura 4: Distribución de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda son los estados de la base ortonormal en  $z$ .

Un punto destacable de las distribuciones de probabilidad de la fig. 4 es que no son simétricas. En la DQWL de la fig. 4a, el caminante empieza en la posición  $|0\rangle$  con el estado inicial de la moneda  $|0\rangle$  que representa mover al caminante un paso hacia la derecha. Esto introduce una preferencia inicial de hacer tender al caminante hacia la derecha. Ocurre de manera similar para la DTQW de la fig. 4b: ya que el estado inicial de la moneda es  $|1\rangle$  y este representa mover al caminante un paso hacia la izquierda, la distribución refleja una tendencia hacia la izquierda.

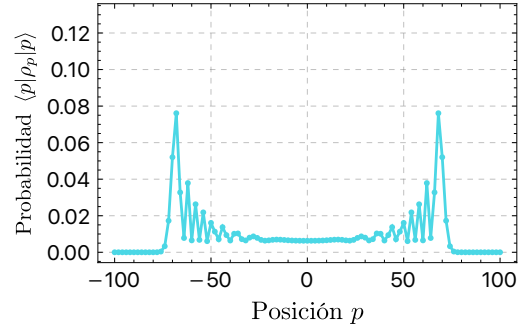
Por otro lado, las distribuciones de probabilidad en la fig. 4 dejan ver la naturaleza cuántica de la caminata. En una caminata aleatoria clásica, cada paso es independiente del anterior y la probabilidad de estar en una posición se calcula sumando directamente las contribuciones de cada trayectoria. A diferencia de las caminatas clásicas, en una caminata cuántica el caminante no toma una única trayectoria con determinada probabilidad. Después de cada paso, el caminante de la caminata cuántica puede estar en una superposición de estados y es por ello que la probabilidad de hallar al caminante en una posición no es simplemente la suma de las probabilidades clásicas, sino el cuadrado del valor absoluto de la amplitud cuántica. Esto ocasiona además que ocurran interferencias constructivas y destructivas produciendo los máximos y mínimos tan característicos de las distribuciones de probabilidad de las caminatas cuánticas.

#### 4.1.2 Estados iniciales de la moneda superpuestos en la base computacional

La siguiente distribución de probabilidad comparada con las presentadas en Venegas–Andraca [12] es la de una DQWL que tiene por estado inicial de la moneda un estado en superposición respecto a la base computacional:  $|+_y\rangle = (|0\rangle + i|1\rangle)/\sqrt{2}$  [fig. 5a]. Luego de verificar que las distribuciones de probabilidad fueron obtenidas correctamente tanto para los estados de la base computacional y el estado  $|+_y\rangle$  como estados iniciales de la moneda, se dio por validado el código y se procedió a generar nuevos resultados. Para los siguientes resultados obtenidos se empleó por estado inicial de la moneda el otro estado de la base ortonormal sobre el eje  $y$ :  $|-_y\rangle$  [fig. 5b], y los estados de la base ortonormal sobre el eje  $x$ :  $|+\rangle, |-\rangle$  [fig. 6].

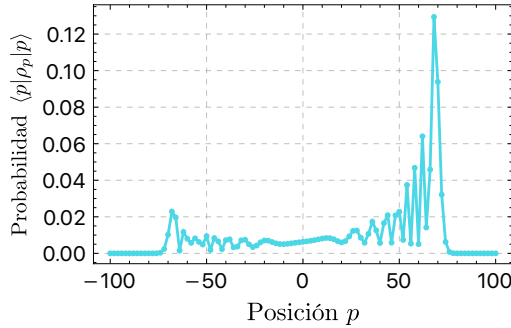


(a) Estado inicial de la DQWL:  $|\psi\rangle_0 = |+_y\rangle \otimes |0\rangle$ .

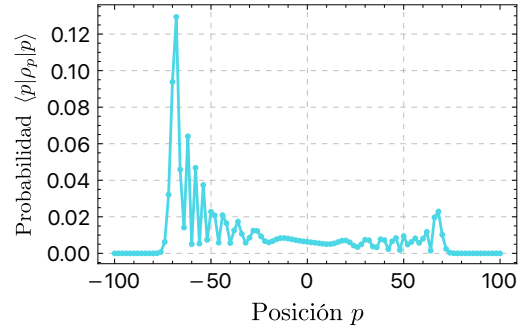


(b) Estado inicial de la DQWL:  $|\psi\rangle_0 = |-_y\rangle \otimes |0\rangle$ .

Figura 5: Distribución de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda son los estados de la base ortonormal en  $y$ .



(a) Estado inicial de la DQWL:  $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$ .



(b) Estado inicial de la DQWL:  $|\psi\rangle_0 = |-\rangle \otimes |0\rangle$ .

Figura 6: Distribución de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda son los estados de la base ortonormal en  $x$ .

Las distribuciones de probabilidad para los estados iniciales de la moneda  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  podrían conducir a pensar incorrectamente que tener estados superpuestos respecto a la base computacional como estados iniciales de la moneda producirán distribuciones de probabilidad simétricas, idea que parece ser respaldada por las distribuciones de probabilidad de las caminatas con estados iniciales de la moneda  $|+_y\rangle$  y  $|-_y\rangle$  [fig. 5] de la moneda. Los resultados obtenidos para los estados  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  [fig. 6] muestran que la idea es en efecto errónea, pues sus distribuciones de probabilidad son asimétricas y además muy similares a las obtenidas con los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  [fig. 4].

La razón de por qué se produce esta asimetría es debido al efecto de aplicar el operador de Hadamard a la base ortonormal sobre el eje  $x$ , pues  $H|+\rangle = |0\rangle$  y  $H|-\rangle = |1\rangle$  tal y como puede corroborarse con los cálculos realizados en el apéndice B. Lo anterior provoca que, por ejemplo, la caminata con estado inicial  $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$  evolucione de forma muy parecida a como lo hace la caminata con el estado inicial  $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$ . Para visualizar esto, comparar los estados de ambas caminatas en el tiempo  $t$  para la caminata con  $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$  y en el tiempo  $t + 1$  para la caminata con  $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$ :

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle_0 &= |+, 0\rangle \\
|\psi\rangle_0 &= |0, 0\rangle \\
|\psi\rangle_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 1\rangle + |1, -1\rangle) \\
|\psi\rangle_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} |0, 1\rangle \\
|\psi\rangle_2 &= \frac{1}{2} [|0, 2\rangle + |1, 0\rangle + |0, 0\rangle - |1, -2\rangle] \\
|\psi\rangle_2 &= \frac{1}{2} (|0, 2\rangle + |1, 0\rangle) \\
|\psi\rangle_3 &= \frac{1}{2\sqrt{2}} [|0, 3\rangle + |1, 1\rangle + |0, 1\rangle - |1, -1\rangle]
\end{aligned}$$

Los cálculos detallados de los pasos de evolución de las caminatas pueden verse en el apéndice C. Los resultados de los cálculos sugieren que la caminata con estado inicial  $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$  está desplazada un paso espacial hacia la izquierda y un paso temporal adelante respecto de la caminata con estado inicial  $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$ .

#### 4.1.3 Estados ubicados sobre un mismo anillo con radio unitario en la esfera de Bloch

El siguiente paso fue obtener resultados para más estados puros aparte de los ya mostrados. Se eligió hacer comparaciones de las distribuciones de probabilidad de caminatas cuyos estados iniciales de la moneda se ubicaran todos en un mismo anillo en la superficie de la esfera de Bloch.

Se empezó por tomar el anillo de radio 1 en el plano  $xy$ . Los estados iniciales de la moneda de estas caminatas son de la forma  $|\psi\rangle_0 = |c\rangle_0 \otimes |0\rangle$  donde  $|c\rangle_0$  está dado por la ec. (10) con  $\theta = \pi/2$  y valores variables para  $\phi$  que van desde 0 hasta  $2\pi$ . En la fig. 7 puede apreciarse la variación continua de las distribuciones de probabilidad para estados en el anillo. La fig. 7a es la distribución de probabilidad correspondiente al estado inicial  $|+\rangle \otimes |0\rangle$ , la fig. 7c corresponde al estado  $|-\rangle \otimes |0\rangle$ , la fig. 7e al estado  $|-\rangle \otimes |0\rangle$  y la fig. 7g al estado  $|-\rangle \otimes |0\rangle$ . Las restantes (figuras 7b, 7d y 7f) muestran distribuciones de probabilidad de transición entre las distribuciones de probabilidad de sus respectivas figuras adyacentes.

Este mismo fenómeno es apreciable para los estados sobre el anillo de radio 1 en el plano  $yz$  (fig. 8). En este caso los estados iniciales de la moneda son de la misma forma que para el plano  $xy$ ; pero con  $\phi = \pi/2$  y  $\phi = \pi/2$  para valores variables de  $\theta$  entre 0 y  $\pi$ . Las figuras 8a, 8c, 8e y 8g corresponden a las distribuciones de probabilidad de las caminatas con estados iniciales  $|0\rangle \otimes |0\rangle$ ,  $|+\rangle \otimes |0\rangle$ ,  $|1\rangle \otimes |0\rangle$  y  $|-\rangle \otimes |0\rangle$ . Las figuras restantes muestran de nuevo distribuciones de probabilidad de transición entre las distribuciones de probabilidad anteriores.

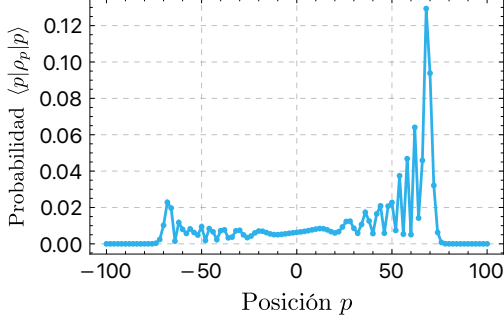
Para el anillo unitario ubicado sobre el plano  $xz$  (ver fig. 9) se toman  $\phi = 0$  y  $\phi = \pi$  para valores variables de  $\theta$  entre 0 y  $\pi$ . Las figuras 9a, 9c, 9e y 9g corresponden a las distribuciones de probabilidad de las caminatas con estados iniciales  $|0\rangle \otimes |0\rangle$ ,  $|+\rangle \otimes |0\rangle$ ,  $|1\rangle \otimes |0\rangle$  y  $|-\rangle \otimes |0\rangle$ . El resto de figuras permiten visualizar la continuidad en la variación de la distribución de probabilidad, tal como se discutió anteriormente.

## 4.2 Estados iniciales mixtos de la moneda

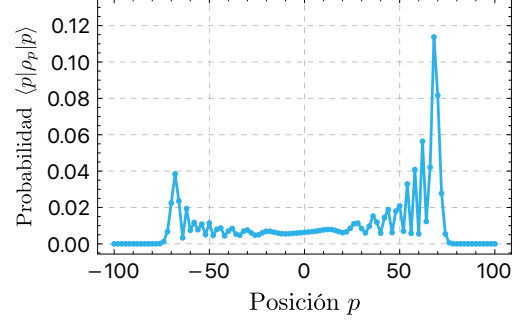
### 4.2.1 Estados sobre un mismo eje

Finalmente, se compararon las distribuciones de probabilidad para caminatas cuyo estado inicial de la moneda se hallaba sobre un mismo eje. El primer eje escogido fue el eje  $x$ . Las matrices de densidad en este caso se construyen empleando la ecuación (11) y el vector de Bloch dado en coordenadas cartesianas:  $\vec{r} = (x, 0, 0)$ , con distintos valores de  $x$  contenidos entre  $-1$  y  $1$ . Tal como se había visualizado anteriormente con los estados iniciales de la moneda sobre un mismo anillo en la esfera de Bloch, tomar estados iniciales de la moneda sobre el eje  $x$  [fig. 10] vuelve a mostrar que parece existir una variación continua de las distribuciones de probabilidad para estados iniciales de la moneda sobre un mismo eje.

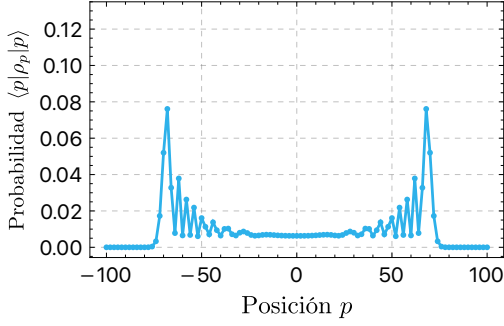
Por otro lado, cabe hacer una mención especial a la distribución de probabilidad del estado máximamente mixto como estado inicial de la moneda [fig. 10d]. El estado máximamente mixto corresponde al estado ubicado en el centro de la esfera de Bloch y es un concepto importante porque físicamente representa la máxima incertidumbre sobre el sistema.



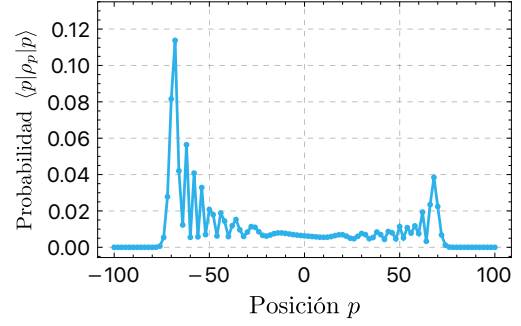
(a)  $\phi = 0 = 2\pi$ .



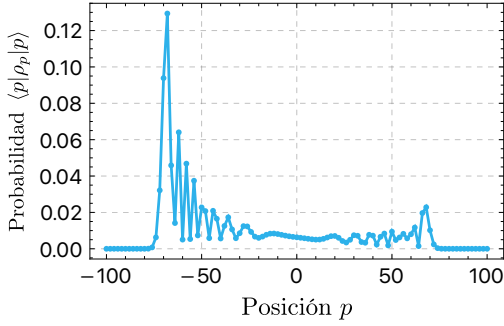
(b)  $\phi = \pi/4$ .



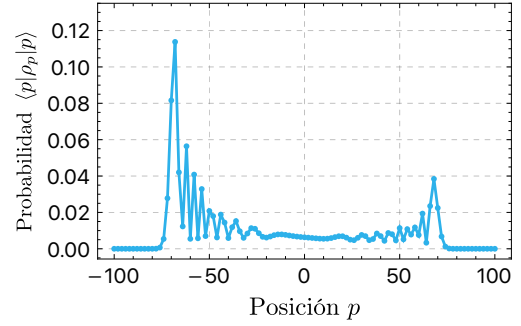
(c)  $\phi = \pi/2$ .



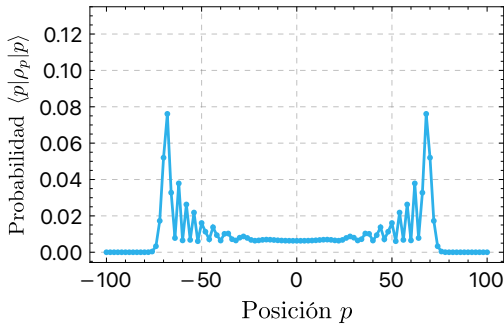
(d)  $\phi = 3\pi/4$ .



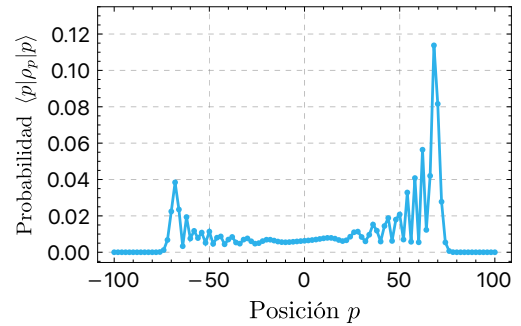
(e)  $\phi = \pi$ .



(f)  $\phi = 5\pi/4$ .

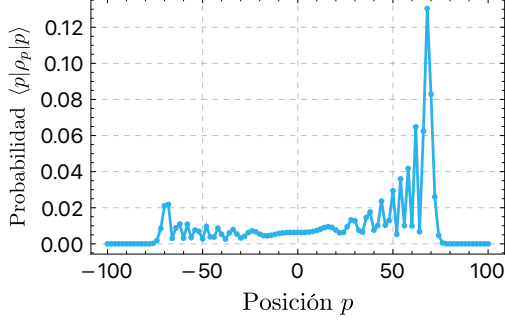


(g)  $\phi = 6\pi/4$ .

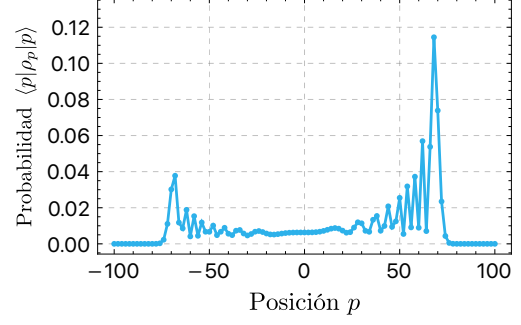


(h)  $\phi = 7\pi/4$ .

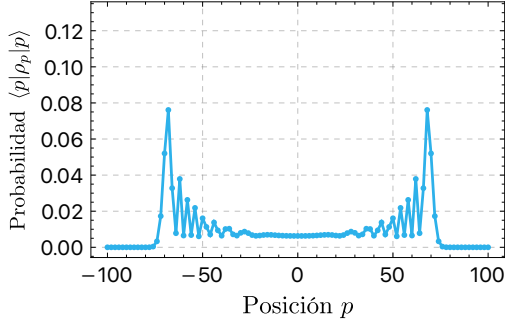
Figura 7: Distribuciones de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda se hallan ubicados en la esfera de Bloch en un anillo de radio 1 sobre el plano  $xy$ . Todos estos estados son de la forma  $|c\rangle_0 = (|0\rangle + e^{i\phi} |1\rangle)/\sqrt{2}$  con distintos valores de  $\phi$  que van desde 0 hasta  $2\pi$ , con una distancia de  $\pi/4$  entre cada uno.



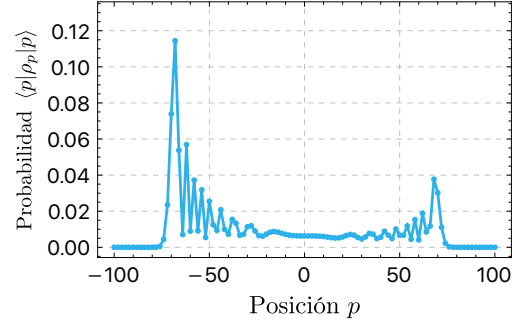
(a)  $\phi = 0 = 2\pi$ .



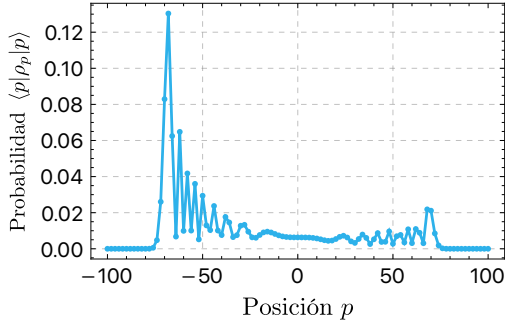
(b)  $\phi = \pi/4$ .



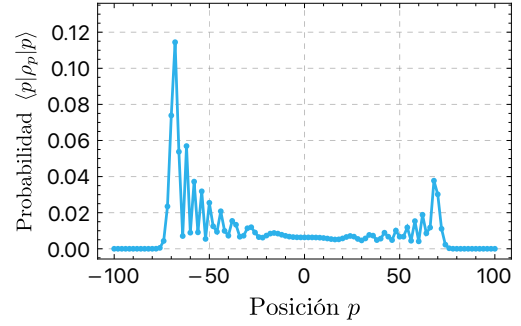
(c)  $\phi = \pi/2$ .



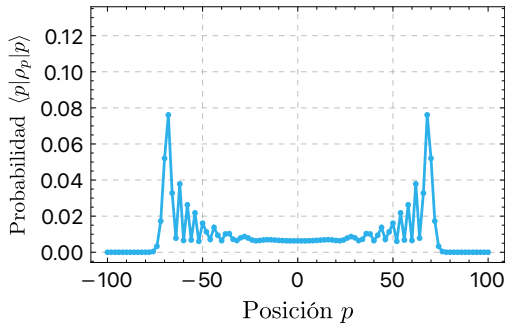
(d)  $\phi = 3\pi/4$ .



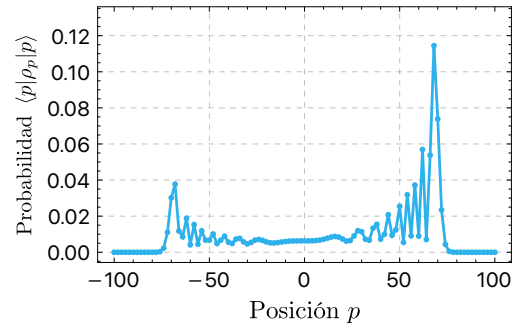
(e)  $\phi = \pi$ .



(f)  $\phi = 5\pi/4$ .

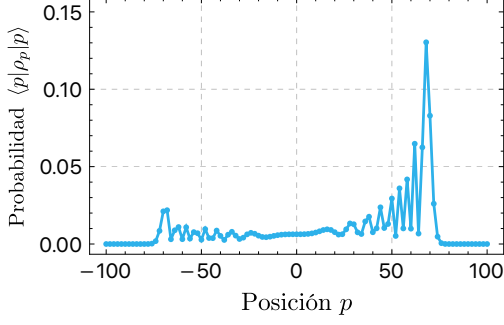


(g)  $\phi = 6\pi/4$ .

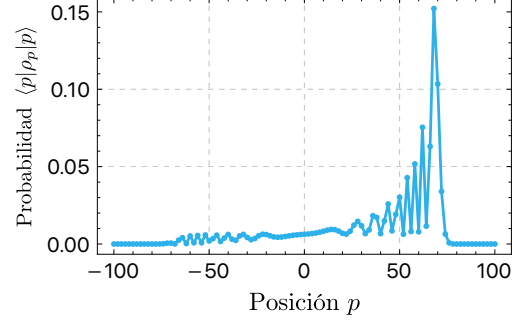


(h)  $\phi = 7\pi/4$ .

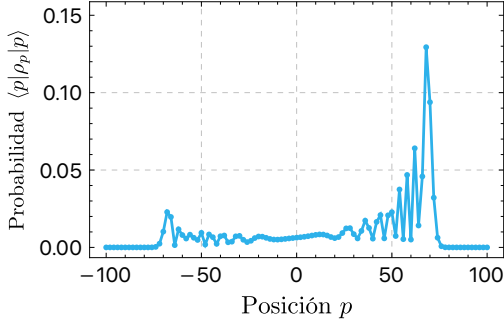
Figura 8: Distribuciones de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda se hallan ubicados en un anillo de radio 1 sobre el plano  $yz$ . Todos estos estados son de la forma  $|c\rangle_0 = [\cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)|1\rangle]/\sqrt{2}$  con  $\phi = \pi/2$  para el lado derecho del anillo y  $\phi = -\pi/2$  para el lado izquierdo; además de tomar distintos valores de  $\theta$  desde 0 hasta  $\pi$ , con una distancia de  $\pi/4$  entre cada uno para cada mitad del anillo



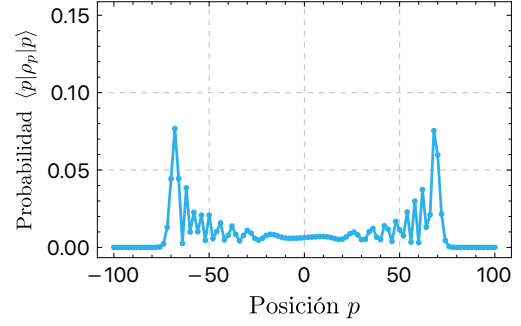
(a)  $\phi = 0 = 2\pi$ .



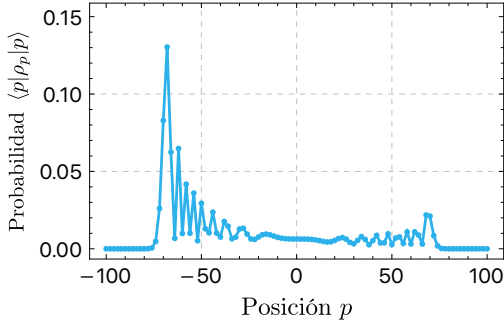
(b)  $\phi = \pi/4$ .



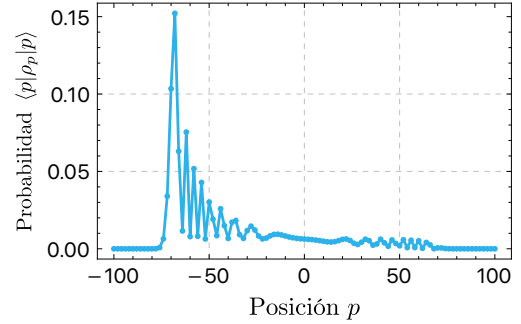
(c)  $\phi = \pi/2$ .



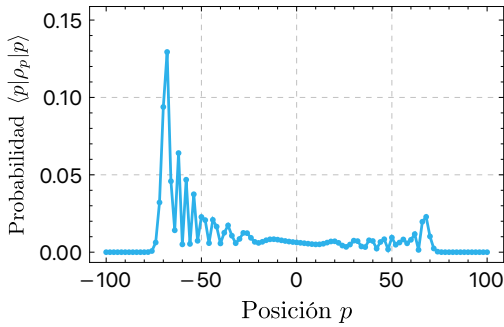
(d)  $\phi = 3\pi/4$ .



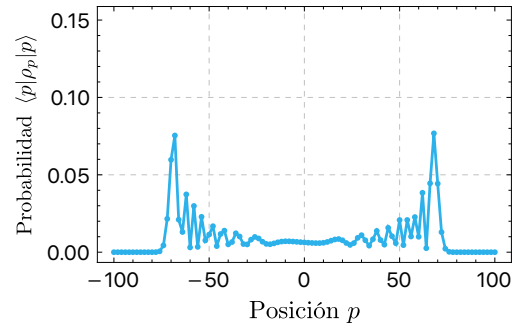
(e)  $\phi = \pi$ .



(f)  $\phi = 5\pi/4$ .



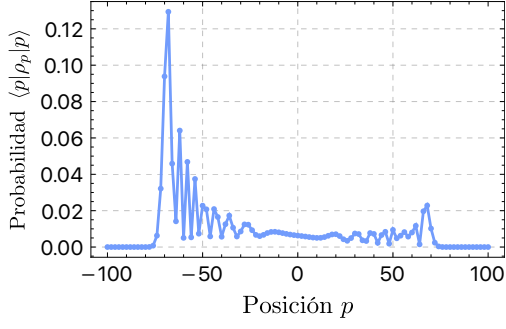
(g)  $\phi = 6\pi/4$ .



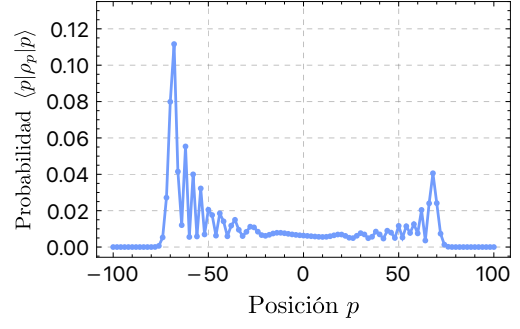
(h)  $\phi = 7\pi/4$ .

Figura 9: Distribuciones de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda se hallan ubicados en un anillo de radio 1 sobre el plano  $xz$ . Todos estos estados son de la forma  $|c\rangle_0 = [\cos(\theta/2) |0\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2) |1\rangle] / \sqrt{2}$  con  $\phi = 0$  para la primera mitad del anillo y  $\phi = \pi$  para la segunda; además de tomar distintos valores de  $\theta$  desde 0 hasta  $\pi$ , con una distancia de  $\pi/4$  entre cada uno para cada mitad del anillo.

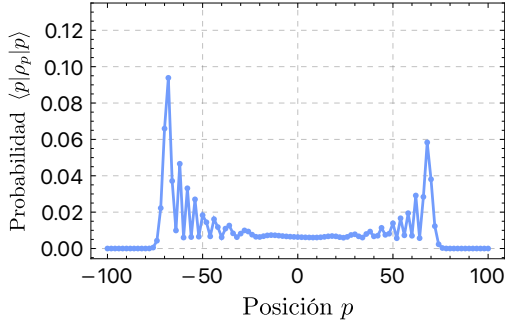
Para los ejes  $y$  y  $z$  se siguió un proceso similar al del eje  $x$ , pero esta vez tomando los vectores de Bloch  $\vec{r} = (0, y, 0)$  y  $\vec{r} = (0, 0, z)$ , respectivamente, con valores de  $y$  y  $z$  entre  $-1$  y  $1$ . La variación continua de la distribución de probabilidad se visualiza de igual manera para las caminatas con estados iniciales de la moneda sobre el eje  $z$  tal como muestra la figura 12. Por otro lado, aunque la distribución de probabilidad para los estados iniciales de la moneda sobre el eje  $y$  muestran el mismo comportamiento que se ha venido discutiendo, resulta todavía más interesante que la distribución de probabilidad se mantenga constante para todos los estados en dicho eje, y que además esta distribución sea simétrica tal como muestra la fig. 11.



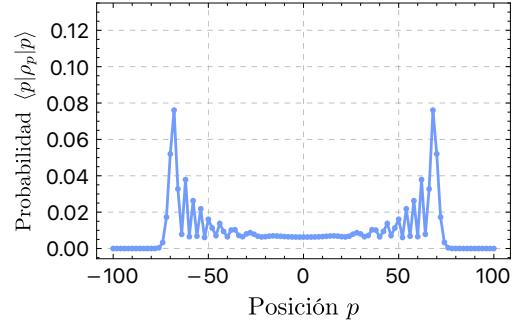
(a)  $x = -1$ .



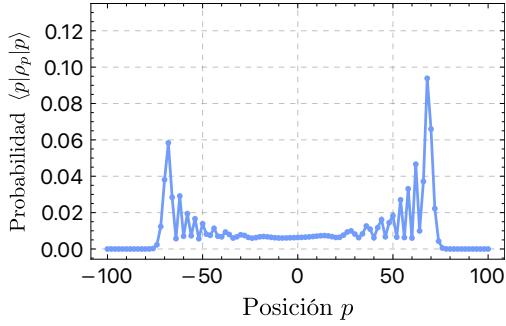
(b)  $x = -2/3$ .



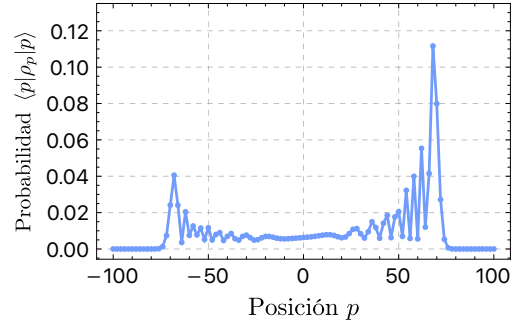
(c)  $x = -1/3$ .



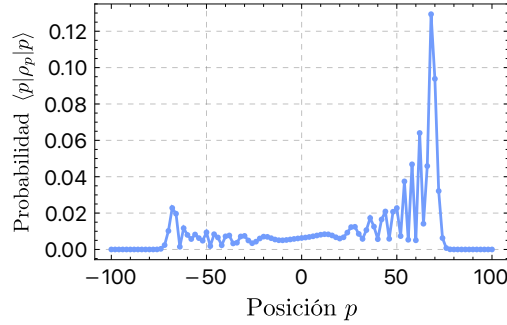
(d)  $x = 0$ .



(e)  $x = 1/3$ .



(f)  $x = 2/3$ .



(g)  $x = 1$ .

Figura 10: Distribuciones de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda se hallan ubicados en el eje  $x$ . Todos estos estados son de la forma  $\rho_{c(t=0)} = [|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| + x(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)]/2$  con valores de  $x$  entre  $-1$  y  $1$ , con una distancia de  $1/3$  entre cada uno.



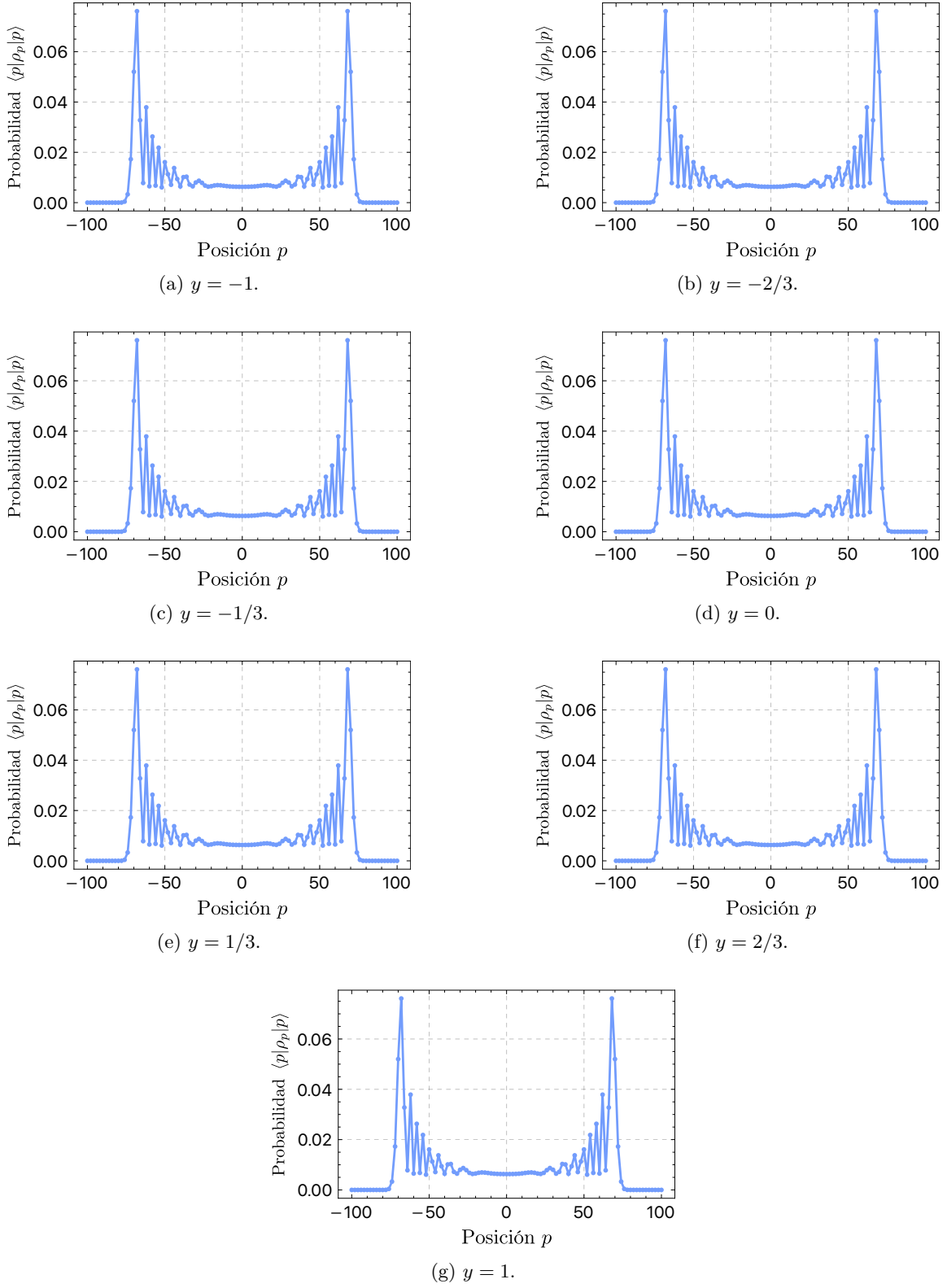
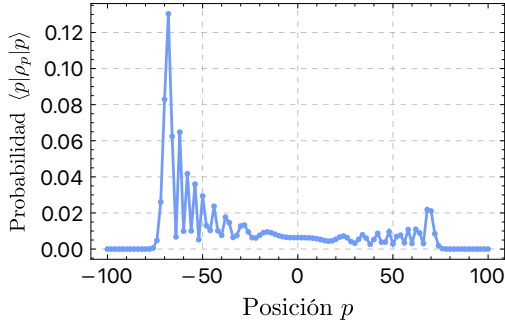
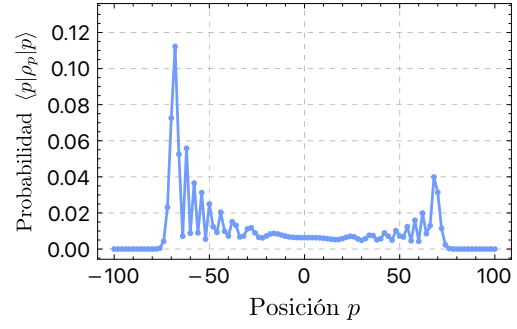


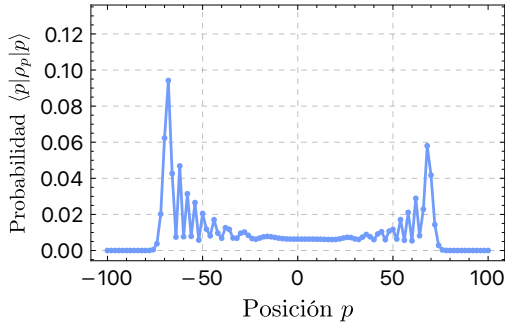
Figura 11: Distribuciones de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda se hallan ubicados en el eje  $y$ . Todos estos estados son de la forma  $\rho_{c(t=0)} = [|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| - yi(|0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|)]/2$  con valores de  $y$  entre  $-1$  y  $1$ , con una distancia de  $1/3$  entre cada uno.



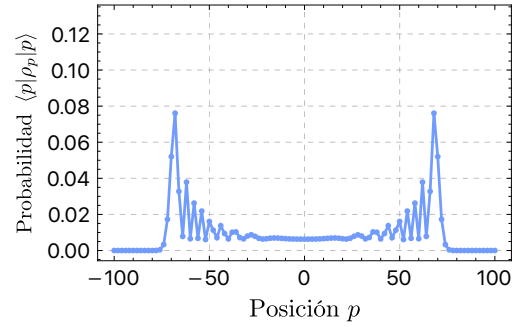
(a)  $z = -1$ .



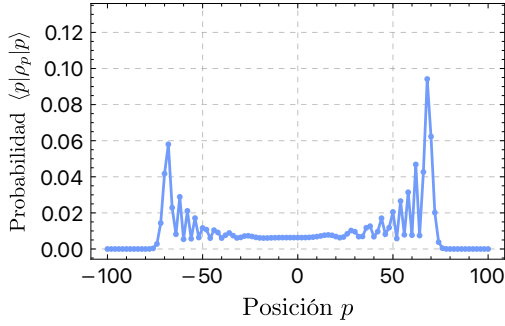
(b)  $z = -2/3$ .



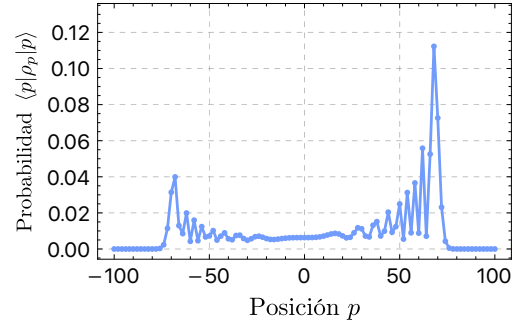
(c)  $z = -1/3$ .



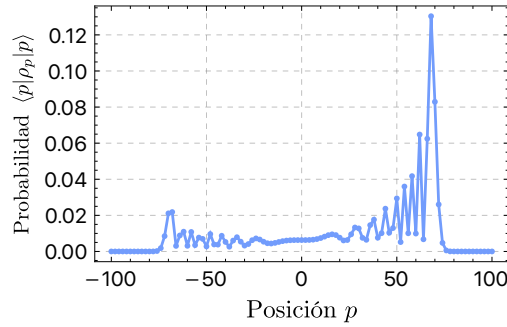
(d)  $z = 0$ .



(e)  $z = 1/3$ .



(f)  $z = 2/3$ .



(g)  $z = 1$ .

Figura 12: Distribuciones de probabilidad para DQWL de 100 pasos cuyos estados iniciales de la moneda se hallan ubicados en el eje  $z$ . Todos estos estados son de la forma  $\rho_{c(t=0)} = [|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| + z(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|)]/2$  con valores de  $z$  entre  $-1$  y  $1$ , con una distancia de  $1/3$  entre cada uno.

## 5 Conclusiones y trabajo futuro

### 5.1 Conclusiones

Este trabajo de prácticas permitió realizar un estudio a profundidad de los conceptos necesarios para entender el comportamiento de las caminatas cuánticas discretas en una línea, lo cual era fundamental para su implementación. Se aprendió el formalismo del operador de densidad al igual que los fundamentos de la mecánica cuántica utilizando este lenguaje. Esto permitió analizar la dinámica del caminante cuántico desde una perspectiva más general empleando tanto estados puros como estados mixtos. Además, este formalismo proporciona una herramienta matemática que contiene toda la información física disponible de un subsistema: la matriz de densidad reducida, concepto que es indispensable para obtener las distribuciones de probabilidad de las caminatas cuánticas.

Se comprendió la estructura matemática y física del modelo de caminata cuántica discreta en una línea. Esto incluyó el entendimiento del operador unitario que se emplea para describir la evolución conjunta del caminante y la moneda, y el análisis de cómo las propiedades cuánticas, como la superposición y la interferencia, influyen en el comportamiento del sistema. Todos los conocimientos adquiridos permitieron implementar numéricamente el modelo de DQWL y producir así resultados con los cuales se analizó la distribución de probabilidad de la posición del caminante cuántico en función del estado inicial de la moneda. Entre los comportamientos visualizados con los resultados obtenidos, se encuentra el más evidente: la caminata es dependiente del estado inicial de la moneda. Este estado juega un papel importante en la dirección principal que tomará el caminante. Por otro lado, se observó que la variación de las distribuciones de probabilidad para estados iniciales de la moneda ubicados en un mismo anillo y en un mismo eje de la esfera de Bloch es continua, y que estados iniciales de la moneda ubicados sobre el eje  $y$  conducen a una distribución de probabilidad simétrica.

### 5.2 Trabajo futuro

Si bien las caminatas cuánticas ofrecen ventajas especialmente por su aplicación en la generación de algoritmos más rápidos que los producidos empleando sus contrapartes clásicas, su implementación práctica enfrenta un desafío importante: la decoherencia. Este fenómeno es inherente a cualquier sistema cuántico que interactúe con su entorno y afecta la dinámica de la caminata. Por lo anterior, surge una pregunta clave: ¿cómo se modifican las caminatas cuánticas en presencia de decoherencia? Como trabajo de graduación se propone caracterizar la decoherencia en caminatas cuánticas empleando el formalismo de canales cuánticos.

## Referencias

- [1] B. R. Rao, R. Srikanth, C. M. Chandrashekar, and S. Banerjee, “Quantumness of noisy quantum walks: a comparison between measurement-induced disturbance and quantum discord,” *Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 12 2010.
- [2] A. M. Childs, R. Cleve, E. Deotto, E. Farhi, S. Gutmann, and D. A. Spielman, “Exponential algorithmic speedup by a quantum walk,” in *Proceedings of the thirty-fifth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 59–68, 2003.
- [3] J. Bhavsar, S. Shekhar, and S. Santra, “Coined quantum walk on a quantum network,” *arXiv preprint arXiv:2406.01558*, 6 2024.
- [4] K. Shukla and C. M. Chandrashekar, “Quantum magnetometry using discrete-time quantum walk,” *Phys. Rev. A*, vol. 109, p. 32608, 3 2024.
- [5] N. Zettili and I. Zahed, “Quantum mechanics: Concepts and applications,” *American Journal of Physics*, vol. 71, pp. 93–93, DEC 2002.
- [6] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*. Cambridge; New York: Cambridge University Press, 10th anniversary ed ed., 2010.
- [7] J. J. Morton and B. W. Lovett, “Hybrid solid-state qubits: The powerful role of electron spins,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 2, p. 189 – 212, 2011.
- [8] K. He, X. Geng, R. Huang, J. Liu, and W. Chen, “Quantum computation and simulation with superconducting qubits,” *Chinese Physics B*, vol. 30, no. 8, 2021.
- [9] Z.-Y. Xue, L. Shao, Y. Hu, S.-L. Zhu, and Z. Wang, “Tunable interfaces for realizing universal quantum computation with topological qubits,” *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, vol. 88, no. 2, 2013.
- [10] Y.-Z. Wu, W.-M. Zhang, and C. Soo, “Quantum computation based on electron spin qubits without spin-spin interaction,” *International Journal of Quantum Information*, vol. 3, no. SUPPL. 1, p. 155 – 162, 2005.
- [11] N. Chandra and R. Ghosh, *Quantum Entanglement in Electron Optics: Generation, Characterization, and Applications*. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics №67, Springer, 1 ed., 2013.
- [12] S. E. Venegas-Andraca, “Quantum walks: a comprehensive review,” *Quantum Information Processing*, vol. 11, pp. 1015–1106, JUL 2012.

## A Justificación de la definición de un elemento de matriz del operador de densidad reducido

La definición empleada para un elemento de matriz de  $\rho^A$  (ec. (44)) se justifica haciendo los cálculos mostrados a continuación.

$$\sum_j \langle \psi_i, \phi_j | \rho^{AB} | \psi_k, \phi_j \rangle = \sum_j \langle \psi_i, \phi_j | \left( \sum_{a,b,c,d} \alpha_{a,b,c,d} | \psi_a, \phi_b \rangle \langle \psi_c, \phi_d | \right) | \psi_k, \phi_j \rangle, \quad (51a)$$

$$= \sum_{j,a,b,c,d} \alpha_{a,b,c,d} \langle \psi_i, \phi_j | \psi_a, \phi_b \rangle \langle \psi_c, \phi_d | \psi_k, \phi_j \rangle, \quad (51b)$$

$$= \sum_{a,b,c,d,j} \alpha_{a,b,c,d} \langle \psi_i | \psi_a \rangle \delta_{j,b} \langle \psi_c | \psi_k \rangle \delta_{d,j}, \quad (51c)$$

$$= \sum_{a,b,c} \alpha_{a,b,c} \langle \psi_i | \psi_a \rangle \langle \psi_c | \psi_k \rangle, \quad (51d)$$

$$= \langle \psi_i | \left( \sum_{a,b,c} \alpha_{a,b,c} | \psi_a \rangle \langle \psi_c | \right) | \psi_k \rangle, \quad (51e)$$

$$= \langle \psi_i | \rho^A | \psi_k \rangle. \quad (51f)$$

## B Efecto del operador de Hadamard sobre los estados de las bases ortonormales sobre el eje $x$ y $z$

JA: No hay referencias a los apéndices B y C en el texto principal, agregalas Mariana: Ya. A continuación se muestran los cálculos detallados de la aplicación del operador de Hadamard (operador utilizado para la moneda) a los estados de la base computacional.

$$H |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) |0\rangle, \quad (52a)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \quad (52b)$$

$$= |+\rangle. \quad (52c)$$

$$H |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) |1\rangle, \quad (53a)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle), \quad (53b)$$

$$= |-\rangle. \quad (53c)$$

Por otro lado, aplicar el operador Hadamard a los estados de la base ortonormal en  $x$  devuelve los estados de la base computacional tal y como se muestra a continuación.

$$H |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \quad (54a)$$

$$= \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle + |0\rangle - |1\rangle), \quad (54b)$$

$$= |0\rangle. \quad (54c)$$

$$H|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (55a)$$

$$= \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle - |0\rangle + |1\rangle), \quad (55b)$$

$$= |1\rangle. \quad (55c)$$

## C Cálculos manuales de pasos de evolución de caminatas cuánticas

Para estos cálculos se emplean los resultados obtenidos en el apéndice B. A continuación se muestran los cálculos para dar los primeros dos pasos de una DQWL con estado inicial  $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$  y los primeros tres pasos de una DQWL con estado inicial  $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$ .

### C.1 DQWL con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$

#### C.1.1 Primer paso de la caminata

$$|\psi\rangle_1 = S(H \otimes \mathbb{1})|0\rangle \otimes |0\rangle, \quad (56a)$$

$$= S(H|0\rangle \otimes \mathbb{1}|0\rangle), \quad (56b)$$

$$= S|+\rangle \otimes |0\rangle, \quad (56c)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}S(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle, \quad (56d)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}S(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle), \quad (56e)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle + |1, -1\rangle). \quad (56f)$$

#### C.1.2 Segundo paso de la caminata

$$|\psi\rangle_2 = S(H \otimes \mathbb{1}) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle), \quad (57a)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}S(H|0\rangle \otimes \mathbb{1}|1\rangle + H|1\rangle \otimes \mathbb{1}|-1\rangle), \quad (57b)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}S(|+\rangle \otimes |1\rangle + |-\rangle \otimes |-1\rangle), \quad (57c)$$

$$= \frac{1}{2}S[(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle + (|0\rangle - |1\rangle) \otimes |-1\rangle], \quad (57d)$$

$$= \frac{1}{2}S[|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle + |0\rangle \otimes |-1\rangle - |1\rangle \otimes |-1\rangle], \quad (57e)$$

$$= \frac{1}{2}[|0, 2\rangle + |1, 0\rangle + |0, 0\rangle - |1, -2\rangle]. \quad (57f)$$

## C.2 DQWL con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$

### C.2.1 Primer paso de la caminata

$$|\psi\rangle_1 = S(H \otimes \mathbb{1}) |+\rangle \otimes |0\rangle, \quad (58a)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} S(H |+\rangle \otimes \mathbb{1} |0\rangle), \quad (58b)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} S(|0\rangle \otimes |0\rangle), \quad (58c)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} |0, 1\rangle. \quad (58d)$$

### C.2.2 Segundo paso de la caminata

$$|\psi\rangle_2 = S(H \otimes \mathbb{1}) \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle \otimes |1\rangle, \quad (59a)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} S(H |0\rangle \otimes \mathbb{1} |1\rangle), \quad (59b)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} S(|+\rangle \otimes |1\rangle), \quad (59c)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} S\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle\right), \quad (59d)$$

$$= \frac{1}{2} S(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle), \quad (59e)$$

$$= \frac{1}{2} (|0, 2\rangle + |1, 0\rangle). \quad (59f)$$

### C.2.3 Tercer paso de la caminata

$$|\psi\rangle_3 = S(H \otimes \mathbb{1}) \frac{1}{2} (|0\rangle \otimes |2\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle), \quad (60a)$$

$$= \frac{1}{2} S(H |0\rangle \otimes \mathbb{1} |2\rangle + H |1\rangle \otimes \mathbb{1} |0\rangle), \quad (60b)$$

$$= \frac{1}{2} S(|+\rangle \otimes |2\rangle + |-\rangle \otimes |0\rangle), \quad (60c)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}} S[(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |2\rangle + (|0\rangle - |1\rangle) \otimes |0\rangle], \quad (60d)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}} S[|0\rangle \otimes |2\rangle + |1\rangle \otimes |2\rangle + |0\rangle \otimes |0\rangle - |1\rangle \otimes |0\rangle], \quad (60e)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}} [|0, 3\rangle + |1, 1\rangle + |0, 1\rangle - |1, -1\rangle]. \quad (60f)$$