

Diseño y simulación de un procesador cuántico superconductor

Miguel Casanova
Departamento de Electrónica y Circuitos¹, Universidad Simón Bolívar

2018
September

¹I am no longer a member of this department

Índice general

1. Introducción	2
2. Información cuántica	3
2.1. Herramientas necesarias	3
2.1.1. Delta de Kronecker	3
2.1.2. Notación de Dirac	4
2.2. Kets, bras y operadores	4
2.3. Productos interno y externo	4
2.4. Espacio de Hilbert	5
2.5. Operadores unitarios	5
2.6. Producto tensorial	5
2.6.1. Propiedades	5
2.7. Matriz de densidad	6
2.8. Postulados de la mecánica cuántica	6
2.9. Computación cuántica	6
2.9.1. Qubits	6
2.9.2. Compuertas cuánticas	7
2.9.3. Correspondencia entre compuertas clásicas y cuánticas	10
2.9.4. Conjuntos universales de compuertas cuánticas	10
2.9.5. Compuertas no cliffordianas	11
2.9.6. Circuitos cuánticos	11
2.9.7. Paralelismo cuántico	11
2.9.8. Algoritmos cuánticos	11
2.9.9. Criterios de DiVincenzo	11
3. Superconductividad	12
3.1. Modelos de la superconductividad	12
3.1.1. La teoría BCS	14

3.1.2.	Efectos cuánticos macroscópicos en superconductor: Cuantización del flujo magnético y efecto Josephson .	23
3.1.3.	Modelo macroscópico de la superconductividad	30
3.2.	Junciones de Josephson	32
3.3.	Efecto Josephson	32
3.3.1.	Efecto Josephson DC	33
3.3.2.	Efecto Josephson AC	33
3.4.	Componentes de la corriente en las junciones de Josephson .	33
3.5.	Qubits superconductores	34
3.6.	Arquetipos de qubits superconductores	35
3.6.1.	Qubit de carga	35
3.6.2.	Qubit de flujo	35
3.6.3.	Qubit de fase	35
3.7.	Transmones	36
3.8.	Hamiltonianos multiqubit de transmones	36
3.8.1.	Acoplamiento capacitivo	37
3.8.2.	Acoplamiento por el resonador	37
3.8.3.	Acoplamiento de JJ	37
3.8.4.	Acoplamiento afinable/calibrable	37
3.9.	Compuertas cuánticas en transmones	37
3.9.1.	El operador de evolución temporal	37
3.9.2.	Pulsos de microondas	38
3.9.3.	Régimen rotacional del pulso	38
3.9.4.	Efecto del pulso sobre el qubit	39
3.9.5.	Régimen dispersivo	39
3.9.6.	Rotaciones X-Y	39
3.9.7.	Compuerta de entrelazamiento	40
3.9.8.	Compuertas compuestas	40
5.	Algoritmo de Grover	42
5.1.	El algoritmo	47
5.2.	Limitaciones y aplicaciones	47
6.	Algoritmo de Shor	48
6.1.	Transformadas integrales	57
6.2.	Transformada cuántica de Fourier	57
6.3.	Estimación de fase	57
6.4.	Estimación de orden	57
6.5.	Algoritmo de Shor	57

7. Google PageRank	58
7.0.1. El algoritmo de remiendo (parcheo) general	61
7.0.2. Interpretación como una caminata aleatoria	62
7.0.3. Cuantizando las caminatas aleatorias	63
7.0.4. Caminata cuántica de Szegedy	63
7.0.5. PageRank cuántico	64
A. Cálculos de Hamiltonianos	66
A.1. Hamiltoniano de Jaynes-Cummings	66
A.2. Hamiltoniano multiqubit	66
A.3. Pulsos de microondas	66
A.4. Régimen rotacional del pulso	67
A.5. Efecto del pulso sobre el qubit	68
A.6. Régimen dispersivo	69
A.7. Rotaciones X-Y	71
A.8. Compuerta de entrelazamiento	71
B. Cálculos de matrices de adyacencia	72
C. Circuitos cuánticos	73

Índice de figuras

5.1. Circuito del algoritmo de Grover, k_{max} desconocido.	44
5.2. Interpretación geométrica del operador difusión	46
5.3. Circuito del algoritmo de Grover.	47
7.1. Grafo correspondiente a la matriz de adyacencia (a) de la red E (b) remendada de Google G con $\alpha = \frac{1}{2}$	62

Índice de cuadros

Capítulo 3

Superconductividad

Gross y Marx, Walther-Meißner-Institut [1]

3.1. Modelos de la superconductividad

Uno de los mayores principios de la mecánica cuántica es el hecho de que cantidades físicas como la energía o el momentum están, bajo ciertas condiciones, cuantizados. Es decir, que sólo tienen valores discretos. Sin embargo, por un largo tiempo se creyó que la cuantización sólo era relevante para sistemas microscópicos, como los núcleos, los átomos o las moléculas. De hecho, considerando el comportamiento de objetos macroscópicos que consistan de una gran cantidad de átomos, los efectos de la cuantización no pueden ser observados, aunque cada átomo individual obedezca las leyes de la mecánica cuántica. Esto se debe al hecho de que los movimientos térmicos enmascaran las regularidades cuánticas. Sin embargo, para ciertos fenómenos ha sido demostrado que es posible observar cuantización macroscópica. Así que podemos observar la cuantización de parámetros que caracterizan a sistemas macroscópicos muchos órdenes de magnitud más grandes que sistemas como los átomos. Esto se debe a altos niveles de correlaciones por efectos de coherencia.

Uno de los efectos más espectaculares de la física del estado sólido es el efecto superconductor. La superconductividad produce efectos cuánticos macroscópicos, siendo un campo perfecto para estudiar aspectos básicos en la física cuántica.

En 1911 Kamerlingh Onnes descubre que el Hg conduce sin resistencia cuando se enfría a temperatura del He líquido (4.2 K). Kamerlingh Onnes fue el primer físico que licuó el He, poco tiempo después de esto, midiendo

resistividades de distintos metales a estas bajas temperaturas, se encontró, en su laboratorio, que el Hg a 4.2K conduce sin resistencia, no con una resistencia despreciablemente pequeña, sino con resistencia cero.

Una primera característica de la superconductividad es la nula resistividad por debajo de una cierta temperatura.

Aunque se pudiera pensar que esto es una excepción resulta que el número de elementos y materiales superconductores es muy grande. El sistema periódico está lleno de elementos que, si se disminuye suficientemente la temperatura, se convierten en superconductores. En realidad la pregunta no sería por que un elemento es superconductor, más bien hay que preguntarse por que no lo es. Ahora bien, las temperaturas a las cuales ocurre el efecto son extraordinariamente bajas. La mayoría de los superconductores tienen temperaturas de transición que están en el rango del He líquido (4.2K), lo cual quiere decir que el efecto es muy débil. Esto hay que matizarlo a la vista de los superconductores recientemente descubiertos (1986) y llamados de alta temperatura. En este capítulo no haremos ninguna referencia a estos nuevos superconductores.

Ahora bien, un superconductor es bastante más que un conductor perfecto. En 1913 se comprobó que si se aplica un campo magnético exterior al material en estado superconductor, se terminaba por destruir el estado de conducción perfecta. Este campo, cuyo valor depende de la temperatura, se llama campo crítico. Tenemos así el primer indicio de que la interacción superconductividad-magnetismo juega un papel primordial en los fenómenos superconductores.

La siguiente característica fundamental de un superconductor consiste en que cuando el campo magnético aplicado no es mayor que el campo crítico un superconductor actúa como un diamagnético perfecto. Esto es $\chi = -1$. Por lo tanto, no existen líneas de campo magnético en el interior de un material superconductor, salvo en una pequeña zona próxima a la superficie. Este efecto se conoce con el nombre de efecto Meissner-Ochsenfeld.

Así la segunda característica del efecto superconductor es el diamagnetismo perfecto (efecto Meissner).

Otra característica típica de la superconductividad es que el flujo del campo magnético que atraviesa un anillo superconductor está cuantizado. Es decir, el flujo que atraviesa un superconductor vale un número entero de veces una unidad de flujo elemental llamada el fluxoido Φ_0 y cuyo valor es $\Phi_0 = h/2e$, donde h es la constante de Planck, c la velocidad de la luz y e la carga del electrón.

Por lo tanto, la tercera característica de la superconductividad es que el flujo magnético que atraviesa un superconductor está cuantizado.

Existe otro efecto cuántico macroscópico asociado a la superconductividad, conocido como el efecto Josephson. Este efecto es un efecto túnel muy especial. Si se separan dos superconductores distintos, o bien el mismo superconductor por una barrera, por ejemplo un aislante o un estrechamiento en el superconductor (lo que se conoce como una unión débil), se tiene paso de corriente por la barrera sin que aparezca caída de potencial a ambos lados de la barrera.

La cuarta característica de la superconductividad es el efecto Josephson, esto es, la existencia de un efecto túnel superconductor.

Existen otros efectos que completan el panorama experimental de la superconductividad, pero los básicos que aparecen siempre son los señalados unas líneas arriba. El resto de fenómenos experimentales superconductores se detallan en la siguiente sección.

3.1.1. La teoría BCS

En 1957 John Bardeen, Leon Cooper y J. Robert Schieffer, encontraron la llave para poder explicar, desde un punto de vista microscópico, la superconductividad. Realmente existen bastantes materiales que se desvían de la teoría estricta BCS, como pueden ser aleaciones, compuestos y algunos elementos (el mismo Hg, donde se descubrió la superconductividad, es un ejemplo de superconductor que no cumple los estrictos requisitos de la teoría BCS).

Esto no significa que la teoría sea incorrecta, tan sólo que es algo incompleta y para tratar algunas situaciones hay que recurrir a levantar alguna de las aproximaciones que esta complicada teoría lleva consigo.

Empezaremos por repasar alguno de los hechos experimentales en que se basa la teoría y señalar algún otro que hasta el momento no ha sido mencionado.

En principio lo más característico de la superconductividad, como ya hemos repetido varias veces, es que por debajo de una cierta temperatura y en ciertas condiciones de densidad de corriente eléctrica y campo magnético aplicado, no se tiene resistencia, es decir que los electrones de conducción no cambian su momento, su k : pero no es esta la única característica fundamental de un superconductor, también sabemos que un superconductor es un diamagnético perfecto y este efecto conocido como efecto Meissner nos indica que un superconductor es mucho más que un conductor perfecto. si recordamos en qué consiste el efecto Meissner, tenemos que cuando enfriamos un superconductor por debajo de la temperatura crítica y en presencia de un campo magnético menor que el crítico, tenemos que el campo magnético es

excluido del superconductor y este estado es de equilibrio termodinámico. En un conductor perfecto el campo magnético quedaría atrapado en el material sin que haya ninguna razón para que sea expulsado, basta con recordar las ecuaciones de Maxwell para verlo.

Por lo tanto estamos en una situación bastante especial. Como veremos en su momento a un superconductor lo que le caracteriza es una función de onda macroscópica que da lugar a una corriente cuántica macroscópica y el efecto Meissner es justamente la expulsión del flujo magnético por esta corriente cuántica. No vamos a decir nada más acerca del efecto Meissner desde el punto de vista microscópico, dado lo complicado que es. Por el contrario, la conducción sin resistencia eléctrica se puede deducir de una manera mucho más sencilla con el formalismo de la teoría microscópica BCS.

Como se ha señalado unas líneas más arriba aparte de estos dos hechos fundamentales del efecto superconductor (conducción eléctrica sin resistencia y diamagnetismo perfecto) hay otros fenómenos experimentales propios de los superconductores que son cruciales y marcan la pauta a la teoría BCS, como es el efecto isotópico, efecto con el que empezaremos.

Se observa experimentalmente que la temperatura crítica T_c superconductora, por ejemplo en el Hg (primer superconductor y primer efecto isotópico encontrado), depende de la masa de los iones en el metal. Dado que existe varios isótopos del Hg se pudieron preparar varias muestras y se comprobó experimentalmente que si M es la masa del ion se tiene que $T_c \propto M^{-\alpha}$ donde el exponente α es del orden de 0.5 para metales que no son de transición y puede ser menor que este valor para metales de transición; incluso existen casos especiales como es el Os donde vale cero, no existiendo efecto isotópico para esta excepción. Este efecto experimental tiene una interpretación bien sencilla: los iones de la red juegan un papel fundamental en la superconductividad.

Existe otro grupo de fenómenos experimentales asociados al estado superconductor, que pasaremos a describir a continuación, que tienen todos ellos el mismo origen.

1. El calor específico electrónico de un metal no superconductor a muy baja temperatura varía linealmente con la temperatura. En un metal existen dos contribuciones al calor específico, una de ellas es la normal de la red. Esta contribución varía como T^3 y prácticamente desaparece a bajas temperaturas. Existe otra contribución al calor específico propia de los metales. A esta contribución, que es la predominante a bajas temperaturas, es a la que nos referimos y varía como T .
2. Un metal en estado normal no es transparente a la radiación visible e

infrarroja.

Por el contrario, en un metal en el estado superconductor se tiene:

1. La variación del calor específico en función de la temperatura sigue una ley exponencial.
2. En un metal en estado superconductor existe, en el rango del infrarrojo lejano, una frecuencia de corte para la cual el metal es transparente a esa radiación.

Estos dos efectos en superconductores son la clara señal de que en un superconductor existe una zanja prohibida de energía, que, como veremos en su momento, no es del mismo tipo que la que existe en semiconductores. Otra comprobación experimental de este hecho son las anomalías en el efecto túnel conocido como túnel Giaever.

Resumiendo, existen dos hechos experimentales cruciales para entender la superconductividad, uno de ellos es que la masa de los iones juega un papel fundamental (efecto isotópico). El segundo es que en un superconductor existe una zanja prohibida de energía, esto es que mientras que en un metal en estado normal no se necesita una energía umbral para tener estados excitados por encima del estado fundamental, en un metal en estado superconductor se necesita comunicar una cierta energía por encima de un cierto valor, el valor de la zanja, para tener a los electrones en estado excitados de energía.

Por lo tanto, simplificando, cualquier teoría microscópica de la superconductividad tiene que dar cuenta de:

1. Conductividad infinita, esto es ausencia de resistividad.
2. Intervención de los iones de la red cristalina, más precisamente, de sus masas. Esto es de los fonones, es decir de las diferentes vibraciones de la red cristalina.
3. La existencia de una zanja de energía en la banda de conducción.

A partir de ahora solamente vamos a centrarnos en descubrir la posible interacción responsable de que un metal conduzca sin resistencia eléctrica por debajo de una cierta temperatura.

Lo primero de todo es recordar que los electrones de conducción, por su movimiento al azar en una red cristalina, donde los iones están vibrando (fonones) cambian su momento, k , esto es la interacción electrón-fonón es la

que produce la resistividad. Que un metal conduzca sin resistencia eléctrica querrá decir que los electrones de conducción en su movimiento en el cristal no cambian su vector k .

Se trata por lo tanto de encontrar una interacción en los electrones de conducción que nos produzca este efecto. En un cristal contamos aparentemente con pocos recursos, por un lado tenemos electrones de conducción e iones que forman la red cristalina y que están vibrando, de otra forma con electrones y fonones y con una interacción fundamental entre estas cargas eléctricas, que es la interacción coulombiana. Pues bien, son estos únicos ingredientes los necesarios para construir la teoría BCS, electrones, fonones e interacción coulombiana.

La interacción coulombiana electrón de conducción-red cristalina (iones) se puede ver esquemáticamente de la siguiente forma. Supongamos un electrón de conducción que se mueve por el cristal y fijémonos en un punto concreto de la red, formada por iones positivos (cationes). Al pasar el electrón por ese punto la red, por interacción coulombiana, se sentirá atraído por ese electrón y se deformará localmente. Ya que las frecuencias de vibración de la red (de los fonones) son del orden de $10^{-13} s^{-1}$ y las velocidades de los electrones de conducción son del orden de $10^{16} \text{Å}/s$, ocurrirá que cuando la red vuelva a su posición de equilibrio, el electrón que la ha deformado se encontrará muy lejos, del orden de 10^{-3}Å , esto es del orden de varios cientos de parámetros de la red del ion que ha dejado fuera de su posición de equilibrio. Esto es así porque las velocidades de los electrones de conducción en su movimiento al azar, velocidades de Fermi, son muy grandes comparadas con los tiempos de relajación de la red, ligados a las frecuencias de los fonones. El segundo paso en este mecanismo es muy sencillo: Mientras que la red está deformada por sus cercanías pasan muchos otros electrones de conducción, que se sienten más cómodos, más atraídos por la red, que si ésta no estuviera deformada. En resumen, se puede establecer una cierta conexión, una cierta interacción atractiva entre los electrones de conducción vía los fonones (vibraciones de la red). Esto es, un electrón de conducción deforma la red y un segundo electrón de conducción se siente atraído por esta deformación y en cierta manera ligado al primer electrón, electrón que puede estar físicamente muy alejado del primero. Esta idea de cómo una interacción de corto alcance electrón-fonón, puede dar lugar a una interacción de largo alcance electrón-electrón, se debe a Fröhlich (1950) y es la base de la teoría de la superconductividad.

En principio tenemos un posible mecanismo de interacción atractiva entre electrones de conducción vía fonones, que de momento no parece que tenga mucho que ver con la superconductividad. Antes de seguir avanzando

se tiene que recordar el papel que juega la interacción coulombiana repulsiva directa entre los electrones de conducción. Ahora bien esta interacción coulombiana repulsiva va como $1/r^2$, siendo r la distancia entre los electrones, es decir que disminuye rápidamente con la distancia. Luego se tendrá que la interacción neta entre los electrones de conducción será la suma de estas dos interacciones una repulsiva, que es la que podríamos decir normal y otra, vía fonón, que es atractiva. La interacción neta será atractiva solamente cuando estemos haciendo el balance entre electrones cuya interacción coulombiana repulsiva sea muy pequeña, es decir entre electrones muy alejados unos de otros. Este caso se puede dar, como hemos resaltado una línea más arriba, ya que se puede todavía tener un acoplamiento vía fonones entre electrones muy alejados, varios cientos de parámetros de red con interacción repulsiva coulombiana muy pequeña.

Una vez entendido lo que sucede lo que sigue es muy sencillo. El siguiente paso lo da Cooper, que demuestra que si se tienen dos electrones que interactúan con una interacción atractiva enta, es decir negativa, aunque ésta sea todo lo pequeña que se quiera, el mar de Fermi de los electrones de conducción es inestable y se produce un estado ligado con momentos k y espines opuestos, llamado par de Cooper. Bardeen, Cooper y Schieffer, trabajando juntos, escriben un hamiltoniano y el estado fundamental formado por la condensación de parejas de electrones, pares de Cooper, de tal manera que son capaces de desarrollar expresiones para la temperatura crítica superconductora, deducen la existencia de una zanja de energía en los superconductores, tal que para romper una pareja de electrones ligados vía la interacción con los fonones de la red, hay que suministrar una energía superior o igual a la de esa zanja, y asimismo deducen el efecto isotópico. Queda por último ver de dónde se obtiene con esta teoría conducción eléctrica sin resistencia, es decir sin que los electrones de conducción cambien de momento (esto es k). Hay que señalar que el estado fundamental propuesto por la teoría BCS no está formado por un conjunto de parejas de Cooper cualesquiera, es algo muy complicado de tal manera que la interacción atractiva entre electrones, que produce una inestabilidad en el mar de Fermi hace que se condensen pares de Cooper, estando la función de onda superconductora formada por todos los pares de Cooper. Los pares no actúan independientemente unos de otros y para romper uno de ellos, esto es para convertir a los dos electrones en electrones normales, hay que suministrar energía (la correspondiente a la zanja) de tipo térmico, subiendo la temperatura, o bien de tipo magnético, aplicando un campo magnético, etc. Mientras que no se suministre una energía superior a la de la zanja los electrones superconductores están formando pares de Cooper, es decir se mueven con momento

k bien determinado y no lo cambian. Esto es, conducen sin resistencia a no ser que se rompan los pares, que no olvidemos no son independientes. Ahora bien, estos electrones se están moviendo en un sólido, en una red cristalina, que estará a una cierta temperatura (por debajo, por supuesto, de la temperatura crítica) que no es suficiente para romper los pares. Por lo tanto, verán fonones e interaccionarán con ellos. ¿Cómo es posible que un electrón de una pareja que interacciona con un fonón (de energía menor de la necesaria para romper el par) no cambie su momento? Esto es debido a que los pares están interrelacionados y el resto se acomoda para hacer posible que en su conjunto de k no varíe. Aquí se puede utilizar una imagen debida a Schieffer. Supongamos que tenemos un conjunto de esquidores, la mitad hombres y la mitad mujeres, que bajan una pendiente cogidos de la mano, hombre con mujer (aquí tenemos los pares de Cooper), pero estas parejas no bajan cada uno por su lado, sino que lo hacen al mismo tiempo y de alguna manera enlazados, de tal manera que si algún miembro de la pareja se encuentra en el camino un obstáculo (un fonón), siempre que no sea muy importante (de energía menor que la de la zanja) el conjunto de pares aguantarán el golpe y harán posible que se siga bajando sin perder velocidad, sin cambiar k , sin resistencia.

Resulta llamativo que la interacción electrón fonón sea el origen de la resistividad y que la interacción electrón-fonón-electrón que acabamos de bosquejar resulta en el origen de la superconductividad.

No resulta nada simple el desarrollar, utilizand el formalismo adecuado, las ideas expuestas en las líneas anteriores, pero por ejemplo la función de onda superconductora y algunos otros detalles se pueden tratar explícitamente en el marco de este capítulo.

Sin duda existen aspectos que pueden parecer caprichosos, en la descripción que acabamos de hacer. Uno de ellos es sin duda que las parejas de Cooper estén formadas por electrones con momentos opuestos y con espines también opuestos, esto es muy fácil entenderlo.

El esquema de la teoría BCS, en sus primeros pasos, es bien simple. Se parte de considerar como el núcleo de la teoría la interacción electrón-fonón-electrón. Esto se puede representar de la siguiente forma: El primer electrón llega a un punto de la red y atrae a la red y hace que ésta «vibre», esto en nuestro lenguaje se dice que emite un fonón. El segundo electrón «ve» este fonón y lo absorbe acoplándose así con el primer electrón. Es decir, los electrones se acoplan intercambiando un fonón, esto se puede representar con uno de los típicos diagramas de Feynman, como se ve en la figura (FIGURA). Este tipo de esquemas se encuentran en otras interacciones en la Naturaleza. Por ejemplo, en el núcleo atómico tenemos en este mismo caso en el

intercambio de mesones π virtuales que produce atracción entre nucleones.

Ahora, ¿Cuál será el tipo de electrones y fonones que están interaccionando? En principio los electrones claramente son los de la banda de conducción, con energías del orden de unos pocos electrón voltio. Los fonones disponibles tienen unas energías que son como máximo del orden de la energía de Debye. Dado que la temperatura de Debye suele ser del orden de algo más de 100K, se tiene que las energías de los fonones disponibles son de unos pocos milielectrón voltio, esto es muy pequeña comparada con la de los electrones. Se tiene que la capa de los electrones de conducción en la esfera de Fermi que intercambian fonones, según este esquema es una franja muy estrecha.

Si llamamos $\hbar k$, $\hbar k'$ y $\hbar k_1$, $\hbar k'_1$, los momentos de los electrones antes y después de la interacción la ley de conservación del momento nos dice que

$$\hbar k_1 + \hbar k'_1 = \hbar k = \hbar k' = \hbar K$$

donde hemos llamado K al momento del centro de masas de los electrones. Conviene aprovechar este punto para indicar el convenio habitual en cuanto al signo de la energía de los electrones. Se toman como energías positivas los valores de la energía superiores a la energía de Fermi y como energías negativas los valores inferiores a la energía, E_F , de Fermi. Es decir que ϵ_k será negativa si k está dentro de la superficie de Fermi y positiva en caso contrario. Está claro que los únicos electrones que pueden intervenir en todo este proceso son los que tienen energías próximas a la de Fermi dado que solamente estos electrones pueden tener estados libres accesibles sin violar el principio de exclusión de Pauli. Por lo tanto, estamos solamente considerando como candidatos a electrones superconductores unos pocos de todos los de la esfera de electrones de conducción de Fermi, aquellos que están en una estrecha franja de espesor $\hbar\omega_D$ donde ω_D es la frecuencia de Debye, por lo tanto del orden de unos pocos milielectrón voltio de la energía de Fermi. En esta situación se conserva el momento $\hbar K$ del centro de masas de los dos electrones. En la figura (FIGURA) se representa gráficamente todo lo que acabamos de decir, además se observa en esta figura que son, dentro de la estrecha franja, muy pocos los electrones que cumplen todas las condiciones y que por lo tanto pueden ser candidatos a formar pares de Cooper. Solamente los electrones cuyos momentos caen en la intersección de las dos capas esféricas son los posibles electrones superconductores. Es fácil ver que si disminuimos el valor del momento del centro de masas del sistema la intersección aumentará y se hará máxima si hacemos $K = 0$, donde toda la franja está formada por posibles pares de Cooper. Es decir los pares de Cooper se forman con electrones de momentos opuestos, como ya habíamos

anicipado unas líneas más arriba, esto es $k, -k$. Además, este argumento que acabamos de desarrollar está apoyado en que la energía del sistema disminuye al ir formándose pares, lo que se puede demostrar, pero no de una manera fácil.

Otro aspecto de los señalados anteriormente, que podemos abordar ahora, es que los pares estaban formados por electrones no sólo con momentos opuestos, sino también con espines opuestos, esta última característica es ahora muy fácil de tratar, dado que los electrones son fermiones, es decir cumplen el principio de exclusión de Pauli y tienen funciones de onda antisimétricas. Se puede demostrar que la parte orbital (es decir olvidándose de la parte de espín) de la función de onda de los pares de Cooper, depende tan sólo del módulo del momento. Por lo tanto, frente al intercambio de la posición de los dos electrones del par se tienen una función simétrica. Luego la parte de espín debe ser antisimétrica, es decir los espines de la pareja son opuestos. Se tiene que un par de Cooper está formado por dos electrones tal que $k \uparrow, -k \downarrow$.

En este punto surge uno de los peligros típicos de la teoría BCS, que pone de manifiesto la gran cantidad de sutilezas que encierra. Dado que un par de Cooper es una entidad cuyo espín es cero, como los bosones, es fácil caer en la tentación de tratar a los pares de Cooper como bosones. Además hemos indicado que un número creciente de pares de Cooper es energéticamente favorable. Ahora bien, el principio de Pauli sigue vigente: Así, el estado formado, por ejemplo, por $k \uparrow, -k \downarrow$ no puede estar ocupado por más de un par de electrones al mismo tiempo. En el gráfico (FIGURA) se representa la situación del estado fundamental para 3 pares de Cooper. Además, entrando en detalles más técnicos, los operadores con los que se construye el hamiltoniano de la teoría BCS, no siguen las reglas de conmutación de los operadores de bosones. Resulta de todas formas llamativo y conviene resaltarlo que la electrodinámica bosónica reproduce muy bien el comportamiento superconductor, por ejemplo la teoría clásica de la superconductividad de London (que no hemos tratado en este capítulo) se puede deducir de un gas cargado de bosones y de allí se puede extraer de una manera natural el efecto Meissner. Resumiendo, los pares de Cooper no son bosones.

Pasaremos a continuación a describir de la manera más sencilla posible la función de onda del estado fundamental superconductor y algunas de las expresiones de la teoría BCS.

La función de onda del estado fundamental de N electrones, según la propone la teoría BCS, es el producto de funciones de onda de pares convenientemente antisimetrizadas, que se puede representar por $\phi(1, 2, \dots, N) \propto \phi(1, 2)\phi(3, 4)\dots\phi(N-$

$1, N)$ si no escribimos explícitamente la parte de espín y sólo lo hacemos con la parte orbital tendríamos $\phi(1, 2, \dots, N)$ *proportional* $\sum_{k_1} \sum_{k_2} \dots \sum_{k_{N/2}} g_{k_1} \dots g_{k_{N/2}} e^{i(k_1 r_1 - r_2 k_2 + \dots + k_{N/2} r_{N-1} - k_{N/2} r_N)}$

donde cada término de esta función de onda describe una configuración donde los N electrones se agrupan en $N/2$ pares que son $(k_1, -k_1) \dots (k_{N/2}, -k_{N/2})$ la parte de espín es inmediata cada electrón de cada par tiene espines opuestos. Como vemos la función de onda es una función complicada que abarca todos los pares relacionados entre ellos. También se puede escribir de una manera más compacta como $\phi = \prod_k \phi_k$.

Antes de continuar merece la pena señalar algún otro aspecto de los pares de Cooper, estos pares están fuertemente relacionados entre sí, de tal manera que se puede decir que del orden de un millón de pares tienen sus centros de masa dentro del espacio en el que se extiende un par dado, esto es los pares de electrones que forman un par de Cooper están muy alejados uno del otro, estando fuertemente correlacionados unos pares con otros. Se puede demostrar, que la disminución de la energía en la fase superconductora respecto al estado normal, debida a la interacción entre pares, depende de cómo se elijan esos pares. El conjunto de pares de Cooper no son independientes unos de otros, están muy correlacionados.

Otro punto que hay que aclarar en lo anterior es que estamos considerando el caso en que no tenemos corriente eléctrica neta, ya que los electrones apareados tienen momento total cero. Los estados portadores de corriente superconductora son aquellos en que los pares tienen momentos que serán $(k + \frac{q}{2} \uparrow, -k + \frac{q}{2} \downarrow)$ y los electrones tendrán una velocidad de arrastre neta que será $v_a = \frac{\hbar q}{2m}$.

Otro aspecto importante de la teoría BSC es que predice la existencia de una zanja de energía Δ , zanja que se puede medir experimentalmente y que está relacionada con la temperatura crítica por la ecuación BCS. Este parámetro Δ es el parámetro crucial de la teoría BCS de que acompaña la aparición del estado superconductor.

Hay que resaltar que esta zanja reúne unas características muy particulares, por lo pronto se diferencia claramente de las zanjas que juegan un papel importante en sólidos, especialmente en los semiconductores. En superconductores tenemos una zanja que está situada en la banda de conducción y que tiene una marcada dependencia con la temperatura. Asimismo, mientras que en un semiconductor se necesita excitar por encima de la zanja a los electrones para tener conducción eléctrica, en un superconductor se tiene la supercorriente sin necesidad de tener estados excitados, se tiene conducción eléctrica por debajo del nivel de Fermi, esto es por debajo de la zanja que

existe en la banda de conducción.

Este parámetro Δ aparece en la sencilla e importante relación que se obtiene en la teoría BCS $2\Delta(0) = 3,52k_B T_c$ donde T_c es la temperatura crítica superconductora.

Para finalizar un resumen general de la teoría BCS.

1. Interacción atractiva entre electrones.
2. Mar de Fermi inestable.
3. Posible formación de estados ligados de dos electrones.
4. Condensación de parejas de electrones, pares de Cooper ($k\uparrow$, $-k\downarrow$).
5. Aparición de una zanja de energía (para romper los pares hay que suministrar esa energía).
6. Temperatura crítica superconductora BCS ligada al valor de la zanja de energía prohibida.

3.1.2. Efectos cuánticos macroscópicos en superconductor: Cuantización del flujo magnético y efecto Josephson

La superconductividad es un campo de la física donde las leyes cuánticas que gobiernan el comportamiento de la naturaleza, se pueden observar a escala macroscópica. El origen de este espectacular efecto veremos que es único, pero existen dos aspectos experimentales en los que se manifiesta. Uno de ellos está ligado a efectos magnéticos y el otro a fenómenos en la densidad de corriente superconductora. El primero de ellos es la cuantización del flujo magnético y el segundo el efecto Josephson. Empezando por el primero de estos efectos cuánticos macroscópicos se tiene que el flujo magnético es siempre un número entero de veces el valor de un flujo elemental, conocido con el nombre de fluxoide. Es decir, que el flujo que atraviesa un material superconductor es siempre o uno o 2 o 500 fluxoides, pero nunca puede ser una cantidad cualquiera, siempre un número entero de fluxoides.

En la teoría de Ginzburg-Landau de las transiciones de fase se introduce el concepto de parámetro de orden, que es una magnitud que aparece acompañando a la transición. Un ejemplo típico de parámetro de orden es la imanación de saturación, que es la magnitud que aparece cuando se tiene la transición de fase del estado paramagnético al ferromagnético. En el caso de una transición de fase del estado paramagnético al ferromagnético. El modelo macroscópico de la superconductividad está basado en la hipótesis

de que existe una función de onda $\psi(r, t)$ que describe el comportamiento del ensemble completo de electrones superconductores y que es el parámetro de orden de la transición superconductora, tal que su módulo al cuadrado nos da la densidad de electrones superconductores que aparecen al pasar el metal del estado normal al superconductor. En el estado normal el parámetro de orden (densidad de electrones superconductores) se desvanece, desaparece. Por supuesto, esta hipótesis puede ser justificada por la teoría microscópica de la superconductividad (Teoría BCS). Esta teoría se basa en la idea de que en metales superconductores existe una fuerza atractiva entre los electrones cercanos al nivel de Fermi. A temperaturas bajo la temperatura crítica T_c , esta fuerza atractiva crea un nuevo estado cuántico diferente del mar de Fermi de un metal normal. Se puede decir que una pequeña porción de los electrones cercanos al nivel de Fermi están ligados a pares de Cooper (pares de electrones con spines opuestos que se comportan como una única entidad). En el caso más simple, el movimiento interno de los pares no tiene momentum angular orbital (estado s simétrico) y consecuentemente el principio de Pauli requiere que los dos spines estén en un estado de spin singlete (antisimétrico). Contrario a ligar dos átomos a una molécula, el estado orbital del par tiene un radio mucho mayor, típicamente entre 10nm y 1um, de manera que pares individuales se sobrelapan fuertemente en espacio y por lo tanto, la ligadura resulta cooperativa. En particular, la energía de ligadura de cualquier par depende de cuantos otros pares se hayan condensado y, más aún, el movimiento del centro de masas de los pares está fuertemente correlacionado tal que cada par reside en el mismo estado con el mismo movimiento de centro de masas. Es este estado el que describimos con una función de onda macroscópica y que le da al sistema sus propiedades superfluídicas. Por ejemplo, el movimiento del centro de masas puede ser descrito por la función de onda $\psi(r, t) = \psi_0 e^{i\theta(r, t)} = \psi_0 e^{ik_s r - i\omega t}$, donde cada par tiene el mismo momentum $\hbar k_s$ o velocidad de par $v_s = \hbar k/m$. Además, se cumple que $n_s = |\psi|^2$ donde n_s es la densidad de electrones superconductores.

Por otro lado, sabemos que la cantidad de movimiento de una partícula de masa m^* y carga e^* en presencia de un campo magnético representado por su potencial vectorial A , se escribe como $\mathbf{p} = m^* \mathbf{v} + \frac{e^*}{c} \mathbf{A}$.

Si tenemos una densidad de partículas, todas ellas teniendo el mismo momentum \mathbf{p} podemos escribir $n_s \mathbf{p} = n_s (m^* \mathbf{v} + \frac{e^*}{c} \mathbf{A})$.

Recordando el operador momentum en su expresión equivalente $p \rightarrow -\hbar \nabla$ tendremos $p = \hbar \nabla \phi = m^* v + \frac{e^*}{c} A$.

Recordando la expresión general de la densidad de corriente eléctrica en función de la densidad de portadores, de la carga y de la velocidad promedio se pueden escribir $\mathbf{J} = n_s e^* \mathbf{v}$ que en nuestro caso será $\hbar \nabla \phi = \frac{m^*}{n_s e^*} J + \frac{e^*}{c} A$.

Con esta expresión estamos preparados para demostrar la cuantización del flujo magnético en superconductores, para ellos basta con recordar algo trivial, como es que el parámetro de orden superconductor sólo puede tener un único valor en cada punto, es decir, la densidad de electrones superconductores debe ser única en cada punto, esta simple consideración se materializa en que podemos escribir $\phi(2\pi) - \phi(0) = n2\pi$.

Recordando la definición de circulación y de gradiente y siendo C un camino cerrado, la expresión anterior la podemos escribir como $\oint_C \nabla\phi dl = n2\pi$.

Si ahora suponemos que este camino C está en el interior de un superconductor, alejado de los bordes y rodeando a un hueco, como se representa en la figura (FIGURA) y suponemos que tenemos aplicado un campo magnético a este superconductor, se tiene $\oint_C (\frac{m^*}{\hbar m_s e^*} J + \frac{e^*}{\hbar e} A) dl = n2\pi$.

Dado que estamos en un camino interior al superconductor y allí no existe corriente (las únicas corrientes que existen en una situación como la que estamos describiendo, están apantallando el campo magnético y están situadas cerca de los bordes tanto de la cavidad como de la superficie del material superconductor), tendremos $\oint_C A dl = \frac{\hbar c}{e^*}$.

Recordando el teorema de Stokes se tiene $\oint_C A dl = \iint_S B ds = \Phi$ que en nuestro caso será $\Phi = n\Phi_0$ expresión que nos indica que el flujo magnético que encierra la cavidad es un número entero de un flujo elemental conocido con el nombre de fluxoide y cuyo valor es $\Phi_0 = \frac{\hbar c}{2e} = 2,0710^{-7} gausscm^2$ siendo e^* la carga del portador de corriente, el par de Cooper $e^* = 2e$.

Este efecto fue encontrado experimentalmente de forma simultánea en 1961 por Deaver-Fairbanks y por Döhl-Nabauer.

El efecto túnel es un efecto típico del carácter cuántico de los electrones, desde el punto de vista de la física clásica es completamente imposible que se produzca el efecto que vamos a discutir.

Los electrones se pueden representar por funciones de onda, de tal manera que existe una cierta probabilidad de que un electrón pueda ir de un metal a otro atravesando una barrera aislante estrecha, que puede ser vacío o un óxido. La función de onda del electrón decae de una manera exponencial fuera de la superficie del metal, la amplitud de la onda no es totalmetne nula fuera del metal, es como si el electrón se desparramase fuera de la superficie. Si situamos un metal junto al otro, separados tan sólo por una barrera, como puede ser, por ejemplo, el óxido de la superficie, existe una probabilidad pequeña, pero no nula de que el electrón atraviese ese túnel y aparezca al otro lado, en el otro metal.

Antes de seguir hay que hacer notar que la energía necesaria para hacer

pasar un electrón que está en el nivel de Fermi de un metal al vacío (función de trabajo del metal) es mayor que la energía necesaria para transferir ese electrón a un aislante.

Por razones de simplicidad vamos a hacer toda la discusión siguiente, salvo cuando se diga expresamente lo contrario, para temperatura de 0K. La figura (FIGURA) nos indica la situación entre dos partes del mismo metal separadas por un aislante. Todos los estados por debajo de la energía de Fermi están ocupados, mientras que todos los estados por encima de E_F están vacíos.

Para que se pueda tener efecto túnel hacen falta dos condiciones. La primera es que, como es lógico, los electrones solamente pueden ir de un estado ocupado a un estado desocupado y la segunda es que se tiene que conservar la energía, es decir que las transiciones, en la gráfica, tienen que ser horizontales. Por lo tanto en la situación de la gráfica (FIGURA) no tendremos efecto túnel. No se pueden tener transiciones horizontales al no existir estados vacíos. Todos los estados en el mismo nivel de energía, a ambos lados de la barrera, están ocupados.

Si aplicamos una diferencia de potencial constante a la barrera lo que estamos haciendo es aumentando la energía de los electrones de un lado de la barrera respecto al otro y entonces tenemos la posibilidad de que se tenga corriente por efecto túnel, gráfica (FIGURA).

La intensidad de esta corriente túnel depende de varios parámetros. Por ejemplo, a mayor diferencia de potencial aplicada mayor corriente. Está claro que cuantos más estados tengamos en el nivel de Fermi mayor será la probabilidad de tener corriente túnel, lo cual puede indicar que quizá con experimentos de efecto túnel podemos obtener información sobre este importante parámetro y en general sobre la superficie de Fermi, pero como es de esperar la corriente túnel también depende de la anchura, altura y forma de la barrera y estos parámetros son muy difíciles de determinar, lo cual hace que en metales normales del efecto túnel se obtenga una información mucho menos rica de lo que se podía esperar. Ocurre todo lo contrario con el efecto túnel cuando uno de los dos metales está en estado superconductor, como pasaremos a ver a continuación.

La existencia de una zanja de energía en el estado superconductor (FIGURA) hace que el efecto túnel en una estructura formada por superconductor-aislante-metal en estado normal, tenga características especiales (Giaver, 1960). Es claro que necesitamos previamente disponer de electrones normales por encima de la zanja superconductora, esto es hay que romper pares de Cooper, como primera medida, es decir diferencias de potencial aplicadas menores que la zanja no producirán efecto túnel. Esto es, se tiene que

diferencias de potencial aplicadas a la barrera no producen corriente túnel, salvo que venzan un valor umbral, que es precisamente el ancho de la zanja. De entrada ya tenemos una muy importante propiedad del efecto túnel superconductor, que nos permite medir la zanja superconductora y medir la variación de esta zanja con la temperatura.

Otra importante propiedad del efecto túnel es lo que pasa si estudiamos el efecto túnel de dos metales en estado superconductor. Es fácil ver que entonces, a 0K, tenemos que aplicar una diferencia de potencial para obtener corriente túnel que será la suma de las dos zanjass de energía. Pero no es sólo esto lo que ocurre cuando separamos dos superconductores por una barrera aislante. Como veremos a continuación aparece un nuevo efecto túnel exclusivo de los superconductores. Este es el conocido como efecto Josephson, postulado teóricamente por Josephson (1962) y comprobado experimentalmente por P.W. Anderson y Rowell (1963) y por Shapiro (1963), casi simultáneamente. Este es un efecto túnel de pares de Cooper entre superconductores, mientras que el efecto túnel tratado en las líneas anteriores es túnel de electrones normales entre superconductores o entre un metal normal y un superconductor. En concreto la sugerencia de Josephson es que puede existir efecto túnel entre dos superconductores que se encuentren separados por una barrera aislante (en principio más delgada que las tratadas en el efecto túnel normal, también conocido como túnel Giaver), donde la corriente túnel sea debida exclusivamente a pares de Cooper sin que se tenga una diferencia de potencial a través de la barrera.

Se va a seguir la deducción debida a Feynman, por su sencillez y claridad, porque este efecto enunciado en unas líneas arriba y que parece casi mágico, se puede deducir en unas pocas líneas.

Supongamos que tenemos un superconductor separado de dos partes por un aislante lo suficientemente estrecho como para que la función de onda superconductora a un lado de la barrera penetre algo al otro lado. Sean ψ_1 y ψ_2 las funciones de onda superconductoras a los dos lados de la barrera (1) y (2).

El túnel de pares del lado (2) al (1) aumenta la amplitud ψ_1 de la función de onda de los pares en el lado (1). Supongamos que el ritmo de crecimiento de ψ_1 es proporcional a ψ_2 , amplitud de la función de onda de los pares en el lado (2). Podemos escribir el ritmo de cambio de ψ_1 de la forma $A\psi_2$ donde A es una característica de la barrera y nos da información de la probabilidad de transferencia de pares del lado (2) al lado (1). En realidad lo que nos dice esta ecuación es que el ritmo de filtración en el lado superconductor (1) es proporcional a ψ_2 .

Podemos escribir la ecuación de Schrödinger para el lado superconductor

(1) teniendo en cuenta lo que acabamos de argumentar, como $\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = E_1\psi_1 + A\psi_2$ donde E_1 es la energía del estado más bajo de energía del superconductor del lado (1).

Análogamente, podemos escribir para el superconductor del lado (2) $\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = E_2\psi_2 + A\psi_1$

Escribiendo explícitamente la función de onda superconductora, tenemos $\psi = n_s^{1/2}e^{i\varphi}$ donde, como ya vimos, n_s es la densidad de electrones superconductores.

Por lo tanto las ecuaciones anteriores las podemos escribir como $\frac{-\hbar}{i}\frac{1}{2n_{s1}^{1/2}}\frac{\partial n_{s1}}{\partial t} + \hbar\frac{\partial\varphi_1}{\partial t}n_{s1}^{1/2} = E_1n_{s1}^{1/2} + An_{s2}^{1/2}e^{i(\varphi_2-\varphi_1)}$
 $\frac{-\hbar}{i}\frac{1}{2n_{s2}^{1/2}}\frac{\partial n_{s2}}{\partial t} + \hbar\frac{\partial\varphi_2}{\partial t}n_{s2}^{1/2} = E_2n_{s2}^{1/2} + An_{s1}^{1/2}e^{i(\varphi_1-\varphi_2)}$

Si ahora igualamos las partes reales y las partes imaginarias de estas ecuaciones tenemos

$$\begin{aligned}\hbar\frac{\partial\varphi_1}{\partial t} &= A\left(\frac{n_{s2}}{n_{s1}}\right)^{1/2}\cos(\varphi_2 - \varphi_1) + E_1 \\ \hbar\frac{\partial\varphi_2}{\partial t} &= A\left(\frac{n_{s1}}{n_{s2}}\right)^{1/2}\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + E_2 \\ \frac{\partial n_{s1}}{\partial t} &= \frac{-2A}{\hbar}(n_{s1}n_{s2})^{1/2}\sin(\varphi_2 - \varphi_1) \\ \frac{\partial n_{s2}}{\partial t} &= \frac{2A}{\hbar}(n_{s1}n_{s2})^{1/2}\sin(\varphi_2 - \varphi_1)\end{aligned}$$

Si definimos $\delta = \varphi_2 - \varphi_1$ y $j_0 = \frac{2A}{\hbar}(n_{s1}n_{s2})^{1/2}$ teniendo en cuenta, que el significado de la variación con el tiempo de la densidad de electrones superconductores, no es ni más ni menos que una corriente eléctrica a través de la barrera $j = j_0\sin(\delta)$.

Como hemos hecho todo el cálculo para un mismo superconductor podemos simplificar $n_{s1} = n_{s2}$. En realidad todo lo anterior es igualmente válido si tuviésemos a cada lado de la barrera dos superconductores distintos.

Una vez completada la parte de cálculo podemos pasar ahora a considerar aspectos generales de estas uniones Josephson, que es el nombre con el que se las conoce. De momento existe una clara diferencia entre este efecto túnel y el considerado al principio. En este caso de efecto Josephson tenemos túnel de pares de Cooper, mientras que en el caso anterior el túnel era de electrones individuales. En el efecto Josephson son bastante estrechas del orden o menores que la longitud coherente (tamaño de los pares de Cooper), en realidad el aislante actúa como un mal superconductor, las funciones de

onda de ambos lados se pueden solapar, existiendo una diferencia de fase a ambos lados de la barrera y como resultado de todo esto se establece una corriente continua a través de la barrera. En realidad, se puede demostrar que el mínimo de energía se alcanza cuando las fases se igualan y por lo tanto no se tiene corriente a través de la barrera, pero basta con aplicar una corriente de una fuente externa, siempre menor que I_0 , para que las fases dejen de ser iguales y si esta desigualdad no varía con el tiempo, se tiene a través de la barrera una corriente constante sin que se tenga caída de potencial. No hace falta colocar un óxido, un aislante, para que actúe de barrera se puede utilizar un estrechamiento en el superconductor, producido mediante una técnica conocida como fotolitografía, o cualquier otra técnica que nos produzca que una parte del superconductor esté unida a otra mediante un estrangulamiento lo suficientemente estrecho como para ser una unión débil. También se pueden obtener este tipo de uniones débiles con contactos entre superconductores de tipo puntual, o bien separando dos superconductores por una capa delgada de un metal en estado normal. Como acabamos de mencionar el tamaño de los pares de Cooper es una indicación del orden de magnitud de esta unión débil.

Los órdenes de magnitud de los parámetros que intervienen en el efecto Josephson son, para una unión de 1mm^2 de área $R = 1\Omega$, $I_0 = 1\text{mA}$ y $\Delta = 1\text{meV}$. Normalmente las densidades de corriente a través de las uniones son del orden de un millón de veces menores que las densidades de corriente crítica superconductora en un superconductor. Es decir, en general, en un superconductor se tiene que pasar de la densidad de corriente crítica para hacer desaparecer la superconductividad, pero si el superconductor tiene en algún punto una unión débil densidades de corriente un millón de veces menores hacen que se tenga caída de potencial en el paso de corriente por la unión.

Si hacemos pasar una corriente mayor que I_0 aparece una diferencia de potencial y teniendo en cuenta que al mismo tiempo que este efecto túnel (Josephson) de pares podemos tener el efecto túnel normal (Glauber) de electrones, el resultado se puede ver en la gráfica (FIGURA) donde se representa la curva característica I,V. Como sea la conexión en la realidad entre estos dos túneles depende de las características de la unión y del circuito exterior.

Finalmente hay que considerar lo que ocurre si aplicamos a la unión Josephson una diferencia de potencial externa constante, V , o lo que es lo mismo, tenemos una intensidad pasando por la barrera superior a I_0 . El cálculo es análogo al anterior, muy sencillo y nos conduce a que la intensidad a través de la barrera tiene la expresión $I = I_0 \sin((\varphi_2 - \varphi_1) + \omega t) = I_0 \sin(\delta + \omega t)$ donde $\omega = \frac{2eV}{\hbar}$.

En realidad el punto de partida de esta deducción es la dependencia con el tiempo de la fase, una diferencia de potencial aplicada a la unión lo que hace es variar en el tiempo la fase y el ritmo de variación de la fase viene dado por la ecuación $\frac{d\delta}{dt} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{qV}{\hbar} = \frac{2eV}{\hbar}$.

Es decir, una diferencia de potencial constante aplicada a una barrera Josephson produce una corriente alterna de pares (una supercorriente), por ejemplo una diferencia de potencial del orden de $1\mu V$ da lugar a una corriente que oscila con una frecuencia de 484MHz. Además de esta corriente de pares tenemos la corriente debida al efecto túnel normal de los electrones individuales. Ahora podemos volver a la gráfica (FIGURA) donde tendremos que hasta que se alcanza el valor I_0 tenemos paso de corriente por la unión sin caída de potencial. una vez que $I > I_0$, entonces aparece un voltaje y nos situamos en un punto de la gráfica del efecto túnel de electrones normales (Giaver), tenemos una diferencia de potencial aplicada, luego existe túnel normal y además, esto no está representado en la gráfica, tenemos una supercorriente (corriente de pares de Cooper) que está oscilando.

Antes de terminar esta sección, unas palabras acerca de este sorprendente descubrimiento. Como dijimos al principio el hecho de que una diferencia de fase de una entidad puramente cuántica pueda determinar un efecto macroscópico tan claro como es la aparición de corriente eléctrica, no fue descubierto experimentalmente. Fue calculado de una manera completa, incluso indicando la forma de hacer la comprobación experimental, por Brian D. Josephson a la edad de 22 años, cuando estaba empezando a trabajar bajo la dirección de Brian Pippard en su tesis doctoral en el Cavendish Laboratory de la Universidad de Cambridge. Pocos años después Josephson pasó a engrosar la larga lista de premios Nobel en física por descubrimientos relacionados con la superconductividad. Su descubrimiento ha tenido numerosas aplicaciones en campos tan distintos como pueden ser desde astronomía a medicina.

3.1.3. Modelo macroscópico de la superconductividad

En la aproximación usual de partículas que interactúan débilmente o que no interactúan, su evolución se puede describir en términos de la ecuación de Schrödinger ordinaria $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$, donde $\psi(r, t) = \psi_0(r, t)e^{i\theta(r, t)}$ es la función de onda compleja de una partícula. $|\psi|^2$ puede ser interpretado como la densidad de probabilidad de las partículas. En el caso estacionario se puede asumir que $|\psi|^2$ es constante y \hat{H} puede ser reemplazado por la energía E de la partícula. Entonces podemos escribir:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -E \quad (3.1)$$

Es decir, el carácter cuántico específico se reduce a aquel de la fase θ de la función de onda.

El punto importante es que en metales normales () no resulta en correlaciones cuánticas para las variables macroscópicas porque los electrones obedecen la estadística de Fermi-Dirac y sus energías nunca pueden ser exactamente iguales. Por lo tanto, de acuerdo a (), la evolución temporal de las fases de la función de onda de las partículas difiera para todas ellas. Es decir, que las fases están uniformemente distribuidas, y ya que las cantidades macroscópicas son la suma sobre todas las partículas, las fases se cancelan en estas cantidades.

Este no es el caso en los superconductores. En estos los pares ligados de electrones (pares de Cooper) se forman con momenta y espines opuestos en el caso más simple. Estos pares, con espín neto cero obedecen la estadística de Bose-Einstein y por lo tanto, pueden ocupar el estado de menor energía a temperaturas bajas. Como resultado sus $\partial\theta/\partial t$ son idénticos. Además, los pares de Cooper tienen tamaños relativamente grandes, del orden de 10 a 1000nm, lo cual es mucho más grande que la distancia típica entre los pares. Por lo que las funciones de onda de cada par individual se sobrelapan en gran medida. Como resultado de estos dos hechos, todos los pares forman un estado de "fase bloqueada" que puede ser descrito por una única función de onda ψ , la cual es denotada frecuentemente como el parámetro de orden. En esta situación las fases no se cancelan en la suma sobre todas las partículas y las variables macroscópicas, en particular la corriente, pueden depender de la fase θ , la cual cambia de una manera cuántica bajo la acción de un campo electromagnético. Esta dependencia cuántica lleva no sólo a la resistencia cero de los superconductores y al efecto Meißner-Ochsenfeld, sino también a efectos específicamente coherentes como la cuantización de flujo y el efecto Josephson.

En el caso de la función de onda macroscópica, se cumplen las siguientes propiedades:

$$\int \psi^*(r, t) \psi(r, t) dV = N_s^* \quad (3.2)$$

$$|\psi(r, t)|^2 = \psi^*(r, t) \psi(r, t) = n_s^*(r, t) \quad (3.3)$$

Donde $n_s^*(r, t)$ es la densidad local y N_s^* es el número total de electrones superconductores.

3.2. Junciones de Josephson

Las uniones de Josephson representan el elemento clave en los qubits superconductores. Se podría decir que son para los qubits, lo que los transistores son para los bits.

3.3. Efecto Josephson

EL efecto Josephson, predicho por Brian David Josephson en 1962, consiste en que una corriente fluya indefinidamente a través de una unión de Josephson aun cuando no hay una diferencia de potencial aplicada. Una unión de Josephson consta de dos superconductores acoplados por una conexión debil, la cual puede ser formada por un aislante (superconductor-isolator-superconductor, SIS), un metal normal (superconductor-normal-superconductor, SNS) o cualquier otro material u obstáculo que acople debilmente a los dos superconductores. En principio, no debería haber conducción entre ambas placas. Sin embargo, ese no es el caso. Por el efecto tunel, una supercorriente (corriente sin disipación) de pares de Cooper (pares de electrones con spins opuestos) pueden pasar de una placa a la otra sin disipación.

Las uniones Josephson son capaces de generar voltajes oscilatorios de alta frecuencia, por lo regular de 10^{10} $10^{11} Hz$ y detectan potenciales eléctricos de un cuatrillón de voltios.

Para comenzar el analisis de una unión de Josephson, se considera un sistema simple y simétrico, tal que el material sea el mismo en ambos extremos de la unión y no exista campo magnético. Se tienen dos placas superconductoras A y B, separadas por un aislante, cuyas funciones de onda son: $\psi_A = \sqrt{\rho_1}e^{i\phi_1}$, $\psi_B = \sqrt{\rho_2}e^{i\phi_2}$

$$V_J = \frac{\hbar}{2e} \frac{d\delta}{dt} \quad (3.4)$$

$$I_J = I_0 \sin(\delta) \quad (3.5)$$

Donde $\delta = \phi_2 - \phi_1$ es la diferencia de fase entre las dos placas superconductoras.

3.3.1. Efecto Josephson DC

Si las placas se encuentran sin alimentación, entonces correrá una supercorriente constante a través de ellas.

3.3.2. Efecto Josephson AC

Si las placas se alimentan con un voltaje DC externo, entonces la diferencia de fase entre ellas variará linealmente con el tiempo y habrá una corriente AC a través de ellas.

3.4. Componentes de la corriente en las uniones de Josephson

Esta corriente tiene tres componentes:

1. I_d , la corriente de desplazamiento: Como la corriente en un capacitor. La unión de Josephson forma un capacitor de placas paralelas superconductoras con un material aislante o un metal normal entre ellas, entonces podemos hablar de una corriente de desplazamiento I_d . La capacitancia C de este dispositivo está definida de la misma manera que en el estado normal: $C = \epsilon_r \frac{A}{4\pi d}$, donde ϵ_r es la constante dieléctrica relativa de la capa que separa a los dos superconductores, d la separación de los superconductores y A el área de los mismos.
2. I_n , la corriente ordinaria: Por los electrones individuales. Cuando la temperatura $T \neq 0$, siempre habrá movimiento térmico de cargas cuya energía es del orden de $k_B T$, donde k_B es la constante de Boltzmann. Cuando T es menor, pero cercano a la temperatura crítica T_c , la energía de acoplamiento de los pares de Cooper $E_g = 2\Delta$ es mucho menor a $k_B T$, lo cual resulta en la disminución de los pares de Cooper y el aumento de la concentración de electrones normales. Si el voltaje a través de la unión es mayor al asociado a la energía de la brecha $V_g = |\Delta_1 + \Delta_2|/e$, los pares de Cooper de una de las uniones se rompen y uno de los electrones de cada uno de los pares disueltos pasa al otro lado, es decir, se produce un tunelamiento de electrones normales. Si la concentración de electrones individuales aumenta, el comportamiento de la unión tenderá a uno de tipo óhmico, es decir, la unión tenderá a comportarse como una resistencia.
3. I_s , la supercorriente: Por los pares de Cooper. Se puede

3.5. Qubits superconductores

Los qubits superconductores se basan en circuitos osciladores no lineales, hechos a partir de JJs [2].

El Hamiltoniano de un oscilador armónico LC está dado por

$$\hat{H} = E_C \hat{n}^2 + E_L \frac{\hat{\phi}^2}{2}, \quad (3.6)$$

donde \hat{n} es la cantidad de pares de Cooper inducidos en el capacitor (En otras palabras, la carga inducida en el capacitor, medida en unidades de $2e$), y $\hat{\phi}$ es la diferencia de fase sobre el inductor. La carga \hat{n} y la fase $\hat{\phi}$ no conmutan, $[\hat{\phi}, \hat{n}] = i$, lo que significa que sus valores esperados no se pueden medir simultaneamente. $E_C = \frac{(2e)^2}{2C}$, $E_L = \frac{\hbar^2}{(2e)^2 L}$ y la distancia entre niveles de energía del oscilador armónico $\hbar\omega = \frac{\hbar}{\sqrt{LC}} = \sqrt{2E_L E_C}$.

Para poder servir como qubit, el oscilador debe ser anarmónico, de manera que se pueda operar sobre un par específico de niveles de energía. Al agregar una JJ, el Hamiltoniano del circuito LCJ se convierte en:

$$\hat{H} = E_C (\hat{n} - n_g)^2 - E_{J0} \cos(\hat{\phi}) + E_L \frac{(\hat{\phi} - \phi_e)^2}{2},$$

donde n_g es la carga inducida por voltaje en el capacitor C (isla qubit) y ϕ_e es la fase inducida por flujo sobre la JJ. La energía de Josephson E_{J0} está dada por $E_{J0} = \frac{\hbar}{2e} I_0$ en términos de la corriente crítica I_0 de la unión. Usualmente, la JJ es del tipo Superconductor-Aislante-Superconductor con corriente crítica fija.

Con el fin de introducir la inductancia no lineal de Josephson, empezamos por

$$I_J = I_0 \sin(\phi)$$

Combinado con la ley de Lenz:

$$V = \frac{d\Phi}{dt} = \frac{\Phi_0}{2\pi} \frac{d\phi}{dt}, \quad \Phi_0 = \frac{h}{2e}$$

Se encuentra que:

$$V = \frac{\Phi_0}{2\pi} \frac{1}{I_0 \cos(\phi)} \frac{dI_J}{dt}$$

Definiendo $L_J = V(\frac{dI_J}{dt})^{-1}$, se obtiene finalmente la inductancia de Josephson L_{J0} :

$$L_J = \frac{\Phi_0}{2\pi} \frac{1}{I_0 \cos(\phi)} = L_{J0} \frac{1}{\cos(\phi)}$$

Esto define la inductancia de Josephson de la JJ aislada y nos permite expresar la energía de Josephson como $E_{J0} = \frac{\hbar^2}{(2e)^2 L_{J0}}$

$$[E_C(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} - n_g)^2 + U(\phi)]\psi = E\psi$$

$$U(\phi) = -E_{J0} \cos(\phi) + E_L \frac{(\phi - \phi_e)^2}{2}$$

1. $E_L = 0$ ($L \sim \infty$) :
2. $E_L \approx E_{J0}$:

3.6. Arquetipos de qubits superconductores

3.6.1. Qubit de carga

Si E_L tiende a cero, la carga almacenada en la isla superconductora entre el capacitor y la unión Josephson se puede usar como qubit. El potencial de este tipo de qubit es de forma de coseno.

3.6.2. Qubit de flujo

Si E_L es comparable con E_{J0} , el flujo a través del lazo formado por el inductor y la unión Josephson se puede usar como qubit. El potencial de este tipo de qubit es de forma cuártica.

3.6.3. Qubit de fase

Si se polariza la unión Josephson con una fuente de corriente, la fase en ambos extremos de la unión Josephson se puede usar como qubit. El potencial de este tipo de qubit es de forma cúbica.

3.7. Transmones

Los transmones son un tipo de qubit de carga. Tratando el transmón como un sistema de dos niveles acoplado linealmente a un oscilador monomodo, su Hamiltoniano toma la siguiente forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_q + \hat{H}_{qr} + \hat{H}_r = -\frac{1}{2}\epsilon\sigma_z + g\sigma_x(a + a^\dagger) + \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

donde ϵ es la energía de excitación del qubit, g es el acoplamiento qubit-oscilador y ω es la frecuencia del oscilador.

Introduciendo los operadores escalera del qubit, $\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$, el término de interacción \hat{H}_{qr} se puede dividir en dos términos, el de Jaynes-Cummings (JC) y el anti-Jaynes-Cummings (AJC):

$$\hat{H}_{qr} = \hat{H}_{qr}^{JC} + \hat{H}_{qr}^{AJC} = g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) + g(\sigma_+ a^\dagger + \sigma_- a)$$

Este Hamiltoniano describe el modelo cuántico canónico de Rabi (canonical quantum Rabi model - QRM). Las ecuaciones (()) son completamente generales y aplicables a cualquier sistema qubit-oscilador. Mantener sólo el término JC corresponde a realizar la aproximación de onda rotativa (rotating wave approximation - RWA).

3.8. Hamiltonianos multiqubit de transmones

Omitiendo el término del oscilador, el Hamiltoniano toma la siguiente forma general:

$$\hat{H} = \hat{H}_q + \hat{H}_{qr} + \hat{H}_{qq} = -\frac{1}{2} \sum_i \epsilon_i \sigma_{zi} + \sum_i g_i \sigma_{xi} (a + a^\dagger) + \frac{1}{2} \sum_{i,j;\nu} \lambda_{\nu,ij} \sigma_{\nu i} \sigma_{\nu j}$$

Por simplicidad, se considera que el término \hat{H}_{qr} se refiere sólo a la lectura y las operaciones de bus, dejando la interacción indirecta qubit-qubit via el resonador ser incluidas en \hat{H}_{qq} via la constante de acoplamiento $\lambda_{\nu,ij}$.

3.8.1. Acoplamiento capacitivo

$$\begin{aligned} \hat{H}_{qq} &= \lambda_{12} \sigma_{x1} \sigma_{x2} \\ \lambda_{12} &= \frac{1}{2} \sqrt{E_{10,1} E_{10,2}} \frac{\sqrt{E_{EC1} E_{EC2}}}{E_{Cc}} = \frac{1}{2} \sqrt{E_{10,1} E_{10,2}} \frac{Cc}{\sqrt{C_1 C_2}} \approx \frac{1}{2} E_{10} \frac{C_c}{C} \\ \hat{H}_{qq} &= \lambda_{12} (\sigma_{+1} \sigma_{-2} + \sigma_{-1} \sigma_{+2}) \end{aligned}$$

3.8.2. Acoplamiento por el resonador

$$\begin{aligned}\hat{H}_{qq} &= \lambda_{12} \sigma_{x1} \sigma_{x2} \\ \lambda_{12} &= \frac{1}{2} g_1 g_2 \left(\frac{1}{\Delta_1} + \frac{1}{\Delta_2} \equiv g_1 g_2 \frac{1}{\Delta} \right) \\ \Delta_i &= \epsilon_i - \hbar\omega\end{aligned}$$

3.8.3. Acoplamiento de JJ

$$\begin{aligned}\hat{H}_{qq} &= \lambda_{12} \sigma_{y1} \sigma_{y2} \\ \lambda_{12} &\approx \frac{1}{2} E_{10} \frac{L_c}{L_J} \frac{\cos(\delta_c)}{2L_c \cos(\delta_c) + L_{Jc}}\end{aligned}$$

3.8.4. Acoplamiento afinable/calibrable

3.9. Compuertas cuánticas en transmones

3.9.1. El operador de evolución temporal

La evolución temporal de un sistema complejo (many-body) puede ser descrita por la ecuación de Schrödinger para el vector de estado $|\psi(t)\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

en términos del operador evolución $\hat{U}(t, t_0)$

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

determinado a partir del Hamiltoniano complejo (many-body) dependiente del tiempo del sistema:

$$\hat{H} = \hat{H}_{sys} + \hat{H}_{ctrl}(t)$$

describiendo el sistema intrínseco y las operaciones de control aplicadas. Las compuertas son el resultado de aplicar pulsos de control específicos a partes selectas de un circuito físico. Esto afecta varios términos del Hamiltoniano, haciéndolos dependientes del tiempo.

Para el transmón, el Hamiltoniano del sistema bajo la RWA toma la forma:

$$\hat{H}_{syst} = -\frac{1}{2} \sum_{\nu i} \epsilon_i \sigma_{zi} + \sum_i g_i (\sigma_{+i} a + \sigma_{-i} a^\dagger) + \hbar \omega a^\dagger a + \frac{1}{2} \sum_{i,j;\nu} \lambda_{\nu,ij} (\sigma_{+i} \sigma_{-j} + \sigma_{-i} \sigma_{+j})$$

y el término de control se puede escribir como:

$$\hat{H}_{ctrl} = \sum_{i;\nu} f_{\nu i}(t) \sigma_{\nu i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j;\nu} h_{\nu,ij}(t) \sigma_{\nu i} \sigma_{\nu j} + k(t) a^\dagger a$$

3.9.2. Pulsos de microondas

$$\hat{H}_d = \sum_k (a + a^\dagger) (\xi_k e^{-i\omega_d^{(k)} t} + \xi_k^* e^{i\omega_d^{(k)} t})$$

RWA:

$$\hat{H}_d = \sum_k a \xi_k^* e^{i\omega_d^{(k)} t} + a^\dagger \xi_k e^{-i\omega_d^{(k)} t}$$

3.9.3. Régimen rotacional del pulso

Trabajando con un sólo modo a la vez, se aplica la siguiente transformación $U(t) = \exp[-i\omega_d t (a^\dagger a + \sum_i \sigma_{zi})]$ para entrar en el régimen rotacional del pulso de control.

$$\hat{H} = U^\dagger (\hat{H}_{syst} + \hat{H}_d) U - iU^\dagger \dot{U}$$

$$\hat{H} = \Delta_c a^\dagger a + \frac{1}{2} \sum_i \Delta_{qi} \sigma_{zi} + \sum_i g_i (a \sigma_{+i} + a^\dagger \sigma_{-i}) + (a \xi^* e^{i\omega_d t} + a^\dagger \xi e^{-i\omega_d t})$$

$$\Delta_c = \omega_c - \omega_d \quad \Delta_{qi} = \omega_{qi} - \omega_d$$

3.9.4. Efecto del pulso sobre el qubit

Luego se aplica el operador de desplazamiento $D(\alpha) = \exp[\alpha a^\dagger - \alpha^* a]$ sobre el campo a con $\dot{\alpha} = -i\Delta_c \alpha - i\xi e^{-i\omega_d t}$ para eliminar el efecto directo del pulso sobre la cavidad.

$$\hat{H} = D^\dagger(\alpha) \hat{H}_{old} D(\alpha) - iD^\dagger(\alpha) \dot{D}(\alpha)$$

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \Delta_c a^\dagger a + \frac{1}{2} \sum_i \Delta_{qi} \sigma_{zi} + \sum_i g_i (a \sigma_{+i} + a^\dagger \sigma_{-i}) \\ & + \sum_i g_i (\alpha \sigma_{+i} + \alpha^* \sigma_{-i}) - \Delta_c \alpha \alpha^*\end{aligned}$$

El término $-\Delta_c \alpha \alpha^*$ se desprecia, ya que sólo representa una fase global en la evolución del sistema.

3.9.5. Régimen dispersivo

Finalmente, aplicamos la transformación $U = \exp[\sum_i \frac{g_i}{\Delta_i} (a^\dagger \sigma_{-i} - a \sigma_{+i})]$, donde $\Delta_i = \omega_{qi} - \omega_c$ y realizamos la aproximación de segundo grado sobre los términos $\frac{g_i}{\Delta_i} \ll 1$.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= U^\dagger \hat{H}_{old} U \\ \hat{H} &\approx \tilde{\Delta}_c a^\dagger a + \frac{1}{2} \sum_i \tilde{\Delta}_{qi} \sigma_{zi} + \sum_i (\Omega_i \sigma_{+i} + \Omega_i^* \sigma_{-i}) \\ &\quad + \sum_{i \neq j} \frac{g_i g_j}{2 \Delta_i} (\sigma_{-i} \sigma_{+j} + \sigma_{+i} \sigma_{-j})\end{aligned}$$

$$\tilde{\Delta}_c = (\omega_c + \sum_i \chi_i \sigma_{zi}) - \omega_d \quad \tilde{\Delta}_{qi} = (\omega_{qi} + \chi_i) - \omega_d \quad \chi_i = \frac{g_i^2}{\Delta_i}$$

3.9.6. Rotaciones X-Y

Tomando $\Omega(t) = \Omega^x(t) \cos(\omega_d t) + \Omega^y \sin(\omega_d t)$, donde ω_d es igual a la frecuencia de resonancia de uno de los qubits logramos rotaciones sobre los ejes X e Y. Las amplitudes de estas rotaciones vienen dadas por $\int_0^{t_0} \Omega^x(t) dt$ y $\int_0^{t_0} \Omega^y(t) dt$, respectivamente, donde t_0 es la duración del pulso.

$$\hat{H} \approx \tilde{\Delta}_c a^\dagger a + \frac{1}{2} \tilde{\Delta}_q \sigma_z + \frac{1}{2} (\Omega^x(t) \sigma_x + \Omega^y(t) \sigma_y)$$

3.9.7. Compuerta de entrelazamiento

Ejemplo con sólo dos qubits

$$\hat{H} \approx \frac{1}{2} \tilde{\Delta}_{q1} \sigma_{z1} + \frac{1}{2} \tilde{\Delta}_{q2} \sigma_{z2} + \frac{g_1 g_2 (\Delta_1 + \Delta_2)}{2 \Delta_1 \Delta_2} (\sigma_{-1} \sigma_{+2} + \sigma_{+1} \sigma_{-2})$$

Variando la frecuencia de resonancia de los qubit, se puede variar el acoplamiento entre estos.

3.9.8. Compuertas compuestas

Con los transmones se pueden realizar rotaciones X-Y y la compuerta iSWAP. Sin embargo, los algoritmos no se escriben en función de sólo estas compuertas, también se necesitan H, CNOT, entre otras. Entonces, debemos construir estas otras compuertas en función de Rx, Ry e iSWAP. Esto es posible, ya que con secuencias de rotaciones en X e Y se puede realizar cualquier compuerta de un sólo qubit, ya que estas consisten de rotaciones en la esfera de Bloch y con rotaciones sobre dos ejes ortogonales se pueden lograr rotaciones sobre cualquier eje en la esfera. Luego, con un set universal de compuertas de un sólo qubit y una compuerta de entrelazamiento, se tiene un conjunto universal de compuertas cuánticas.

Las otras compuertas que necesitaremos, se construyen de la siguiente manera:

Bibliografía

- [1] Rudolf Gross and Achim Marx. Applied superconductivity: Josephson effect and superconducting electronics. *Walther-Meißner-Institut*, 2005.
- [2] G. Wendin. Quantum information processing with superconducting circuits: a review. *IOP Science*, 2017.
- [3] Adriano Barenco, Charles H. Bennet, Richard Cleve, David P. DiVincenzo, Norman Margolus, Peter Shor, Tycho Sleator, Jhon A. Smolin, and Harald Weinfurter. Elementary gates for quantum computation. *Physical Review A*, 1995.