



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA**

**CORRELACIONES CUÁNTICAS TIPO DISCORDIA EN EL
MECANISMO DE LOS PARES RADICALES PARA LA
MAGNETORRECEPCION EN LAS AVES**

**TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)**

Presenta:
VICTOR OSVALDO ONOFRE GONZALEZ

**TUTOR PRINCIPAL:
DR. FERNANDO ROJAS IÑIGUEZ**

**MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:
DR. JESÚS ALBERTO MAYTORENA CORDOBA
DR. ERNESTO COTA ARAIZA**

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA, ABRIL 2021

Correlaciones cuánticas tipo discordia en el mecanismo de los pares radicales para la magnetorrecepción en las aves

Victor Onofre

Resumen

El modelo de los pares radicales para la magnetorrecepción propone que el criptocromo, una proteína que se encuentra en las retinas de las aves, puede ser el magnetosensor que detecta la dirección de los campos magnéticos a través de cambios en los estados de espín de sus electrones. Las reacciones dentro de la proteína criptocromo al recibir un fotón generan un par de radicales, los cuales pueden estar en un estado singlete o triplete. El par de radicales oscila entre estos dos estados, y la probabilidad de encontrarlos en un estado u otro está influenciada por la dirección del campo magnético terrestre. El rendimiento de estos estados (singlete o triplete) influye en las señales neuronales de la retina del ave, proporcionando la base para la magnetorrecepción.

En esta investigación se estudia las correlaciones cuánticas en el mecanismo de los pares radicales, para esto se trabajo con cuantificadores tipo discordia.

La discordia cuántica entrópica es el cuantificador de correlaciones cuánticas más utilizado, se define como la diferencia entre las correlaciones totales con las correlaciones clásicas de un sistema. Las expresiones analíticas de discordia cuántica se han encontrado solo para algunos tipos especiales de estados y la situación se vuelve más complicada para los estados cuánticos generales. Esto se debe al procedimiento de optimización para la entropía condicional sobre todas las mediciones locales generalizadas que es difícil de realizar.

Estas dificultades llevaron a la propuesta del concepto de incertidumbre cuántica local(*LQU*), utilizando la información de Skew, y la información cuántica de fisher optimizada (\mathcal{Q}) como una medida de correlaciones cuánticas similar a la discordia, asociada a mediciones locales. Esta medida satisface los requisitos completos de una medida de correlaciones cuánticas. \mathcal{Q} y *LQU* son un cuantificador tipo discordia más general que las técnicas basadas en entrelazamiento. Además de que son más sencillas de calcular porque el proceso de minimización que en la discordia es muy complicado se convierte en encontrar el máximo eigenvalor de la matriz W de 3×3 .

En la primera etapa del trabajo se investigó la dependencia del ángulo del campo magnético terrestre con el rendimiento del singlete, siendo consistente con los distintos estudios sobre el mecanismo de los pares radicales. En la segunda etapa se calculó \mathcal{Q} y *LQU* en función del ángulo del campo magnético terrestre, encontrando una dependencia similar a la del rendimiento del singlete. Finalmente se obtuvo la eficiencia, medida en que las correlaciones cuánticas se utilizan para una tarea, y eficiencia acumulada, cantidad del recurso cuántico que el sistema ha consumido después de un tiempo t , de \mathcal{Q} y *LQU* en función del tiempo y el ángulo del campo magnético terrestre.

Índice general

1. Introducción	8
1.1. Efectos cuánticos no triviales en sistemas biológicos	9
1.1.1. Fotosíntesis	9
1.1.2. Enzimas	10
1.1.3. Olfato	11
1.1.4. Magnetorrecepción en las aves	13
1.2. Objetivo de investigación	14
1.2.1. Objetivo general	16
1.2.2. Objetivos específicos	16
2. Conceptos básicos	17
2.1. Matriz de densidad	17
2.2. Sistemas compuestos	18
2.3. Coherencia cuántica	20
2.4. Mediciones	22
2.4.1. Mediciones selectivas y no-selectivas	23
2.5. Sistemas cuánticos abiertos	25
2.5.1. Derivación de la ecuación maestra	26
3. Información y correlaciones cuánticas	28
3.1. Entrelazamiento	28
3.2. Estados clásicamente correlacionados	29
3.3. Discordia cuántica	30
3.4. Propiedades de una medición de correlaciones cuánticas	34
3.5. Información de Skew	36
3.6. Información cuántica de Fisher	36
3.7. Medición de correlaciones cuánticas: Incertidumbre cuántica local	37
3.7.1. Información de Skew como medida de correlaciones cuánticas (no-clasicidad)	39
3.7.2. Información cuántica de Fisher como medida de las correlaciones cuánticas (no-clasicidad)	40
3.8. Ejemplo de medición de correlaciones cuánticas: Estado de Werner	41

4. Magnetorrecepción en las aves	43
4.1. Mecanismo de los pares radicales	45
5. Modelo del mecanismo de pares radicales para la magnetorrecepción en las aves	47
5.1. Campo magnético	48
5.2. Hamiltoniano	48
5.3. Mecanismo de pares radicales en sistemas abiertos	52
6. Resultados y discusión	55
6.1. Poblaciones y rendimiento de singlete	55
6.2. Información cuántica de Fisher y Skew como medida de las correlaciones cuánticas del mecanismo de los pares radicales	57
6.3. Eficiencia acumulada de las correlaciones cuánticas del mecanismo de los pares radicales	66
7. Conclusiones	72
A. Derivación alterna de la ecuación maestra	75
B. Derivación de la forma matricial del Hamiltoniano	79
C. Deducción de la información cuántica de fisher y Skew a partir de la información de Fisher clásica	83
D. Minimización para obtener la incertidumbre cuántica local (LQU)	88
Referencias	90

Índice de figuras

1.1.	Línea del tiempo de momentos destacados en el desarrollo de la biología cuántica. Basada y modificada del artículo "The origins of quantum biology" [32].	8
1.2.	(Izquierda) Método clásico de la fotosíntesis. (Derecha) Método cuántico de la fotosíntesis. Ilustraciones de Lucy Reading-Ikkanda del artículo [35]	10
1.3.	a) El enfoque clásico para modelar la catálisis por enzimas ha sido visualizar una barrera energética que debe superarse para pasar de los reactivos a los productos. b) El efecto túnel de una onda a través de una barrera de energía potencial. La amplitud decae dentro de la barrera, porque la barrera resiste. ^{el} paso de la onda. Si la amplitud de la onda no ha llegado a cero en el lado más alejado de la barrera, dejará de decaer y reanudará la oscilación que tenía al entrar en la barrera (pero con menor amplitud). Ilustraciones de [29]	11
1.4.	(Izquierda) Mecanismo del olfato (Derecha) Un esquema que ilustra el posible papel de los efectos cuánticos en el olfato. En el pasado se había propuesto que el olfato dependía de la forma y el tamaño de las moléculas olfativas que se ajustan a un receptor específico, los experimentos con moscas de fruta han indicado que la sustitución de hidrógeno por deuterio da como resultado un cambio de olor a pesar de que tienen la misma forma. Esto sugiere que la frecuencia de vibración de cada molécula podría desempeñar un papel en la detección de olores. Ilustraciones de [20] y [31] . .	12
2.1.	Experimento típico de la doble rendija. Los electrones se envían a través de la doble rendija, lo que conduce al patrón <i>a</i> o <i>b</i> en la pantalla de detección. Si se puede saber a través de qué rendija pasó un electrón, no existe coherencia de trayectoria y la pantalla de detección muestra un patrón clásico (<i>b</i>). Sin embargo, si no conocemos información sobre el camino del electrón, estos pasan a través de ambas ranuras simultáneamente. Esta coherencia del camino conduce al patrón de interferencia típico (<i>a</i>). Con coherencia, los electrones pueden llegar a posiciones en la pantalla del detector que están clásicamente prohibidas.	21
2.2.	Medición selectiva [45]	25

3.1.	En un entorno de comunicación cuántica estándar Alice y Bob, pueden realizar cualquier medición generalizada que esté localizada en su laboratorio y comunicarse de forma clásica. La pared de ladrillos indica que no se pueden intercambiar partículas cuánticas de manera coherente entre Alice y Bob. Este conjunto de operaciones se conoce generalmente como LOCC. Ilustración de [39]	29
3.2.	El diagrama de Venn muestra la entropía conjunta $H(X, Y)$, las entropías marginales $H(X)$ y $H(Y)$, entropías condicionales $H(X Y)$ y $H(Y X)$ y la información mutua $J(X : Y) = I(X : Y)$ para una distribución de probabilidad clásica para variables aleatorias X y Y .	32
3.3.	Las correlaciones cuánticas desencadenan la incertidumbre cuántica local. Consideremos un estado bipartito ρ . Un observador en el subsistema A está equipado con un medidor cuántico, un dispositivo de medición cuya barra de error muestra solo la incertidumbre cuántica.(a) Si ρ no está correlacionado o contiene solo correlaciones clásicas (sombra gris), es decir, ρ tiene la forma $\rho_{AB}^{cl-cu} = \sum_i p_i(i\rangle_A \langle i _A) \otimes \rho_B^{(I)}$, el observador puede medir al menos un observable en A sin ninguna incertidumbre cuántica intrínseca. (b) Si ρ contiene correlaciones cuánticas (sombra amarilla), se cuantifica por entrelazamiento para estados puros y discordia cuántica en estados en general, cualquier medida local en A se ve afectada por la incertidumbre cuántica. La incertidumbre cuántica mínima asociada a una sola medición en el subsistema A se puede utilizar para cuantificar la discordia en el estado ρ , como lo percibe el observador en A . Ilustración de [13].	38
3.4.	Medida de correlaciones cuánticas del estado de Werner utilizando $\mathcal{Q}(\rho)$, $LQU(\rho)$ y la concurrencia como medida de entrelazamiento.	42
4.1.	Robin Europeo, primera ave donde se detectó experimentalmente la existencia de la magnetorrecepción. Foto de Jan Meeus en Unsplash.	43
4.2.	Los embudos de Emlen se han utilizado para estudiar cómo las aves migratorias pueden orientarse con el campo magnético terrestre. En el diseño original, un campo magnético es activado a cierto ángulo del embudo. La actividad de las aves se registra como marcas de garras en un papel colocado en las paredes inclinadas de la jaula. Las versiones modernizadas del embudo Emlen son más cuantitativas, ya que utilizan sensores de movimiento que envían datos a una computadora. Ilustración de Barbara Aulicino. Foto de Jonathan Blair/National Geographic Creative.	44
4.3.	Experimentos han demostrado que las aves tienen una brújula de inclinación, lo que significa que miden el ángulo entre las líneas del campo magnético y la superficie, por lo tanto, las aves pueden detectar el polo y el ecuador, no entre el norte y el sur como lo haría una brújula de polaridad.	45
4.4.	(Izquierda) Molécula de metano que contiene 10 electrones. (Derecha) Creación de par de radicales. Un átomo de hidrógeno es separado de la molécula de metano, el resultado es un molécula de metano con 9 electrones (un metano radical) y un átomo de hidrógeno con 1 electrón (un hidrógeno radical)	45

4.5. Analogía del mecanismo de los pares radicales. Ilustración de [18].	46
5.1. Diagrama del mecanismo de los pares radicales para la magnetorrecepción. Ilustración de Lucy Reading-Ikkanda del artículo [35]	47
5.2. (Izquierda) Un par radical acoplado con espines nucleares efectivos (flechas verdes), en un campo magnético externo, \vec{B} (flechas azules). (Derecha) Modelo de ojo utilizado para el cálculo de patrones de modulación visual. Los rayos 1 y 2 ingresan a través de un agujero infinitesimal y se proyectan sobre la retina esférica. Se supone que las proteínas receptoras (Criptocromos) están orientadas de manera normal a la superficie de la retina (direcciones z_1 y z_2), formando ángulos diferentes con la dirección del vector de campo magnético.	49
5.3. Diagrama del mecanismo de los pares radicales. Un fotón excita un electrón y lo transfiere de un donador a un aceptor, un estado singlete $ S\rangle$ es generado. La componente vertical del acoplamiento hiperfino A_z induce la interconversión entre $ S\rangle$ y $ T_0\rangle$ y las componentes horizontales del acoplamiento A_x y A_y inducen las transiciones entre $ S\rangle$ y $ T_{\pm}\rangle$. El campo magnético externo B_x y las componentes horizontales A_x y A_y llevan a las transiciones entre $ T_0\rangle$ y $ T_{\pm}\rangle$. Ilustración de [61]	50
6.1. Evolución en el tiempo de las poblaciones de los estados dado un ángulo (θ) del campo magnético terrestre , a) $\theta = 0$, b) $\theta = \pi/8$, c) $\theta = \pi/4$, d) $\theta = \pi/2$. Los estados están dados por la base del sistema (Eq. 5.18)	56
6.2. El rendimiento de singlete en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre para distintas k (Constantes de disipación). a) $k = 0,5 \times 10^4 s^{-1}$ b) $k = 10^4 s^{-1}$, esta es la constante equivalente al tiempo de vida experimental de los pares radicales, que es equivalente a el tiempo $t = 8,8 \approx 100 \mu s$ c) $k = 1,5 \times 10^4 s^{-1}$ d) $k = 10^5 s^{-1}$.	57
6.3. (a) $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 4 ángulos distintos, $\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$	61
6.4. (a) Eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 4 ángulos distintos, $\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$	62
6.5. (a) Eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_2 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 4 ángulos distintos, $\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$	62
6.6. (a) Eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_3 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 4 ángulos distintos, $\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$	63
6.7. (a) \mathcal{Q} y (b) LQU en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 7 tiempos distintos.	64
6.8. (a) \mathcal{Q} y (b) LQU en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre para la familia de correlaciones cuánticas f_2 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 7 tiempos distintos.	64

6.9. (a) \mathcal{Q} y (b) LQU en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre para la familia de correlaciones cuánticas f_3 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 7 tiempos distintos.	65
6.10. Evolución en el tiempo de la fidelidad entre los estados $\rho_\theta(t)$ y ρ_0 dado 4 ángulos del campo magnético terrestre. (a) $\pi/8$, (b) $\pi/4$, (c) $3\pi/8$, (d) $\pi/2$	66
6.11. (a) Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$	67
6.12. (a) Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_2 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$	67
6.13. (a) Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_3 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$	68
6.14. (a) $(E_{acumulada}^{\mathcal{Q}}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y (b) $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$	69
6.15. (a) $(E_{acumulada}^{\mathcal{Q}}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y (b) $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_2 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$	69
6.16. (a) $(E_{acumulada}^{\mathcal{Q}}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y (b) $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_3 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$	70
6.17. Varianza de la energía del sistema para el t_{max} de \mathcal{Q} de la familia de correlaciones (a) f_1 , (b) f_2 y (c) f_3	71
A.1. Diagrama de un sistema abierto	75

Capítulo 1

Introducción

La biología describe un mundo macroscópico de seres vivos rodeados de un ambiente cálido y extremadamente incontrolable. En cambio, los efectos cuánticos se presentan en ambientes controlados, donde hay temperaturas bajas y el ruido del ambiente es mínimo. De estos hechos se podría deducir que las propiedades intrínsecas de los seres vivos son incompatibles con los efectos cuánticos y por lo tanto irrelevantes para su estudio. Esta deducción es errónea, pero fue la predominante durante mucho tiempo.

En la década de 1930 nuevas áreas y problemas en la biología empezaron a surgir, entre ellas la microbiología, genética y la teoría de los cromosomas. Se descubrió que los genes estaban involucrados en transmitir información hereditaria pero su funcionamiento seguía siendo un misterio; al mismo tiempo la mecánica cuántica estaba siendo establecida abriendo la puertas a nuevas propuestas para explicar estos fenómenos desde conceptos cuánticos.

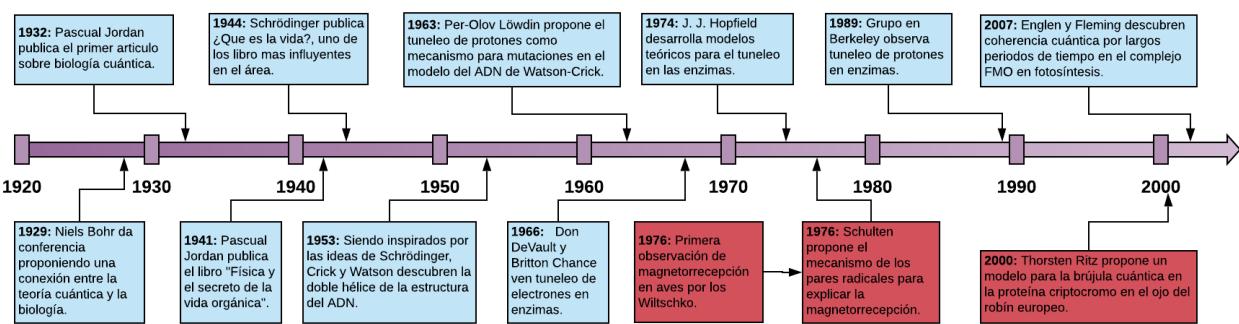


Figura 1.1: Línea del tiempo de momentos destacados en el desarrollo de la biología cuántica. Basada y modificada del artículo "The origins of quantum biology" [32].

Pascual Jordan que fue uno de los autores del artículo de 1925 "Three-man paper", junto a Max Born y Werner Heisenberg en donde introducían al mundo la mecánica de matrices, sistema matemático en donde se estableció la mecánica cuántica. Inspirado por el libro de Ludwig von Bertalanffy, 'Critical Theory of Morphogenesis', que escribió en 1928, donde explicaba la necesidad de nuevos principios para describir a los seres vivos. Trabajó con Niels Bohr en el que es considerado el 1er artículo sobre biología cuántica en 1932 "Quantum mechanics and the fundamental problems

of biology and psychology". En este artículo, se propone que el indeterminismo de la mecánica cuántica es amplificado en los seres vivos y utilizado a su favor, incluso propuso la idea de que este indeterminismo de la mecánica cuántica está ligado a la psicología del ser humano (teoría que ha visto un renacer desde 1990 [22]). Las ideas de Jordan fueron revolucionarias pero opacadas por su fanatismo hacia la filosofía Nazi, donde intentó ligarlas con el fascismo, desacreditando mucho de su trabajos.

Para inicios de los 1940, Erwin Schrödinger mostró un gran interés por el problema de los genes culminando en su libro, "What is life?" (¿Qué es la vida?) donde propone que ya que el tamaño de los genes es demasiado pequeño, las leyes clásicas no los pueden regir y la mecánica cuántica debe de tener un mayor rol de lo que se pensaba. Muchos otros científicos han tenido ideas similares pero después de la 2da guerra mundial, con el inicio de la era atómica y la guerra fría, la investigación en la física se fue enfocando en problemas más prácticos.

El libro de Schrödinger y sus propuestas tuvieron un gran efecto en la investigación de los genes en 1950-60, pero la unión de la biología con la cuántica seguía sin lograrse. Esto no evitó que mentes pioneras inspirados por trabajos hechos antes de la 2da guerra iniciaran sus propias investigaciones. Culminando en resultados experimentales realmente sorprendentes presentados en las últimas décadas [24] (Ver tabla 1.1), donde se ha encontrado que los efectos del ambiente y temperaturas pueden coexistir con los fenómenos cuánticos e incluso amplificarlos para el uso de sistemas biológicos. Dando origen al área de la biológica cuántica.

La biología cuántica estudia los efectos no triviales de la mecánica cuántica en sistemas biológicos. Dado que cada reacción química depende de la mecánica cuántica y las reacciones químicas son procesos básicos en los sistemas biológicos, se puede decir que todos los fenómenos biológicos están gobernados por la cuántica, pero esta deducción es trivial. De igual forma se puede llegar a la misma conclusión en otras áreas de estudio, la mecánica cuántica estudia los fundamentos de la materia por lo que es la base de todo lo que conocemos y conoceremos. Gracias al exponencial avance tecnológico en las últimas décadas que nos ha permitido estudiar sistemas biológicos a escalas más pequeñas, una separación entre efectos triviales y no triviales de la cuántica en la biología ha estado surgiendo. Cuando los efectos cuánticos se vuelven clave para determinado proceso biológico, en otras palabras, si el efecto cuántico es eliminado del proceso, éste deja de existir o su eficiencia disminuye drásticamente, su involucramiento en el proceso es no-trivial y hemos entrado al área de la biología cuántica.

En la actualidad hay varios fenómenos biológicos donde se han detectado efectos cuánticos no-triviales, a continuación veremos los principales.

1.1. Efectos cuánticos no triviales en sistemas biológicos

1.1.1. Fotosíntesis

La fotosíntesis es la conversión de energía solar a energía química, es la base de la vida en la tierra. La eficiencia de esta conversión de energía siempre ha sido un tema de estudio relevante no solo por su importancia en la naturaleza pero también por sus posibles usos en tecnología actual. El

sistema de la fotosíntesis funciona utilizando una ‘antena’ para capturar energía solar, lo que inicia el proceso creando un exciton (la interacción entre un electrón y el hueco que deja en el sistema al ser excitado), que viaja al centro de reacción que culmina en la producción de ATP.

El ATP es un depósito de energía química potencial y actúa como un intermediario común en el metabolismo, vinculando las reacciones que requieren energía y las que producen energía. Para una máxima eficiencia todos los fotones absorbidos en forma de exciton tienen que llegar al centro de reacción, aquí es donde se presenta un gran problema, se sabe que casi todos los fotones (casi el 100 %) que se absorben se transfieren con éxito al centro de reacción, aunque las excitones intermedios son de muy corta duración (1 ns). Clásicamente se creía que la ruta del excitón al centro de reacción era aleatoria, como hay muchos caminos para llegar al centro de reacción y el exciton desconoce cual es el mas rápido (eficiente), pero experimentos recientes han demostrado la presencia de efectos cuánticos en el proceso.

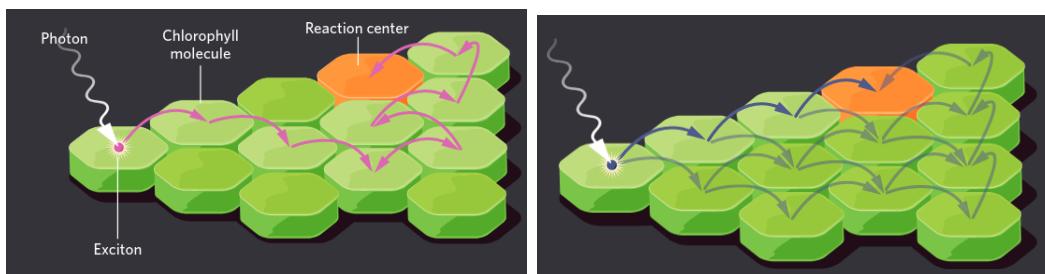


Figura 1.2: (Izquierda) Método clásico de la fotosíntesis. (Derecha) Método cuántico de la fotosíntesis. Ilustraciones de [Lucy Reading-Ikkanda](#) del artículo [35]

Recientemente se ha descubierto la existencia de coherencia cuántica en este proceso, la habilidad de simultáneamente intentar todos los caminos hacia el centro de reacción y tomar solo la ruta más eficiente. Dado que la naturaleza de la molécula fotosintética a menudo es sobrevivir en condiciones hostiles (bajos nivel de luz), es de vital importancia recolectar tantos fotones en el centro de reacción como sea posible. Una posibilidad es que la coherencia exhibidas por los fotones absorbidos puedan permitir un ‘random walk’ cuántico, llevando la energía de la manera más eficiente a donde debe estar. Este proceso es la transferencia de energía de excitación (EET, por sus siglas en inglés), en lugar de la transferencia de energía.

1.1.2. Enzimas

Las enzimas son moléculas (típicamente proteínas) que aceleran significativamente la velocidad de la mayoría de las reacciones químicas que ocurren dentro de las células. Han creado y deshecho cada biomolécula dentro de cada célula viva que vive o ha vivido alguna vez[20].

El enfoque clásico para modelar la catálisis por enzimas ha sido visualizar una barrera energética que debe superarse para pasar de los reactivos a los productos. Para que prosiga la reacción, los reactivos deben pasar la barrera de energía potencial hacia el lado del producto a través del estado de transición en la parte superior de la barrera de energía, este estado de transición es inestable.

Cuanto mayor sea la altura de esta barrera de energía, más lenta será la velocidad de reacción. Las enzimas reducen la energía necesaria para atravesar esta barrera, aumentando así la velocidad

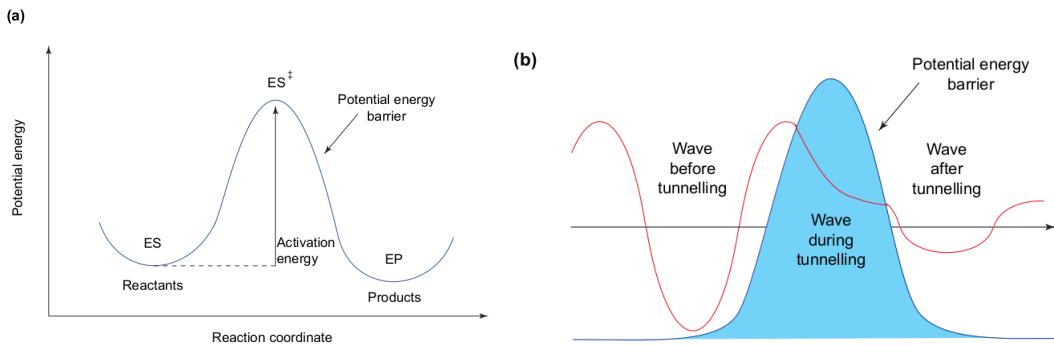


Figura 1.3: a) El enfoque clásico para modelar la catálisis por enzimas ha sido visualizar una barrera energética que debe superarse para pasar de los reactivos a los productos. b) El efecto túnel de una onda a través de una barrera de energía potencial. La amplitud decae dentro de la barrera, porque la barrera resiste el paso de la onda. Si la amplitud de la onda no ha llegado a cero en el lado más alejado de la barrera, dejará de decaer y reanudará la oscilación que tenía al entrar en la barrera (pero con menor amplitud). Ilustraciones de [29]

de reacción. Este tratamiento clásico sobre la barrera, conocido como teoría del estado de transición, se ha utilizado para representar reacciones catalizadas por enzimas durante los últimos 50 años. Sin embargo, existe un misterio: la eficiencia (o velocidad) con el que se produce esta transición (es decir, puede haber una diferencia de 10 a 25 veces en la velocidad, observada experimentalmente, cuando se comparan las moléculas que reaccionan en solución frente a entornos enzimáticos [2]) no puede ser explicado únicamente por la mecánica clásica o cualquier teoría del estado de transición puramente clásica (TST).

Experimentos clave en 1966 por DeVault and Chance mostraron por primera vez que un efecto túnel estaba presente en las enzimas. Los experimentos mostraron que, como se esperaba, la oxidación a altas temperaturas depende de la temperatura, las velocidades son más rápidas a temperaturas más altas, lo que indica que hay una barrera de activación que superar. Pero sorprendentemente, a temperaturas más bajas (4-100 K) se pierde la dependencia de la temperatura y la reacción aún se produce sin la energía necesaria para superar la barrera de activación del estado de transición. Esto implica que sin el requisito de energía cinética para superar la barrera, los electrones deben utilizar el efecto túnel. El uso del efecto túnel es una forma de atravesar el cruce de barreras, evitando el problema de la altura de la barrera y por lo tanto, permitiendo y mejorando una velocidad.

Este hallazgo demostró la incapacidad de la teoría del estado de transición en su régimen clásico para explicar la independencia de la temperatura a baja temperatura y las altas tasas de transferencia de electrones. Si bien aumentar la temperatura aumenta la velocidad de reacción, la teoría clásica aún no explica las velocidades más rápidas.

1.1.3. Olfato

En el olfato no se comprende completamente cómo una molécula olfativa inicia la respuesta del proceso mediante el cual detectamos el olor. Sabemos que sea activa una proteína olfativa, un receptor acoplado a una proteína G (GPCR) [5], pero el mecanismo físico por el cual lo hace aún no

ha sido completamente determinado. Una teoría es que el olor se ajusta al receptor como un 'candado y llave', en la reacción que ocurre sólo si estos contactos son hecho como una llave (molécula olfativa) que encaja en una cerradura (receptor en la nariz). Sin embargo, se ha demostrado que esta teoría por sí sola no es suficiente para explicar la respuesta olfativa[49].

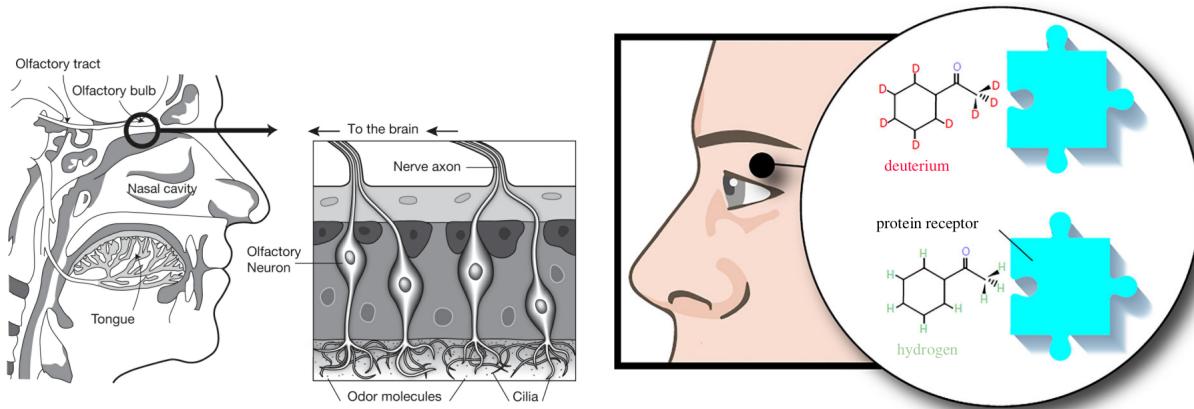


Figura 1.4: (Izquierda) Mecanismo del olfato (Derecha) Un esquema que ilustra el posible papel de los efectos cuánticos en el olfato. En el pasado se había propuesto que el olfato dependía de la forma y el tamaño de las moléculas olfativas que se ajustan a un receptor específico, los experimentos con moscas de fruta han indicado que la sustitución de hidrógeno por deuterio da como resultado un cambio de olor a pesar de que tienen la misma forma. Esto sugiere que la frecuencia de vibración de cada molécula podría desempeñar un papel en la detección de olores. Ilustraciones de [20] y [31]

Por un lado, moléculas de formas muy diversas pueden activar el mismo receptor y, a la inversa, algunas moléculas de la misma forma activan varios receptores. Hay alrededor de 390 tipos de receptores olfativos humanos funcionales [5], todos los cuales están de alguna manera 'sintonizados' para responder a los diferentes estímulos moleculares ofrecidos por los olores con el fin de abarcar un espacio olfativo de potencialmente miles de olores[15]. Y lo hacen en un proceso combinatorio, muchos receptores activados constituyen un 'código' que determina un carácter olfativo [24]. Los receptores hacen esto de manera constante (no hay subjetividad en el nivel del receptor) y se demuestra que son sensibles a 'algo' de las moléculas olfativas (en aproximadamente 390 formas).

Fue propuesto por Dyson y luego por Wright [30, 60] que el 'algo' descrito anteriormente podría ser las vibraciones moleculares de las moléculas olfativas, el receptor está de alguna manera transmitiendo las fluctuaciones térmicas de la molécula. Turín [53] propuso que el receptor está detectando las frecuencias de vibración de las moléculas olfativas, una propiedad intrínsecamente cuántica. De acuerdo con esta teoría, un electrón hará efecto túnel desde un donante (molécula olfativa) hasta un sitio aceptor (receptor en la nariz) solo cuando la diferencia de energía entre estos sitios corresponda con la energía de vibración de la molécula olfativa. En apoyo de la teoría, experimentos con moscas de fruta han indicado que la forma y el tamaño de las moléculas olfativas son insuficientes para su detección, es necesario la teoría de vibraciones.

Sistema Biológico	Avances en su investigación	Artículos
Fotosíntesis	Coherencia cuántica a Temperatura criogénica Coherencia cuántica a Temperatura ambiente (FMO) Coherencia cuántica a Temperatura ambiente (Alga) Transporte asistido por el ambiente Entrelazamiento, Legget-Gargg Modelos alternativos	[9, 25] [37] [8] [38, 33, 19, 26] [46, 54] [52, 4]
Magnetorrecepción	Propuestas iniciales y evidencia Modelos matemáticos Evidencia indirecta (dependencia de luz, campo magnético) Experimentos en pares radicales Mariposas monarcas, moscas y moluscos	[47, 57] [42] [57, 58, 42, 51] [59, 44, 28] [11]
Olfato	El tuneleo de electrones es el método por el cual las vibraciones son detectadas por los receptores olfativos dentro de la nariz.	[53] [30, 60]
Catalizador de Enzimas	El efecto túnel es utilizado en las enzimas como catalizador	[34, 1]

Cuadro 1.1: Avances en la investigación de sistemas biológicos y sus efectos cuánticos no-triviales. Basada y modificada del artículo ‘Functional quantum biology in photosynthesis and magnetoreception’ [23].

1.1.4. Magnetorrecepción en las aves

El cuarto de los principales sistemas biológicos donde se han detectado efectos cuánticos no-triviales, y el tema de nuestra investigación, es la **magnetorrecepción en las aves**. En la década de 1960 se descubrió las aves pueden detectar el campo magnético de la Tierra para obtener información direccional [57] , capacidad llamada magnetorrecepción.

Los experimentos, realizados por Wiltschko, Ritz and Bianco [55, 56, 43, 3] utilizando embudos de Emlen en aves migratorias revelaron tres características de la magnetorrecepción en las aves: funciona solo en una ventana funcional alrededor de la intensidad del campo magnético ambiental, pero puede adaptarse a otras intensidades, es una ”brújula de inclinación”, no basada en la polaridad del campo magnético, sino en el curso axial de las líneas de campo y requiere luz de onda corta de Ultravioleta a 565 nm Verde. Fue hasta finales de los 70 que Schulten [48] propuso una explicación: el modelo de los pares radicales.

El modelo de los pares radicales para la magnetorrecepción propone que el criptocromo, una proteína que se encuentra en las retinas de las aves y otros animales, puede ser el magnetosensor que detecta la dirección de los campos magnéticos a través de cambios en los estados de espín de sus electrones. Las reacciones dentro de la proteína criptocromo al recibir un fotón generan un par de radicales (Un radical es un átomo, molécula o ion que tiene electrones de valencia impares), los cuales pueden estar en un estado singlete o triplete. El par de radicales oscila entre estos dos estados, y la probabilidad de encontrarlos en un estado u otro está influenciada por la dirección de los campos magnéticos externos. El rendimiento de estos estados (singlete o triplet) influye en las señales neurales de la retina del ave, proporcionando la base para la magnetorrecepción.

1.2. Objetivo de investigación

Investigaciones recientes [10] en el mecanismo de los pares radicales para la magnetorrecepción en las aves utilizando teoría de información cuántica han logrado, a través de simulaciones numéricas, replicar los resultados experimentales. Además de demostrar que la sensibilidad para detectar el campo magnético está directamente relacionado al rendimiento de singlete. Encontrando que la amplitud y fase (y por lo tanto el entrelazamiento) están realmente protegidas dentro del mecanismo en el ave. Las escalas de tiempo son de al menos decenas de microsegundos. Aún no queda claro por qué se produce una protección tan notable.

Se han encontrado resultados [40] sobre el estudio de la dinámica de espín del modelo de pares radicales y los distintos efectos de la decoherencia debido al núcleo y el ambiente, incluido los efectos de interacciones hiperfinas y Zeeman en el sistema. Han encontrado que la brújula aviar debe funcionar en el régimen de grandes fuerzas de interacción hiperfinas y el efecto de la decoherencia por el ambiente, a diferencia de la debida al núcleo, es homogeneizar el rendimiento de singlete, por lo tanto, interrumpir la detección del campo magnético terrestre.

También se ha investigado [2] la identificación de un régimen de parámetros donde la presencia del medio ambiente mejora el rendimiento de singlete. Una mejora similar causada por el medio ambiente también se encuentra en estudios de transferencia de energía durante la fotosíntesis. Estos sugieren que la naturaleza podría estar optimizando el desempeño de algunos procesos biológicos utilizando el ruido inevitable presente en el medio ambiente.

Las correlaciones cuánticas presentes en un sistema son elementos intrínsecos de su naturaleza no clásica. Las mediciones de correlaciones cuánticas más comunes están basados en el entrelazamiento, pero este es un recurso complicado de manejar para su implementación por la necesidad de manejarla en sistemas altamente controlados. La discordia cuántica es otro cuantificador de correlaciones cuánticas que incluye al entrelazamiento como un subconjunto y es más robusto que el entrelazamiento contra influencias externas [7]. La discordia también se puede utilizar como un recurso útil para llevar a cabo tareas que son clásicamente imposibles. Las expresiones analíticas de discordia cuántica son complicadas de encontrar para los estados cuánticos generales. Esto se debe al procedimiento de optimización es difícil de realizar. Estas dificultades llevaron a la propuesta de medidores de correlaciones cuánticas tipo discordia más sencillos de calcular.

En la mecánica cuántica el proceso de medición perturba el estado físico del sistema, esto difiere de lo que pasa en el escenario clásico. Por lo que es posible concluir que la perturbación inducidas por una medición en un estado es una buena evidencia de su no-clasicidad. La perturbación inducida por la medición en el sistema cambia las propiedades globales del estado, en particular la cantidad de correlaciones entre los dos subsistemas. La mínima contribución cuántica a la incertidumbre asociada a la medición de sistemas compuestos con observables locales se conoce como incertidumbre local cuántica (*LQU*) [7]. Se ha probado que la LQU cumple los criterios de un cuantificador de correlaciones cuánticas tipo discordia [13]. Más allá de su importancia como cuantificador de correlación cuántica, *LQU* también está profundamente relacionado con la información de Fisher cuántica (*QFI*) en el contexto de la metrología cuántica. Recientemente, el concepto de información de Fisher cuántica local (*Q*) fue introducida por Kim, Sunho, et al. [21] para caracterizar las

correlaciones cuánticas en términos de *QFI*. Este cuantificador de correlaciones cuánticas, se basa en minimizar *QFI* sobre un observable local asociado con uno de los subsistemas.

En la reciente publicación de A. Saloui, et al. [50], se realizó un estudio comparativo entre los cuantificadores de correlaciones cuánticas *LQU* y \mathcal{Q} para el modelo cuántico de Heisenberg *XY*. Se consideran dos situaciones distintas. La primera se refiere al modelo anisotrópico *XY* y la segunda a al modelo isotrópico *XY* sometido a un campo magnético externo. Mostrando que para valores más altos de temperatura, las correlaciones cuánticas se destruyen. Para el modelo *XY* isotrópico de dos qubits con un campo magnético, el aumento del campo magnético mejora la cantidad de correlaciones cuánticas contenidas en el sistema. Además de mostrar resultados que confirman que \mathcal{Q} revela más correlaciones cuánticas que *LQU*.

En el trabajo de He, Zhi, et al [16] ha sido introducido un método alternativo basado en la *LQU* para medir la no Markovianidad para un sistema cuántico abierto. La medida captura las características de la no-markovianidad y tiene una interpretación física: en sistemas bipartitos correlacionados, el proceso no-markoviano (markoviano) de un subsistema considerado abierto corresponde al aumento (disminución) de la incertidumbre cuántica de los observables locales de otro subsistema libre medido.

LQU se ha usado como medida de las correlaciones cuánticas para realizar una estimación cuántica en una configuración interferométrica en el protocolo de estimación de fase [13].

También en el trabajo realizado por M. Chávez-Huerta y F. Rojas [6], *LQU* se ha utilizado como una métrica robusta para caracterizar correlaciones cuánticas en subconjuntos de cromóforos en complejos de captación de luz fotosintéticos. Específicamente en el complejo de pigmento-proteína llamado Fenna-Matthews-Olson (FMO), alojado en el complejo captador de luz de la bacteria de azufre verde. Encontrando que una anomalía tipo Schottky en el calor específico que identifica la disponibilidad de niveles de energía, definiendo la relación entre una magnitud medible y recursos no clásicos.

Recientemente en el trabajo de Guo, Li-Sha, et al. [14] introducen la información de Fisher cuántica (*QFI*), que representa la información máxima sobre la dirección del campo magnético extraída del estado de los pares radicales, para cuantificar la sensibilidad del mecanismo. Encuentrando resultados consistentes con las observaciones experimentales sugiriendo que la *QFI* puede servir como una medida para describir la sensibilidad de la brújula basada en el mecanismo de los pares radicales. Hay que destacar que la *QFI* no es realizada ninguna minimización sobre una observable local, por lo que no es igual a \mathcal{Q} . Esto quiere decir que la *QFI* utilizada no es un cuantificador robusto de las correlaciones cuánticas, es decir, los resultados expresados con esta medida son cualitativos.

Dados estos resultados recientes vemos la necesidad de encontrar una caracterización precisa de las correlaciones cuánticas como recursos cuánticos en el mecanismo de los pares radicales para comprender su relación funcional con la detección del campo magnético. Al igual que para abrir la oportunidad para construir dispositivos cuánticos naturalmente robustos basados en esa mecánica. Utilizar medidores de correlaciones cuánticas tipo-discordia, *LQU* y \mathcal{Q} , es lo mas óptimo dado la naturaleza del sistema, siendo una métrica altamente flexible (nos permite dividir en familias de correlaciones el sistema), robusta y consistente para caracterizar las correlaciones cuánticas [7].

En esta investigación trabajamos con el concepto de incertidumbre cuántica local (LQU), utilizando la información de Skew, y la información cuántica de Fisher optimizada (\mathcal{Q}) como una medida de correlaciones cuánticas similar a la discordia, asociada a mediciones locales. Esta medida satisface los requisitos completos de una medida de correlaciones cuánticas. \mathcal{Q} y LQU son un cuantificador tipo discordia más general que las técnicas basadas en entrelazamiento.

1.2.1. Objetivo general

El **objetivo** general de este trabajo es analizar las correlaciones cuánticas tipo discordia del sistema de pares radicales para la magnetorrecepción utilizando la incertidumbre cuántica local y la información cuántica de Fisher como cuantificadores de las correlaciones cuánticas (LQU y \mathcal{Q}).

1.2.2. Objetivos específicos

- Investigar las poblaciones de los estados en el sistema de los pares radicales y la dependencia del ángulo del campo magnético terrestre con el rendimiento del singlete.
- Analizar \mathcal{Q} y LQU en función del ángulo del campo magnético terrestre para distintas familias de correlaciones cuánticas
- Investigar la eficiencia y eficiencia acumulada de \mathcal{Q} y LQU en función del tiempo y el ángulo del campo magnético terrestre para identificar las asociaciones más fuertes entre los subsistemas.

Capítulo 2

Conceptos básicos

2.1. Matriz de densidad

En la práctica, el estado de un sistema físico expresado con el vector de estado $|\psi\rangle$ no siempre está perfectamente determinado. Por ejemplo, si consideramos un haz de átomos emitidos por una fuente térmica, no conocemos la energía de cada átomo, solo su distribución. En este caso, decimos que nuestra información sobre el sistema está incompleta. Sólo sabemos que el sistema está en un estado aleatorio tomado del ensemble $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_l\rangle\}$, con probabilidades $\{p_1, p_2, \dots, p_l\}$, satisfaciendo la condición de probabilidad unitaria, $\sum_i p_i = 1$. Decimos que tenemos una mezcla estadística (también conocida como estado mixto) de los estados $|\psi_k\rangle$, con pesos estadísticos p_k . En contraste, los estados individuales $|\psi_K\rangle$ se conocen como estados puros.

La mezcla estadística de los estados $|\psi_K\rangle$, con p_k , no debe confundirse con la superposición lineal:

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle, \quad |c_k|^2 = p_k. \quad (2.1)$$

Al contrario, la superposición ponderada aleatoriamente de los estados en $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_l\rangle\}$ debe verse como un mecanismo probabilístico completamente clásico. La probabilidad $p(i)$ de que una medición del observable A obtenga el resultado a_i está dado por:

$$p(i) = \sum_{k=1}^l p_k \langle \psi_k | P_i | \psi_k \rangle, \quad (2.2)$$

donde P_i es el proyector en el subespacio asociado con el eigenvalor a_i de A . Como resultado, el valor esperado de cualquier observable A es:

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^n a_i p(i) = \sum_{k=1}^l p_k \sum_{i=1}^n a_i \langle \psi_k | P_i | \psi_k \rangle = \sum_{k=1}^l p_k \langle \psi_k | A | \psi_k \rangle, \quad (2.3)$$

donde se utilizó la descomposición espectral $A = \sum_n a_n P_n$.

En la ecuación 2.3 las probabilidades aparecen dos veces: (1) en la falta de información inicial sobre el sistema, expresada por los pesos estadísticos p_k ; (2) en el proceso de medición, caracterizado

por las probabilidades $\langle \psi_k | P_i | \psi_k \rangle$ para obtener resultados a_i de la medición del observable A cuando el sistema es descrito por el estado $|\psi_k\rangle$. Estas últimas probabilidades son intrínsecamente cuánticas.

La pregunta ahora es cómo tomar en cuenta la información parcial que tenemos sobre el sistema e incluir simultáneamente en nuestra descripción las leyes de la mecánica cuántica y la teoría clásica de probabilidades. Para este propósito, es muy útil introducir el operador de densidad ρ , definido como

$$\rho \equiv \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (2.4)$$

Dada una base ortonormal $\{|i\rangle\}$, con $i = 1, 2, \dots, n$, la correspondiente matriz, conocida como la matriz de densidad, tiene los elementos

$$\rho_{ij} = \langle i | \rho | j \rangle. \quad (2.5)$$

El valor esperado de cualquier observable A se puede obtener mediante el operador de densidad de la siguiente manera:

$$\langle A \rangle = Tr(\rho A) = \sum_i^n \langle i | \rho A | i \rangle = \sum_k^l \sum_i^n p_k \langle i | |\psi_k\rangle \langle \psi_k| A | i \rangle. \quad (2.6)$$

La igualdad entre la ecuación 2.6 y 2.3 se puede obtener tomando en cuenta la relación de completez $\sum_i |i\rangle \langle i| = I$. La probabilidad $p(i)$ de que una medición del observable A de como resultado a_i en términos de la matriz de densidad es,

$$p(i) = Tr(\rho P_i). \quad (2.7)$$

Por lo tanto, el operador de densidad ρ caracteriza completamente el sistema; a partir de él podemos predecir las probabilidades de los posibles resultados de cualquier experimento realizado en el sistema. El operador de densidad ρ satisface las siguientes propiedades:

- ρ es hermitiana
- ρ tiene traza unitaria $Tr(\rho) = 1$
- ρ es un operador no-negativo, para cualquier vector $|\varphi\rangle$ en el espacio de Hilbert tenemos $\langle \varphi | \rho | \varphi \rangle \geq 0$

2.2. Sistemas compuestos

Consideremos un estado puro de un sistema bipartito. Este estado reside en el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, que es el producto tensorial de los espacios de Hilbert asociados con los subsistemas A y B. Por lo tanto, podemos expresar un estado genérico $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,\alpha} c_{i\alpha} |i\rangle_A |\alpha\rangle_B = \sum_{i,\alpha} c_{i\alpha} |i\rangle_A \otimes |\alpha\rangle_B, \quad \sum_{i,\alpha} |c_{i\alpha}|^2 = 1, \quad (2.8)$$

donde $\{|i\rangle_A\}$ y $\{|\alpha\rangle_B\}$ son bases para \mathcal{H}_A y \mathcal{H}_B , respectivamente. El operador de densidad correspondiente es

$$\rho^{AB} = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{i,\alpha} \sum_{j,\beta} c_{i\alpha} c_{j\beta}^* |i\rangle_A |\alpha\rangle_B \langle i|_A \langle \alpha|_B = \sum_{i,\alpha} \sum_{j,\beta} \rho_{i\alpha;j\beta} |i\rangle_A |\alpha\rangle_B \langle i|_A \langle \alpha|_B, \quad (2.9)$$

con los elementos de matriz de ρ definidos por

$$\rho_{i\alpha;j\beta} \equiv \langle i|_A \langle \alpha|_B \rho |j\rangle_A \langle \beta|_B. \quad (2.10)$$

El sistema completo se describe mediante la matriz de densidad ρ , si deseamos calcular el valor esperado de un operador P^A que actúa solo en el subsistema A. Primero extendemos el operador al espacio entero de Hilbert \mathcal{H} definiendo el operador

$$P^A \equiv P_A \otimes I_B, \quad (2.11)$$

donde I_B es el operador de identidad en \mathcal{H}_2 . Entonces tenemos

$$\begin{aligned} \langle P^A \rangle &= Tr(\rho P^A) = \sum_{k,\gamma} |k\rangle_A \langle \gamma|_B \rho \tilde{A} |k\rangle_A \langle \gamma|_B \\ &= \sum_{k,\gamma} |k\rangle_A \langle \gamma|_B \left(\sum_{i,\alpha} \sum_{j,\beta} \rho_{i\alpha;j\beta} |i\rangle_A |\alpha\rangle_B \langle i|_A \langle \alpha|_B \right) (P_A \otimes I_B) |k\rangle_A \langle \gamma|_B. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Tomando en cuenta las relaciones de ortonormalidad $\langle k| |i\rangle_A = \delta_{ik}$, $\langle \gamma| |\alpha\rangle_B = \delta_{\alpha\gamma}$ y $\langle \beta| |\gamma\rangle_B = \delta_{\beta\gamma}$, podemos remover tres de las seis sumas de la ecuación, obteniendo

$$\langle P^A \rangle = \sum_{i,j,\alpha} \rho_{i\alpha;j\alpha} \langle j|_A P_A |i\rangle_A. \quad (2.13)$$

Ahora nos es útil introducir la matriz de densidad reducida

$$\rho^A \equiv Tr_B(\rho^{AB}), \quad (2.14)$$

donde Tr_B es la traza parcial sobre el subsistema B :

$$\rho^A = Tr_B(\rho^{AB}) \equiv \sum_s p_s |\alpha_s^A\rangle \langle \alpha_s^A|. \quad (2.15)$$

De igual manera para el subsistema A

$$\rho^B \equiv Tr_A(\rho) \equiv \sum_s p_s |\alpha_s^B\rangle \langle \alpha_s^B|. \quad (2.16)$$

Los elementos de matriz de ρ^A en la base $\{|i\rangle_A\}$ están dadas por

$$(\rho^A)_{ij} = \langle i|_A \rho^A |i\rangle_A = \sum_\alpha \rho_{i\alpha;j\alpha}. \quad (2.17)$$

Sustituyendo esta igualdad en la ecuación 2.13, obtenemos

$$\langle A_1 \rangle = \sum_{i,j} \langle i|_1 \rho_1 |j\rangle_1 \langle j|_1 A_1 |i\rangle_1 = \sum_i \langle i|_1 \rho_1 A_1 |i\rangle_1 = Tr(\rho_1 A_1). \quad (2.18)$$

Por lo tanto, es posible calcular el valor esperado de un operador que actúa solo en el subsistema A como si el sistema estuviera aislado y descrito por la matriz de densidad reducida ρ^A . Podemos concluir que ρ^A , obtenido después de la traza parcial sobre el subsistema B, describe el estado del subsistema A.

2.3. Coherencia cuántica

La coherencia cuántica es uno de los conceptos más importantes en la mecánica cuántica y el de mayor relevancia para el estudio de la biología cuántica. Iniciamos su estudio analizando el significado físico de los elementos de la matriz de densidad ρ . Expandiendo un estado puro $|\psi_k\rangle$ sobre una base ortonormal $\{|i\rangle\}$, obtenemos:

$$|\psi_k\rangle = \sum_{i=1}^n c_i^{(k)} |i\rangle. \quad (2.19)$$

Entonces tenemos

$$\rho_{ij} = \sum_{k=1}^l p_k \langle i| |\psi_k\rangle \langle \psi_k| |j\rangle = \sum_{k=1}^n p_k \sum_{l,m=1}^n c_l^k c_m^{(k)*} \langle i| |j\rangle \langle m| |j\rangle = \sum_{k=1}^l p_k c_i^{(k)} c_j^{(k)*}, \quad (2.20)$$

podemos ver que los términos en la diagonal

$$\rho_{ii} = \sum_k p_k |c_i^{(k)}|^2 = Tr(\rho P_i), \quad P_i = |i\rangle \langle i|, \quad (2.21)$$

representan las probabilidad de que el sistema sea dejado en el estado $|i\rangle$ después de medir una observable con eigenestados $\{|i\rangle\}$. Los elementos ρ_{ii} representan la población del estado $|i\rangle$.

Los estados fuera de la diagonal ρ_{ij} representan interferencia entre los estados $|i\rangle$ y $|j\rangle$, esta interferencia es la que definimos como coherencia. Tal interferencia está presente para cualquier estado $|\psi_k\rangle$ de la mezcla estadística que contiene una superposición lineal de $|i\rangle$ y $|j\rangle$. Los términos de ρ_{ij} son una suma ponderada de los elementos de interferencias $c_i^{(k)} c_j^{(k)*}$, que son cantidades complejas.

Consideremos el estado cuántico más simple, un qubit ($|\psi\rangle = p_0 |0\rangle + p_1 |1\rangle$)

$$\rho = \begin{vmatrix} |0\rangle & |1\rangle \\ |0\rangle & p_0 & c_{01} \\ |1\rangle & c_{10} & p_1 \end{vmatrix} \quad (2.22)$$

donde p_i son las probabilidades de estar en el estado $|i\rangle$ y $c_{01} = c_{10}^*$ cuantifica la coherencia

$|0\rangle\langle 1|$ entre los dos estados. Las probabilidades p_i pueden ser medidos directamente, la coherencia es mas sutil. El estado ρ tendrá una evolución temporal diferente para diferentes valores de c_{01} , esto es conocido como efectos de interferencia. Si $c_{01} = 0$, entonces la partícula está en una mezcla de los estados ($|0\rangle\langle 0|$ o $|1\rangle\langle 1|$), que es conocido para el observador. Si $c_{01} \neq 0$ entonces la partícula puede estar en una superposición de ambos estados.

Si bien siempre es posible encontrar una base en la que el estado ρ sea diagonal, algunas bases son intuitivamente preferidas. En el caso del experimento de doble rendija, vea la Fig. 5, esta base es la ruta izquierda $|L\rangle$ y derecha $|R\rangle$. En este experimento, la pregunta clave es si una sola partícula pasa a través de la ranura izquierda o derecha (sin coherencia), o ambas ranuras simultáneamente (requiere términos de coherencia $|L\rangle\langle R|$). Si no hay coherencia de trayectoria, la partícula pasará por cualquiera de las rendijas, y dará lugar a un patrón clásico en la pantalla. Con coherencia de trayectoria, la partícula atraviesa ambas ranuras simultáneamente e interferirá consigo misma, dando lugar a un patrón de interferencia en la pantalla del detector.

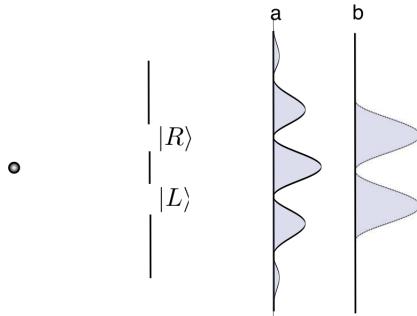


Figura 2.1: Experimento típico de la doble rendija. Los electrones se envían a través de la doble rendija, lo que conduce al patrón a o b en la pantalla de detección. Si se puede saber a través de qué rendija pasó un electrón, no existe coherencia de trayectoria y la pantalla de detección muestra un patrón clásico (b). Sin embargo, si no conocemos información sobre el camino del electrón, estos pasan a través de ambas ranuras simultáneamente. Esta coherencia del camino conduce al patrón de interferencia típico (a). Con coherencia, los electrones pueden llegar a posiciones en la pantalla del detector que están clásicamente prohibidas.

La coherencia cuántica de un sistema se manifiesta cuando se deben utilizar amplitudes de probabilidad, en lugar de simples probabilidades para describir por completo la evolución del sistema. Describiendo la capacidad de una partícula para mostrar una superposición, es decir, tener un comportamiento cuántico. Estos estados pueden representar, por ejemplo, posición, energía o espín. La pérdida de la capacidad de mostrar un comportamiento cuántico, es decir, perder la coherencia cuántica debido a la interacción con el ambiente es llamado decoherencia. Las principales características y consecuencias de la decoherencia son:

1. **Puede ser extremadamente rápida en comparación con todas las demás escalas de tiempo relevantes del sistema.** Esta era una de las características que se creía impedía la existencia de efectos cuánticos no triviales en sistemas biológicos. Resultados recientes han demostrado que la naturaleza se ha podido adaptar a distintas escalas y mantener coherencia cuántica por mayor tiempo.

2. Puede interpretarse como un proceso de medición indirecta, un monitoreo del sistema por el entorno. Este argumento será revisado mas fondo en la sección de mediciones no-locales.
3. Ayuda a comprender el surgimiento de la clasicidad en un marco cuántico. La interacción del ambiente con el sistema cuántico es lo que evita la existencia de efectos cuánticos a escalas macroscópicas, aunque depende en buena medida de la interpretación preferida de la mecánica cuántica.

2.4. Mediciones

Una medición proyectiva de una cantidad física (e.g, de energía, momento angular, etc) llevada a cabo en un sistema cuántico es descrito por un operador hermitiano que puede ser dependiente del tiempo. Hablamos de una medición de A y denotamos el operador con el mismo símbolo A .

Los posibles valores medidos que pueden ocurrir como resultado de una medición de una observable A son los eigenvalores a_n del operador asociado A . Por simplicidad, asumimos que su espectro es discreto:

$$A |u_n^i\rangle = a_n |u_n^i\rangle, \quad i = 1, \dots, g_n. \quad (2.23)$$

Los eigenvectores $|u_n^i\rangle$ forman una base ortonormal o pueden, en el caso de degeneración, ser elegidos correspondientemente. El g_n da el grado de degeneración de los eigenvalores a_n .

Cuando una medición selectiva de los observables A de un sistema con un vector de estado normalizado $|\psi\rangle$ conduce al resultado a_n , entonces el vector de estado no normalizado $|\widetilde{\psi}_n\rangle$ inmediatamente después de la medición viene dada por la proyección de $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle \rightarrow |\widetilde{\psi}_n\rangle = P_n |\psi\rangle, \quad (2.24)$$

con el operador de proyección

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|, \quad (2.25)$$

que se proyecta sobre el espacio de los eigenvectores correspondientes a a_n . A través de la normalización de $|\widetilde{\psi}_n\rangle$, el vector de estado $|\psi_n\rangle$ después de obtener la medición es obtenido.

Denotamos por $N(a_n)$ la frecuencia con la que se obtiene un valor medido a_n cuando la medición se realiza en N sistemas preparados idénticamente en el estado $|\psi\rangle$. Las frecuencias relativas $\frac{N(a_n)}{N}$ para todos los ensembles se aproxima a la probabilidad $p(a_n)$ como un valor límite en $N \rightarrow \infty$:

$$\frac{N(a_n)}{N} \xrightarrow{\infty} p(a_n). \quad (2.26)$$

La probabilidad $p(a_n)$ de obtener una valor medido a_n a un cierto tiempo es igual al valor esperado del operador de proyección P_n obtenido con el estado $|\psi\rangle$ anterior a la medición. Equi-

valentemente, es igual al cuadrado de la norma de los vectores de estados no normalizados $|\tilde{\psi}_n\rangle$ después de la medición

$$p(a_n) = \langle\psi|P_n|\psi\rangle = \|\tilde{\psi}_n\|^2. \quad (2.27)$$

Siguiendo con el ejemplo de la doble rendija, una medición en este sistema significa encontrar a través de cual ranura el electrón viajo. Un posible resultado para lograr esto es hacer una medición condicional y registrar solo los impactos que son asociados a la ranura derecha, hacemos una medición selectiva. Tal medición consiste de muchos eventos con una subsecuente selección dependiendo de por cual ranura ha pasado el electrón.

Un procedimiento alternativo para hacer mediciones en el sistema de la doble rendija consiste en no hacer una medición selectiva, i.e, registramos todos los electrones que pasan por ambas rendijas, sin tomar en cuenta por cual rendija paso el electrón, hacemos una medición no-selectiva. Ahora pasaremos a formalizar este tipo de mediciones.

2.4.1. Mediciones selectivas y no-selectivas

La matriz de densidad para estados puros es:

$$\rho = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (2.28)$$

Una medición selectiva de los observables A con resultados a_n y los proyectores P_n asociados, obtenemos:

$$\rho \rightarrow \rho'_n = \frac{P_n \rho P_n}{p(a_n)}, \quad (2.29)$$

donde $p(a_n) = \text{tr}[P_n \rho]$ es la probabilidad de obtener el valor a_n en la medición. Puede ser útil escribir la matriz de densidad en su forma no-normalizada $\tilde{\rho}'_n = |\tilde{\psi}'_n\rangle\langle\tilde{\psi}'_n|$. En esta forma la traza no necesariamente está igual a uno. En cuanto al estado, lo caracterizamos por la tilde:

$$\tilde{\rho}'_n = P_n \rho P_n. \quad (2.30)$$

La probabilidad $p(a_n)$ es igual a la traza de la matriz de densidad no-normalizada resultante después de la medición selectiva:

$$p(a_n) = \text{tr}[\tilde{\rho}'_n]. \quad (2.31)$$

Obtenemos el valor de expectación $\langle A \rangle$ de la observable A insertando el operador identidad generado por la base ortonormal $\{|u_i\rangle\}$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{j,k=1}^d \langle\psi|u_j\rangle\langle u_j|A|u_k\rangle\langle u_k|\psi\rangle = \sum_{j,k=1}^d \langle u_k|\rho|u_j\rangle\langle u_j|A|u_k\rangle \\ &= \sum_k \langle u_k|\rho A|u_k\rangle = \text{tr}[\rho A]. \end{aligned} \quad (2.32)$$

La matriz de densidad para estados mixtos es:

$$\rho = \sum_{i=1}^N p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_{i=1}^N p_i \rho_i, \quad (2.33)$$

donde $\rho_i = |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$. En una medición de una observable A , el valor a_n será obtenido con una probabilidad

$$p(a_n) = \sum_i p(a_n|i)p_i, \quad (2.34)$$

donde $p(a_n|i)$ es la probabilidad condicional que el valor de a_n sera obtenido cuando el estados ρ_i . Encontramos:

$$p(a_n|i) = \text{tr}[P_n \rho_i]. \quad (2.35)$$

Utilizando las reglas de computación de la traza, llegamos a :

$$p(a_n) = \text{tr}[P_n \rho_i]. \quad (2.36)$$

La ecuación 2.6 puede ser aplicada en el caso de estados mixtos con el argumento que los valores de esperados para los estados individuales contribuyan con las probabilidades p_i :

$$\langle A \rangle = \sum_i p_i \text{tr}[A \rho] = \text{tr}[A \rho]. \quad (2.37)$$

Para cada uno de los estados individuales ρ_i del conjunto, obtenemos el resultado de una medición selectiva que da el valor a_n en el estado no normalizado

$$\rho_i \rightarrow \widetilde{\rho}'_{i,n} = P_n \rho_i P_n. \quad (2.38)$$

Permitimos explícitamente la degeneración de los valores medidos. Encontramos para el operador de densidad normalizado después de la medición selectiva es,

$$\rho \rightarrow \rho'_n = \frac{P_n \rho_i P_n}{p(a_n)} \quad \text{tr}(\rho'_n) = 1 \quad (2.39)$$

La probabilidad $p(a_n)$ de observar un valor medido a_n en un estado mixto puede escribirse como:

$$p(a_n) = \text{tr}[\rho'_n]. \quad (2.40)$$

En el caso especial de que no exista degeneración en los valores medidos a_n . Tenemos $P_n |a_n\rangle \langle a_n|$ con el eigenvalor $|a_n\rangle$ perteneciendo al eigenvalor a_n . La ecuación 2.39 se convierte en

$$\rho \rightarrow \rho'_n = |a_n\rangle \langle a_n| \quad (2.41)$$

Cuando en el resultado de la medición no exista degeneración, la medición selectiva correspondiente en el estado mixto se convertirá en un estado puro. En una medición no selectiva del

observable A , a menudo se repite la medición en sistemas cuánticos en el mismo estado sin separar los estados ρ'_n que pertenecen a un resultado particular a_n como en una medición selectiva. El estado resultante ρ' en este caso es de nuevo una mezcla estadística que está compuesta de los estados ρ'_n que son producidos por una medición con las probabilidades $p(a_n)$:

$$\rho \rightarrow_{n.s} \rho_{n.s} = \sum_n p(a_n) \frac{P_n \rho P_n}{\text{tr}[\rho P_n]} = \sum_n P_n \rho P_n, \quad \text{tr}(\rho'_{n.s}) = 1. \quad (2.42)$$

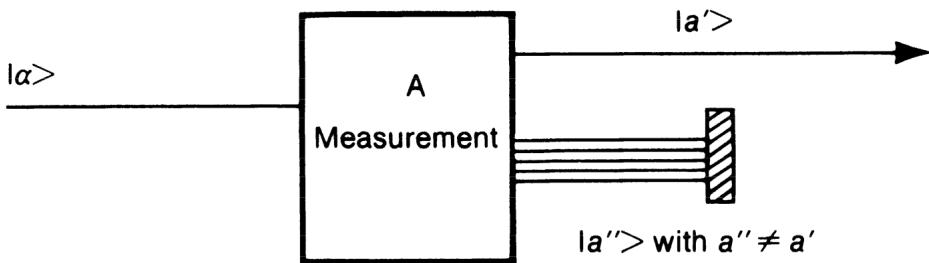


Figura 2.2: Medicion selectiva [45]

2.5. Sistemas cuánticos abiertos

En la práctica cualquier sistema ya sea clásico o cuántico está abierto al ambiente. Por ejemplo, podemos estudiar un objeto en caída libre sin tomar en cuenta la resistencia del aire teniendo resultados ideales, pero si tomamos en cuenta el efecto del ambiente podemos entender el funcionamiento de sistemas más complejos como el paracaídas, aeroplanos, etc. En ocasiones los efectos ambientales pueden conducir a los sistemas en direcciones favorables.

Los efectos del ambiente son aún más importantes en sistemas cuánticos, donde como ya vimos en la sección de conceptos cuánticos son llamados efectos de dechorencia. Un ejemplo de las consecuencias de la dechorencia es en una computadora cuántica, para poder trabajar con ella es necesario aislar el sistema del ambiente en complejos aparatos, de esta manera se evita la perdida de los efectos cuánticos pero como consecuencia se vuelve muy difícil lograr aumentar su capacidad. Igual que el ejemplo de la caída libre, si tomamos en cuenta los efectos de dechorencia podemos encontrar que estos efectos son benéficos en ciertos casos. El estudio de sistemas cuánticos abiertos es de vital importancia para entender el funcionamiento de la naturaleza y en recientes años, como en la computación cuántica, el avance de la ingeniería. También, la teoría de la decoherencia tiene un interés fundamental, ya que proporciona explicaciones sobre el surgimiento de la clasicidad en un mundo gobernado por las leyes de la mecánica cuántica.

La ecuación maestra es la que se utiliza para describir el decaimiento y la decoherencia de un sistema cuántico inducido por el ambiente de ese sistema. Dada su importancia en nuestro trabajo, revisar la derivación de esta ecuación es pertinente.

2.5.1. Derivación de la ecuación maestra

En esta derivación asumimos la **Aproximación de Born**, donde el ambiente es grande y no es afectado por la interacción con el sistema o, con el mismo efecto, las correlaciones del sistema con el medio ambiente se desarrollan muy lentamente. En la representación de Krauss, las matrices de densidad $\rho(t)$ y $\rho(t + dt)$ que describen el sistema a tiempos t y $t + dt$ se relacionan como:

$$\rho(t + dt) = S(t + dt, t)\rho(t) = \sum_{k=0}^{M-1} E_k \rho(t) E_k^\dagger, \quad (2.43)$$

donde los operadores E_k son los operadores de Krauss, donde $M \leq N^2$ (N es la dimensión del espacio de Hilbert), los operadores E_k son transformaciones infinitisimales y $S(t + dt, t)$ es el superoperador mapeando de $\rho(t)$ a $\rho(t + dt)$. Esta última suposición implica que el comportamiento de $\rho(t + dt)$ solo depende de $\rho(t)$ y no de tiempos anteriores $\tau < t$, esto es conocido como la aproximación de Markov.

- **Aproximación de Markov:** La matriz de densidad $\rho(t)$ evoluciona con una ecuación diferencial de primer orden en el tiempo. Por lo tanto, el conocimiento de la matriz de densidad $\rho(t_0)$ a cierto tiempo t_0 es suficiente para determinar $\rho(t)$ a cualquier tiempo $t > t_0$. Esto no es un requisito trivial ya que el sistema interactúa con el ambiente y en general el estado del ambiente al tiempo t_0 depende de la matriz $\rho(t')$ a tiempos anteriores $t' < t_0$. En otras palabras, el ambiente adquiere información en el sistema pero esa información puede fluir de regreso, al menos en parte, al sistema. Por lo tanto, el conocimiento de la matriz de densidad $\rho(t_0)$ en un tiempo t_0 es en general no suficiente para determinar $\rho(t)$ a tiempos posteriores.

Para asegurar que $S(t, t)$ sea igual a la identidad, escribimos los operadores de Krauss como:

$$\begin{aligned} E_0 &= I + \frac{1}{\hbar}(-iH + K)dt \\ E_k &= L_k \sqrt{\gamma_k dt} \quad (k = 1, \dots, M - 1), \end{aligned} \quad (2.44)$$

donde γ_k son reales, H y K son operadores Hermitianos y los operadores L_k son conocidos como los operadores de Lindblad. Con la condición de normalización $\sum_{k=1}^{M-1} E_k^\dagger E_k = I$ se obtiene

$$[I + \frac{1}{\hbar}(iH + K)dt][I + \frac{1}{\hbar}(-iH + K)dt] + \sum_{k=1}^{M-1} \gamma_k L_k^\dagger L_k = I. \quad (2.45)$$

De la ecuación 2.45

$$\frac{2}{\hbar}Kdt + \sum_{k=1}^{M-1} \gamma_k L_k^\dagger L_k + O((dt)^2) = 0, \quad (2.46)$$

por lo tanto

$$K = -\frac{\hbar}{2} \sum_{k=1}^{M-1} \gamma_k L_k^\dagger L_k. \quad (2.47)$$

Sustituyendo la ecuación 2.47 y 2.44 en 2.43:

$$\rho(t+dt) = \rho(t) - \frac{i}{\hbar}[H, \rho]dt + \sum_{k=1}^{M-1} \gamma_k \left(L_K \rho(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2} \rho(t) L_k^\dagger L_k - \frac{1}{2} + L_k^\dagger L_k \rho(t) \right) dt + O(dt^2). \quad (2.48)$$

Si asumimos que

$$\rho(t+dt) = \rho(t) + \dot{\rho}(t) + O((dt)^2). \quad (2.49)$$

Obtenemos la ecuación maestra GKSL (Gorini, Kossakowski, Sudarshan and Lindblad) también llamada lindbladianos, Louivillianos, ecuaciones maestras de Lindblad, ecuaciones diferenciales de Lindblad-Kossakowski o ecuaciones GKS-L. En este trabajo nos referiremos a ella como la ecuación maestra:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \sum_{k=1}^{M-1} \gamma_k \left(L_K \rho L_k^\dagger - \frac{1}{2} \rho L_k^\dagger L_k - \frac{1}{2} L_k^\dagger L_k \rho \right), \quad (2.50)$$

con el Hamiltoniano H , los operadores de salto L_K y las constantes de decaimiento $\gamma_k > 0$. El término $L_K \rho L_k^\dagger$, es llamado de reciclaje, sándwich o término de salto, actúa de una manera no-trivial en el estado por ambos lados simultáneamente y es la razón por la que no es posible reducir la ecuación maestra a una donde solo este involucrado un solo estado $|\Psi\rangle$.

El término restante $L_k^\dagger L_k$ puede combinarse con H para formar el operador no-hermitiano:

$$F \equiv H - \frac{i}{2} \sum_{k>0} \gamma_k L_k^\dagger L_k. \quad (2.51)$$

Este operador genera la parte determinista o el contra-salto de la evolución temporal, en combinación con su contra-partida logran que la evolución de ρ cumpla las propiedades de una matriz de densidad. Debemos hacer énfasis en que la expansión 2.49 es posible bajo la aproximación Markoviana discutida previamente.

Capítulo 3

Información y correlaciones cuánticas

3.1. Entrelazamiento

El concepto de entrelazamiento, la no separabilidad de los subsistemas, ha jugado un papel crucial en el desarrollo de la mecánica cuántica como la característica cualitativa que la distingue de manera más sorprendente de nuestra intuición clásica. El concepto de entrelazamiento se vuelve más tangible al definirlo en términos de operaciones locales y comunicación clásica (LOCC, por sus siglas en inglés).

En cualquier experimento de comunicación cuántica, nos gustaría poder distribuir estados cuánticos a través de laboratorios distantes. Si podemos transportar un qubit sin decoherencia, cualquier entrelazamiento compartido por ese qubit también se distribuirá perfectamente. Por el contrario, si podemos distribuir perfectamente los estados entrelazados, entonces con una pequeña cantidad de comunicación clásica podemos usar la teletransportación [referencia] para transmitir perfectamente los estados cuánticos. Sin embargo, en cualquier experimento que involucre estos procesos, los efectos del ruido afectarán inevitablemente nuestra capacidad para enviar estados cuánticos a largas distancias.

Una forma de tratar de superar este problema es distribuir estados cuánticos utilizando canales cuánticos con ruido disponibles, para luego intentar combatir los efectos de este ruido utilizando procesos cuánticos locales de mayor calidad en los laboratorios distantes. Estas operaciones cuánticas locales (“LO”, por sus siglas en inglés) estarán mucho más cerca de lo ideal, ya que pueden realizarse en entornos bien controlados sin la decoherencia inducida por la comunicación a largas distancias. Sin embargo, no hay razón para que las operaciones de los laboratorios separados sean totalmente independientes. La comunicación clásica (“CC”) se puede realizar esencialmente a la perfección utilizando tecnologías de telecomunicaciones estándar, por lo que también podemos utilizar dicha comunicación para coordinar las acciones cuánticas de los diferentes laboratorios. Resulta que la capacidad de realizar la comunicación clásica es vital para muchos protocolos de información cuántica, un ejemplo destacado es la teletransportación.

Un estado entrelazado es un estado que no puede ser preparado por LOCC. Un estado entrelazado es preparado por una interacción intrínsecamente cuántica entre Alice y Bob, i.e, una transformación unitaria global entre ambos. Es muy difícil caracterizar al entrelazamiento y for-

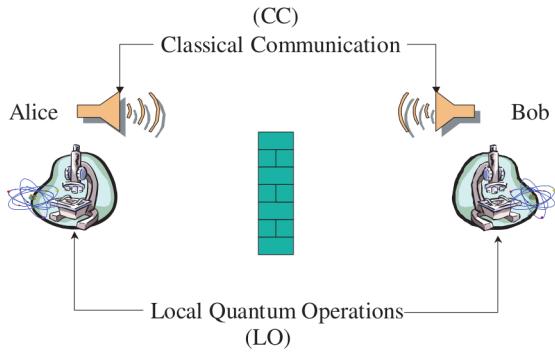


Figura 3.1: En un entorno de comunicación cuántica estándar Alice y Bob, pueden realizar cualquier medición generalizada que esté localizada en su laboratorio y comunicarse de forma clásica. La pared de ladrillos indica que no se pueden intercambiar partículas cuánticas de manera coherente entre Alice y Bob. Este conjunto de operaciones se conoce generalmente como LOCC. Ilustración de [39]

malmente entrelazamiento esta definido como estados no-separables.

- Un estado esta **entrelazado** si y sólo si, **no** se puede preparar utilizando operaciones locales y comunicaciones clásicas

$$\rho_{AB} \neq \sum_{r=1}^m p_r \rho_r^A \otimes \rho_r^B, \quad p_r > 0, \quad \sum_r p_r = 1 \quad \text{Estado entrelazado} \quad (3.1)$$

El caso opuesto son los estados separables, donde los subsistemas son independientes del uno del otro,

- Un estado es **separable** si y sólo si se puede preparar utilizando operaciones locales y comunicaciones clásicas

$$\rho_{AB} = \sum_{r=1}^m p_r \rho_r^A \otimes \rho_r^B, \quad p_r > 0, \quad \sum_r p_r = 1 \quad \text{Estado separable} \quad (3.2)$$

3.2. Estados clásicamente correlacionados

Un estado cuántico es descrito por el operador de densidad ρ_{AB} , mientras el estado de un sistema clásico correlacionado es descrito por una distribución conjunta P_{ab} . El estado de un sistema clásicamente correlacionado puede escribirse en forma del operador de densidad como $\rho_{AB} = \sum_{ab} P_{ab} |ab\rangle \langle ab|$, donde $\{|ab\rangle\}$ forma una base ortonormal.

Por ejemplo,

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} (|00\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|), \quad (3.3)$$

es un estado correlacionado clásicamente. Un estado esta clásicamente correlacionado siempre y cuando el estado es diagonal en una base ortonormal. Una razón por la cual llamamos a ese estado clásicamente correlacionado es que puede ser medido sin alterarlo. En otras palabras, si conocemos

que el estado es diagonal en la base $|ab\rangle$, entonces se puede determinar los valores p_{ab} sin perturbar su estado.

- Un estado esta **clásicamente correlacionado** si y sólo si, puede ser determinado sin perturbarlo utilizando operaciones locales y comunicaciones clásicas

$$\rho_{AB} = \sum_{ab} |ab\rangle \langle ab| \rho_{AB} |ab\rangle \langle ab| = \sum_{ab} p_{ab} |ab\rangle \langle ab| \quad \text{Estado clásicamente correlacionado} \quad (3.4)$$

donde $\{|ab\rangle\}$ forma una base ortonormal, i.e, $\langle ab| |a'b'\rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'}$

3.3. Discordia cuántica

Fueron Olliver y Zurek [36] y Henderson y Vedral [17] quienes propusieron a principios de los 2000 la de medición de correlaciones cuánticas a través de la discordia cuántica, utilizando conceptos de teoría de información clásica. Pero antes de definir la discordia en términos de información es útil establecer la intuición definiendo los estados que poseen discordia cuántica. Un sistema bipartito tiene discordia cuántica cuando no es un estado correlacionado clásicamente

- Un estado tiene **discordia cuántica** si y solo si, **no** puede ser determinado sin perturbarlo utilizando operaciones locales y comunicaciones clásicas

$$\rho_{AB} \neq \sum_{ab} |ab\rangle \langle ab| \rho_{AB} |ab\rangle \langle ab| = \sum_{ab} p_{ab} |ab\rangle \langle ab| \quad \text{Estado con discordia cuántica} \quad (3.5)$$

donde $\{|ab\rangle\}$ forma una base ortonormal, i.e, $\langle ab| |a'b'\rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'}$

Notamos que la diferencia entre un estado separable y un estado entrelazado tiene que ver con la forma en que cada estado es preparado. Mientras la diferencia entre un estado correlacionado clásicamente y un estado con discordia cuántica tiene que ver con que si el estado puede ser medido sin ser perturbado.

El conjunto de estados clásicamente correlacionados forman un subconjunto de los estados separables. Por lo que algunos estados separables tienen discordia cuántica. Esto significa que la discordia cuántica puede ser generada por LOCC. También todos los estados entrelazados tienen discordia cuántica, pero es un criterio mas débil para la 'quantumness' del sistema que el entrelazamiento.

Siguiendo el procedimiento de [12], consideramos dos variables aleatorias clásicas X y Y donde la distribución de probabilidad conjunta de obtener el resultado $X = x$ y $Y = y$ es $p_{x,y}$. Una medida de la interdependencia mutua de cualquiera de las variables con la otra es la información mutua clásica entre las variables, que se puede escribir como,

$$I(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y) \quad \text{Información mutua clásica} \quad (3.6)$$

donde $H(X)$ y $H(Y)$ son las entropías de Shannon de las distribuciones marginales de $P_{x,y}$ y $H(X, Y)$ es la entropía de Shannon de la distribución conjunta $p_{x,y}$. Para definir las distribu-

ciones marginales utilizamos la distribución de probabilidad clásica conjunta $P_{x,y} = \{p_{x,y}\}$. Las distribuciones marginales pueden obtenerse sumando sobre uno de los índices,

$$P_x = \left\{ \sum_y p_{x,y} \right\} \quad \text{y} \quad P_y = \left\{ \sum_x p_{x,y} \right\}. \quad (3.7)$$

Cuantificando la incertidumbre de una distribución de probabilidad a través de su entropía, obtenemos $H(X, Y)$, la entropía de Shannon de la distribución conjunta $p_{x,y}$

$$H(X, Y) = H(P_{x,y}) = - \sum_{x,y} p_{x,y} \log(p_{x,y}). \quad (3.8)$$

La misma cantidad en la Ec. 3.6 puede expresarse como,

$$\begin{aligned} J(X : Y) &= H(X) - H(X|Y) && \text{Información mutua clásica} \\ J(Y : X) &= H(Y) - H(Y|X) \end{aligned} \quad (3.9)$$

cumpliendo la equivalencia $I(X : Y) = I(Y : X) = J(X : Y) = J(Y : X)$ y donde la entropía condicional $H(Y|X)$, se define como

$$H(Y|X) = \sum_{x \in X} p_x H(Y|X = x) = H(X, Y) - H(X), \quad (3.10)$$

siendo $H(Y|X)$ la medición de la ignorancia de Y dado cierta información del estado de X . Otra manera de expresar la entropía condicional es con la falta de información del valor de Y cuando el estado de X esta en el estado X_n , pesado por la probabilidad de cada resultado:

$$\begin{aligned} H(Y|X) &= \sum_x p_x H(P_{y|x}) = - \sum_a p_a \sum_y \frac{p_{x,y}}{p_x} \log\left(\frac{p_{x,y}}{p_x}\right) \\ &= - \sum_{x,y} p_{x,y} \log(p_{x,y}) + \sum_{x,y} p_{x,y} \log(p_x) = H(X, Y) - H(X). \end{aligned} \quad (3.11)$$

donde se utilizó la distribución condicionada definida como $P_{y|x} = \{p_{x,y}/p_x\}$.

Generalizando los conceptos clásicos a la mecánica cuántica, remplazamos las distribuciones de probabilidad clásicas con operadores de densidad y la entropía de Shannon con la entropía de Von Neumann:

$$S(AB) = S(\rho_{AB}) = -\text{tr}[\rho_{AB} \log(\rho_{AB})] = - \sum_{ab} \lambda_{ab} \log(\lambda_{ab}), \quad (3.12)$$

donde λ_{ab} son los eigenvalores de ρ_{AB} .

El análogo de información mutua en información cuántica es:

$$I(\rho) = I(A : B) = S(A) + S(B) - S(A, B). \quad (3.13)$$

La información cuántica mutua cuantifica la cantidad total (clásica y cuántica) de correlaciones entre los dos subsistemas. Correlaciones entre los subsistemas no pueden aumentar si el subsistema

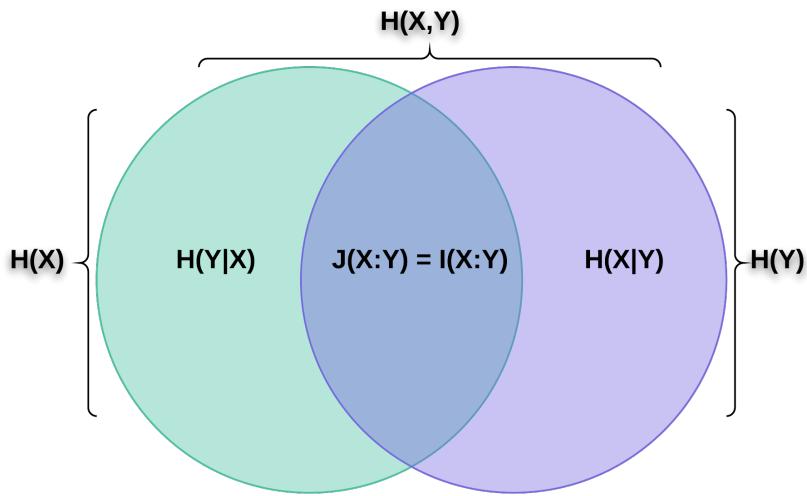


Figura 3.2: El diagrama de Venn muestra la entropía conjunta $H(X, Y)$, las entropías marginales $H(X)$ y $H(Y)$, entropías condicionales $H(X|Y)$ y $H(Y|X)$ y la información mutua $J(X : Y) = I(X : Y)$ para una distribución de probabilidad clásica para variables aleatorias X y Y .

A, B evolucionan independientemente: la información mutua es no-creciente sobre operaciones locales Φ_A, Ξ_B : $I((\Phi_A \otimes \Xi_B)\rho) \leq I(\rho)$ y es invariante sobre transformaciones unitarias locales.

Desde ahora, nos enfocamos en $J(A : B)$. En general J no representa la información mutua del estado post-medición, el cual depende de la observable que se a medido en el subsistema A . Si medimos una observable $K^A = K_A \otimes I_B$, el estado es proyectado a un eigenestado de K^A , mientras una medición de un observable $K^{A'} = K_{A'} \otimes I_B$ que no conmuta con K^A proyecta el estado al eigenestado de $K^{A'}$ que es diferente del K^A . Recordamos que una medición local $\{M^A = M_A \otimes I_B\}$ en A mapea al sistema a un ensemble estadístico $\{p_k, \rho_k \equiv \rho_{B|\Pi_k^A}\}$, tal que $\rho_k = \frac{(M_{A,k} \otimes I_B)\rho(M_{A,k}^\dagger \otimes I_B)}{p_k}$, donde $p_k = \text{Tr}[\rho M_k^{A\dagger} M_k^A]$. Por lo que, la versión cuántica de la entropía condicional clásica es $S(B|\{M^A\}) = \sum_k p_k S(\rho_k)$, y la cantidad

$$J(B : A)_{M^A} = S(B) - S(B|\{M^A\}) \quad \text{Información mutua cuántica,} \quad (3.14)$$

obtiene la información promedio adquirida en el subsistema B después de una medición local M^A ha sido hecha. El punto clave es que, en contraste con el caso clásico, esta cantidad siempre es menor que la información cuántica mutua en el estado inicial:

$$J(\rho) = J(B : A) \geq J(B : A)_{\{M^A\}}, \forall \{M^A\}. \quad (3.15)$$

En efecto, $S(B|\{M^A\}) \geq S(B|A)$ ($H(Y|X) \rightarrow S(B|A) = S(AB) - S(A)$). Por lo tanto, la información mutua, que mide el total (clásico y cuántico) de correlaciones, disminuye después de la medición. Ya que las correlaciones clásicas son con certeza mantenidas invariantes, las correlaciones que se han perdido son genuinamente cuánticas. También, evalúan que tanto el estado es perturbado por la medición cuántica. El estado está sólo clásicamente correlacionado si y sólo si existe al menos una medición $\{M^A\}$ en A que no afecte la información mutua y alcance la igualdad en

Eq.3.15: $I(\rho) = J(\rho)_{\{M^A\}}$. Somos capaces de cuantificar las correlaciones cuánticas de un estado encontrando el mínimo de la entropía condicional $S(B|\{M^A\})$ sobre todos las posibles medición en A , i.e., determinando el máximo de J_{M^A} , el cual es la mayor cantidad posible de correlaciones preservadas después de una medición en A y después substrayéndolo a el total de correlaciones que el sistema tenia antes de la medición, que son medidas por la información mutua I . La cantidad de correlaciones clásicas son expresadas por la información mutua obtenida considerando la menor medición perturbadora:

$$C(B : A) = \max_{M^A} J(B : A)_{M^A} = S(B) - \min_{M^A} \sum_k p_k S(B|\{M_k^A\}). \quad (3.16)$$

En efecto, satisface todos los requerimientos de una buena medición de correlaciones clásicas:

- Es cero si y solo si el estado no esta correlacionado: $C(B : A)(\rho_A \otimes \rho_B) = 0$, sino $C(B : A)(\rho) > 0$
- Para estados puros: $C(B : A)(\rho_{puro}) = C(A : B)(\rho_{puro}) = S(A) = S(B)$
- Es invariantes sobre operaciones locales unitarias: $C(B : A)((U_A \otimes U_B)\rho(U_A \otimes U_B)^\dagger) = C(B : A)(\rho)$
- No aumenta en operaciones locales: $C(B : A)((\Phi_A \otimes \Xi_B)\rho) \leq C(B : A)(\rho)$

La cantidad de correlaciones cuánticas es medida por la discordia cuántica, se obtiene al restar las correlaciones clásicas de las correlaciones totales:

$$D^A(\rho) = I(\rho) - C(B : A) = S(A) - S(A, B) + \min_{M^A} \sum_k p_k S(B|\{M_k^A\}). \quad (3.17)$$

Notamos que la discordia cuántica no es simétrica. Tomando la medición en el subsistema de B en vez de A obtenemos un valor de la discordia diferente: $D^A \neq D^B$. Por lo tanto decimos que la discordia $D^{A(B)}$ cuantifica la cantidad de correlaciones cuánticas entre A y B como es percibida por A (B). De ahora en adelante siempre consideraremos mediciones locales en A . En el caso de estados bipartitos puros, la discordia equivale a la entropía marginal de uno de los dos subsistemas, que es una medición del entrelazamiento: $D^A = D^B = S(A) = S(B)$.

El análisis de las propiedades de las correlaciones en sistemas bipartitos involucra un refinamiento de la clasificación de los estados de los propios sistemas. Es inmediato verificar que no solo estados entrelazados, pero casi todos los estados separables tienen una discordia cuántica no-nula, i.e , son afectados por un proceso de medición, por lo que exponen algunas propiedades cuánticas. En el conjunto de estados separables, podemos identificar la subclase de estados clásicos-cuánticos, definidos como

$$\rho_{CQ} = \sum_j p_j \rho_A^{(j)} \otimes (|j\rangle_B \langle j|_B) \quad (\text{Cuántico} - \text{Clásico}) \quad (3.18)$$

$$\rho_{QC} = \sum_i p_i (|i\rangle_A \langle i|_A) \otimes \rho_B^{(I)} \quad (\text{Clásico} - \text{Cuántico}) \quad (3.19)$$

tal que $D^A(\rho_{CQ}) = D^B(\rho_{QC}) = 0$, donde $\{|i\rangle\}, \{|j\rangle\}$ son un conjunto de vectores ortonormales. En efecto, al hacer una medición proyectiva $\{\Pi_i^A\}$ en la base $\{|i\rangle\}$ obtenemos $\rho_{CQ}^{\Pi_i^A} = \sum_i \Pi_i^A \rho_{CQ} \Pi_i^A = \rho_{CQ}$, y deja el estado sin perturbar. Entonces el conjunto de estados correlacionados genuinamente clásicos, llamados estados clásicos-clásicos consiste de estados de la forma

$$\rho_{CC} = \sum_{i,j} p_{i,j} (|i\rangle_A \langle i|_A) \otimes (|i\rangle_B \langle i|_B) \quad (\text{Clásico - Clásico}) \quad (3.20)$$

Tenemos $D^A(\rho_{CC}) = D^B(\rho_{CC}) = 0$. Notamos que los estados clásicos no son solo un subconjunto de los estados separables, pero es posible mostrar que los estados con cero discordia son un subconjunto de mediciones nulas del conjunto de estados separables, esto es el conjunto de estados clásicos-cuánticos y clásicos-clásicos.

La discordia cuántica no es la única manera de medir las correlaciones cuánticas. Varios cuantificadores alternos han sido introducidos recientemente. Las mediciones de correlaciones cuánticas propuestas están en dos clases: cantidades entropicas y cantidades geométricas. Una medición entropica es usualmente introducida para traer una información teórica o una interpretación termodinámica de las correlaciones, pero es en general muy difícil de computar explícitamente. Las mediciones geométricas de las correlaciones son construidas arreglando una métrica en el espacio de Hilbert de los estados cuánticos y después usándolos para evaluar la distancia entre el estado y el conjunto de estados clásicos (cero discordia)

La discordia cuántica entrópica es el cuantificador de correlaciones cuánticas mas utilizado y como ya vimos anteriormente, se define como la diferencia entre dos expresiones clásicamente equivalentes de la información mutua: la información mutua cuántica y la información mutua cuántica inducida por la medición local. Las expresiones analíticas de discordia cuántica se han encontrado solo para algunos tipos especiales de estados y la situación se vuelve más complicada para los estados cuánticos generales. Esto se debe al procedimiento de optimización para la entropía condicional sobre todas las mediciones locales generalizadas que es difícil de realizar.

El cálculo de la discordia cuántica entropica es NP-completo. Estas dificultades llevaron a Grollami et al. a proponer el concepto de incertidumbre cuántica local como una medida de correlación cuántica similar a la discordia. Se define como la incertidumbre mínima inducida por la medición de un solo observable local en un estado cuántico utilizando la noción de información de Wigner-Yanase, la información de Skew. Esta medida satisface los requisitos completos de una medida de correlaciones cuánticas. Más allá de su importancia como cuantificador de correlación cuántica, la incertidumbre cuántica local también está profundamente relacionado con la información cuántica de Fisher en el contexto de la metrología cuántica.

3.4. Propiedades de una medición de correlaciones cuánticas

Las propiedades de una medición de correlaciones cuánticas \mathcal{C} son:

- Es cero si y sólo si el estado esta clásicamente correlacionado: $\mathcal{C}^A(\rho) = 0, \mathcal{C}^B(\rho) = 0$, sino

$$\mathcal{C}^{A(B)}(\rho) > 0$$

- Es una medida de entrelazamiento para estados puros: $\mathcal{C}^{A(B)}(\rho_{puro}) = \varepsilon(\rho)$
- Es invariantes sobre operaciones locales unitarias: $\mathcal{C}^{A(B)}((U_A \otimes U_B)\rho(U_A \otimes U_B)^\dagger) = \mathcal{C}^{A(B)}(\rho)$
- No aumenta en operaciones locales aplicadas a la parte no medida: $\mathcal{C}^A((I_A \otimes \Phi_B)\rho) \leq \mathcal{C}^A(\rho)$, $\mathcal{C}^B((\Phi_A \otimes I_B)\rho) \leq \mathcal{C}^B(\rho)$

La primera condición es solo un requerimiento de fidelidad, mientras la segunda refleja el hecho de que para estados puros las correlaciones cuánticas coinciden con el entrelazamiento. La tercera propiedad es todavía intuitiva, ya que un cambio de base local no debería de afectar las correlaciones. Finalmente, la ultima propiedad nos dice que $\mathcal{C}^{A(B)}$ no aumenta por operaciones locales en $B(A)$. Una peculiaridad interesante de las correlaciones cuánticas, relacionada a su asimetría, es que pueden aumentar por operaciones locales en el subsistema medido $\mathcal{C}^A((\Phi_A \otimes I_B)\rho) > \mathcal{C}^A(\rho)$, el mismo resultado aplica para Q^B . En general, dado un estado clásicamente correlacionado, correlaciones cuánticas pueden crearse por operaciones locales cuando la communitividad de los operadores de densidad no sean preservados: todo canal local Φ^A que no satisfaga $[\Phi^A(\rho), \Phi^A(\sigma)] = 0$ para dos matrices de densidad ρ, σ , cualquiera tal que $[\rho, \sigma] = 0$, crea correlaciones cuánticas en un estado clásicamente correlacionado: $\mathcal{C}^A(\Phi^A\rho) > 0$.

Los medidores de correlaciones cuánticas representan un paradigma conceptual sin explorar en la teoría cuántica. Una importante cuestión es extender el concepto de coherencia a sistemas multipartitos. Se ha demostrado que las correlaciones cuánticas son la forma más general de la coherencia, en este sentido: Si y solo si correlaciones cuánticas son compartidas entre ambas partes del sistema compuesto, entonces coherencia cuántica es garantizada en cualquier base local. Por lo tanto, las correlaciones cuánticas son un requerimiento mínimo para la no-clasicidad ("quantumness") no-trivial en sistemas multipartitos [12].

Algunas preguntas interesantes surgen: quisiéramos saber la cantidad de correlaciones cuánticas que un estado tiene y bajo qué condiciones presentan alguna peculiaridad potencial. En este sentido, mucho interés a sido abordado recientemente al estudio de la dinámica de correlaciones cuánticas en sistemas cuánticos abiertos, i.e, como las correlaciones cuánticas entre el sistema y el ambiente o entre las partes del sistema en investigación, se comportan sobre dinámicas disipativas. En general, se ha demostrado que las correlaciones cuánticas son mas robustas y sencillas de crear sobre la interacción de reservorios. Este es un resultado directo: las correlaciones cuánticas pueden ser creadas por operaciones locales de un estados clásicamente correlacionados y desaparecen solo en una medición nula del conjunto de estados.

En este trabajo realizamos una investigación de la dinámica de correlaciones cuánticas en el sistema de pares radicales. Utilizando la Información de Skew y Fisher como medidores de las correlaciones cuánticas, por lo tanto una revisión de estos conceptos es apropiada.

3.5. Información de Skew

Wigner y Yanase [referencia] en su estudio de mediciones desde una perspectiva de información introducieron la cantidad:

$$I(\rho, K) = -\frac{1}{2}Tr[(\sqrt{\rho}, K)^2], \quad (3.21)$$

que llamaron información de Skew, como la cantidad de información en los valores de observables que no comutan con K (que puede ser un hamiltoniano, un momento u otra cantidad que se conserve). $I(\rho, K)$ puede interpretarse como la medición de la no-commutatividad entre ρ y K , una interpretación general de esta medida es que es más difícil medir un observable que no comuta que una que sí comuta. Wigner y Yanase comprobaron que esta cantidad satisface todos los requerimientos de una medida de información, de los cuales los básicos son los siguientes:

- La información de Skew se mantiene constante para sistemas aislados. Por lo que I es invariante siempre y cuando el estado cambie acorde a la ecuación de Newmann-Landau.
- Es convexa, es decir, no aumenta sobre la mezcla clásica.
- La información de Skew decrece cuando dos ensembles diferencen son unidos. Sea ρ_1 y ρ_2 dos operadores de densidad, entonces

$$I(\lambda_1\rho_1 + \lambda_2\rho_2, K) \leq \lambda_1 I(\rho_1, K) + \lambda_2 I(\rho_2, K). \quad (3.22)$$

para cualquier $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, $\lambda_1 \geq 0$, $\lambda_2 \geq 0$

- La información de Skew es aditiva, la información contenida en un sistema compuesto de dos partes independientes es la suma de sus partes. Sea ρ_1 y ρ_2 dos operadores de densidad y K_1 , K_2 las cantidades conservadas, entonces

$$I(\rho_1 \otimes \rho_2, K_1 \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes K_2) = I(\rho_1, K_1) + I(\rho_2, K_2). \quad (3.23)$$

- Siempre es menor que la varianza de K :

$$I(\rho, K) = Tr[\rho K^2] - Tr[\sqrt{\rho}K\sqrt{\rho}] \leq Tr[\rho K^2] - (Tr[\rho K])^2 \equiv Var_{\rho}(K) \quad (3.24)$$

llegando a la igualdad en estados puros ($\rho = \sqrt{\rho}$), donde no existe ignorancia clásica.

La información de Skew es una generalización de la información de Fisher clásica, mas detalles sobre esto se puede consultar en el Apéndice C. .

3.6. Información cuántica de Fisher

La información clásica de Fisher es una medida de que tan preciso se puede medir un parámetro con los datos disponibles. De igual manera, la información cuántica de Fisher (F) es utilizada en

metrología cuántica para cuantificar la máxima precisión con la cual un parámetro (una fase) θ puede estimarse usando un estado cuántico ρ . Para M mediciones independientes la varianza V está limitada por la cota de Cramér–Rao:

$$(\Delta V)^2 \geq \frac{1}{MF(\rho_\theta)} \quad (3.25)$$

Una mejor precisión, es decir, un valor más grande de la parte derecha de la desigualdad se puede lograr si el estado ρ es mas sensible a una transformación unitaria generada por el operador hermitiano K asociado al parámetro θ . Por lo que la información cuántica de Fisher cuantifica la distinguibilidad de ρ a $\rho_\theta = e^{-i\theta K} \rho e^{i\theta K}$, para ρ infinitesimales.

Para un estado cuántico arbitrario ρ_θ que depende del parámetro θ podemos definir la información cuántica de Fisher como:

$$F(\rho_\theta) = \frac{1}{4} \text{Tr}[\rho_\theta L_\theta^2]. \quad (3.26)$$

donde la derivada simétrica logarítmica L_θ es definida como la solución a la ecuación

$$\frac{\partial \rho_\theta}{\partial \theta} = \frac{1}{2} (L_\theta \rho_\theta + \rho_\theta L_\theta). \quad (3.27)$$

Utilizando la descomposición espectral $\rho = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, la información cuántica de Fisher puede ser evaluada como:

$$F(\rho, H_A) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{(\lambda_i - \lambda_j)^2}{\lambda_i + \lambda_j} |\langle \psi_i | K | \psi_j \rangle|^2, \quad (3.28)$$

la suma es llevada bajo la condición $\lambda_i + \lambda_j \neq 0$. Cumpliendo los mismos requerimientos que la información de Skew para una medida de información. La estimación de la precisión en metrología cuántica puede ser mejorada utilizando estados cuánticos con mucha información cuántica de Fisher.

La información cuántica de Fisher y de Skew son generalizaciones de la información de Fisher clásica, mas detalles sobre esto se puede consultar en el Apéndice C, cumpliendo la propiedad:

$$I(\rho, K) \leq F(\rho, H_A) \leq 2I(\rho, K). \quad (3.29)$$

3.7. Medición de correlaciones cuánticas: Incertidumbre cuántica local

Como ya se discutió en la sección anterior, recientemente se ha demostrado que el entrelazamiento no es la forma más general de correlaciones cuánticas. Incluso los estados no entrelazados de los sistemas compuestos pueden compartir correlaciones verdaderamente cuánticas. Este es un resultado interesante, ya que la creación y protección del entrelazamiento podría ser una condición demasiado exigente para ser satisfecha en sistemas biológicos macroscópicos y para aparatos de ingeniería, que tienen que lidiar con regímenes de alta temperatura y alto desorden. De hecho, el entrelazamiento suele ser frágil siempre que los sistemas interactúan con un entorno externo.

Una de las lecciones que aprendemos de la mecánica cuántica es que el proceso de medición perturba el estado físico del sistema. Esto difiere de lo que pasa en el escenario clásico. Por lo que es posible concluir que la perturbación inducida por una medición en un estado es una buena evidencia de su no-clasicidad. Aquí estamos interesados en estudiar un sistema bipartito en el que una medición local es hecha en uno de los subsistemas. La perturbación inducida por la medición en el sistema cambia las propiedades globales del estado, en particular la cantidad de correlaciones entre los dos subsistemas.

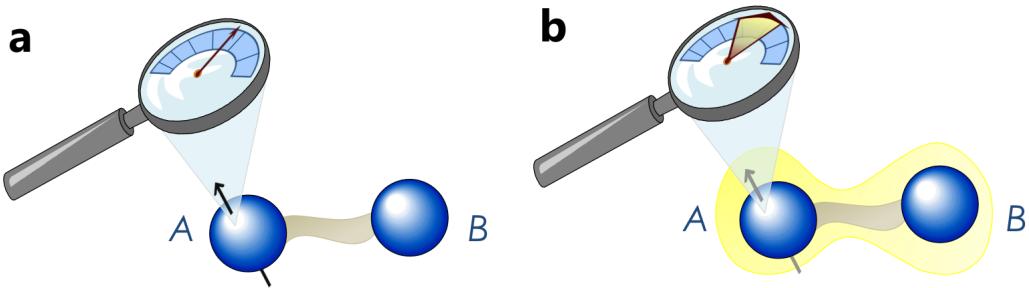


Figura 3.3: Las correlaciones cuánticas desencadenan la incertidumbre cuántica local. Consideremos un estado bipartito ρ . Un observador en el subsistema A está equipado con un medidor cuántico, un dispositivo de medición cuya barra de error muestra solo la incertidumbre cuántica. (a) Si ρ no está correlacionado o contiene solo correlaciones clásicas (sombra gris), es decir, ρ tiene la forma $\rho_{AB}^{cl-cu} = \sum_i p_i (|i\rangle_A \langle i|_A) \otimes \rho_B^{(I)}$, el observador puede medir al menos un observable en A sin ninguna incertidumbre cuántica intrínseca. (b) Si ρ contiene correlaciones cuánticas (sombra amarilla), se cuantifica por entrelazamiento para estados puros y discordia cuántica en estados en general, cualquier medida local en A se ve afectada por la incertidumbre cuántica. La incertidumbre cuántica mínima asociada a una sola medición en el subsistema A se puede utilizar para cuantificar la discordia en el estado ρ , como lo percibe el observador en A . Ilustración de [13].

Consideremos un ejemplo de la incertidumbre cuántica, si tenemos un sistema compuesto preparado por un estado entrelazado de Bell de dos qubits $|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$. Este es un eigenestado del observable global $\sigma_3 \otimes \sigma_3$ por lo que no hay incertidumbre en el resultado de tal medición. En contraste, la medición local de una observable de la forma $\vec{a} \cdot \vec{\sigma} \otimes I$ (donde $\vec{a} \neq 0$ es un vector real) tiene una incertidumbre intrínseca. El estado $|\phi^+\rangle \langle \phi^+|$ y en general cualquier estado entrelazado no puede ser eigenestado de una observable local.

Extendiendo el argumento a estados mixtos, necesitamos filtrar la incertidumbre debido a mezclas clásicas, i.e., falta de conocimiento del estado, para poder identificar el estado cuántico. Decimos que una observable K en el estado ρ es ‘cuántico-exacto’ cuando el error estadístico en su medida es debido a la ignorancia clásica. Adoptando una definición cuantitativa de incertidumbre cuántica, encontramos que K es cuántico-exacto si y solo si $\rho = \rho_K$, donde ρ_K es la matriz de densidad del estado después de la medición de K . Los únicos estados que son invariantes por una medición local completa son los descritos por una teoría de probabilidad clásica.

La incertidumbre cuántica en observables locales esta relacionada con el concepto de correlaciones cuánticas. Los estados ρ_K que admiten una observable local K Cuántico-exacto son los estados con cero correlaciones cuánticas. En las siguientes sección discutiremos dos clases de medidas de

correlaciones cuánticas, la información cuántica de Skew y Fisher, interpretadas y analizadas en el contexto de la incertidumbre cuántica local.

3.7.1. Información de Skew como medida de correlaciones cuánticas (no-clasicidad)

Introducimos la incertidumbre cuántica local (LQU, por sus siglas en inglés), siguiendo el procedimiento de Giromali [13], como el mínimo de la información de Skew realizable en una sola medición local. Sea $\rho \equiv \rho_{AB}$ el estado de un sistema bipartito y sea $K^\Lambda = K_A^\Lambda \otimes I_B$ una observable local, con K_A^Λ siendo un operador hermitiano en A con un espectro Λ . Con Λ no-degenerado, que corresponde a observables en A . En un sistema bipartito solo estados con discordia cero pueden conmutar con las observables locales $K^\Lambda = K_A^\Lambda \otimes I_B$. Si el sistema comparte correlaciones no clásicas su estado no conmutara con ninguna observable local y las mediciones en A mostrarán una incertidumbre cuántica. Por lo tanto, la LQU con respecto al subsistema A , optimizada sobre todos las observables locales en A con espectro no-degenerado Λ es:

$$LQU(\rho_{AB}) = U_A^\Lambda(\rho) \equiv \min_{K^\Lambda} I(\rho, K_A^\Lambda \otimes I_B), \quad (3.30)$$

donde la minimización es sobre el conjunto de observables locales de espectro no degenerado. Como discutíamos en la sección anterior, la no existencia de 'certeza-cuántica' en observables locales caracteriza un estado correlacionado cuantitativamente. Encontramos que la cantidad LQU no solo es un indicador pero también una medida de correlaciones cuánticas en estados bipartitos ya que cumple con todas las propiedades de un cuantificador de correlaciones cuánticas [12]. Específicamente, se puede demostrar que la LQU (para cualquier Λ no degenerado) es invariante sobre operaciones locales, es no creciente sobre operaciones locales en B , desaparece si y solo si ρ es un estado con cero correlaciones cuánticas con respecto a mediciones en A y se reduce a un entrelazamiento monótono cuando ρ es un estado puro.

Si ahora nos enfocamos en el caso de sistemas bipartitos $2 \otimes d$, encontramos que el cuantificador de correlaciones cuánticas vía la LQU es más sencillo en práctica comparando con la discordia cuántica y otras mediciones entropicas, que típicamente involucra optimizaciones difíciles, no admitiendo una fórmula cerrada incluso para estados de dos qubits. La minimización puede expresarse en forma cerrada para estados arbitrarios ρ_{AB} de un sistema qubit-qudit $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^d$, tal que LQU admite una fórmula cerrada computable. También notamos que cuando A es un qubit, todas las mediciones dependientes de Λ son equivalentes hasta un a multiplicación constante. Un qubit observable no degenerado $K^A = K_A \otimes \mathbb{I}_B$ con un espectro fijo puede ser parametrizado como:

$$K_A = \alpha \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A + \beta \mathbb{I}_A, \quad (3.31)$$

donde α, β son constantes ($\alpha \neq 0$), \vec{n} es un vector unitario y $\sigma_A = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Entonces $I(\rho, K^A) = \alpha^2 I(\rho, \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A \otimes \mathbb{I}_B)$, implicando que todos las LQU son proporcionales entre ellas. Escogemos observables K_A no degeneradas en el qubit A de la forma $K_A = \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A = \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A$ con $|\vec{n}| = 1$. Esta elección corresponde a una LQU normalizada a la unidad para estados puros,

máximamente entrelazados. Por lo que la minimización puede escribirse como la minimización de una forma cuadrática que involucra el vector unitario \vec{n} (Ver apéndice D), obteniendo

$$\text{Incertidumbre Cuántica Local} = \mathbf{LQU}(\rho_{AB}) = U_A(\rho_{AB}) = \mathbf{1} - \boldsymbol{\lambda}_{\max}(W_{AB}), \quad (3.32)$$

donde λ_{\max} denota el máximo eigenvalor, y W_{AB} es un matriz simétrica 3×3 cuyos elementos son:

$$(W_{AB})_{ij} = \text{Tr}[\sqrt{\rho_{AB}}(\sigma_{iA} \otimes \mathbb{I}_B)\sqrt{\rho_{AB}}(\sigma_{jA} \otimes \mathbb{I}_B)], \quad (3.33)$$

donde $i, j = x, y, z$. Obtenemos una forma de caracterizar correlaciones cuánticas a través de la LQU entre dos subsistemas donde uno es un qubit y el otro un qudit.

3.7.2. Información cuántica de Fisher como medida de las correlaciones cuánticas (no-clasicidad)

Consideremos un estado cuántico bipartito ρ_{AB} de $2 \times d$ en el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Asumimos que la dinámica de la primera parte es gobernada por la transformación de fase local $e^{-i\theta K_A}$, con $K_A = K_A \otimes I_B$ como el operador local. En este caso la información cuántica de Fisher se reduce a la información cuántica de Fisher local (LQFI, por sus siglas en inglés), escribiendo

$$F(\rho, K_A) = \text{Tr}(\rho K_A^2) - \sum_{i \neq j} \frac{2\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i + \lambda_j} |\langle \psi_i | K_A | \psi_j \rangle|^2, \quad (3.34)$$

La información cuántica de Fisher local fue introducida para manejar correlaciones cuánticas tipo discordia. Nos permite obtener una visión más profunda de cómo las correlaciones cuánticas pueden ser vitales para la precisión en metrología. La cuantificación de las correlaciones cuánticas en términos de la información cuántica de Fisher local (medida computable de correlaciones cuánticas tipo-discordia) Girolami et al. [13] la define como potencia interferométrica (IP, por sus siglas en inglés). En este trabajo utilizaremos la notación $\mathcal{Q}(\rho_{AB})$ y está definida como la mínima información cuántica de Fisher sobre todos los operadores locales K_A actuando en el subsistema A ,

$$\mathcal{Q}(\rho_{AB}) = IP(\rho_{AB}) = \min_{K_A} F(\rho_{AB}, K_A), \quad (3.35)$$

$\mathcal{Q}(\rho_{AB})$ tiene las propiedades necesarias de un cuantificador de correlaciones cuánticas. Es no-negativa y es nula para estados con cero discordia, es invariante sobre transformaciones locales.

Para minimizar $F(\rho_{AB}, H_A)$, al igual que en la minimización de la información de Skew, puede expresarse en forma cerrada para estados arbitrarios ρ_{AB} de un sistema qubit-qudit $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^d$. Tomando el operador K_A de la forma $K_A = \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A$ con $|\vec{n}| = 1$. Se puede observar que $\text{Tr}(\rho H_A^2) = 1$

y el segundo término de la ecuación 3.34 se puede expresar como

$$\sum_{i \neq j} \frac{2\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i + \lambda_j} |\langle \psi_i | K | \psi_j \rangle|^2 = \sum_{i \neq j} \sum_{m,n=1}^3 \frac{2\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i + \lambda_j} \langle \psi_i | \sigma_{m,A} \otimes \mathbb{I}_B | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \sigma_{n,A} \otimes \mathbb{I}_B | \psi_i \rangle, \quad (3.36)$$

Por lo que la minimización puede escribirse, al igual que con la información de Skew, como la minimización de una forma cuadrática que involucra el vector unitario \vec{n} , obteniendo:

$$\mathcal{Q}(\rho_{AB}) = IP(\rho_{AB}) = \mathbf{1} - \lambda_{max}(W), \quad (3.37)$$

donde $\lambda_{min}(W)$ denota el eigenvalor máximo de la matriz W de 3×3 :

$$(W)_{mn} = \sum_{i,j} \frac{2\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i + \lambda_j} \langle \psi_i | \sigma_{m,A} \otimes \mathbb{I}_B | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \sigma_{n,A} \otimes \mathbb{I}_B | \psi_i \rangle, \quad (3.38)$$

\mathcal{Q} se convierte en un indicador operacional y computable de correlaciones cuánticas.

$\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ son un cuantificador tipo discordia más general que las técnicas basadas en entrelazamiento. Además de que son más sencillas de calcular porque el proceso de minimización que en la discordia puede llegar a ser muy complicado se convierte en encontrar el máximo eigenvalor de la matriz W .

3.8. Ejemplo de medición de correlaciones cuánticas: Estado de Werner

Una clase importante de estados cuánticos son los estados de Werner, que aparecen en dispositivos de computación cuántica realistas y entornos de comunicación cuántica al momento de transmitir estados entrelazados a través de canales con ruido. Son ejemplos paradigmáticos de estados cuánticos y juegan un papel importante en la teoría de la información cuántica.

Los estados de Werner son una mezcla de los estados de Bell $|\phi_{bell}\rangle$ con ruido de la forma

$$\rho_{werner} = (1-p) |\phi_{bell}\rangle \langle \phi_{bell}| + \frac{p\mathbb{I}}{4} \quad p \in \{0, 1\}, \quad (3.39)$$

donde $|\phi_{bell}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$. El estado de Werner se caracteriza por un único parámetro real p llamado fidelidad. Esta cantidad mide la separación del estado de Werner con el estado de Bell. Calculamos la concurrencia, una medida de entrelazamiento, al estado de werner. La concurrencia se encuentra a través de la matriz de densidad ρ ,

$$C(\rho) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (3.40)$$

donde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$ son los eigenvalores de la matriz

$$R = \sqrt{\rho^{1/2} \tilde{\rho} \rho^{1/2}}, \quad (3.41)$$

con

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho(\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (3.42)$$

Una concurrencia diferente de cero es una marca de entrelazamiento. Para un estado separable la concurrencia es cero y para un estado máximamente entrelazado es 1. También calculamos $\mathcal{Q}(\rho)$ y $LQU(\rho)$ para el estado de Werner con diferentes p , el resultado se muestra en la figura 3.4. El estado de Werner es separable cuando $p \geq \frac{2}{3} = 0,6666$. Sin embargo podemos notar que $\mathcal{Q}(\rho) > 0$ y $LQU(\rho) > 0$ en todo el rango de p excepto en $p = 0$. Además, cuando el entrelazamiento es nulo, es decir la concurrencia es igual a cero, aun existen correlaciones cuánticas.

Mientras $\mathcal{Q}(\rho)$, $LQU(\rho)$ y entrelazamiento coinciden para estados puros, considerando estados mixtos como el estado de Werner podemos empezar a ver las diferencias. Aunque este es un caso simple, en sistemas más complejos se presentan comportamientos similares.

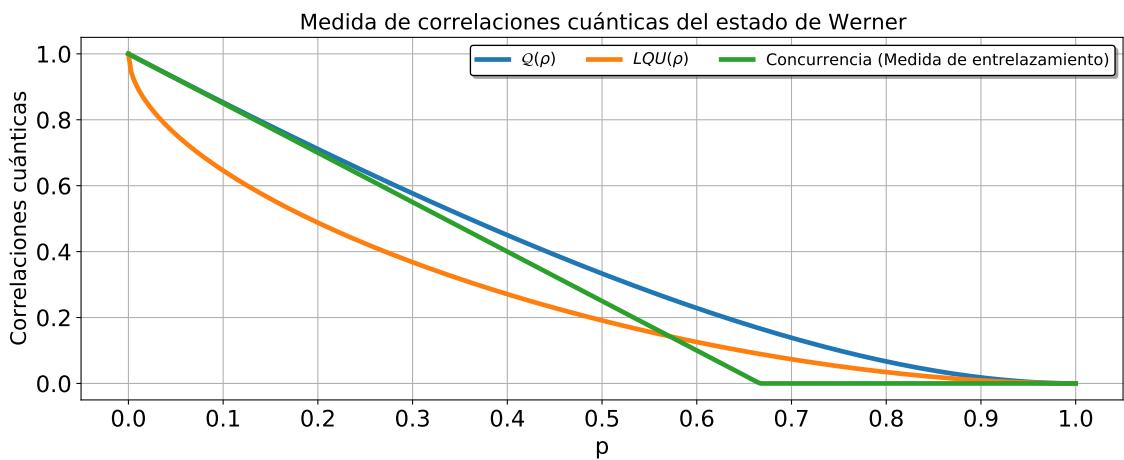


Figura 3.4: Medida de correlaciones cuánticas del estado de Werner utilizando $\mathcal{Q}(\rho)$, $LQU(\rho)$ y la concurrencia como medida de entrelazamiento.

Capítulo 4

Magnetorrecepción en las aves



Figura 4.1: Robin Europeo, primera ave donde se detectó experimentalmente la existencia de la magnetorrecepción. Foto de Jan Meeus en Unsplash.

Muchas especies en el planeta llevan a cabo el fenómeno de la migración, múltiples métodos para trasladarse durante largas distancias hasta llegar a su destino son utilizadas, desde seguir el mapa de las estrellas, la posición del sol o incluso el olfato. En la década de 1960 se descubrió que uno de estos métodos es poder detectar el campo magnético de la Tierra para obtener información direccional [57], capacidad llamada magnetorrecepción. La especie involucrada fue el Robin europeo, una pequeña ave migratoria. Desde entonces, se ha encontrado magnetorrecepción en más de 20 especies de aves, también en otros animales, involucrando a miembros de los vertebrados, insectos, crustáceos y moluscos[55].

Las aves siguen siendo el grupo mejor estudiado y en el que los principios de la magnetorecepción han comenzado a entenderse. Se sabe mucho menos sobre los posibles mecanismos de magnetorrecepción en otros animales. Los experimentos [55, 56, 43, 3] utilizando embudos de Emlen en aves migratorias revelaron tres características de la magnetorrecepción en las aves:

1. **Funciona sólo en una ventana funcional alrededor de la intensidad del campo magnético ambiental, pero puede adaptarse a otras intensidades.** El campo magnético de la Tierra es del orden de $47 \mu T$, esto es extremadamente bajo, para ponerlo en perspectiva, un imán de refrigerador común es del orden de $5 mT$. Las aves pueden extraer información



Figura 4.2: Los embudos de Emlen se han utilizado para estudiar cómo las aves migratorias pueden orientarse con el campo magnético terrestre. En el diseño original, un campo magnético es activado a cierto ángulo del embudo. La actividad de las aves se registra como marcas de garras en un papel colocado en las paredes inclinadas de la jaula. Las versiones modernizadas del embudo Emlen son más cuantitativas, ya que utilizan sensores de movimiento que envían datos a una computadora. Ilustración de [Barbara Aulicino](#). Foto de Jonathan Blair/National Geographic Creative.

siendo sensibles sólo a un rango entre el campo magnético que está presente en su área. Esto significa que si viajan por una zona donde el campo magnético local de la Tierra es del orden de $47 \mu T$, su mecanismo sólo puede detectar el campo magnético del orden, por ejemplo, entre $40-60 \mu T$. Esta ventana funcional es muy flexible, si el ave permanece lo suficiente (de 1 a 17 horas) en un área con una intensidad fuera de su rango, modificará su detección a esa intensidad. Incluso cuando esto sucede, su otro rango aún está disponible. Por ejemplo, si las aves permanecen en un lugar donde hay un campo magnético del orden de $100 \mu T$, pueden detectar aproximadamente el rango $90-110 \mu T$ pero también el campo magnético terrestre entre $40-60 \mu T$.

2. Es una "brújula de inclinación", no basada en la polaridad del campo magnético, sino en el curso axial de las líneas de campo. Se encontró que las aves sólo detectan el ángulo de inclinación con la tierra de la intensidad total del campo. Esto significa que no ven una diferencia entre los polos norte y sur, sólo entre uno de los polos y el ecuador.
3. Requiere luz de onda corta de Ultravioleta a 565 nm Verde. A partir de los resultados experimentales, se descubrió que la brújula de inclinación solo era funcional en presencia de luz entre el ultravioleta y el verde de 565 nm.

Durante mucho tiempo se trató de explicar estas características a través de diversas teorías, pero no fue hasta inicios de los 2000 que se pudo encontrar una explicación: el modelo de los pares radicales, donde hay procesos de espín químicos en una proteína ubicada en el ojo del ave llamada critocromo.

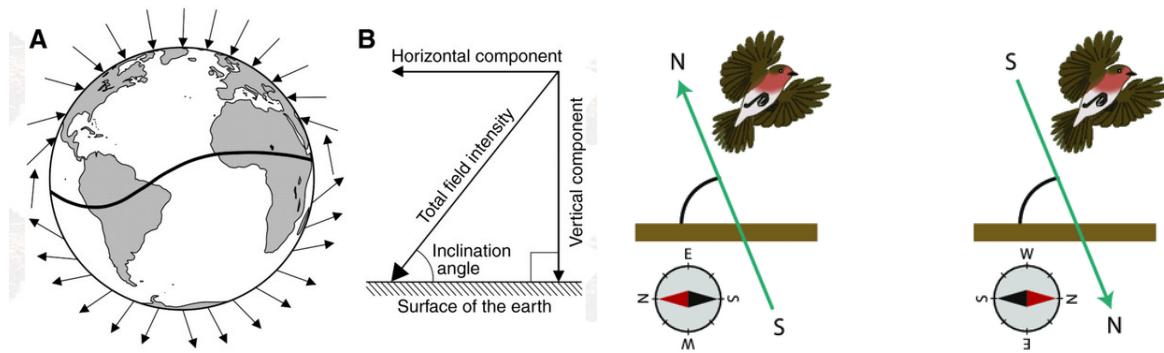


Figura 4.3: Experimentos han demostrado que las aves tienen una brújula de inclinación, lo que significa que miden el ángulo entre las líneas del campo magnético y la superficie, por lo tanto, las aves pueden detectar el polo y el ecuador, no entre el norte y el sur como lo haría una brújula de polaridad.

4.1. Mecanismo de los pares radicales

Un radical es un átomo, molécula o ion que tiene electrones de valencia impares. Radicales y pares de radicales frecuentemente juegan un papel muy importante como intermediarios en reacciones térmicas, de radiación y fotoquímicas. La presencia de espines de electrones impares permite influenciar estas reacciones usando campos magnéticos externos. Sin embargo, hasta 1970 la mayoría de los científicos creían que los campos magnéticos ordinarios no tenían efectos significativos en reacciones químicas o bioquímicas, ya que la energía magnética de las moléculas típicas sobre campos magnéticos ordinarios es mucho más pequeña que la energía térmica a temperatura ambiente. La situación cambió significativamente después de que una serie de resultados experimentales fueron reportados sobre los efectos de campos magnéticos en reacciones químicas[62]. Como explicación de estos estudios surgió el mecanismo de los pares radicales.

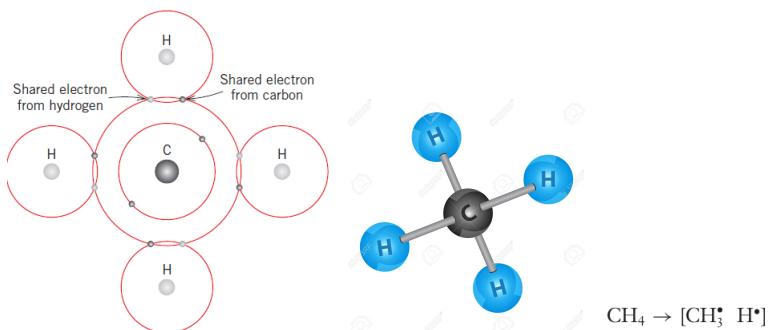


Figura 4.4: (Izquierda) Molécula de metano que contiene 10 electrones. (Derecha) Creación de par de radicales. Un átomo de hidrógeno es separado de la molécula de metano, el resultado es un molécula de metano con 9 electrones (un metano radical) y un átomo de hidrógeno con 1 electrón (un hidrógeno radical)

De acuerdo con el mecanismo de pares radicales, un campo magnético externo afecta las reacciones químicas alterando el estado del espín del par de radicales, los cuales son producidos como un intermediario.

A primera vista, el mecanismo de los pares radicales parece inverosímil: la interacción del campo magnético de la Tierra ($30\text{--}65 \mu\text{T}$) con una sola molécula es más de un millón de veces más pequeña que su energía térmica, $k_B T$ (la constante de Boltzmann multiplicada por la temperatura) es la energía asociada con los movimientos siempre presentes de las moléculas. Normalmente, un impacto significativo en el rendimiento de una transformación química es imposible a menos que se suministre una cantidad de energía que sea al menos comparable a la energía asociada con estos movimientos. La figura 4.5 puede ayudar a dilucidar por qué las reacciones de pares radicales son diferentes. Tomando la analogía de [18], imagina que tenemos un bloque de piedra pesado, ¿una mosca podría tirarlo?. La respuesta obviamente es no. Pero supongamos que hemos suministrado la energía necesaria para equilibrar la piedra en su borde: claramente no sería estable y tendería a caer hacia la izquierda o hacia la derecha si se dejara solo. Pero, ¿qué pasa si una mosca aterriza en su lado derecho mientras el bloque se tambalea de esta manera?. Aunque la energía impartida por la mosca sería diminuta, podría ser suficiente para hacer que el bloque caiga hacia la derecha en lugar de hacia la izquierda. Las pequeñas interacciones pueden tener efectos profundos, pero sólo si el sistema ha sido llevado previamente a un estado apropiado lejos del equilibrio. En el contexto actual, el estado de no equilibrio es el par radical, y la energía requerida para alcanzar ese estado proviene de un fotón.

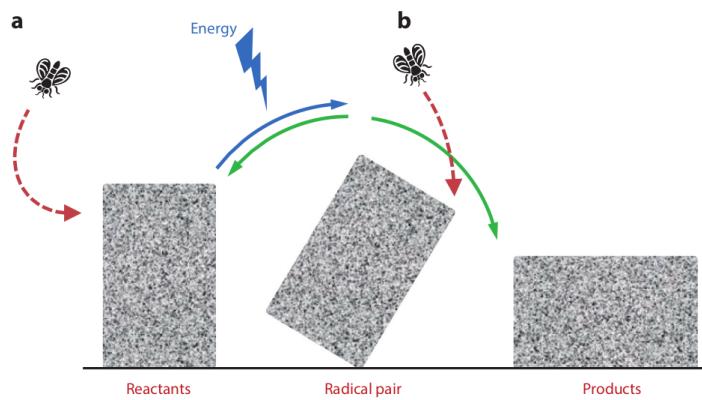


Figura 4.5: Analogía del mecanismo de los pares radicales. Ilustración de [18].

Capítulo 5

Modelo del mecanismo de pares radicales para la magnetorrecepción en las aves

El modelo de los pares radicales para la magnetorrecepción propone que el criptocromo, una proteína que se encuentra en las retinas de las aves y otros animales, puede ser el magnetosensor que detecta la dirección de los campos magnéticos a través de cambios en los estados de espín de sus electrones. Las reacciones dentro de la proteína criptocromo al recibir un fotón generan un par de radicales, los cuales pueden estar en un estado singlete o triplete. El par de radicales oscila entre estos dos estados, y la probabilidad de encontrarlos en un estado u otro está influenciada por la dirección de los campos magnéticos externos. El rendimiento de estos estados (singlete o triplete) influye en las señales neurales de la retina del ave, proporcionando la base para la magnetorrecepción.

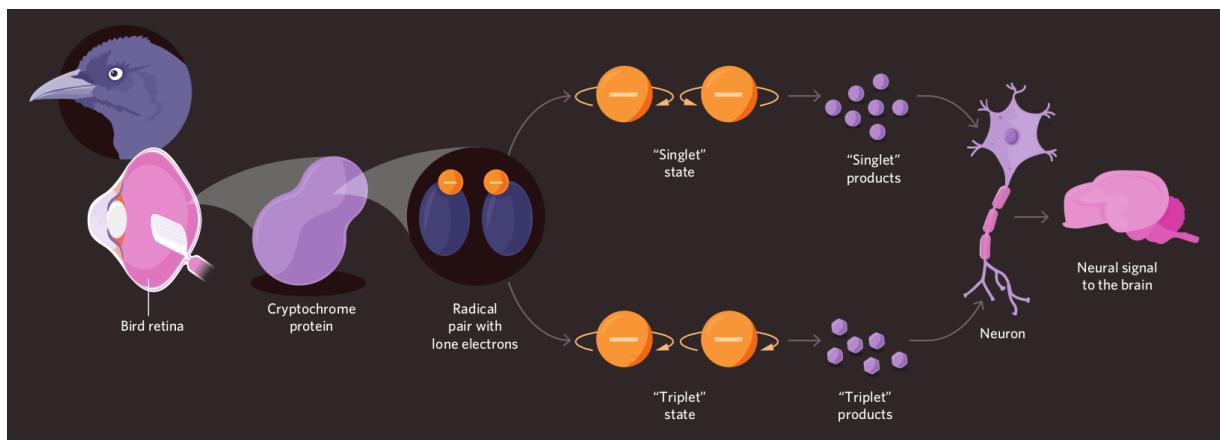


Figura 5.1: Diagrama del mecanismo de los pares radicales para la magnetorrecepción. Ilustración de [Lucy Reading-Ikkanda](#) del artículo [35]

Una vez que se ha formado el par de radicales mediante el transporte de electrones inducido por la luz, nos enfrentamos a la parte del modelo del par de radicales que es sensible a los campos magnéticos. Es el estado de espín del electrón lo que nos concierne aquí y que influye en la reacción química posterior. Por lo que primero analizaremos las expresiones que utilizaremos para expresar este campo magnético, después lo incorporaremos al Hamiltoniano que describe el sistema. Con

CAPÍTULO 5. MODELO DEL MECANISMO DE PARES RADICALES PARA LA MAGNETORRECEPCIÓN EN LAS AVES

el Hamiltoniano desarrollado realizamos simulaciones numéricas del sistema cuántico abierto para posteriormente calcular la información de Skew y Fisher como cuantificadores de las correlaciones cuánticas del sistema

5.1. Campo magnético

El campo magnético que interactúa con los pares radicales se puede representar en coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned}\vec{B} &= B_x \hat{i} + B_y \hat{j} + B_z \hat{k} \\ B_x &= B_0 \sin \theta \cos \phi + B_{rf} \cos \omega t \sin \vartheta \cos \varphi \\ B_y &= B_0 \sin \theta \sin \phi + B_{rf} \cos \omega t \sin \vartheta \sin \varphi \\ B_z &= B_0 \cos \theta + B_{rf} \cos \omega t \cos \vartheta\end{aligned}\tag{5.1}$$

donde B_0 es la intensidad del campo magnético terrestre, θ y ϕ describen su orientación. B_{rf} es la intensidad de un campo magnético externo (siendo mucho más débil que el campo terrestre $B_0 > B_{rf}$) con frecuencia w , ω y φ da la dirección del campo oscilante. Debido a la simetría del problema podemos tomar $\phi = \varphi = 0$ y enfocarnos en $\theta \forall [0, \pi/2]$ sin pérdida de generalidad, por lo que la componente B_y es nula,

$$\begin{aligned}\phi = 0 \rightarrow \vec{B} &= (B_x, 0, B_z) \\ B_x &= B_0 \sin \theta + B_{rf} \cos \omega t \sin \vartheta \\ B_y &= 0 \\ B_z &= B_0 \cos \theta + B_{rf} \cos \omega t \cos \vartheta\end{aligned}\tag{5.2}$$

Esto es apoyado por los resultados experimentales donde la brújula interna de las aves no dependen de la polaridad del campo magnético, solo de su inclinación. Ya que la mayoría de los experimentos en el Robin europeo fueron hechos en la ciudad de Frankfurt, utilizaremos el campo magnético terrestre de esta zona $B_0 = 47 \mu T$

5.2. Hamiltoniano

El sistema de los pares de radicales está descrito por el Hamiltoniano:

$$H = \gamma \vec{B} \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{A} \cdot I,\tag{5.3}$$

donde $\gamma = \frac{1}{2} \mu_B g_s$ es la relación giromagnética, con μ_B siendo el magnetón de Bohr y g_s el factor g del electrón. Los operadores de espín \mathbf{S}_1 , \mathbf{S}_2 son

$$\mathbf{S}_1 = \sigma_x^1 \hat{i} + \sigma_y^1 \hat{j} + \sigma_z^1 \hat{z} \quad \mathbf{S}_2 = \sigma_x^2 \hat{i} + \sigma_y^2 \hat{j} + \sigma_z^2 \hat{z},\tag{5.4}$$

I es el operador de espín para el núcleo, \mathbf{A} es el tensor Hiperfino anisotrópico con una forma dia-

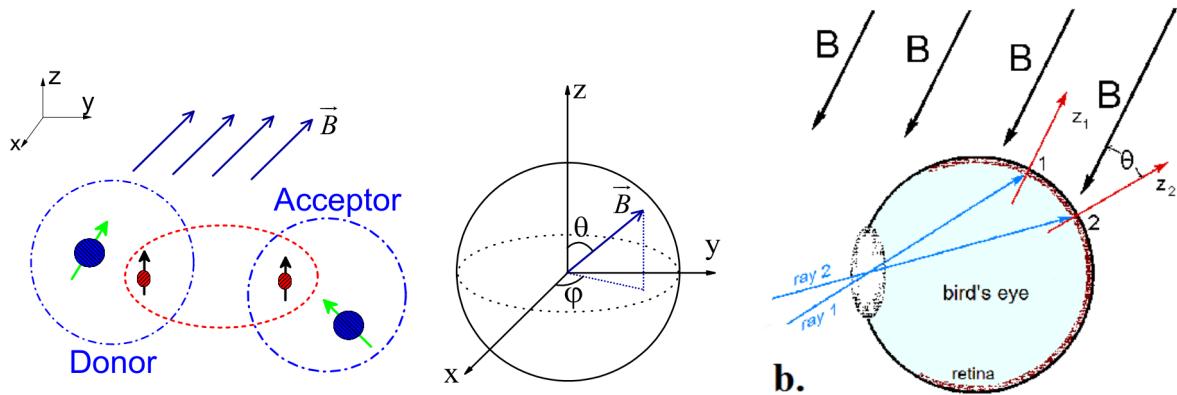


Figura 5.2: (Izquierda) Un par radical acoplado con espines nucleares efectivos (flechas verdes), en un campo magnético externo, \vec{B} (flechas azules). (Derecha) Modelo de ojo utilizado para el cálculo de patrones de modulación visual. Los rayos 1 y 2 ingresan a través de un agujero infinitesimal y se proyectan sobre la retina esférica. Se supone que las proteínas receptoras (Criptocromos) están orientadas de manera normal a la superficie de la retina (direcciones z_1 y z_2), formando ángulos diferentes con la dirección del vector de campo magnético.

gonal $\mathbf{A} = \text{diag}(A_x, A_y, A_z)$. Desarrollando el término que involucra el campo magnético terrestre, creando un efecto Zeeman en el sistema,

$$\gamma \vec{B} \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) = \gamma B_x(\sigma_x^1 + \sigma_x^2) + \gamma B_z(\sigma_z^1 + \sigma_z^2). \quad (5.5)$$

El siguiente término que describe el sistema captura la interacción entre el electrón y el núcleo, conocida como interacción hiperfina,

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{I} = A_{xx} I_x \sigma_x^1 + A_{yy} I_y \sigma_y^1 + A_{zz} I_z \sigma_z^1, \quad (5.6)$$

la fuerza de acoplamiento hiperfina entre un espín de electrón y un espín nuclear de la misma molécula está contenida en el tensor de acoplamiento hiperfino \mathbf{A} . Tomando el campo magnético de la Eq. (5.2), obtenemos el hamiltoniano

$$H = \gamma B_x(\sigma_x^1 + \sigma_x^2) + \gamma B_z(\sigma_z^1 + \sigma_z^2) + A_{xx} I_x \sigma_x^1 + A_{yy} I_y \sigma_y^1 + A_{zz} I_z \sigma_z^1, \quad (5.7)$$

donde B_x y B_z es el campo magnético terrestre en dirección x y y respectivamente. Para realizar simulaciones numéricas con este Hamiltoniano es necesario expresarlo en su forma matricial, para esto debemos elegir una base. Empezamos analizando los estados de espín del electrón que pueden ser denotados como:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= |+1/2\rangle \quad \text{Espín 'Up'} \\ |\downarrow\rangle &= |-1/2\rangle \quad \text{Espín 'Down'} \end{aligned} \quad (5.8)$$

Ya que cada partícula vive en un espacio de dos dimensiones, el espacio resultante es de 4

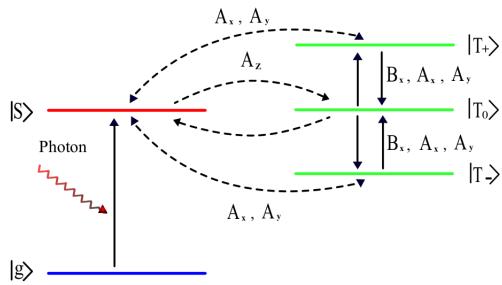


Figura 5.3: Diagrama del mecanismo de los pares radicales. Un fotón excita un electrón y lo transfiere de un donador a un acceptor, un estado singlete $|S\rangle$ es generado. La componente vertical del acoplamiento hiperfino A_z induce la interconversión entre $|S\rangle$ y $|T_0\rangle$ y las componentes horizontales del acoplamiento A_x y A_y inducen las transiciones entre $|S\rangle$ y $|T_{\pm}\rangle$. El campo magnético externo B_x y las componentes horizontales A_x y A_y llevan a las transiciones entre $|T_0\rangle$ y $|T_{\pm}\rangle$. Ilustración de [61]

dimensiones. Para ser más precisos, el sistema bipartito puede ser descrito por estados del tipo:

$$|\uparrow, \downarrow\rangle = |\uparrow\rangle |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \quad (5.9)$$

Este sistema bipartito contiene dos partículas de $1/2$ espín y tiene 4 kets. Los correspondientes kets base son:

$$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \quad (5.10)$$

Esta es base también conocida como la base computacional, utilizada en computación cuántica.

Para expresar el hamiltoniano de la Eq. (5.2) en su forma matricial tenemos que encontrar cada elemento de la matriz de 4×4 para los dos posibles casos, con espín Up ($|\uparrow\rangle$) y Down ($|\downarrow\rangle$). Recordando como actúan los operadores de pauli en la base computacional:

$$\begin{aligned} \sigma_x |\uparrow\rangle &= +1 |\downarrow\rangle, & \sigma_y |\uparrow\rangle &= +i |\downarrow\rangle, & \sigma_z |\uparrow\rangle &= +1 |\uparrow\rangle \\ \sigma_x |\downarrow\rangle &= +1 |\uparrow\rangle, & \sigma_y |\downarrow\rangle &= -i |\uparrow\rangle, & \sigma_z |\downarrow\rangle &= -1 |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (5.11)$$

Y expresando en notación tensorial cada σ_i del Hamiltoniano,

$$\begin{aligned} \sigma_x^1 &= \sigma_x \otimes \mathbb{I}_2, & \sigma_y^1 &= \sigma_y \otimes \mathbb{I}_2, & \sigma_z^1 &= \sigma_z \otimes \mathbb{I}_2 \\ \sigma_x^2 &= \mathbb{I}_1 \otimes \sigma_x, & \sigma_y^2 &= \mathbb{I}_1 \otimes \sigma_y, & \sigma_z^2 &= \mathbb{I}_1 \otimes \sigma_z \end{aligned} \quad (5.12)$$

Podemos expresar cada elemento del hamiltoniano en forma matricial de la siguiente forma

$$H = \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow\rangle & |\downarrow\downarrow\rangle \\ \langle \uparrow\uparrow| & \langle \uparrow\downarrow| H |\uparrow\uparrow\rangle & \langle \uparrow\downarrow| H |\uparrow\downarrow\rangle & \langle \uparrow\downarrow| H |\downarrow\uparrow\rangle & \langle \uparrow\downarrow| H |\downarrow\downarrow\rangle \\ \langle \uparrow\downarrow| & \langle \uparrow\downarrow| H |\uparrow\uparrow\rangle & \langle \uparrow\downarrow| H |\uparrow\downarrow\rangle & \langle \uparrow\downarrow| H |\downarrow\uparrow\rangle & \langle \uparrow\downarrow| H |\downarrow\downarrow\rangle \\ \langle \downarrow\uparrow| & \langle \downarrow\uparrow| H |\uparrow\uparrow\rangle & \langle \downarrow\uparrow| H |\uparrow\downarrow\rangle & \langle \downarrow\uparrow| H |\downarrow\uparrow\rangle & \langle \downarrow\uparrow| H |\downarrow\downarrow\rangle \\ \langle \downarrow\downarrow| & \langle \downarrow\downarrow| H |\uparrow\uparrow\rangle & \langle \downarrow\downarrow| H |\uparrow\downarrow\rangle & \langle \downarrow\downarrow| H |\downarrow\uparrow\rangle & \langle \downarrow\downarrow| H |\downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

Desarrollando cada término y para hacer nuestra discusión más sencilla asumimos $A_x = A_y = 0$. En este caso simplificado, los efectos de A_x y A_y son omitidos y el proceso físico para la orientaciones es el siguiente: La componente vertical del acoplamiento hiperfino A_z lleva a la transición entre el estado singlete $|S\rangle$ y el estado triplete $|T_0\rangle$, el campo horizontal B_x induce la transición entre $|T_0\rangle$ y $|T_{\pm}\rangle$. Cuando solo consideramos la componente vertical del acoplamiento hiperfino, el espín nuclear puede tratarse como un campo magnético efectivo, dependiente del estado del espín. Si el espín nuclear esta en el estado 'Up' ($|\uparrow\rangle$) el campo magnético efectivo es $A_z I_z = A_z/\gamma$ y para el estado 'Down' ($|\downarrow\rangle$) $A_z I_z = -A_z/\gamma$. Obtenemos el hamiltoniano en su forma matricial para el caso con espín 'Up'

$$H_{\uparrow} = \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow\rangle & |\downarrow\downarrow\rangle \\ \langle\uparrow\uparrow| & 2\gamma B_z + A_z/\gamma & \gamma B_x & \gamma B_x & 0 \\ \langle\uparrow\downarrow| & \gamma B_x & A_z/\gamma & 0 & \gamma B_x \\ \langle\downarrow\uparrow| & \gamma B_x & 0 & -A_z/\gamma & \gamma B_x \\ \langle\downarrow\downarrow| & 0 & \gamma B_x & \gamma B_x & -2\gamma B_z - A_z/\gamma \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

y el caso con espín 'Down'

$$H_{\downarrow} = \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow\rangle & |\downarrow\downarrow\rangle \\ \langle\uparrow\uparrow| & 2\gamma B_z - A_z/\gamma & \gamma B_x & \gamma B_x & 0 \\ \langle\uparrow\downarrow| & \gamma B_x & -A_z/\gamma & 0 & 0 \\ \langle\downarrow\uparrow| & \gamma B_x & 0 & A_z/\gamma & \gamma B_x \\ \langle\downarrow\downarrow| & 0 & \gamma B_x & \gamma B_x & -2\gamma B_z + A_z/\gamma \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

Los detalles para desarrollar el hamiltoniano de la Eq. 5.13 a las Eq. 5.14 y 5.15 se encuentran en el apéndice B (Derivación de la forma matricial del Hamiltoniano).

El hamiltoniano que describe el sistema completo es de 8 dimensiones, con los bloques de coherencia entre el espín nuclear Up y Down igual a cero,

$$H_{\uparrow\downarrow} = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle \\ \langle\uparrow| & H_{\uparrow} \\ \langle\downarrow| & 0 \\ 0 & H_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

Expresando explícitamente el hamiltoniano,

$$H_{\uparrow\downarrow} = \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow,\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow,\uparrow\rangle & |\downarrow\uparrow,\uparrow\rangle & |\downarrow\downarrow,\uparrow\rangle & |\uparrow\uparrow,\downarrow\rangle & |\uparrow\downarrow,\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow,\downarrow\rangle & |\downarrow\downarrow,\downarrow\rangle \\ \langle\uparrow\uparrow,\uparrow| & 2\gamma B_z + A_z/\gamma & \gamma B_x & \gamma B_x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\uparrow\downarrow,\uparrow| & \gamma B_x & A_z/\gamma & 0 & \gamma B_x & 0 & 0 & 0 \\ \langle\downarrow\uparrow,\uparrow| & \gamma B_x & 0 & -A_z/\gamma & \gamma B_x & 0 & 0 & 0 \\ \langle\downarrow\downarrow,\uparrow| & 0 & \gamma B_x & \gamma B_x & -2\gamma B_z - A_z/\gamma & 0 & 0 & 0 \\ \langle\uparrow\uparrow,\downarrow| & 0 & 0 & 0 & 2\gamma B_z - A_z/\gamma & \gamma B_x & \gamma B_x & 0 \\ \langle\uparrow\downarrow,\downarrow| & 0 & 0 & 0 & \gamma B_x & -A_z/\gamma & 0 & 0 \\ \langle\downarrow\uparrow,\downarrow| & 0 & 0 & 0 & \gamma B_x & 0 & A_z/\gamma & \gamma B_x \\ \langle\downarrow\downarrow,\downarrow| & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma B_x & \gamma B_x & -2\gamma B_z + A_z/\gamma \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

Donde $|Electron_1 Electron_2, Nucleo\rangle$.

5.3. Mecanismo de pares radicales en sistemas abiertos

En el mecanismo de los pares radicales se presenta una molécula (sistema bipartito) consistente de una partícula donadora y una partícula aceptadora con un estado base de un espín singlete. El donador absorbe un fotón para moverse a un estado excitado. Los dos electrones separados espacialmente pueden interactuar con diferentes campos magnéticos locales. Ambos electrones interactúan con un campo geomagnético local, mientras uno de ellos adicionalmente interactúa con un partícula con un espín nuclear de $|\uparrow\rangle$ o $|\downarrow\rangle$. Esta interacción causa la oscilación entre estado singlete y triplete. La evolución en el tiempo es dependiente del ángulo de inclinación con el campo geomagnético. El estado singlete y triplete decae con una tasa constante k .

Este sistema es descrito por un hamiltoniano donde se considera el espín nuclear $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ y un mecanismo de salida o acumulamiento de dos tipos de productos, en este caso el rendimiento de singlete o triplete.

Para modelar estas interacciones es necesario utilizar la ecuación maestra, donde en la evolución en el tiempo se crean singletes (tripletes) y a través de un mecanismo de salida convierte estos estados a una población $S(T)$ que es la cantidad de singletes (tripletes) a un tiempo t .

El rendimiento de los estados de singlete (triplete) influye en las señales neurales de la retina del ave, proporcionando la base para la magnetorrecepción. Es decir, la 'cantidad' de singletes o tripletes que presente el par de radicales cambiara acorde con la dirección del campo magnético.

El estado del electrón espín-nuclear vive en un espacio de Hilbert de 8 dimensiones. Introducimos los operadores de proyección que representan la cantidad de singletes o rendimiento $|S\rangle$ en el sistema, de igual forma con los tripletes $|T\rangle$.

Por lo tanto, la base de nuestro sistema es de 10 dimensiones:

$$\begin{aligned}
 |\uparrow\uparrow, \uparrow\rangle &= |1\rangle & |\uparrow\uparrow, \downarrow\rangle &= |5\rangle \\
 |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle &= |2\rangle & |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle &= |6\rangle \\
 |\downarrow\uparrow, \uparrow\rangle &= |3\rangle & |\downarrow\uparrow, \downarrow\rangle &= |7\rangle \\
 |\downarrow\downarrow, \uparrow\rangle &= |4\rangle & |\downarrow\downarrow, \downarrow\rangle &= |8\rangle \\
 |S\rangle &= |9\rangle & |T\rangle &= |10\rangle
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Donde $|Electron_1 Electron_2, Nucleo\rangle$. En este caso al Hamiltoniano agregamos los estados de rendimiento $|S\rangle$ y $|T\rangle$

$$H_{\uparrow\downarrow} = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle & |S\rangle & |T\rangle \\ |\uparrow\rangle & H_{\uparrow} & 0 & 0 \\ |\downarrow\rangle & 0 & H_{\downarrow} & 0 \\ |S\rangle & 0 & 0 & 0 \\ |T\rangle & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.19}$$

Obteniendo explicitamente,

$$H_{\uparrow\downarrow} = \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow, \uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle & |\downarrow\uparrow, \uparrow\rangle & |\downarrow\downarrow, \uparrow\rangle & |\uparrow\uparrow, \downarrow\rangle & |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow, \downarrow\rangle & |\downarrow\downarrow, \downarrow\rangle & |S\rangle & |T\rangle \\ |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle & 2\gamma B_z + A_z/\gamma & \gamma B_x & \gamma B_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle & \gamma B_x & A_z/\gamma & 0 & \gamma B_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |\downarrow\uparrow, \uparrow\rangle & \gamma B_x & 0 & -A_z/\gamma & \gamma B_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |\downarrow\downarrow, \uparrow\rangle & 0 & \gamma B_x & \gamma B_x & -2\gamma B_z - A_z/\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |\uparrow\uparrow, \downarrow\rangle & 0 & 0 & 0 & 2\gamma B_z - A_z/\gamma & \gamma B_x & \gamma B_x & 0 & 0 & 0 \\ |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle & 0 & 0 & 0 & 2\gamma B_x & -A_z/\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |\downarrow\uparrow, \downarrow\rangle & 0 & 0 & 0 & \gamma B_x & 0 & A_z/\gamma & \gamma B_x & 0 & 0 \\ |\downarrow\downarrow, \downarrow\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma B_x & \gamma B_x & -2\gamma B_z + A_z/\gamma & 0 & 0 \\ |S\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |T\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

Pero como es de nuestro interés investigar la intreconversión singletes-tripletes del sistema, es necesario expresar los singletes y tripletes en nuestra base, definiendo los nuevos operadores como

$$\begin{aligned} |s, \uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle) & |s, \downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|6\rangle - |7\rangle) \\ |t_0, \uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle) & |t_0, \downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|6\rangle + |7\rangle) \\ |t_+, \uparrow\rangle &= |1\rangle & |t_+, \downarrow\rangle &= |5\rangle \\ |t_-, \uparrow\rangle &= |4\rangle & |t_-, \downarrow\rangle &= |8\rangle \end{aligned} \quad (5.21)$$

Para poder investigar la dinámica en el mecanismo de los pares radicales es necesario tomar en cuenta que el sistema biológico esta en contacto con el ambiente por lo que presentará decoherencia. La ecuación maestra es la que nos permite estudiar esta dinámica,

$$\rho(t) = \frac{d\rho}{dt} = \frac{-i}{\hbar}[H, \rho] + k \sum_i P_i \rho P_i^\dagger - \frac{1}{2} \left(\sum_i \rho P_i^\dagger P_i + P_i^\dagger P_i \rho \right). \quad (5.22)$$

Donde el coeficiente k representa las tasas de decoherencia o disipación del sistema con unidades de tiempo inverso y los operadores de proyección o decaimiento se definen como:

$$\begin{aligned} P_1 &= P_{S,\uparrow} = |S\rangle \langle s, \uparrow|, & P_2 &= P_{S,\downarrow} = |S\rangle \langle s, \downarrow| \\ P_3 &= P_{T_+,\uparrow} = |T\rangle \langle t_+, \uparrow|, & P_4 &= P_{T_+,\downarrow} = |T\rangle \langle t_+, \downarrow| \\ P_5 &= P_{T_-,\uparrow} = |T\rangle \langle t_-, \uparrow|, & P_6 &= P_{T_-,\downarrow} = |T\rangle \langle t_-, \downarrow| \\ P_7 &= P_{T_0,\uparrow} = |T\rangle \langle t_0, \uparrow|, & P_8 &= P_{T_0,\downarrow} = |T\rangle \langle t_0, \downarrow| \end{aligned} \quad (5.23)$$

donde cada proyector nos dice la cantidad de singletes o tripletes que hay en cada estado proyectado. Por ejemplo, si tenemos un estado mixto: $\rho_0 = 0,7|s, \uparrow\rangle \langle s, \uparrow| + 0,3|t_+, \uparrow\rangle \langle t_+, \uparrow|$. Aplicando

el proyector P_1 a ρ_0 obtenemos

$$\begin{aligned}
 P_1\rho_0P_1^\dagger &= |S\rangle\langle s,\uparrow| \left[0,7|s,\uparrow\rangle\langle s,\uparrow| + 0,3|t_+,\uparrow\rangle\langle t_+,\uparrow| \right] |s,\uparrow\rangle\langle S| \\
 &= 0,7|S\rangle\langle s,\uparrow| |s,\uparrow\rangle\langle s,\uparrow| |s,\uparrow\rangle\langle S| + 0,3|S\rangle\langle s,\uparrow| |t_+,\uparrow\rangle\langle t_+,\uparrow| |s,\uparrow\rangle\langle S| \\
 &= 0,7|S\rangle\langle S|.
 \end{aligned} \tag{5.24}$$

La matriz de densidad obtenida de resolver la ecuación maestra (Ec.5.22) se utilizará para calcular el rendimiento del singlete a un tiempo t ($\rho_{t,k}(\theta)$),

$$\text{Rendimiento de Singlete} = \Phi_{t,k}(\theta) = \text{Tr}[\rho_{t,k}(\theta))S] \quad S = |S\rangle\langle S| \tag{5.25}$$

donde S es el estado de rendimiento del singlete.

También, con la matriz de densidad obtenida de la ecuación maestra obtendremos las correlaciones cuánticas $\mathcal{Q}(\rho(t))$ y $LQU(\rho(t))$, en función del tiempo y ángulo (θ) del campo terrestre utilizando las Ec.(3.37) y (3.32)

Capítulo 6

Resultados y discusión

En esta sección se resolvió la ecuación maestra (Ec. 5.22) con un campo magnético terrestre de la ciudad de Frankfurt $B_0 = 47\mu T$, ya que la mayoría de los experimentos con aves se realizaron en dicha ciudad. Para el tensor hiperfino asumimos $A_x = A_y = 0$ (como ya se discutió en el capítulo 5 en la sección 5.2 Hamiltoniano) y $A_z = 10^{-5}mev$. El tiempo $t = 0$ corresponde al momento de formación del par radical y el estado inicial ρ_0 utilizado en todas las simulaciones de nuestro modelo es el estado mixto,

$$\rho_0 = \frac{1}{2}(|s,\uparrow\rangle\langle s,\uparrow| + |s,\downarrow\rangle\langle s,\downarrow|), \quad (6.1)$$

donde $|s,\uparrow(\downarrow)\rangle$ es el singlete con espín nuclear $|\uparrow\rangle$ ($|\downarrow\rangle$). Todas las simulaciones se realizaron en Python utilizando la librería QuTip.

6.1. Poblaciones y rendimiento de singlete

Primero estudiaremos las poblaciones del sistema en función del tiempo para distintos ángulos ($\theta = 0, \pi/8, \pi/4, \pi/2$) del campo magnético terrestre, tomando en consideración que los estados $|9\rangle$ y $|10\rangle$ son los rendimientos de singlete y triplete respectivamente.

Obtenemos esta evolución en el tiempo de las poblaciones de los estados $|i\rangle$ calculando,

$$\langle i \rangle_{t,\theta} = Tr[\rho(t,\theta))i] \quad i = |i\rangle\langle i|. \quad (6.2)$$

Los resultados se muestran en la figura 6.1, donde observamos las poblaciones en función del tiempo y a 4 ángulos ($\theta = 0, \pi/8, \pi/4, \pi/2$).

En la figura 6.1.(a) tenemos el caso para $\theta = 0$, vemos que los estados de rendimiento son iguales durante la evolución en el tiempo y los demás $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle, |6\rangle, |7\rangle, |8\rangle$ muestran un oscilación amortiguada. La figura 6.1.(b) muestra el caso para $\theta = \pi/8$, donde observamos que los estados de rendimiento de singlete y tripletes se empiezan a separar y los demás estados siguen con una oscilación. En la figura 6.1.(c) y 6.1.(d) vemos que la separación entre los estados de rendimiento se vuelve más prominente y la oscilación amortiguada de los estados restantes sigue presente.

La separación de las poblaciones de los estados $|9\rangle$ y $|10\rangle$ dependiendo del ángulo del campo

Poblaciones Vs Tiempo

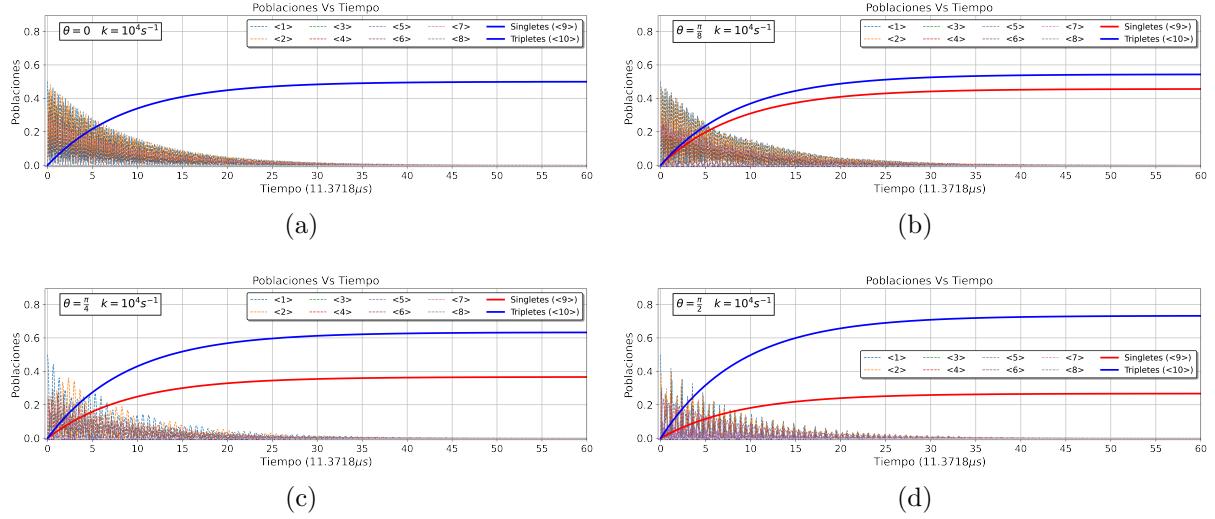


Figura 6.1: Evolución en el tiempo de las poblaciones de los estados dado un ángulo (θ) del campo magnético terrestre , a) $\theta = 0$, b) $\theta = \pi/8$, c) $\theta = \pi/4$, d) $\theta = \pi/2$. Los estados están dados por la base del sistema (Eq. 5.18)

magnético terrestre es causada por la interconversión singlete-triplete. La oscilación de los estados $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle, |6\rangle, |7\rangle, |8\rangle$ y sus disipaciones al aumentar el tiempo muestran los efectos de la decoherencia en el sistema.

Continuemos ahora con el estudio del rendimiento del singlete en función del ángulo del campo magnético, lo cual mide la sensibilidad del sistema al campo magnético terrestre. Utilizamos diferentes constantes de disipación ($k = 0,5 \times 10^{-4} s^{-1}, 10^{-4} s^{-1}, 1,5 \times 10^{-4} s^{-1}, 10^{-5} s^{-1}$) y tomando la matriz de densidad a 7 tiempos distintos ($t = 568, 398, 284, 170, 119, 100, 56$ en unidades de μs).

Se obtuvo el rendimiento del singlete utilizando la matriz de densidad del sistema a un tiempo t ($\rho_{t,k}(\theta)$) obtenida al resolver la ecuación maestra (Ec.5.22),

$$\text{Rendimiento de Singlete} = \Phi_{t,k}(\theta) = \text{Tr}[\rho_{t,k}(\theta)]S \quad S = |S\rangle\langle S|. \quad (6.3)$$

donde S es el estado de rendimiento del singlete. En la figura 6.2 se presentan los resultados, el rendimiento del singlete en función del ángulo (θ) con las 4 constantes de disipación y los 7 tiempos distintos.

En la figura 6.2.(a) se muestra el rendimiento de singlete con la constante de disipación $k = 0,5 \times 10^4 s^{-1}$, vemos que la cantidad de singletes disminuye al ir aumentando el ángulo y a distintos tiempos muestra un aumento. La figura 6.2.(b), donde $k = 10^4 s^{-1}$, observamos la misma disminución de singletes con el ángulo y a distintos tiempos sigue mostrando un aumento pero con una separación menor. En la figura 6.2.(c) con $k = 1,5 \times 10^4 s^{-1}$ se muestra la misma dependencia con el ángulo y al aumentar el tiempo se observa una convergencia. Finalmente en la figura 6.2.(d) con $k = 10^5 s^{-1}$ vemos que la dependencia con el ángulo sigue presente pero esta vez el comportamiento de todos los tiempos convergieron al tiempo $t = 60 = 568 \mu s$.

Para todos los casos con distintas constantes de disipación, vemos que el rendimiento de singlete

Rendimiento de Singlete Vs Ángulo del campo magnético terrestre \vec{B}

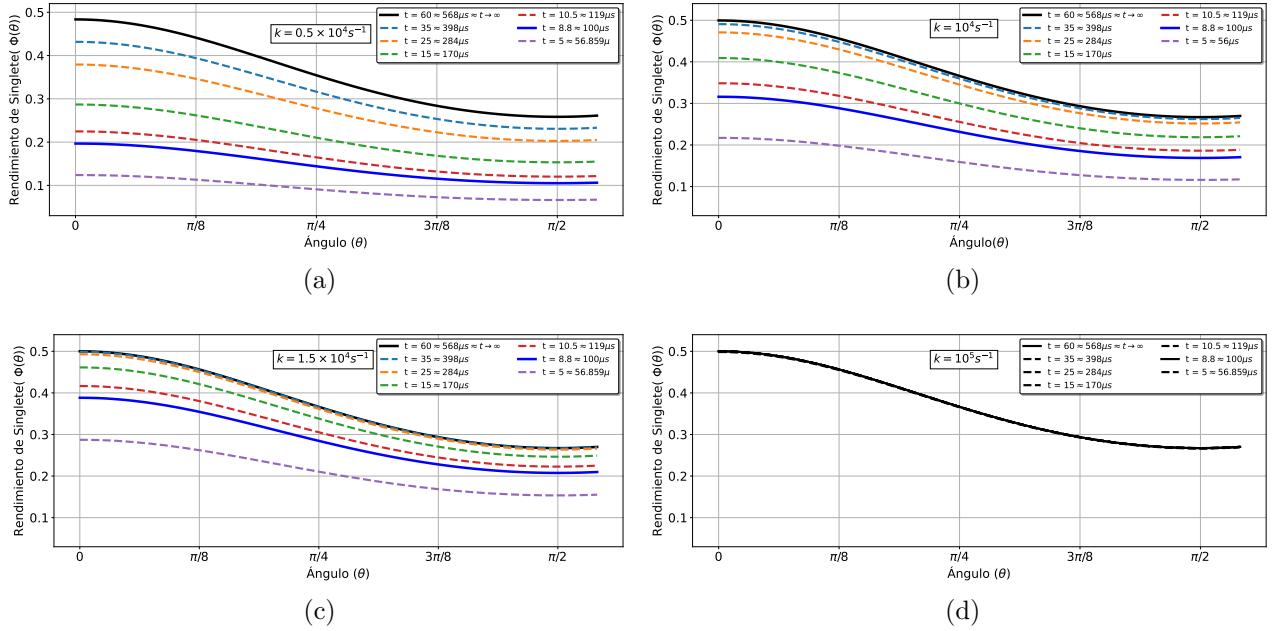


Figura 6.2: El rendimiento de singlete en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre para distintas k (Constantes de disipación). a) $k = 0,5 \times 10^4 s^{-1}$ b) $k = 10^4 s^{-1}$, esta es la constante equivalente al tiempo de vida experimental de los pares radicales, que es equivalente a el tiempo $t = 8,8 \approx 100\mu s$ c) $k = 1,5 \times 10^4 s^{-1}$ d) $k = 10^5 s^{-1}$

siempre tiene una dependencia con el ángulo del campo terrestre que muestra una disminución del rendimiento. Recientemente se ha encontrado experimentalmente que el tiempo de vida de los pares radicales, la inversa de k , es del orden de $10^{-4}s$, que equivale a la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$. El comportamiento con esta constante se muestra en la figura 6.2.(b), en lo que sigue de nuestra investigación utilizaremos esta constante de disipación.

En el caso de los distintos tiempos podemos tomar el tiempo $t = 60 \approx 568\mu s$ como el estado estacionario ('steady state') del sistema, notamos que para $k = 10^5 s^{-1}$ el rendimiento del singlete se comporta como estado estacionario en todos los tiempos.

Estos resultados, la dependencia del ángulo del campo magnético terrestre con el rendimiento del singlete, son consistentes con los distintos estudios del mecanismos de los pares radicales, específicamente con Xu et al. [61], Gauger et al [10] y Poonia et al. [41]

6.2. Información cuántica de Fisher y Skew como medida de las correlaciones cuánticas del mecanismo de los pares radicales

Se calculó la información de Fisher y Skew como medida de las correlaciones cuánticas (\mathcal{Q} y LQU) del mecanismo de los pares radicales utilizando la Ec.(3.37) y Ec.(3.32) con los operadores $\sigma_{i,A}$ modificados para tomar en cuenta los estados de rendimiento S y T . A continuación desarrollamos

cada $\sigma_{i,A} = (\sigma_{x,A}, \sigma_{y,A}, \sigma_{z,A})$ para los casos con espín nuclear 'up' (\uparrow) y 'down' (\downarrow), expresando cada σ_i en su forma matricial. Recordando la base del sistema,

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow, \uparrow\rangle &= |1\rangle & |\uparrow\uparrow, \downarrow\rangle &= |5\rangle \\ |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle &= |2\rangle & |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle &= |6\rangle \\ |\downarrow\uparrow, \uparrow\rangle &= |3\rangle & |\downarrow\uparrow, \downarrow\rangle &= |7\rangle \\ |\downarrow\downarrow, \uparrow\rangle &= |4\rangle & |\downarrow\downarrow, \downarrow\rangle &= |8\rangle \\ |S\rangle &= |9\rangle & |T\rangle &= |10\rangle \end{aligned} \quad (6.4)$$

donde se agregaron los estados de rendimiento 9 y 10. Sabemos como los operadores σ_i de dos dimensiones operan sobre los estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ de la forma,

$$\begin{aligned} \sigma_x |\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle & \sigma_y |\uparrow\rangle &= i |\uparrow\rangle & \sigma_z |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \\ \sigma_x |\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle & \sigma_y |\downarrow\rangle &= -i |\uparrow\rangle & \sigma_z |\downarrow\rangle &= - |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (6.5)$$

Aplicando estas operaciones a la base del sistema para el caso de σ_x actuando en el primer electrón con las dos opciones del espín nuclear, obtenemos,

$$\begin{array}{llll} \sigma_{x,\uparrow}^1 |1\rangle = |3\rangle & \sigma_{x,\uparrow}^1 |2\rangle = |4\rangle & \sigma_{x,\downarrow}^1 |1\rangle = 0 & \sigma_{x,\downarrow}^1 |2\rangle = 0 \\ \sigma_{x,\uparrow}^1 |3\rangle = |1\rangle & \sigma_{x,\uparrow}^1 |4\rangle = |2\rangle & \sigma_{x,\downarrow}^1 |3\rangle = 0 & \sigma_{x,\downarrow}^1 |4\rangle = 0 \\ \sigma_{x,\uparrow}^1 |5\rangle = 0 & \sigma_{x,\uparrow}^1 |6\rangle = 0 & \sigma_{x,\downarrow}^1 |5\rangle = |7\rangle & \sigma_{x,\downarrow}^1 |6\rangle = |8\rangle \\ \sigma_{x,\uparrow}^1 |7\rangle = 0 & \sigma_{x,\uparrow}^1 |8\rangle = 0 & \sigma_{x,\downarrow}^1 |7\rangle = |5\rangle & \sigma_{x,\downarrow}^1 |8\rangle = |6\rangle \\ \sigma_{x,\uparrow}^1 |9\rangle = 0 & \sigma_{x,\uparrow}^1 |10\rangle = 0 & \sigma_{x,\downarrow}^1 |9\rangle = 0 & \sigma_{x,\downarrow}^1 |10\rangle = 0 \end{array} \quad (6.6)$$

dando como resultado la matriz para los casos $\sigma_{x,\uparrow}^1$ (σ_x actuando en el primer electrón con el espín nuclear 'Up' (\uparrow)) y $\sigma_{x,\downarrow}^1$ (σ_x actuando en el primer electrón con el espín nuclear 'down' (\downarrow)).

$$\sigma_{x,\uparrow}^1 = \begin{pmatrix} |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle & |4\rangle & |5\rangle & |6\rangle & |7\rangle & |8\rangle & |9\rangle & |10\rangle \\ |1\rangle & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |2\rangle & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |3\rangle & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |4\rangle & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |5\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |6\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |7\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |8\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |9\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |10\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_{x,\downarrow}^1 = \begin{pmatrix} |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle & |4\rangle & |5\rangle & |6\rangle & |7\rangle & |8\rangle & |9\rangle & |10\rangle \\ |1\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |2\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |3\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |4\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |5\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 \\ |6\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} \\ |7\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 \\ |8\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ |9\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |10\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

Nótese la inclusión de los estados $|9\rangle$ y $|10\rangle$, que siempre son nulos en todos los σ_i ya que se utilizan como rendimiento de singlete y triplete. De la misma forma para el caso de σ_y actuando

en el electrón 1 con el espín nuclear \uparrow y \downarrow ,

$$\begin{array}{ll}
 \sigma_{y,\uparrow}^1 |1\rangle = i|3\rangle & \sigma_{y,\uparrow}^1 |2\rangle = i|4\rangle \\
 \sigma_{y,\uparrow}^1 |3\rangle = -i|1\rangle & \sigma_{y,\uparrow}^1 |4\rangle = -i|2\rangle \\
 \sigma_{y,\uparrow}^1 |5\rangle = 0 & \sigma_{y,\uparrow}^1 |6\rangle = 0 \\
 \sigma_{y,\uparrow}^1 |7\rangle = 0 & \sigma_{y,\uparrow}^1 |8\rangle = 0 \\
 \sigma_{y,\uparrow}^1 |9\rangle = 0 & \sigma_{y,\uparrow}^1 |10\rangle = 0
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{ll}
 \sigma_{y,\downarrow}^1 |1\rangle = 0 & \sigma_{y,\downarrow}^1 |2\rangle = 0 \\
 \sigma_{y,\downarrow}^1 |3\rangle = 0 & \sigma_{y,\downarrow}^1 |4\rangle = 0 \\
 \sigma_{y,\downarrow}^1 |5\rangle = i|7\rangle & \sigma_{y,\downarrow}^1 |6\rangle = i|8\rangle \\
 \sigma_{y,\downarrow}^1 |7\rangle = -i|5\rangle & \sigma_{y,\downarrow}^1 |8\rangle = -i|6\rangle \\
 \sigma_{y,\downarrow}^1 |9\rangle = 0 & \sigma_{y,\downarrow}^1 |10\rangle = 0
 \end{array} \quad (6.8)$$

expresando esto en forma de matriz.

$$\sigma_{y,\uparrow}^1 = \left(\begin{array}{c|cccccccccc}
 |1\rangle & |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle & |4\rangle & |5\rangle & |6\rangle & |7\rangle & |8\rangle & |9\rangle & |10\rangle \\
 \hline
 |1\rangle & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |2\rangle & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |3\rangle & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |4\rangle & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |5\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |6\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |7\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |8\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |9\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |10\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right) \quad \sigma_{y,\downarrow}^1 = \left(\begin{array}{c|cccccccccc}
 |1\rangle & |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle & |4\rangle & |5\rangle & |6\rangle & |7\rangle & |8\rangle & |9\rangle & |10\rangle \\
 \hline
 |1\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |2\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |3\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |4\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |5\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 \\
 |6\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 \\
 |7\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |8\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |9\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |10\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right) \quad (6.9)$$

Siguiendo el mismo procedimiento para el caso de σ_z obtenemos

$$\begin{array}{ll}
 \sigma_{z,\uparrow}^1 |1\rangle = |1\rangle & \sigma_{z,\uparrow}^1 |2\rangle = |2\rangle \\
 \sigma_{z,\uparrow}^1 |3\rangle = -|3\rangle & \sigma_{z,\uparrow}^1 |4\rangle = -|4\rangle \\
 \sigma_{z,\uparrow}^1 |5\rangle = 0 & \sigma_{z,\uparrow}^1 |6\rangle = 0 \\
 \sigma_{z,\uparrow}^1 |7\rangle = 0 & \sigma_{z,\uparrow}^1 |8\rangle = 0 \\
 \sigma_{z,\uparrow}^1 |9\rangle = 0 & \sigma_{z,\uparrow}^1 |10\rangle = 0
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{ll}
 \sigma_{z,\downarrow}^1 |1\rangle = 0 & \sigma_{z,\downarrow}^1 |2\rangle = 0 \\
 \sigma_{z,\downarrow}^1 |3\rangle = 0 & \sigma_{z,\downarrow}^1 |4\rangle = 0 \\
 \sigma_{z,\downarrow}^1 |5\rangle = |5\rangle & \sigma_{z,\downarrow}^1 |6\rangle = |6\rangle \\
 \sigma_{z,\downarrow}^1 |7\rangle = -|7\rangle & \sigma_{z,\downarrow}^1 |8\rangle = -|8\rangle \\
 \sigma_{z,\downarrow}^1 |9\rangle = 0 & \sigma_{z,\downarrow}^1 |10\rangle = 0
 \end{array} \quad (6.10)$$

Al igual que su forma matricial

$$\sigma_{z,\uparrow}^1 = \left(\begin{array}{c|cccccccccc}
 |1\rangle & |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle & |4\rangle & |5\rangle & |6\rangle & |7\rangle & |8\rangle & |9\rangle & |10\rangle \\
 \hline
 |1\rangle & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |2\rangle & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |3\rangle & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |4\rangle & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |5\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |6\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |7\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |8\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |9\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |10\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right) \quad \sigma_{z,\downarrow}^1 = \left(\begin{array}{c|cccccccccc}
 |1\rangle & |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle & |4\rangle & |5\rangle & |6\rangle & |7\rangle & |8\rangle & |9\rangle & |10\rangle \\
 \hline
 |1\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |2\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |3\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |4\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |5\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |6\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |7\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
 |8\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
 |9\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 |10\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right) \quad (6.11)$$

Para trabajar con la información de Fisher y Skew como medida de las correlaciones cuánticas del sistema se siguió el siguiente método:

- (1) Definir los subsistemas del sistema. La definición de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y $LQU_\theta(\rho(t))$ nos permite

elegir cualquier subsistema para medir las correlaciones cuánticas tipo discordia del sistema. En este caso se eligieron tres particiones del sistema, cada parte describe una familia de correlaciones cuánticas.

(2) Determinar los estados cuánticos representados por la matriz de densidad resolviendo la ecuación maestra. Después de haber definido las familias de correlaciones cuánticas el siguiente paso es determinar los estados cuánticos, utilizando los resultados de resolver la ecuación maestra (Ec.5.22). Obteniendo la matriz de densidad $\rho(t, \theta)$ del sistema en función del tiempo (t) y el ángulo del campo magnético terrestre (θ).

(3) Calcular $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y $LQU_\theta(\rho(t))$ entre los subsistemas. Con los estados cuánticos determinados y las familias de correlaciones cuánticas definidas se puede calcular $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y $LQU_\theta(\rho(t))$, utilizando las Ec.(3.37) y (3.32), obteniendo las matriz W con los distintos σ_{iA} dependiendo de la familia de correlaciones.

La primera familia **f₁** corresponde a las correlaciones cuánticas tipo discordia entre el espín del electrón 1 (S_1) con el espín nuclear 'Up' (I^\uparrow) y el resto del sistema, el espín 2 (S_2) con espín nuclear 'Up' (I^\uparrow) y Down' (I^\downarrow), por lo que los subsistemas se definen como,

$$\{S_1 - I^\uparrow\} = \text{SubsistemaA}_1 \quad \{S_2 - I^\uparrow, S_2 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaB}_1 \quad (6.12)$$

En esta familia de correlaciones el operador local actuando en el sistema es $K_A = n_\uparrow \cdot \vec{\sigma}_{\uparrow,A}$ por la forma del subsistema A_1 , por lo que se utilizan $\sigma_{iA} = (\sigma_{x,\uparrow}^1, \sigma_{y,\uparrow}^1, \sigma_{z,\uparrow}^1)$ al momento de calcular la matriz W para \mathcal{Q} y LQU .

La segunda familia **f₂** corresponde a las correlaciones cuánticas entre el electrón 1 (S_1) con el espín nuclear 'Down' (I^\downarrow) y el resto del sistema, el espín 2 (S_2) con espín nuclear 'Up' (I^\uparrow) y Down' (I^\downarrow).

$$\{S_1 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaA}_2 \quad \{S_2 - I^\uparrow, S_2 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaB}_2 \quad (6.13)$$

En esta familia de correlaciones el operador local actuando en el sistema es $K_A = n_\downarrow \cdot \vec{\sigma}_{\downarrow,A}$ por la forma del subsistema A_2 , por lo que se utilizan $\sigma_{iA} = (\sigma_{x,\downarrow}^1, \sigma_{y,\downarrow}^1, \sigma_{z,\downarrow}^1)$ al momento de calcular la matriz W para $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y $LQU_\theta(\rho(t))$.

La tercera familia **f₃** corresponde a las correlaciones cuánticas entre el electrón 1 (S_1) con el espín nuclear 'Up' (I^\uparrow) y 'Down' (I^\downarrow), y el resto del sistema, el espín 2 (S_2) con espín nuclear 'Up' (I^\uparrow) y Down' (I^\downarrow).

$$\{S_1 - I^\uparrow, S_1 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaA}_3 \quad \{S_2 - I^\uparrow, S_2 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaB}_3 \quad (6.14)$$

En esta familia de correlaciones el operador local actuando en el sistema es $K_A = n_\uparrow \cdot \vec{\sigma}_{\uparrow,A} + n_\downarrow \cdot \vec{\sigma}_{\downarrow,A}$ por la forma del subsistema A_3 , por lo que se utilizan $\sigma_{iA} = (\sigma_{x,\uparrow}^1, \sigma_{y,\uparrow}^1, \sigma_{z,\uparrow}^1, \sigma_{x,\downarrow}^1, \sigma_{y,\downarrow}^1, \sigma_{z,\downarrow}^1)$ al momento de calcular la matriz W para \mathcal{Q} y LQU .

En la figura 6.3 podemos observar $\mathcal{Q}_\theta(t)$ y $LQU_\theta(t)$ para f_1 en función del tiempo (t), con 4

ángulos del campo magnético terrestre ($\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$).

En la figura 6.3.(a) observamos $\mathcal{Q}_\theta(t)$, donde vemos una dependencia con el ángulo del campo terrestre al ir disminuyendo hasta el ángulo $\theta = 3\pi/8$ y aumentar para el ángulo $\theta = \pi/2$ con un mínimo aproximado en el tiempo $t = 8,8 \approx 100\mu s$. Este mínimo es el tiempo de vida de los pares radicales para la constante $k = 10^4 s^{-1}$. Un comportamiento similar tiene $LQU_\theta(t)$ en la figura 6.3.(b).

$\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ para las correlaciones cuánticas de f_1

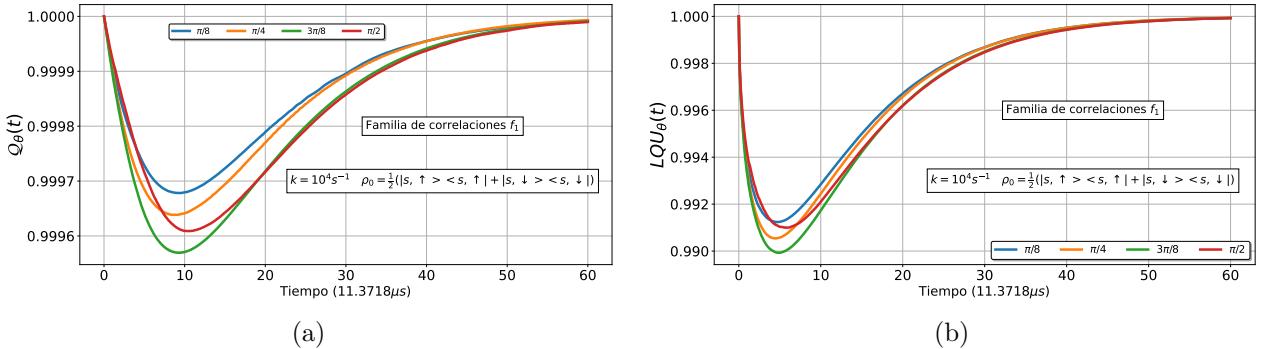


Figura 6.3: (a) $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 4 ángulos distintos, $\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$

Al comparar las dos medidas de correlaciones cuánticas, observamos que en ambos casos empezamos con un estado con máximas correlaciones cuánticas ($\mathcal{Q}_\theta(t) = LQU_\theta(t) = 1$) que disminuye, encontrando el mínimo en el tiempo de vida de los pares radicales. Después de este mínimo inicia un aumento hasta llegar a otro estado con máximas correlaciones cuánticas, aquí surge la pregunta, ¿este nuevo estado es completamente diferente al estado inicial?, en secciones posteriores utilizaremos la fidelidad para investigar esta cuestión. También vemos que $\mathcal{Q}_\theta(t)$ muestra una variación mas grande al cambiar de ángulo (θ) que $LQU_\theta(t)$. Por lo que $\mathcal{Q}_\theta(t)$ es mas sensible a las variaciones del campo magnético terrestre.

De estos resultados es clara la dependencia, sensibilidad, de $\mathcal{Q}_\theta(t)$ y $LQU_\theta(t)$ con el ángulo θ del campo magnético terrestre al igual que con el rendimiento del singlete, para investigar la relación entre estos dos términos, o sea, cómo el recurso de correlaciones cuánticas esta relacionado con la sensibilidad del campo terrestre en el rendimiento de singlete, introducimos la eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(t)$ y $LQU_\theta(t)$

Definimos la eficiencia como la medida en que las correlaciones cuánticas se utilizan para una tarea, en este caso para la detección del campo magnético terrestre. La eficiencia del cuantificador de correlaciones cuánticas utilizando la información cuántica de Fisher se define como,

$$\text{Eficiencia de } \mathcal{Q}_\theta(\rho(t)) = E_{\mathcal{Q}}(t) = 1 - \mathcal{Q}_\theta(\rho(t)), \quad (6.15)$$

donde $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ está definida por la Eq.3.37 y la eficiencia del cuantificador de correlaciones cuánticas utilizando la información de Skew, incertidumbre cuántica local, se define como

$$\text{Eficiencia de } LQU_\theta(\rho(t)) = E_{LQU}(t) = 1 - LQU_\theta(\rho(t)), \quad (6.16)$$

donde $LQU_\theta(\rho(t))$ esta definido por la Eq. 3.32, en ambos casos eficiencia igual a 0 equivale a una perdida nula de correlaciones cuánticas durante el proceso.

Para comparar el comportamiento de $\mathcal{Q}_\theta(t)$ y $LQU_\theta(t)$, en la figura 6.4 podemos observar su eficiencia para f_1 en función del tiempo (t), con 4 ángulos del campo magnético terrestre ($\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$).

Eficiencia de $\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ para las correlaciones cuánticas de f_1

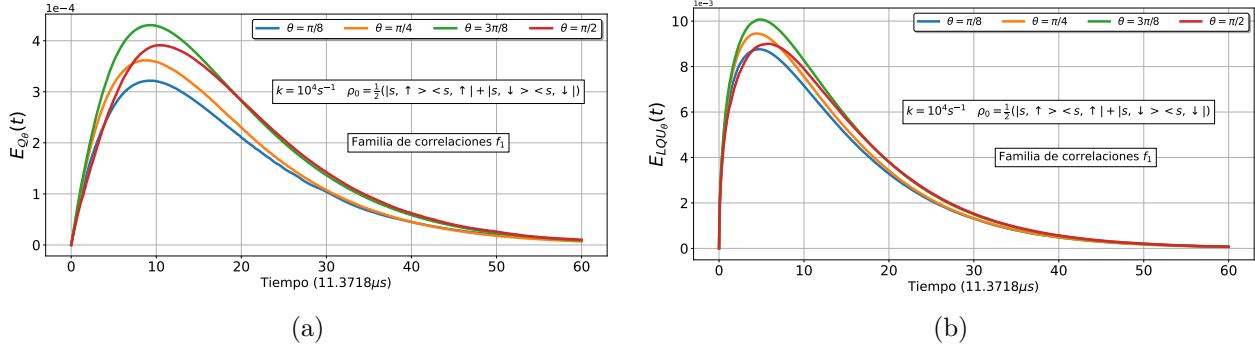


Figura 6.4: (a) Eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 4 ángulos distintos, $\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$

En la figura 6.4.a observamos la eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(t)$, donde vemos una dependencia con el ángulo del campo terrestre al ir aumentando hasta el ángulo $\theta = 3\pi/8$ y disminuir para el ángulo $\theta = \pi/2$ con un máximo aproximado en $t = 8,8 \approx 100\mu s$. Este máximo es el tiempo de vida de los pares radicales para la constante $k = 10^4 s^{-1}$. Un comportamiento similar tiene la eficiencia de $LQU_\theta(t)$ en la figura 6.4.b. Al comparar las dos medidas de correlaciones cuánticas, vemos que $\mathcal{Q}_\theta(t)$ muestra una variación mas grande al cambiar de ángulo (θ) que $LQU_\theta(t)$. Por lo que $\mathcal{Q}_\theta(t)$ es mas sensible a las variaciones del campo magnético terrestre.

Al igual que con f_1 , comparamos la eficiencia de $\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ en función del tiempo (t) para f_2 en la figura 6.5 para 4 ángulos distintos ($\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$).

Eficiencia de $\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ para las correlaciones cuánticas de f_2

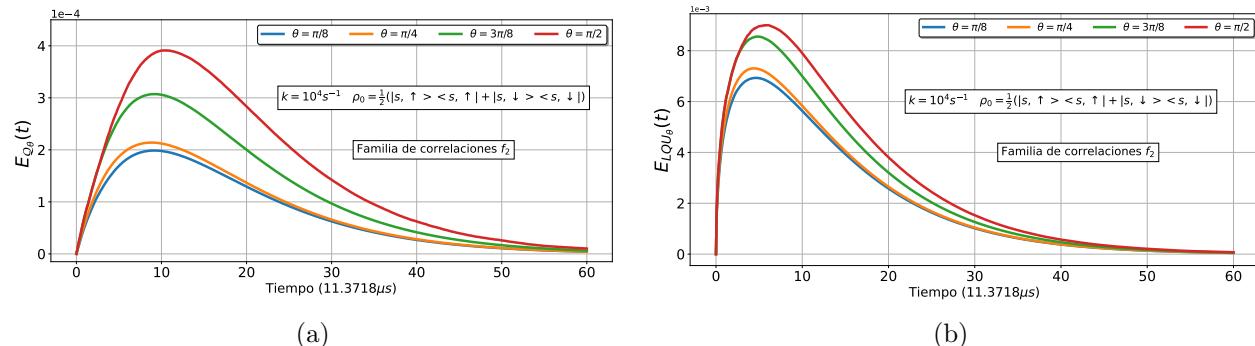


Figura 6.5: (a) Eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_2 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 4 ángulos distintos, $\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$

En la figura 6.5.(a) observamos la eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(t)$, observando una dependencia con el ángulo del campo terrestre al ir aumentando con el ángulo, con un máximo aproximado en $t = 8,8 \approx 100\mu s$. Este máximo es el tiempo de vida de los pares radicales para la constante $k = 10^4 s^{-1}$. Podemos observar un comportamiento similar de la eficiencia de $LQU_\theta(t)$ en la figura 6.5.(b). Vemos que $\mathcal{Q}_\theta(t)$ muestra una variación mas grande al cambiar de ángulo (θ) que $LQU_\theta(t)$. Por lo que al igual que con f_1 la $\mathcal{Q}_\theta(t)$ es mas sensible a las variaciones del campo magnético terrestre.

Para f_3 observamos el comportamiento de $\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ en función del tiempo (t) en la figura 6.6 para 4 ángulos distintos ($\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$).

Eficiencia de $\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ para las correlaciones cuánticas de f_3

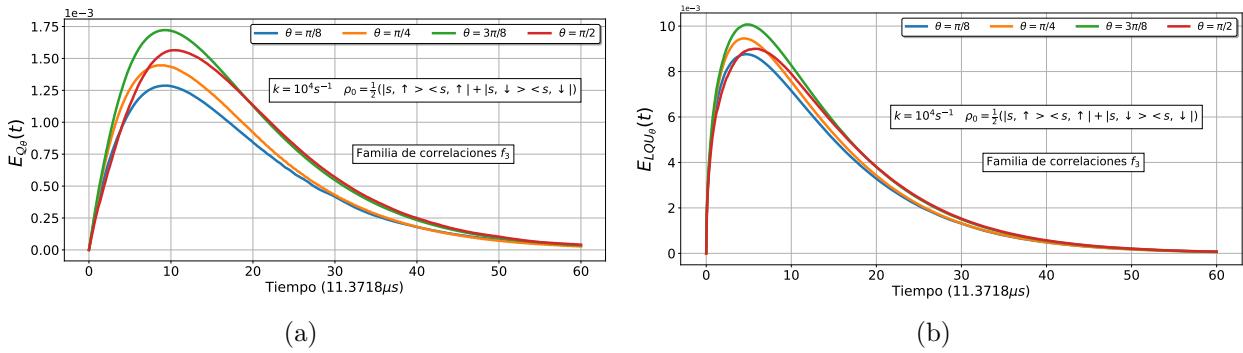


Figura 6.6: (a) Eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_3 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 4 ángulos distintos, $\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$

La figura 6.6.(a) muestra la eficiencia de $\mathcal{Q}_\theta(t)$, observando una dependencia con el ángulo del campo terrestre, igual a la familia f_2 , al ir aumentando hasta el ángulo $\theta = 3\pi/8$ y disminuir para el ángulo $\theta = \pi/2$, con un máximo aproximado en $t = 8,8 \approx 100\mu s$. La eficiencia de $LQU_\theta(t)$ en la figura 6.6.(b) se comporta de una manera similar. Al igual que en las otras familias de correlaciones, $\mathcal{Q}_\theta(t)$ muestra una variación mas grande al cambiar de ángulo (θ) que $LQU_\theta(t)$.

Notamos en los 3 casos que la eficiencia llega a su máximo (máximo uso de las correlaciones cuánticas del sistema) en un tiempo aproximado de $100\mu s$ ($t = 8.8$, en las unidades utilizadas), este es el tiempo de vida de los pares radicales experimentalmente para la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$. $\mathcal{Q}_\theta(t)$ fue más sensible al campo magnético terrestre en los 3 casos.

La sensibilidad de la eficiencia $\mathcal{Q}_\theta(t)$ y $LQU_\theta(t)$ con el ángulo θ del campo magnético terrestre muestra un comportamiento similar al rendimiento del singlete ($\Phi_t(\theta)$) por lo que un análisis para los mismos parámetros que $\Phi_t(\theta)$ es pertinente.

Observamos en la figura 6.4 $\mathcal{Q}_t(\theta)$ y $LQU_t(\theta)$ para f_1 en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre , a 7 tiempos distintos ($t = 56, 100, 119, 170, 284, 398, 568\mu s$).

En la figura 6.7.(a) observamos $\mathcal{Q}_t(\theta)$, donde vemos la dependencia con el ángulo (θ) del campo terrestre al ir disminuyendo, con un aumento a partir de $\theta = 3\pi/8$. Un comportamiento similar tiene $LQU_t(\theta)$ en la figura 6.7.(b). Al comparar las dos medidas de correlaciones cuánticas, vemos que \mathcal{Q} muestra un comportamiento mas similar al rendimiento del singlete en la figura 6.2. En el caso de los distintos tiempos, podemos ver que todos convergen al estado estacionario ($t = 60 \approx 568\mu s$)

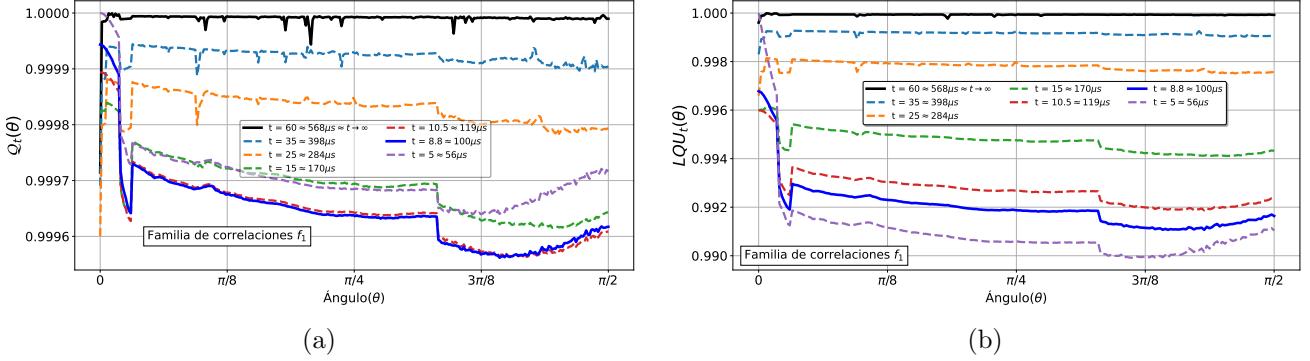
$\mathcal{Q}_t(\theta)$ y $LQU_t(\theta)$ para las correlaciones cuánticas de f_1


Figura 6.7: (a) \mathcal{Q} y (b) LQU en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 7 tiempos distintos.

y con un comportamiento descendiente en $t = 8,8 \approx 100\mu s$, que es el tiempo de vida de los pares radicales para la constante $k = 10^4 s^{-1}$.

La figura 6.8 muestra $\mathcal{Q}_t(\theta)$ y $LQU_t(\theta)$ para f_2 en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre , a 7 tiempos distintos ($t = 56, 100, 119, 170, 284, 398, 568\mu s$).

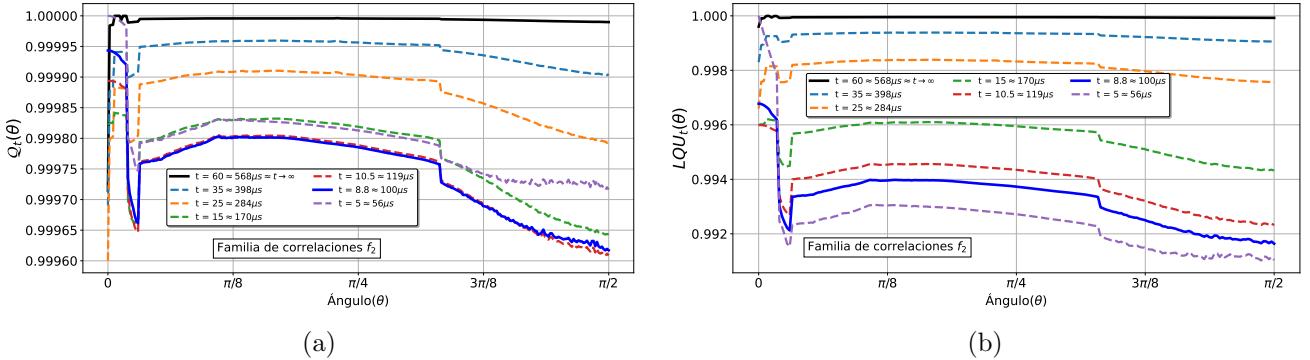
 $\mathcal{Q}_t(\theta)$ y $LQU_t(\theta)$ para las correlaciones cuánticas de f_2


Figura 6.8: (a) \mathcal{Q} y (b) LQU en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre para la familia de correlaciones cuánticas f_2 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 7 tiempos distintos.

En la figura 6.8.(a) observamos $\mathcal{Q}_t(\theta)$, donde al igual que con la familia de correlaciones f_1 vemos la dependencia con el ángulo (θ) del campo terrestre, pero en este caso se observa una aumento y una posterior disminución. Un comportamiento similar tiene la eficiencia de $LQU_t(\theta)$ en la figura 6.8.(b). Al comparar las dos medidas de correlaciones cuánticas, vemos que \mathcal{Q} muestra un comportamiento mas similar al rendimiento del singlete en la figura 6.2 aun mas que con las correlaciones de f_1 . En el caso de los distintos tiempos, esta familia se comporta de la misma manera que f_1 .

Finalmente, observamos en la figura 6.9 muestra $\mathcal{Q}_t(\theta)$ y $LQU_t(\theta)$ para f_3 en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre , a 7 tiempos distintos ($t = 56, 100, 119, 170, 284, 398, 568\mu s$).

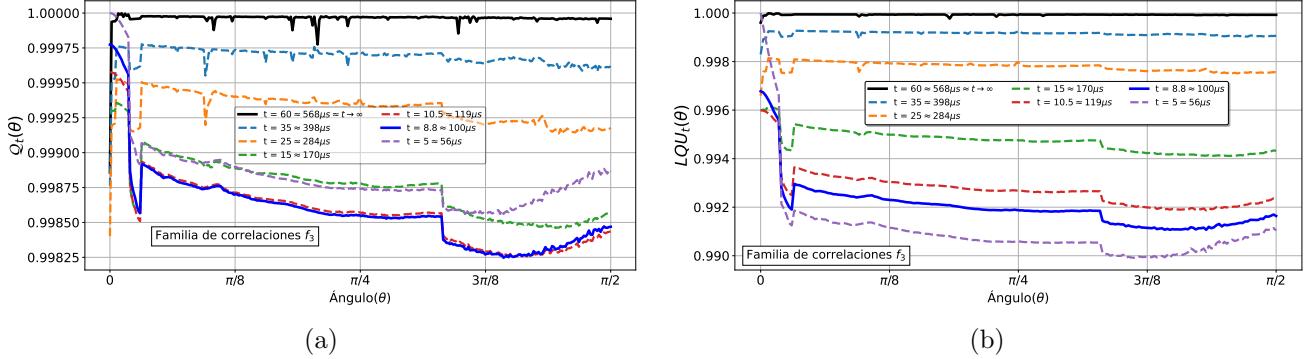
$\mathcal{Q}_t(\theta)$ y $LQU_t(\theta)$ para las correlaciones cuánticas de f_3


Figura 6.9: (a) \mathcal{Q} y (b) LQU en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre para la familia de correlaciones cuánticas f_3 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$ y a 7 tiempos distintos.

En la figura 6.9.(a) observamos $\mathcal{Q}_t(\theta)$, vemos la misma dependencia con el ángulo (θ) del campo terrestre, igual que con f_1 . Un comportamiento similar tiene la eficiencia de $LQU_t(\theta)$ en la figura 6.9.(b). En esta caso la escala de las medición de correlaciones cuánticas es mucho mayor que para las familias f_1 y f_2 .

Las tres familias de correlaciones f_1 , f_2 y f_3 tienen el comportamiento similar con la dependencia del ángulo terrestre, siendo la familia f_1 las mas parecida a la dependencia del campo terrestre con el rendimiento del singlete.

Recordando los resultados de la eficiencia en las figuras 6.4, 6.5 y 6.6, el sistema utiliza un máximo de correlaciones cuánticas y después de cierto tiempo llega a una eficiencia 0, vuelve un estado con las mismas correlaciones cuánticas, este estado puede ser el mismo estado inicial ρ_0 u otro estado completamente diferente, para identificar esto calculamos la distancia entre los estados con el estado inicial.

Una medida de la distancia entre estados cuánticos es la fidelidad. La fidelidad de los estados ρ y σ esta definida por

$$F(\rho, \sigma) = \text{Tr}(\sqrt{\rho^{1/2}\sigma\rho^{1/2}}). \quad (6.17)$$

Calculamos la fidelidad entre los estados $\rho_{\text{theta}}(t)$, dependiente del tiempo (t), y ρ_0 (el estado inicial), para cuatro ángulos ($\theta = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2$) los resultados se muestran en la figura 6.10.

Podemos observar un decaimiento y oscilación de la fidelidad, la oscilación se debe al comportamiento de las coherencias. Vemos que la figura 6.10.b y c muestra una oscilación más fuerte, al igual que las poblaciones del sistema para esos ángulos, $\theta = \pi/4, 3\pi/8$. El decaimiento nos dice que el estado tiene una transformación a otro estado completamente diferente a ρ_0 pero como nos muestra los resultados de la eficiencia en las las figuras 6.4, 6.5 y 6.6 , este nuevo estado es equivalente en correlaciones cuánticas.

Fidelidad Vs Tiempo

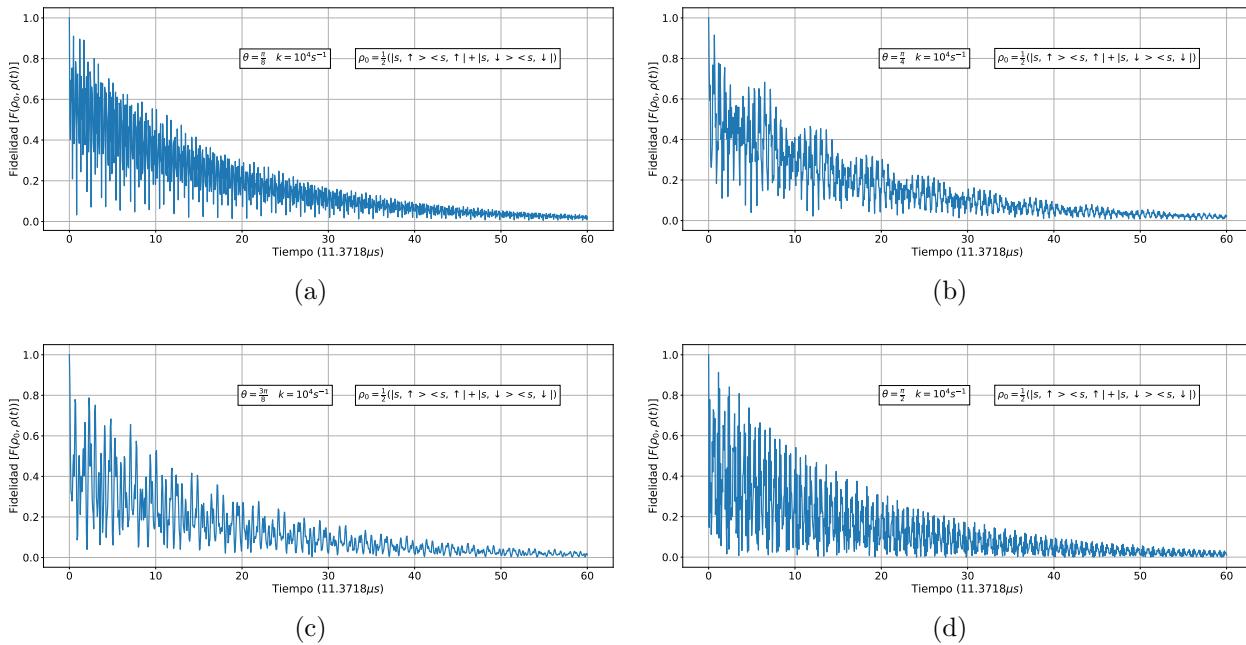


Figura 6.10: Evolución en el tiempo de la fidelidad entre los estados $\rho_\theta(t)$ y ρ_0 dado 4 ángulos del campo magnético terrestre. (a) $\pi/8$, (b) $\pi/4$, (c) $3\pi/8$, (d) $\pi/2$

6.3. Eficiencia acumulada de las correlaciones cuánticas del mecanismo de los pares radicales

En información cuántica, las correlaciones cuánticas se pueden utilizar como un recurso que se consume para realizar tareas que no son posibles usando medios clásicos. En nuestro investigación definimos la eficiencia acumulada de LQU como la cantidad del recurso cuántico que el sistema ha consumido después de un tiempo t ,

$$\text{Eficiencia acumulada de } LQU_{\theta}(\rho(t)) = E_{acumulada}^{LQU,\theta} = \frac{1}{t_{max}} \int_0^{t_{max}} E_{LQU,\theta}(t') dt' = \frac{1}{t_{max}} \int_0^{t_{max}} [1 - LQU_{\theta}(\rho(t))] dt', \quad (6.18)$$

donde t_{max} es el punto en el tiempo donde la eficiencia de $LQU_\theta(\rho(t))$ ($E_{LQU}(t)$) llega a su máximo. De igual manera la eficiencia acumulada de $Q_\theta(\rho(t))$ se define como,

$$\text{Eficiencia acumulada de } \mathcal{Q}_\theta(\rho(t)) = E_{acumulada}^{\mathcal{Q},\theta} = \frac{1}{t_{max}} \int_0^{t_{max}} E_{\mathcal{Q},\theta}(t') dt' = \frac{1}{t_{max}} \int_0^{t_{max}} [1 - \mathcal{Q}_\theta(\rho(t'))] dt', \quad (6.19)$$

donde t_{max} se define igual que para $LQU_\theta(\rho(t))$.

Para comparar el comportamiento de $E_{\text{acumulada}}^{Q,\theta}$ y $E_{\text{acumulada}}^{LQU,\theta}$, en la figura 6.11 podemos observar las eficiencias acumuladas para f_1 en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre.

En la figura 6.11.a observamos la eficiencia acumulada de $Q_\theta(t)$, observando una dependencia

Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ para las correlaciones cuánticas de f_1

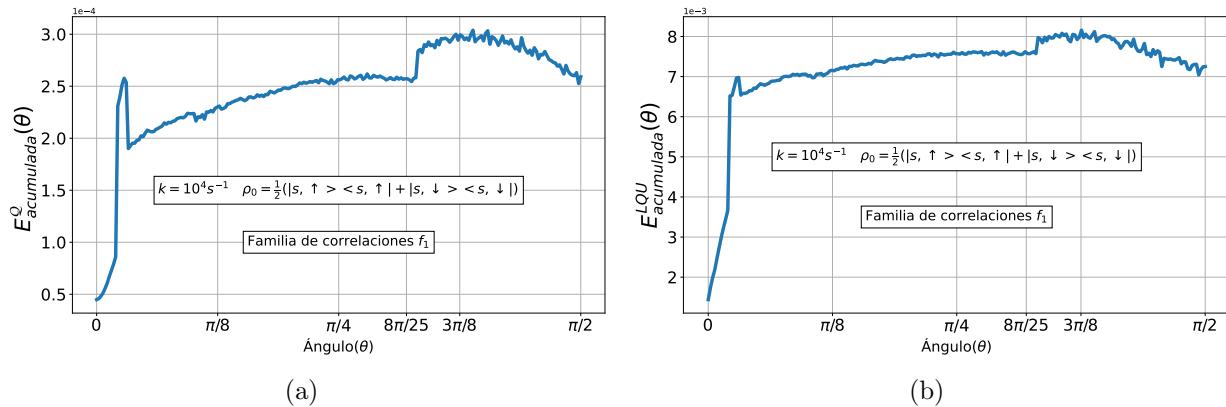


Figura 6.11: (a) Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$

con el ángulo del campo terrestre, con un aumento inicial y una posterior disminución. El aumento se mantiene relativamente constante hasta el ángulo $\theta \approx 8\pi/25$ donde se presenta un 'brinco', después hay un ligero aumento con un decaimiento posterior. Podemos observar un comportamiento similar de la eficiencia acumulada de $LQU_\theta(t)$ en la figura 6.11.b donde el 'brinco' ocurre en el mismo ángulo. Vemos que $Q_\theta(t)$ muestra una acumulación mas grande al cambiar de ángulo (θ) que $LQU_\theta(t)$.

Observamos en la figura 6.12 las eficiencias acumuladas, $E_{acumulada}^{Q,\theta}$ y $E_{acumulada}^{LQU,\theta}$, para f_2 en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre.

Eficiencia acumulada de $Q(t)$ y $LQU(t)$ para las correlaciones cuánticas de f_2

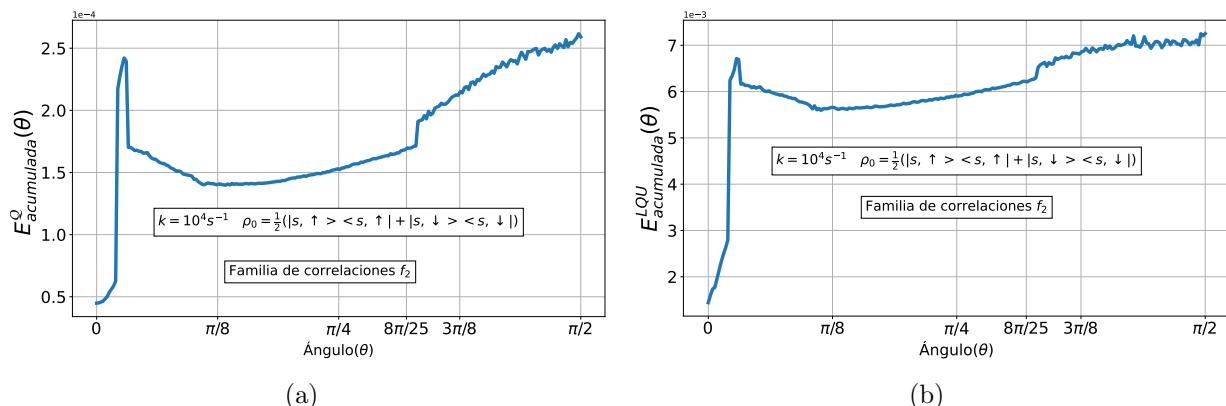


Figura 6.12: (a) Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_2 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$

En la figura 6.12.a observamos la eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}_\theta(t)$, vemos una dependencia con el ángulo del campo terrestre, con un aumento inicial y una posterior disminución al igual que en la familia de correlaciones f_1 . En este caso existe un aumento a partir de $\pi/8$ que se mantiene constante hasta el, con un ligero 'brinco' en el ángulo $\theta \approx 8\pi/25$. Podemos observar un comportamiento

similar de la eficiencia acumulada de $LQU_\theta(t)$ en la figura 6.12.b. $\mathcal{Q}_\theta(t)$ muestra una acumulación mas grande al cambiar de ángulo (θ) que $LQU_\theta(t)$.

En la figura 6.12 podemos observar las eficiencias acumuladas, $E_{acumulada}^{\mathcal{Q},\theta}$ y $E_{acumulada}^{LQU,\theta}$, para f_3 en función del ángulo (θ) del campo magnético terrestre.

Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}(t)$ y $LQU(t)$ para las correlaciones cuánticas de f_3

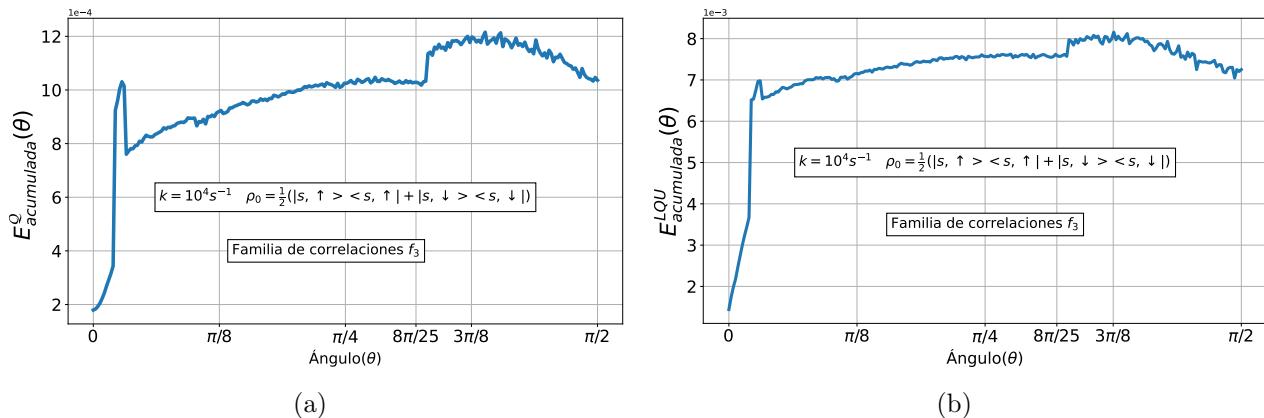


Figura 6.13: (a) Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}_\theta(\rho(t))$ y (b) $LQU_\theta(\rho(t))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_3 . Con la constante de disipación $k = 10^4 \text{s}^{-1}$

En la figura 6.13.(a) observamos la eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}_\theta(t)$, observando una dependencia con el ángulo del campo terrestre y al igual que en los otros dos casos vemos un aumento inicial y una posterior disminución. El aumento se mantiene constante hasta el ángulo $\theta \approx 8\pi/25$ donde se observa el mismo 'brinco' que en las familias de correlaciones anteriores. $LQU_\theta(t)$ en la figura 6.13.(b) se comporta de la de una manera similar, donde el 'brinco' ocurre en el mismo ángulo. Vemos que $\mathcal{Q}_\theta(t)$ muestra una acumulación mas grande al cambiar de ángulo (θ) que $LQU_\theta(t)$.

En el caso del 'brinco' en el ángulo $\theta \approx 8\pi/25$, presente en la eficiencia acumulada y en \mathcal{Q} y LQU dependientes del ángulo, se realizaron varias pruebas para detectar un posible error numérico. Entre estas pruebas, se aumentó el numero de pasos al momento de resolver la ecuación diferencial al igual que la tolerancia de error, mostrando ningún cambio.

Para ver la relación más directamente de la eficiencia acumulada de \mathcal{Q} y LQU con el rendimiento de singlete y por lo tanto con la sensibilidad para detectar el campo magnético terrestre, obtuvimos las curvas perimétricas para las 3 familias de correlaciones.

Para analizar el comportamiento del rendimiento de singlete ($\Phi_{t_{max}}(\theta)$) y la eficiencia acumulada de \mathcal{Q} y LQU , mostramos en la figura 6.14 la función perimétrica $(E_{acumulada}^\mathcal{Q}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ para f_1 en función del ángulo ($\theta \in [0, \pi/2]$) del campo magnético terrestre.

En la figura 6.14.(a) observamos la curva perimétrica de $E_{acumulada}^{\mathcal{Q},\theta}$ contra el rendimiento de singlete, observando que al aumentar el ángulo del campo terrestre existe una disminución de ambos medidores. Podemos observar un comportamiento similar en la curva perimétrica de $E_{acumulada}^{LQU,\theta}$ en la figura 6.14.(b). Vemos que \mathcal{Q} muestra una comportamiento mas oscilatorio que LQU .

Rendimiento de Singlete ($\Phi_{t_{max}}(\theta)$) Vs Eficiencia acumulada $Q(\theta)$ y $LQU(\theta)$ para las correlaciones cuánticas de f_1

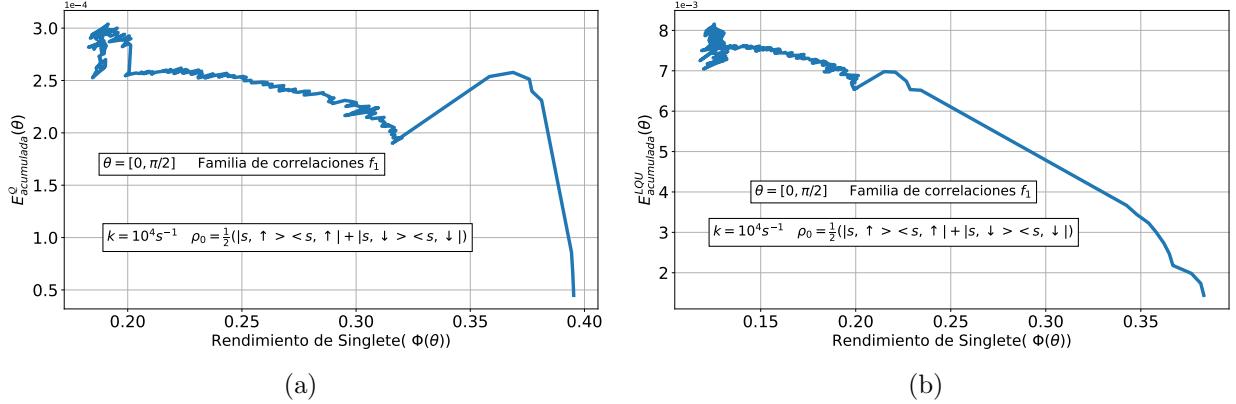


Figura 6.14: (a) $(E_{acumulada}^Q(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y (b) $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_1 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$

Para analizar la relación para la familia de correlaciones f_2 entre el rendimiento de singlete ($\Phi_{t_{max}}(\theta)$) y la eficiencia acumulada de Q y LQU , mostramos en la figura 6.15 la función perimétrica $(E_{acumulada}^Q(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ en función del ángulo ($\theta \in [0, \pi/2]$) del campo magnético terrestre.

Rendimiento de Singlete ($\Phi_{t_{max}}(\theta)$) Vs Eficiencia acumulada de $Q(\theta)$ y $LQU(\theta)$ para las correlaciones cuánticas de f_2

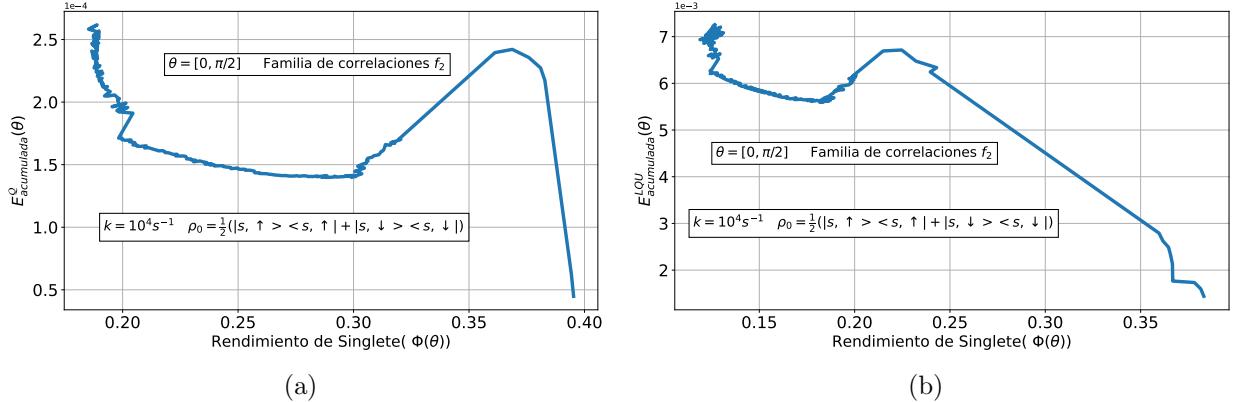


Figura 6.15: (a) $(E_{acumulada}^Q(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y (b) $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_2 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$

En la figura 6.15.(a) observamos la curva perimétrica de $E_{acumulada}^{Q,\theta}$ contra el rendimiento de singlete, al igual que con la familia f_1 observamos que un aumento del ángulo del campo terrestre crea una disminución general de ambos medidores, con una oscilación en $E_{acumulada}^{Q,\theta}$. Podemos observar un comportamiento de disminución con una oscilación al final en la curva perimétrica de $E_{acumulada}^{LQU,\theta}$ en la figura 6.15.(b).

Para analizar la relación entre el rendimiento de singlete ($\Phi_{t_{max}}(\theta)$) y la eficiencia acumula-

da de \mathcal{Q} y LQU , mostramos en la figura 6.16 la función perimétrica $(E_{acumulada}^{\mathcal{Q}}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ para la familia de correlaciones f_3 en función del ángulo ($\theta \in [0, \pi/2]$) del campo magnético terrestre.

Rendimiento de Singlete ($\Phi_{t_{max}}(\theta)$) Vs Eficiencia acumulada de $\mathcal{Q}(\theta)$ y $LQU(\theta)$ para las correlaciones cuánticas de f_3

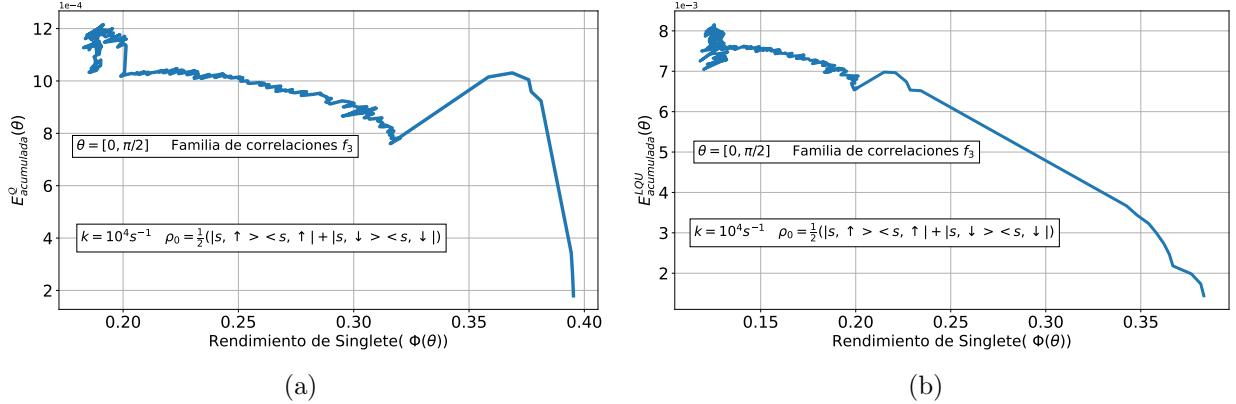


Figura 6.16: (a) $(E_{acumulada}^{\mathcal{Q}}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y (b) $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ para la familia de correlaciones cuánticas f_3 . Con la constante de disipación $k = 10^4 s^{-1}$

En la figura 6.16.(a) observamos la curva perimétrica de $E_{acumulada}^{\mathcal{Q},\theta}$ contra el rendimiento de singlete, observando un comportamiento similar a las otras familias de correlaciones con una disminución general de ambos medidores pero con $E_{acumulada}^{\mathcal{Q},\theta}$ mostrando una oscilación, en contraste con un comportamiento de completa disminución en la curva perimétrica de $E_{acumulada}^{LQU,\theta}$ en la figura 6.16.(b).

Para las tres familias de correlaciones encontramos un comportamiento similar en las curvas perimétricas $(E_{acumulada}^{\mathcal{Q}}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$. Se aprecia una disminución de ambos medidores al aumentar el ángulo del campo terrestre. Para el caso de $E_{acumulada}^{\mathcal{Q},\theta}$ se mostró una oscilación en la curva perimétrica, esto se puede atribuir a la sensibilidad mayor del medidor de correlaciones cuánticas \mathcal{Q} .

La información cuántica de Fisher y Skew, $I(\rho, K)$, para estados puros es igual a la varianza de K . Tomando esto en cuenta se calculó la varianza de la energía del sistema en función del ángulo del campo magnético terrestres (θ),

$$Var_{t_{max}}(\theta) = Tr[\rho_{t_{max}}(\theta)H(\theta)^2] - Tr[\rho_{t_{max}}(\theta)H(\theta)]^2, \quad (6.20)$$

donde $H(\theta)$ es el Hamiltoniano del sistema de los pares radicales en función del angulo del campo terrestre, t_{max} es el punto en el tiempo donde la eficiencia de \mathcal{Q} llega a su máximo, igual que para la eficiencia acumulada de \mathcal{Q} .

En la figura 6.17 vemos la varianza de la energía del sistema para los t_{max} de las tres familias de correlaciones. Podemos observar que en los tres casos, la varianza se comporta de la misma manera ya que lo único que cambia en cada gráfica es el t_{max} utilizado para cada ángulo.

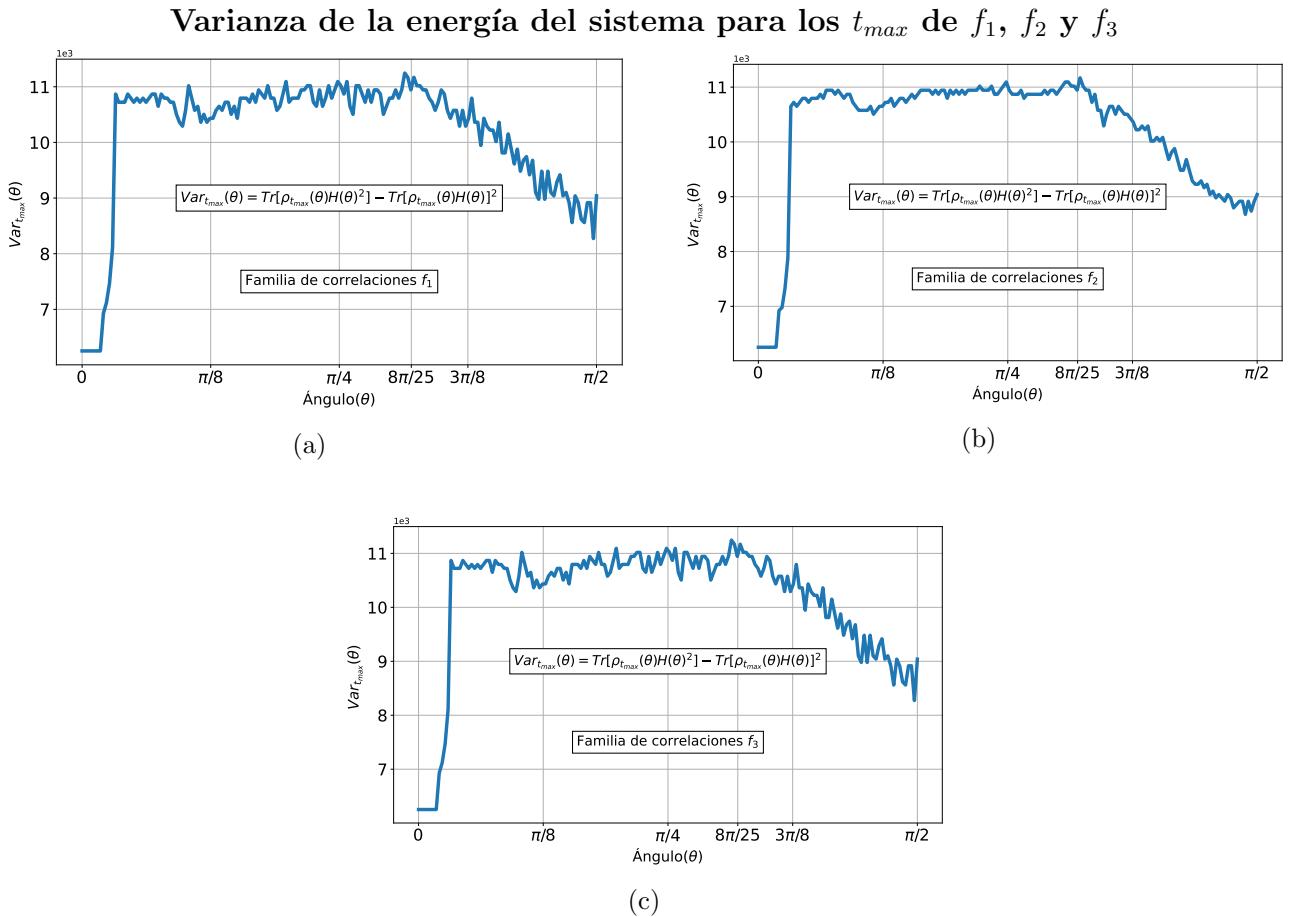


Figura 6.17: Varianza de la energía del sistema para el t_{max} de \mathcal{Q} de la familia de correlaciones (a) f_1 , (b) f_2 y (c) f_3 .

El 'brinco' en el ángulo $\theta \approx 8\pi/25$, presente en la eficiencia acumulada y en \mathcal{Q} y LQU dependientes del ángulo también se encuentra en la varianza de la energía del sistema.

Debido a estos resultados podemos identificar ese salto de energía como un cambio en las fluctuaciones de las energías y no a un error numérico, donde la incertidumbre de la medición de la energía esta disminuyendo siendo consistente en las tres familias de correlaciones. Su interpretación física amerita una investigación más profunda del sistema

Capítulo 7

Conclusiones

El mecanismo de pares de radicales, basado en transiciones singlete-triplete, es utilizado por las aves migratorias para la navegación. Y es apoyado por experimentos de comportamiento con aves. Es el rendimiento de singlete que dicta la sensibilidad del sistema al campo magnético terrestre para la navegación de las aves.

En la primera etapa del trabajo se investigaron las poblaciones del sistema, mostrando un aumento de los estados de rendimiento en función del tiempo y una oscilación amortiguada para los demás estados. También se mostró la dependencia del ángulo del campo magnético terrestre con el rendimiento del singlete, observando una disminución del rendimiento en función del ángulo y su comportamiento con distintas constantes de disipación, siendo consistente con los distintos estudios sobre el mecanismo de los pares radicales.

En la segunda parte de la investigación se trabajó con \mathcal{Q} y LQU , basados en la incertidumbre de observables locales para caracterizar las correlaciones cuánticas en subsistemas del mecanismo de los pares radicales para tres familias de correlaciones. Encontramos una relación de \mathcal{Q} y LQU con el campo magnético terrestre muy similar a la del rendimiento del singlete, mostrando una disminución en función del ángulo, sobre todo con la familia de correlaciones $f_2 (\{S_1 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaA}_2 \quad \{S_2 - I^\downarrow, S_2 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaB}_2)$.

Finalmente en la tercera parte de la investigación trabajamos con la eficiencia, medida en que las correlaciones cuánticas se utilizan para una tarea, y eficiencia acumulada, cantidad del recurso cuántico que el sistema ha consumido después de un tiempo t , de \mathcal{Q} y LQU . Al encontrar un 'salto' inusual en \mathcal{Q} y LQU se realizaron distintas pruebas para evitar errores numéricos, encontrando que el comportamiento surge de una disminución de la incertidumbre de la medición de la energía. Al analizar \mathcal{Q} y LQU en el tiempo, notamos que existe una transformación del estado inicial, calculamos la fidelidad entre los estados $\rho_\theta(t)$ y ρ_0 encontrando que esta transformación es a otro estado completamente diferente a ρ_0 pero como nos muestra los resultados de la eficiencia, este nuevo estado es equivalente en correlaciones cuánticas. También encontramos que \mathcal{Q} es más sensible que LQU al campo magnético terrestre, mostrando variaciones mas prominentes con distintos ángulos y con la familia de correlaciones $f_3 (\{S_1 - I^\uparrow, S_1 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaA}_3 \quad \{S_2 - I^\uparrow, S_2 - I^\downarrow\} = \text{SubsistemaB}_3)$ siendo la que utiliza correlaciones mas fuertes. Se calcularon las curvas paramétricas $(E_{acumulada}^{\mathcal{Q}}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ y $(E_{acumulada}^{LQU}(\theta), \Phi_{t_{max}}(\theta))$ encontrando una relación de disminución

entre ambos medidores, mostrando una relación más directa entre la sensibilidad para detectar el campo magnético terrestre con la eficiencia acumulada de los medidores de correlaciones cuánticas tipo-discordia \mathcal{Q} y LQU .

Aunque es necesario una mayor investigación, estos hallazgos son un indicio de que las correlaciones cuánticas pueden funcionar como recurso en el mecanismo de los pares radicales.

Teniendo en cuenta lo expuesto hasta este momento, podemos proponer como trabajo futuro, lo siguiente:

- Analizar el efecto en las correlaciones cuánticas al utilizar distintas condiciones iniciales ρ_0 .
- Explorar los dispositivos inspirados en este mecanismo para hacer metrología cuántica.
- Analizar el efecto de los campos dependientes del tiempo en las correlaciones cuánticas del modelo de pares de radicales.
- Estudiar el efecto de un canal de ruptura de discordia en el sistema de la forma,

$$D((\Lambda \otimes I)\rho_{AB}) = 0, \quad (7.1)$$

donde D es la discordia cuántica, ρ_{AB} es la matriz de densidad el sistema y $(\Lambda \otimes I)$ un operador local y ver el efecto que tiene con el rendimiento del singlete.

Apéndices

Apéndice A

Derivación alterna de la ecuación maestra

Es posible derivar la ecuación maestra de una forma alternativa a la mostrada en la sección de conceptos básicos.

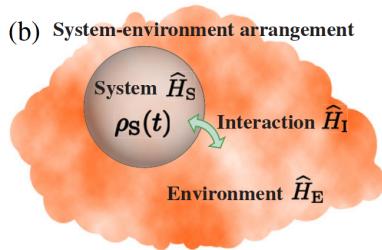


Figura A.1: Diagrama de un sistema abierto

Consideremos un sistema en interacción con el ambiente (también llamado baño o reservorio). El Hamiltoniano mas general que describe la situación es:

$$H = H_S \otimes I_R + I_S \otimes H_R + H_{SR} \equiv H_0 + H_{SR}, \quad (\text{A.1})$$

donde H_S , H_R y H_{SR} describen al sistema, el reservorio y la interacción respectivamente.

Llamamos a χ como la matriz de densidad describiendo al sistema mas el reservorio y

$$\rho = Tr_R(\chi), \quad (\text{A.2})$$

como la matriz de densidad reducida describiendo al sistema. La evolución de χ esta dada por la ecuación de Von Neumann:

$$i\hbar\dot{\chi} = [H, \chi]. \quad (\text{A.3})$$

Asumimos que la interacción es muy débil, tal que podemos separar el movimiento rápido debido a $H_0 = H_s + H_R$ del movimiento lento debido a la interacción H_{SR} . Para este propósito, utilizamos

la “interaction picture”:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{U}_S &= H_S U_S, \quad U_S(0) = I_S \\ i\hbar\dot{U}_R &= H_R U_R, \quad U_R(0) = I_R \\ U &= U_S \otimes U_R, \quad \tilde{\chi} = U^\dagger \chi U, \quad \tilde{H}_{SR} = U^\dagger H_{SR} U \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo A.4 en A.3:

$$i\hbar\dot{\tilde{\chi}} = [\tilde{H}_{SR}, \tilde{\chi}], \quad (\text{A.5})$$

que es equivalente a la ecuación integro-diferencial

$$\dot{\tilde{\chi}}(t) = \tilde{\chi}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau [\tilde{H}_{SR}(\tau), \tilde{\chi}(\tau)]. \quad (\text{A.6})$$

Donde $\tilde{\chi} = \chi(0)$. Sustituyendo en A.6 en A.5 :

$$\dot{\tilde{\chi}}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{H}_{SR}(\tau), \chi(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau [\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(\tau), \tilde{\chi}(\tau)]]. \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} Tr_R(\tilde{\chi}) &= Tr_R(U^\dagger \chi U) = U_S^\dagger Tr_R(U_R^\dagger \chi U_R) U_S = U_S^\dagger \rho U_S \equiv \tilde{\rho} \\ Tr_R(U_R^\dagger \chi U_R) &= Tr_R(\chi U_R^\dagger U_R) = Tr_R(\chi) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Podemos obtener la traza sobre el ambiente:

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = \frac{1}{i\hbar} Tr_R\{[\tilde{H}_{SR}(\tau), \chi(0)]\} - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau Tr_R\{[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(\tau), \tilde{\chi}(\tau)]]\} \quad (\text{A.9})$$

La ecuación A.9 es exacta. Para proceder con el procedimiento se necesitan unas suposiciones.

- **Factorizacion del estado inicial:** Asumimos que al tiempo $t = 0$ el sistema y el ambiente no están entrelazados

$$\chi(0) = \rho(0) \otimes \rho_R(0), \quad (\text{A.10})$$

donde ρ y ρ_R son las matrices de densidad del sistema y el ambiente respectivamente.

- **Suposición en la condicion inicial:**

$$Tr_R\{[\tilde{H}_{SR}(\tau), \chi(0)]\} = 0, \quad (\text{A.11})$$

Si esto no se cumple, $Tr_R\{[\tilde{H}_{SR}(\tau), \chi(0)]\}$ es un operador actuando solo en el sistema.

- **Aproximacion de Born:** Asumimos que el acoplamiento es muy débil y el reservorio es muy grande tal que el estado no es afectado por la interacción, $\rho_R = \rho_R(\tau)$. Por lo tanto,

$$\tilde{\chi}(\tau) \approx \tilde{\rho}(\tau) \otimes \tilde{\rho}_R, \quad (\text{A.12})$$

por lo que la ecuación A.9 se convierte en

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau Tr_R\{[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(\tau), \tilde{\rho}(\tau) \otimes \tilde{\rho}_R]]\}. \quad (\text{A.13})$$

Para poder interpretar esta suposición es necesario considerar una situación donde el reservorio se equilibra a escalas de tiempo que sean mucho mas rápidas que la escala de tiempo de la evolución del sistema. La ecuación A.13 necesita ser simplificada para usos prácticos.

- **Aproximación de Markov:** La matriz de densidad $\rho(t)$ evoluciona con una ecuación diferencial de primer orden en el tiempo. Por lo tanto, el conocimiento de la matriz de densidad $\rho(t_0)$ a cierto tiempo t_0 es suficiente para determinar $\rho(t)$ a cualquier tiempo $t > t_0$. Esto no es un requisito no trivial ya que el sistema interactúa con el ambiente y en general el estado del ambiente al tiempo t_0 depende de la matriz $\rho(t')$ a tiempos anteriores $t' < t_0$. En otras palabras, el ambiente adquiere información en el sistema pero esa información puede fluir de regreso, al menos en parte, al sistema. Por lo tanto, le conocimiento de la matriz de densidad $\rho(t_0)$ en un tiempo t_0 es en general no suficiente para determinar $\rho(t)$ a tiempos posteriores. Por lo que tenemos:

$$\rho(t_0 + dt) = Tr_{ambiente}[\rho_{tot}(t_0 + dt)] = Tr_{ambiente}[U(t_0 + dt, t_0)\rho_{tot}(t_0)U^\dagger(t_0 + dt, t_0)], \quad (\text{A.14})$$

donde ρ_{tot} es la matriz de densidad del sistema mas el ambiente, donde su evolucion del tiempo t_0 al tiempo $t + dt$ esta dado por el operador unitario $U(t_0 + dt, t_0)$. $\rho_{tot}(t_0)$ depende de $\rho(t)$ para todos los tiempos $t < t_0$. Esto significa que no podemos determinar por completo $\rho(t_0 + dt)$ utilizando solo $\rho(t_0)$. En la aproximacion markoviana, asumimos que el ambiente no tiene memoria, es decir, el estado al tiempo t_0 no es afectado por la historia del sistema. El flujo de información es en un solo sentido, del sistema al ambiente. Esto significa que el flujo de información es esencialmente unidireccional, es decir, del sistema al entorno. La aproximación de Markoviana proporciona una buena descripción del ruido cuántico si la memoria de cualquier efecto que el sistema tiene en el medio ambiente se limita a una escala de tiempo mucho más corta que las escalas de tiempo de interés para la dinámica del sistema.

$$\tilde{\rho}(\tau) \rightarrow \tilde{\rho}(t), \quad (\text{A.15})$$

obtenemos:

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau Tr_R\{[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(\tau), \tilde{\rho}(t) \otimes \tilde{\rho}_R]]\}. \quad (\text{A.16})$$

La ecuación A.16 ya no es integro-diferencial, solo diferencial, ya que $\tilde{\rho}(t)$ en el lado derecho no tiene que ser integrado en el tiempo. La sustitución de (14) solo es posible con la hipótesis que el tiempo de escala de la evolución del sistema es mucho mas grande que la del reservorio. Esta suposición se mantiene solo en los casos que la interacción sistema-reservorio es suficiente

pequeña y el reservorio suficientemente grande.

Podemos escribir H_{SR} en una base de operadores hermitianos $\{\sigma_i\}$ que actúan sobre el sistema:

$$H_{SR} = \sum_{i=0}^{M-1} \sigma_i B_i, \quad (\text{A.17})$$

donde los operadores B_i actúan sobre el ambiente. Notamos que si el espacio de Hilbert del sistema tiene dimensiones N , tenemos $M = N^2$. Por ejemplo, si $N = 2$, podemos tomar $\sigma_0 = I$, $\sigma_1 = \sigma_x$, $\sigma_2 = \sigma_y$ y $\sigma_3 = \sigma_z$

Utilizando la ecuación A.4 tenemos:

$$\tilde{H}_{SR}(t) = U^\dagger(t) H_{SR} U(t) = \sum_{i=0} \tilde{\sigma}_i(t) \tilde{B}_i(t), \quad (\text{A.18})$$

donde

$$\tilde{\sigma}_i(t) \equiv U^\dagger(t) \sigma_i U(t), \quad \tilde{B}_i(t) \equiv U^\dagger(t) B_i U(t) \quad (\text{A.19})$$

Sustituyendo la ecuación A.18 y A.19 en A.16

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} \int_0^t d\tau Tr_R \{ [\tilde{\sigma}_i(t) \tilde{B}_i(t), [\tilde{\sigma}_j(t) \tilde{B}_j(t), \tilde{\rho}(t) \otimes \tilde{\rho}_R]] \}. \quad (\text{A.20})$$

Para proceder mas allá de esta ecuación diferencial es necesario especificar nuestros sistemas.

En el caso general, la ecuación A.20 puede manipularse para obtener la forma final de la ecuación maestra describiendo la evolución de un sistema acoplado de N-niveles a un ambiente:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{-i}{\hbar} [H, \rho] + \frac{1}{\hbar} \sum_{i,j} \frac{\gamma_{i,j}}{2} \{ [\sigma_i, \rho \sigma_j] + [\sigma_i \rho, \sigma_j] \} \quad (\text{A.21})$$

Las constantes complejas γ_{ji} dependen de los detalles del baño Markoviano y tienen que calcularse para poder determinar la dinámica del sistema. La ecuación A.21 describe la evolución no unitaria de la matriz de densidad ρ mas general.

Apéndice B

Derivación de la forma matricial del Hamiltoniano

El hamiltoniano de los pares radicales es:

$$H = \gamma \vec{B} \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{A} \cdot I, \quad (\text{B.1})$$

I es el operador de espín para el núcleo, \mathbf{A} es el tensor Hiperfino anisotrópico con una forma diagonal $\mathbf{A} = \text{diag}(A_x, A_y, A_z)$. Los operadores de espín \mathbf{S}_1 , \mathbf{S}_2 son

$$\mathbf{S}_1 = \sigma_x^1 \hat{i} + \sigma_y^1 \hat{j} + \sigma_z^1 \hat{z} \quad \mathbf{S}_2 = \sigma_x^2 \hat{i} + \sigma_y^2 \hat{j} + \sigma_z^2 \hat{z} \quad (\text{B.2})$$

Expresando en notación tensorial cada elemento,

$$\begin{aligned} \sigma_x^1 &= \sigma_x \otimes \mathbb{I}_2, & \sigma_y^1 &= \sigma_y \otimes \mathbb{I}_2, & \sigma_z^1 &= \sigma_z \otimes \mathbb{I}_2 \\ \sigma_x^2 &= \mathbb{I}_1 \otimes \sigma_x, & \sigma_y^2 &= \mathbb{I}_1 \otimes \sigma_y, & \sigma_z^2 &= \mathbb{I}_1 \otimes \sigma_z \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Recordando como actúan los operadores de Pauli en la base computacional:

$$\begin{aligned} \sigma_x |0\rangle &= +1 |1\rangle, & \sigma_y |0\rangle &= +i |1\rangle, & \sigma_z |0\rangle &= +1 |0\rangle \\ \sigma_x |1\rangle &= +1 |0\rangle, & \sigma_y |1\rangle &= -i |0\rangle, & \sigma_z |1\rangle &= -1 |1\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

El campo magnético se puede representar en coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} \vec{B} &= B_0(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \cos \phi, \cos \theta) \\ B_x &= B_0 \sin \theta \cos \phi \quad B_y = B_0 \sin \theta \cos \phi \quad B_z = B_0 \cos \theta \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

En este caso tomamos $\phi = 0$, por lo que la componente B_y es nula

$$\phi = 0 \quad \vec{B} = (B_x, 0, B_z) \quad B_x = B_0 \sin \theta \quad B_y = 0 \quad B_z = B_0 \cos \theta \quad (\text{B.6})$$

Empezamos desarrollando el término que involucra el campo magnético terrestre, creando un

efecto Zeeman en el sistema

$$\gamma \vec{B} \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) = \gamma B_x(\sigma_x^1 + \sigma_x^2) + \gamma B_z(\sigma_z^1 + \sigma_z^2), \quad (\text{B.7})$$

el siguiente término que describe el sistema captura la interacción entre el electrón y el núcleo, conocida como interacción hiperfina,

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{A} \cdot I = A_{xx}I_x\sigma_x^1 + A_{yy}I_y\sigma_y^1 + A_{zz}I_z\sigma_z^1, \quad (\text{B.8})$$

la fuerza de acoplamiento hiperfina entre un espín de electrón y un espín nuclear de la misma molécula está contenida en el tensor de acoplamiento hiperfino \mathbf{A} . Tomando el campo magnético de la Eq. (5.2), obtenemos el hamiltoniano

$$H = \gamma B_x(\sigma_x^1 + \sigma_x^2) + \gamma B_z(\sigma_z^1 + \sigma_z^2) + A_{xx}I_x\sigma_x^1 + A_{yy}I_y\sigma_y^1 + A_{zz}I_z\sigma_z^1. \quad (\text{B.9})$$

Podemos expresar cada elemento del hamiltoniano en forma matricial de la siguiente forma

$$H = \begin{pmatrix} |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \\ |00\rangle & \langle 00|H|00\rangle & \langle 00|H|01\rangle & \langle 00|H|10\rangle & \langle 00|H|11\rangle \\ |01\rangle & \langle 01|H|00\rangle & \langle 01|H|01\rangle & \langle 01|H|10\rangle & \langle 01|H|11\rangle \\ |10\rangle & \langle 10|H|00\rangle & \langle 10|H|01\rangle & \langle 10|H|10\rangle & \langle 10|H|11\rangle \\ |11\rangle & \langle 11|H|00\rangle & \langle 11|H|01\rangle & \langle 11|H|10\rangle & \langle 11|H|11\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

Expresando en notación tensorial la base computacional,

$$|00\rangle = |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2, \quad |01\rangle = |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2, \quad |10\rangle = |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2, \quad |11\rangle = |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \quad (\text{B.11})$$

Empezamos aplicando el operador del Hamiltoniano al estado $|00\rangle$

$$\begin{aligned} H|00\rangle &= \gamma B_x(\sigma_x^1|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + \sigma_x^2|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2) + \gamma B_z(\sigma_z^1|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + \sigma_z^2|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2) \\ &\quad + A_{xx}I_x\sigma_x^1|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + A_{yy}I_y\sigma_y^1|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + A_{zz}I_z\sigma_z^1|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \\ &= \gamma B_x[(+1)|1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + |0\rangle_1 \otimes (+1)|1\rangle_2] + \gamma B_z[(+1)|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + |0\rangle_1 \otimes (+1)|0\rangle_2] \quad (\text{B.12}) \\ &\quad + A_{xx}I_x(+1)|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + A_{yy}I_y(+i)|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + A_{zz}I_z(+1)|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \end{aligned}$$

$$H|00\rangle = \gamma B_x(|10\rangle + |01\rangle) + \gamma B_z(|00\rangle + |00\rangle) + A_{xx}I_x|10\rangle + A_{yy}I_yi|10\rangle + A_{zz}I_z|00\rangle$$

De esta manera podemos obtener el resto de los elementos que involucren $H |00\rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle 00| H |00\rangle &= \gamma B_x (\langle 00| |10\rangle + \langle 00| |01\rangle) + \gamma B_z (\langle 00| |00\rangle + \langle 00| |00\rangle) \\
 &\quad + A_{xx} I_x \langle 00| |10\rangle + A_{yy} I_y i \langle 00| |10\rangle + A_{zz} I_z \langle 00| |00\rangle \\
 \langle 00| H |00\rangle &= 2\gamma B_z + A_{zz} I_z \\
 \langle 01| H |00\rangle &= \gamma B_x \\
 \langle 10| H |00\rangle &= \gamma B_x + A_{xx} I_x + i A_{yy} I_y \\
 \langle 11| H |00\rangle &= 0
 \end{aligned} \tag{B.13}$$

Aplicando el operador del Hamiltoniano al estado $|01\rangle$

$$\begin{aligned}
 H |01\rangle &= \gamma B_x (\sigma_x^1 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + \sigma_x^2 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2) + \gamma B_z (\sigma_z^1 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + \sigma_z^2 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2) \\
 &\quad + A_{xx} I_x \sigma_x^1 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + A_{yy} I_y \sigma_y^1 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + A_{zz} I_z \sigma_z^1 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \\
 &= \gamma B_x [(+1) |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + |0\rangle_1 \otimes (+1) |0\rangle_2] + \gamma B_z [(+1) |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + |0\rangle_1 \otimes (-1) |1\rangle_2] \\
 &\quad + A_{xx} I_x (+1) |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + A_{yy} I_y (+i) |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + A_{zz} I_z (+1) |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2
 \end{aligned} \tag{B.14}$$

$$H |01\rangle = \gamma B_x (|11\rangle + |00\rangle) + \gamma B_z (|01\rangle - |01\rangle) + A_{xx} I_x |11\rangle + A_{yy} I_y i |11\rangle + A_{zz} I_z |01\rangle$$

Obtenemos el resto de los elementos que involucren $H |01\rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle 00| H |01\rangle &= \gamma B_x (\langle 00| |11\rangle + \langle 00| |00\rangle) + A_{xx} I_x \langle 00| |11\rangle + A_{yy} I_y i \langle 00| |11\rangle + A_{zz} I_z \langle 00| |01\rangle \\
 \langle 00| H |01\rangle &= \gamma B_x \\
 \langle 01| H |01\rangle &= A_{zz} I_z \\
 \langle 10| H |01\rangle &= 0 \\
 \langle 11| H |01\rangle &= \gamma B_x + A_{xx} I_x + i A_{yy} I_y
 \end{aligned} \tag{B.15}$$

Aplicando el operador del Hamiltoniano al estado $|10\rangle$

$$\begin{aligned}
 H |10\rangle &= \gamma B_x (\sigma_x^1 |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + \sigma_x^2 |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2) + \gamma B_z (\sigma_z^1 |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + \sigma_z^2 |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2) \\
 &\quad + A_{xx} I_x \sigma_x^1 |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + A_{yy} I_y \sigma_y^1 |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + A_{zz} I_z \sigma_z^1 |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \\
 &= \gamma B_x [(-1) |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + |1\rangle_1 \otimes (+1) |1\rangle_2] + \gamma B_z [(-1) |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + |1\rangle_1 \otimes (+1) |0\rangle_2] \\
 &\quad + A_{xx} I_x (+1) |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + A_{yy} I_y (-i) |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + A_{zz} I_z (-1) |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2
 \end{aligned} \tag{B.16}$$

$$H |10\rangle = \gamma B_x (|00\rangle + |11\rangle) + \gamma B_z (-|10\rangle + |10\rangle) + A_{xx} I_x |00\rangle + A_{yy} I_y i |00\rangle + A_{zz} I_z |10\rangle$$

Obtenemos el resto de los elementos que involucren $H |10\rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle 00| H |10\rangle &= \gamma B_x (\langle 00| |00\rangle + \langle 00| |11\rangle) + A_{xx} I_x \langle 00| |00\rangle + A_{yy} I_y i \langle 00| |00\rangle + A_{zz} I_z \langle 00| |10\rangle \\
 \langle 00| H |10\rangle &= \gamma B_x + A_{xx} I_x - i A_{yy} I_y \\
 \langle 01| H |10\rangle &= 0 \\
 \langle 10| H |10\rangle &= -A_{zz} I_z \\
 \langle 11| H |10\rangle &= \gamma B_x
 \end{aligned} \tag{B.17}$$

Aplicando el operador del Hamiltoniano al estado $|11\rangle$

$$\begin{aligned}
 H |11\rangle &= \gamma B_x (\sigma_x^1 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + \sigma_x^2 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2) + \gamma B_z (\sigma_z^1 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + \sigma_z^2 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2) \\
 &\quad + A_{xx} I_x \sigma_x^1 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + A_{yy} I_y \sigma_y^1 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + A_{zz} I_z \sigma_z^1 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \\
 &= \gamma B_x [(+1) |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + |1\rangle_1 \otimes (+1) |0\rangle_2] + \gamma B_z [(-1) |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + |1\rangle_1 \otimes (-1) |1\rangle_2] \\
 &\quad + A_{xx} I_x (+1) |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + A_{yy} I_y (-i) |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + A_{zz} I_z (-1) |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2
 \end{aligned} \tag{B.18}$$

$$H |11\rangle = \gamma B_x (|01\rangle + |10\rangle) + \gamma B_z (-|11\rangle - |11\rangle) + A_{xx} I_x |01\rangle - A_{yy} I_y i |01\rangle + A_{zz} I_z |11\rangle$$

Obtenemos el resto de los elementos que involucren $H |11\rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle 00| H |11\rangle &= \gamma B_x (\langle 00| |01\rangle + \langle 00| |10\rangle) + \gamma B_z (-\langle 00| |11\rangle - \langle 00| |11\rangle) \\
 &\quad + A_{xx} I_x \langle 00| |01\rangle - A_{yy} I_y i \langle 00| |01\rangle + A_{zz} I_z \langle 00| |11\rangle \\
 \langle 00| H |11\rangle &= 0 \\
 \langle 01| H |11\rangle &= \gamma B_x + A_{xx} I_x - i A_{yy} I_y \\
 \langle 10| H |11\rangle &= \gamma B_x \\
 \langle 11| H |11\rangle &= -2\gamma B_x - A_{zz} I_z
 \end{aligned} \tag{B.19}$$

$$H_{(\uparrow,\downarrow)} = \begin{pmatrix} |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \\ |00\rangle & 2\gamma B_z + A_z I_z & \gamma B_x & \gamma B_x + A_x I_x - i A_y I_y & 0 \\ |01\rangle & \gamma B_x & A_z I_z & 0 & \gamma B_x + A_x I_x - i A_y I_y \\ |10\rangle & \gamma B_x + A_x I_x + i A_y I_y & 0 & -A_z I_z & \gamma B_x \\ |11\rangle & 0 & \gamma B_x + A_x I_x + i A_y I_y & \gamma B_x & -2\gamma B_z - A_z I_z \end{pmatrix} \tag{B.20}$$

Apéndice C

Deducción de la información cuántica de fisher y Skew a partir de la información de Fisher clásica

Esta sección es un resumen del artículo de Shunlong Luo [27]

Wigner y Yanase introdujeron la cantidad $I_W(\rho, H) = \frac{1}{2}Tr[D_H\rho^{1/2}]$ que llamaron la información de Skew para medir el contenido de información del operador de densidad ρ con respecto al operador hermitiano H (que puede interpretarse como un hamiltoniano, un momento o cualquier cantidad conservada). D_H es la diferenciación interna respecto a H definida como $D_Hx = i[x, H] = i(xH - Hx)$. Alternativamente, $I_W(\rho, H)$ puede interpretarse como una medida de la no-comutatividad entre ρ y H . Wigner y Yanase demostraron que esta cantidad satisface todas las condiciones para una medida de la información. La información de Skew es muy similar la mas conocida información de Fisher originada por inferencia estadística. La informacion de Fisher de una familia de densidades de probabilidad parametrizadas $\{p_\theta : \theta \in \Re\}$ en \Re esta definida como

$$I_F(p_\theta) = \int_{\Re} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} p_\theta^{1/2}(x) \right)^2 dx = \frac{1}{4} \int_{\Re} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta(x) \right) p_\theta(x) dx. \quad (\text{C.1})$$

En particular, cuando $p_\theta(x) = p(x - \theta)$, por la invarianza de la integral de Lebesgue, tenemos

$$I_F(p_\theta) = \int_{\Re} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} p^{1/2}(x) \right)^2 dx = \frac{1}{4} \int_{\Re} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log p(x) \right)^2 p(x) dx. \quad (\text{C.2})$$

Entonces en estas circunstancias, $I_F(p_\theta)$ es independiente de θ y podemos denotar a $I_F(p_\theta)$ simplemente por $I_F(p)$. Es la información de Fisher de p respecto a la posición del parámetro. En un escenario de operadores (el caso cuántico), el concepto de la información de Fisher tiene muchas generalizaciones debido a la no-comutatividad. Entre las generalizaciones, hay dos que sobresalen. El primero surge cuando formalmente generalizamos la expresión $I_F(p_\theta) = \int_{\Re} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} p_\theta^{1/2}(x) \right)^2 dx$. Remplazando la integración por una traza, las probabilidades parametrizadas p_θ por un operador de densidad parametrizado ρ_θ en un espacio de Hilbert y el diferencial $\frac{\partial}{\partial \theta}$ por el diferencial cuantico

APÉNDICE C. DEDUCCIÓN DE LA INFORMACIÓN CUÁNTICA DE FISHER Y SKEW A PARTIR DE LA INFORMACIÓN DE FISHER CLÁSICA

D_H en una geometria no-commutativa (donde H es hermitiano), pdemos definir heuristicamente

$$I_F(\rho_\theta) = \text{Tr}[D_H \rho_\theta^{1/2}]^2. \quad (\text{C.3})$$

En particular, cuando $\rho_\theta = e^{-i\theta H} \rho e^{i\theta H}$, $I_F(\rho_\theta)$ es independiente del parámetro θ . En estas circunstancias $I_F(\rho_\theta)$ es precisamente la iinformación Wigner-Yanase Skew $I_F(\rho, H) = \frac{1}{2}\text{Tr}[D_H \rho^{1/2}]^2$

La segunda generalización natural de la información clásica de Fisher surge cuando formalmente generalizamos la expresión $I_F(p_\theta) = \frac{1}{4} \int_{\Re} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta(x) \right)^2 p_\theta(x) dx$. Notamos que en su forma simétrica

$$\frac{\partial}{\partial \theta} p_\theta = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta \cdot p_\theta + p_\theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta \right). \quad (\text{C.4})$$

En la ec. C.1, remplazando la integracion por la traza, $p\theta$ por ρ_θ y la derivada logaritmica $\frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta$ por la derivada simetrica logaritmica L_θ determinada por

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \rho_\theta = \frac{1}{2} (L_\theta \rho_\theta + \rho_\theta L_\theta) \quad \theta \in \Re, \quad (\text{C.5})$$

llegamos a la información cuántica de Fisher (derivada utilizando la derivada simétrica logaritmica)

$$I_F(\rho_\theta) = \frac{1}{4} \text{Tr}[L_\theta^2 \rho_\theta]. \quad (\text{C.6})$$

Esta generalización juega un papel importante la estimación cuántica, en particular, cuando $\rho_\theta = e^{-i\theta H} \rho e^{i\theta H}$, $I_F(\rho_\theta)$ es independiente de los parámetros θ y en estas circunstancias , $I_F(\rho_\theta)$ coincide con $I_F(\rho_\theta) = \frac{1}{4} \text{Tr}[\rho L^2]$. Aqui L es el analogo cuantico a la derivadas simetrica logaritmica determinada por

$$D_H \rho = \frac{1}{2} (L \rho + \rho L). \quad (\text{C.7})$$

Sea H una observable fija (operador hermitiano) en un espacio de Hilbert \mathcal{H} de estados cuantos representando un cierta cantidad conservada. Sea ρ un operador de denisdad en \mathcal{H} y $\rho_\theta = e^{-i\theta H} \rho e^{i\theta H}$ la evolucion de ρ generada por H , donde $\theta \in \Re$ es un parametro (temporal o espacial) y H puede interpretarse como el generador del cambio temporal o el desplazamiento espacial. Claramente, ρ_θ satisface la ecuacion de von Neumann-Landau

$$i \frac{\partial \rho_\theta}{\partial \theta} = H \rho_\theta - \rho_\theta H \quad \theta \in \Re \quad (\text{C.8})$$

Bajo las suposiciones anteriores tenemos:

1. $I_W(\rho_\theta) = I_W(\rho, H)$, $\forall \theta \in \Re$. Esto es, $I_W(\rho_\theta)$ es independiente del parametro θ y coincide con la informacion Wigner-Yanase skew $I_W(\rho, H)$
2. $I_F(\rho_\theta) = I_F(\rho, H)$, $\forall \theta \in \Re$. Esto es, $I_F(\rho_\theta)$ es independiente del parametro θ y coincide con $I_F(\rho, H)$

APÉNDICE C. DEDUCCIÓN DE LA INFORMACIÓN CUÁNTICA DE FISHER Y SKEW A PARTIR DE LA INFORMACIÓN DE FISHER CLÁSICA

La conclusion de (1) se obtiene de la propiedad ciclica de la traza y

$$D_H \rho_\theta^{1/2} = e^{-i\theta H} (D_H \rho^{1/2}) e^{i\theta H}. \quad (\text{C.9})$$

Con la ecuacion C.8 y C.7 tenemos

$$i(\rho_\theta H - H \rho_\theta) = \frac{1}{2}(L_\theta \rho_\theta + \rho_\theta L_\theta), \quad (\text{C.10})$$

que implica

$$i(\rho H - H \rho) = \frac{1}{2}(L \rho + \rho L). \quad (\text{C.11})$$

Donde $L = e^{i\theta} L_\theta e^{-i\theta H}$. Claramente, L es independiente del parametro θ ya que es la unica solucion de la ecuacion C.11 cuando H y ρ (que son independientes de θ) son fijos. Por la propiedad ciclica de la traza tenemos:

$$I_W(\rho_\theta) = \frac{1}{4} \text{Tr}[\rho_\theta L_\theta^2] = \frac{1}{4} \text{Tr}[e^{-i\theta H} \rho e^{i\theta H} L_\theta^2] = \frac{1}{4} \text{Tr}[\rho_\theta e^{i\theta} L_\theta^2 e^{-i\theta H}] = \frac{1}{4} \text{Tr}[\rho L^2]. \quad (\text{C.12})$$

Tomando el caso en que ρ es no-degenerado, tenemos us representacione espectral como

$$\rho = \sum_m \lambda_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m|, \quad (\text{C.13})$$

donde λ_m son los eigenvalores de ρ y $|\psi_m\rangle$ concituye su base ortonormal. Podemos expresar la identidad en terminos de $|\psi_m\rangle$ como

$$I = \sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \quad (\text{C.14})$$

Ahora obtenemos la informacion de Skew $I_W(\rho, H)$, ya que

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho H^2) &= \sum_m \langle \psi_m | \rho H^2 | \psi_m \rangle = \sum_m \lambda_m \langle \psi_m | H^2 | \psi_m \rangle = \sum_m \lambda_m \langle \psi_m | H \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| H | \psi_m \rangle \\ &= \sum_{m,n} \lambda_m \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle \langle \psi_n | H | \psi_m \rangle = \sum_{m,n} \lambda_m |\langle \psi_m | H | \psi_n \rangle|^2. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Simentricamente tambien tenemos

$$\text{Tr}(\rho H^2) = \sum_{m,n} \lambda_n |\langle \psi_m | H | \psi_n \rangle|^2. \quad (\text{C.16})$$

Por consecuencia

$$\text{Tr}(\rho H^2) = \sum_{m,n} \frac{\lambda_m + \lambda_n}{2} |\langle \psi_m | H | \psi_n \rangle|^2. \quad (\text{C.17})$$

APÉNDICE C. DEDUCCIÓN DE LA INFORMACIÓN CUÁNTICA DE FISHER Y SKEW A PARTIR DE LA INFORMACIÓN DE FISHER CLÁSICA

Para el siguiente termino tenemos

$$\begin{aligned}
 Tr(H\rho^{1/2}H\rho^{1/2}) &= \sum_m \langle\psi_m| H\rho^{1/2}H\rho^{1/2}|\psi_m\rangle = \sum_m \lambda_m^{1/2} \langle\psi_m| H\rho^{1/2}H|\psi_m\rangle \\
 &= \sum_{m,n} \lambda_m^{1/2} \langle\psi_m| H\rho^{1/2}|\psi_n\rangle \langle\psi_n| H|\psi_m\rangle = \sum_{m,n} \lambda_m^{1/2} \lambda_n^{1/2} \langle\psi_m| H|\psi_n\rangle \langle\psi_n| H|\psi_m\rangle \\
 &= \sum_{m,n} \lambda_m^{1/2} \lambda_n^{1/2} |\langle\psi_m| H|\psi_n\rangle|^2.
 \end{aligned} \tag{C.18}$$

Combinando las ecuacion C.15 y C.18 tenemos

$$I_W(\rho, H) = Tr(\rho H^2) - Tr(H\rho^{1/2}H\rho^{1/2}) = \frac{1}{2} \sum_{m,n} (\lambda_m^{1/2} - \lambda_n^{1/2})^2 |\langle\psi_m| H|\psi_n\rangle|^2. \tag{C.19}$$

Ahora evaluamos la información cuántica de Fisher $I_F(\rho, H)$, ya que

$$i(\rho H - H\rho) = \frac{1}{2}(L\rho + \rho L), \tag{C.20}$$

tenemos

$$\langle\psi_m| i(\rho H - H\rho)|\psi_n\rangle = \frac{1}{2} \langle\psi_m| (L\rho + \rho L)|\psi_n\rangle. \tag{C.21}$$

De aqui tenemos, para todo m y n

$$i(\lambda_m - \lambda_n) \langle\psi_m| H|\psi_n\rangle = \frac{\lambda_m + \lambda_n}{2} \langle\psi_m| L|\psi_n\rangle. \tag{C.22}$$

Ahora

$$\begin{aligned}
 I_F(\rho, H) &= \frac{1}{4} Tr(\rho L^2) = \frac{1}{4} \sum_m \langle\psi_m| \rho L^2 |\psi_m\rangle = \frac{1}{4} \sum_{m,n} \lambda_m \langle\psi_m| L|\psi_n\rangle \langle\psi_n| L|\psi_m\rangle \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{m,n} \lambda_m |\langle\psi_m| L|\psi_n\rangle|^2.
 \end{aligned} \tag{C.23}$$

Simétricamente también

$$I_F(\rho, H) = \frac{1}{4} \sum_{m,n} \lambda_n |\langle\psi_m| L|\psi_n\rangle|^2. \tag{C.24}$$

APÉNDICE C. DEDUCCIÓN DE LA INFORMACIÓN CUÁNTICA DE FISHER Y SKEW A PARTIR DE LA INFORMACIÓN DE FISHER CLÁSICA

consecuentemente

$$\begin{aligned}
 I_F(\rho, H) &= \frac{1}{4} \sum_{m,n} (\lambda_m + \lambda_n) |\langle \psi_m | L | \psi_n \rangle|^2 = \frac{4}{8} \sum_{m,n} (\lambda_m + \lambda_n) \frac{(\lambda_m - \lambda_n)^2}{(\lambda_m + \lambda_n)^2} |\langle \psi_m | H | \psi_n \rangle|^2 \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{m,n} \frac{1}{(\lambda_m + \lambda_n)} (\lambda_m - \lambda_n)^2 |\langle \psi_m | H | \psi_n \rangle|^2 \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{m,n} \left(1 + \frac{2\lambda_m^{1/2} \lambda_n^{1/2}}{(\lambda_m + \lambda_n)}\right) (\lambda_m^{1/2} - \lambda_n^{1/2})^2 |\langle \psi_m | H | \psi_n \rangle|^2
 \end{aligned} \tag{C.25}$$

de aquí obtenemos que

$$0 \leq \frac{2\lambda_m^{1/2} \lambda_n^{1/2}}{(\lambda_m + \lambda_n)} \leq 1 \quad \forall m, n \tag{C.26}$$

por lo tanto

$$I_W(\rho, H) \leq I_F(\rho, H) \leq 2I_W(\rho, H), \tag{C.27}$$

si ρ conmuta con H entonces

$$I_W(\rho, H) = I_F(\rho, H) = 0. \tag{C.28}$$

Apéndice D

Minimización para obtener la incertidumbre cuántica local (LQU)

La información de Skew nos dice que tan rápido un estado cuántico (representado por una matriz de densidad) cambia respecto a un operador, de la ecuación C.25 tenemos la definición de la información de skew:

$$I(\rho, K) = -\frac{1}{2} \text{Tr}[(\sqrt{\rho}, K)^2], \quad (\text{D.1})$$

Las correlaciones cuánticas basadas en Información cuántica de Skew se encuentran a través del mínimo de :

$$LQU = U_A^\Lambda(\rho) \equiv \min_{K^\Lambda} I(\rho, K), \quad (\text{D.2})$$

esta propiedad es nula si el estado bipartito es Clásico-Cuántico(CQ) o Clásico-Clásico (CC). Para sistemas del tipo $2 \times N$, es suficiente considerar el operador general:

$$H_a = \vec{n} \cdot \sigma, \quad (\text{D.3})$$

donde n es un vector unitario y σ son las matrices de pauli. El mínimo se encuentra con:

$$\begin{aligned} U_A^\Lambda(\rho) &= \min_{H_A} I(\rho, H_A) = \min_{H_A} \left[-\frac{1}{2} \text{Tr}[(\sqrt{\rho}, K)^2] \right] = \min_{H_A} \left[\text{Tr}[\rho(\vec{n} \cdot \sigma)^2] - \text{Tr}[\sqrt{\rho}(\vec{n} \cdot \sigma)\sqrt{\rho}(\vec{n} \cdot \sigma)] \right] \\ &= \min_{H_A} \left[\text{Tr}[\rho H_A^2] - \text{Tr}[\sqrt{\rho} H_A \sqrt{\rho} H_A] \right] = \min_{H_A} \left[\text{Tr}[\rho] - \text{Tr}[\sqrt{\rho}(\vec{n} \cdot \sigma)\sqrt{\rho}(\vec{n} \cdot \sigma)] \right] \\ &= \min_{H_A} \left[1 - \text{Tr}[\sqrt{\rho}(\vec{n} \cdot \sigma)\sqrt{\rho}(\vec{n} \cdot \sigma)] \right] = \min_{H_A} \left[1 - \text{Tr}[\sqrt{\rho} \sum_i n_i \sigma_i^A \sqrt{\rho} \sum_j n_j \sigma_j^A] \right] \\ &= \min_{H_A} \left[1 - \sum_{ij} n_i \text{Tr}[\sqrt{\rho} \sigma_i^A \sqrt{\rho} \sigma_j^A] \right] n_j = \min_{H_A} \left[1 - \sum_{i,j} n_i w_{i,j} n_j \right], \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

APÉNDICE D. MINIMIZACIÓN PARA OBTENER LA INCERTIDUMBRE CUÁNTICA
LOCAL (LQU)

desarrollando el ultimo termino, donde $w_{i,j} = \text{Tr}[\sqrt{\rho}\sigma_i^A\sqrt{\rho}\sigma_j^A]$, obtenemos

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} n_i w_{i,j} n_j &= n_1 w_{11} n_1 + n_1 w_{12} n_2 + n_1 w_{13} n_3 + n_2 w_{21} n_1 + n_2 w_{22} n_2 + n_2 w_{23} n_3 \\ &\quad + n_3 w_{31} n_1 + n_3 w_{32} n_2 + n_3 w_{33} n_3. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Reacomodando los términos e igualando a una constante,

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} n_i w_{i,j} n_j &= w_{11} n_1^2 + w_{22} n_2^2 + w_{33} n_3^2 + (w_{21} + w_{12}) n_2 n_1 + (w_{13} + w_{31}) n_1 n_3 + (w_{32} + w_{23}) n_2 n_3 \\ \sum_{i,j} n_i w_{i,j} n_j &= \alpha. \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

La ecuación D.6 se puede considerar un función de las tres variables, n_1 , n_2 y n_3

$$\frac{1}{\alpha} [w_{11} n_1^2 + w_{22} n_2^2 + w_{33} n_3^2 + (w_{21} + w_{12}) n_2 n_1 + (w_{13} + w_{31}) n_1 n_3 + (w_{32} + w_{23}) n_2 n_3] = 1, \quad (\text{D.7})$$

por lo que el problema se reduce a una forma cuadrática

$$ax^2 + by^2 + cz^2 + dyz + ezx + fxy = 1 \xrightarrow{\text{Aplicando rotaciones}} ax^*{}^2 + by^*{}^2 + cz^*{}^2 = 1, \quad (\text{D.8})$$

$$U_A(\rho) = 1 - \lambda_{\min}(W), \quad (\text{D.9})$$

el eigenvalor mínimo de la matriz W de 3×3 matriz definida como:

$$(W_{AB})_{mn} = \text{Tr}[\sqrt{\rho_{AB}}(\sigma_{iA} \otimes \mathbb{I}_B)\sqrt{\rho_{AB}}(\sigma_{jA} \otimes \mathbb{I}_B)] \quad (\text{D.10})$$

Bibliografía

- [1] Rudolf K Allemann y Nigel S Scrutton, eds. *Quantum Tunnelling in Enzyme-Catalysed Reactions*. RSC Biomolecular Sciences. The Royal Society of Chemistry, 2009, P001-P385. ISBN: 978-0-85404-122-0. DOI: [10.1039/9781847559975](https://doi.org/10.1039/9781847559975). URL: <http://dx.doi.org/10.1039/9781847559975>.
- [2] Jayendra N Bandyopadhyay, Tomasz Paterek y Dagomir Kaszlikowski. «Quantum coherence and sensitivity of avian magnetoreception». En: *Physical review letters* 109.11 (2012), pág. 110502.
- [3] Giuseppe Bianco y col. «Emlen funnel experiments revisited: methods update for studying compass orientation in songbirds». En: *Ecology and evolution* 6.19 (2016), págs. 6930-6942.
- [4] John S. Briggs y Alexander Eisfeld. «Equivalence of quantum and classical coherence in electronic energy transfer». En: *Phys. Rev. E* 83 (5 mayo de 2011), pág. 051911. DOI: [10.1103/PhysRevE.83.051911](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.051911). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.83.051911>.
- [5] Jennifer C. Brookes. «Quantum effects in biology: golden rule in enzymes, olfaction, photosynthesis and magnetodetection». En: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 473.2201 (2017), pág. 20160822. DOI: [10.1098/rspa.2016.0822](https://doi.org/10.1098/rspa.2016.0822). eprint: <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rspa.2016.0822>. URL: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.2016.0822>.
- [6] M Chavez-Huerta y F Rojas. «Local quantum uncertainty as a robust metric to characterize discord-like quantum correlations in subsets of the chromophores in photosynthetic light-harvesting complexes». En: *Revista Mexicana de Fisica* 66.4 Jul-Aug (2020), págs. 525-537.
- [7] M. Chávez-Huerta y F. Rojas. «Local quantum uncertainty as a robust metric to characterize discord-like quantum correlations in subsets of the chromophores in photosynthetic light-harvesting complexes». En: *Revista Mexicana de Física* 66 (4 jul. de 2020), págs. 525-537. DOI: <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.66.525>. URL: <https://rmf.smf.mx/ojs/rmf/article/view/4990>.
- [8] Wilk K. et al. Collini E. Wong C. «Coherently wired light-harvesting in photosynthetic marine algae at ambient temperature». En: *Nature* 463 (2010), págs. 644-647. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature08811>.

- [9] Read E. et al. Engel G. Calhoun T. «Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems». En: *Nature* 446 (2007), págs. 782-786. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature05678>.
- [10] Erik M. Gauger y col. «Sustained Quantum Coherence and Entanglement in the Avian Compass». En: *Phys. Rev. Lett.* 106 (4 ene. de 2011), pág. 040503. DOI: [10.1103/PhysRevLett.106.040503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.040503). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.040503>.
- [11] Casselman A. et al. Gegeair R. Foley L. «Animal cryptochromes mediate magnetoreception by an unconventional photochemical mechanism». En: *Nature* 463 (6906 ene. de 2010), págs. 804-807. DOI: [10.1038/nature08719](https://doi.org/10.1038/nature08719). URL: <https://www.nature.com/articles/nature08719>.
- [12] Davide Girolami. «Quantum Correlations in Information Theory». Tesis doct. Nottingham, United Kingdom: University of Nottingham, jul. de 2013.
- [13] Davide Girolami, Tommaso Tufarelli y Gerardo Adesso. «Characterizing Nonclassical Correlations via Local Quantum Uncertainty». En: *Phys. Rev. Lett.* 110 (24 jul. de 2013), pág. 240402. DOI: [10.1103/PhysRevLett.110.240402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.240402). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.240402>.
- [14] Li-Sha Guo y col. «Quantifying magnetic sensitivity of radical pair based compass by quantum fisher information». En: *Scientific reports* 7.1 (2017), págs. 1-8.
- [15] K. Harini y Ramanathan Sowdhamini. «Computational Approaches for Decoding Select Odorant-Olfactory Receptor Interactions Using Mini-Virtual Screening». En: *PLOS ONE* 10.7 (jul. de 2015), págs. 1-30. DOI: [10.1371/journal.pone.0131077](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0131077). URL: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0131077>.
- [16] Zhi He y col. «Measuring non-Markovianity based on local quantum uncertainty». En: *Phys. Rev. A* 90 (4 oct. de 2014), pág. 042101. DOI: [10.1103/PhysRevA.90.042101](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.90.042101). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.90.042101>.
- [17] L Henderson y V Vedral. «Classical, quantum and total correlations». En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 34.35 (ago. de 2001), págs. 6899-6905. DOI: [10.1088/0305-4470/34/35/315](https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/35/315). URL: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/35/315>.
- [18] P. J. Hore y Henrik Mouritsen. «The Radical-Pair Mechanism of Magnetoreception». En: *Annual Review of Biophysics* 45.1 (2016), págs. 299-344. ISSN: 1936-122X. DOI: [10.1146/annurev-biophys-032116-094545](https://doi.org/10.1146/annurev-biophys-032116-094545).
- [19] Akihito Ishizaki y Graham R. Fleming. «Theoretical examination of quantum coherence in a photosynthetic system at physiological temperature». En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 106.41 (2009), págs. 17255-17260. ISSN: 0027-8424. DOI: [10.1073/pnas.0908989106](https://doi.org/10.1073/pnas.0908989106). eprint: <https://www.pnas.org/content/106/41/17255.full.pdf>. URL: <https://www.pnas.org/content/106/41/17255>.

- [20] Jim Al-Khalili Johnjoe McFadden. *Life on the Edge. The Coming of Age of Quantum Biology.* Crown Publishers, mar. de 2014. ISBN: 978-0-307-98681-8. URL: <https://www.crownpublishing.com>.
- [21] Sunho Kim y col. «Characterizing nonclassical correlations via local quantum Fisher information». En: *Phys. Rev. A* 97 (3 mar. de 2018), pág. 032326. DOI: [10.1103/PhysRevA.97.032326](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.032326). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.97.032326>.
- [22] Hepp K. Koch C. «Quantum mechanics in the brain». En: *Nature* 440 (2006), pág. 611. DOI: <https://doi.org/10.1038/440611a>.
- [23] Neill Lambert y col. *Functional quantum biology in photosynthesis and magnetoreception.* 2012. arXiv: [1205.0883 \[physics.bio-ph\]](https://arxiv.org/abs/1205.0883).
- [24] Neill Lambert y col. «Quantum biology». En: *Nature Physics* 9.1 (ene. de 2013), págs. 10-18. ISSN: 1745-2473. DOI: [10.1038/nphys2474](https://doi.org/10.1038/nphys2474). URL: <http://www.nature.com/articles/nphys2474>.
- [25] Hohjai Lee, Yuan-Chung Cheng y Graham R. Fleming. «Coherence Dynamics in Photosynthesis: Protein Protection of Excitonic Coherence». En: *Science* 316.5830 (2007), págs. 1462-1465. ISSN: 0036-8075. DOI: [10.1126/science.1142188](https://doi.org/10.1126/science.1142188). eprint: <https://science.sciencemag.org/content/316/5830/1462.full.pdf>. URL: <https://science.sciencemag.org/content/316/5830/1462>.
- [26] Hohjai Lee, Yuan-Chung Cheng y Graham R. Fleming. «Quantum Coherence Accelerating Photosynthetic Energy Transfer». En: *Ultrafast Phenomena XVI*. Ed. por Paul Corkum y col. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2009, págs. 607-609. ISBN: 978-3-540-95946-5.
- [27] Shunlong Luo. «Wigner-Yanase skew information vs. quantum Fisher information». En: *Proc. Amer. Math. Soc.* (132 jul. de 2004), págs. 885-890. DOI: <https://doi.org/10.1090/S0002-9939-03-07175-2>. URL: <https://www.ams.org/journals/proc/2004-132-03/S0002-9939-03-07175-2/>.
- [28] Cintolesi F. et al. Maeda K. Henbest K. «Chemical compass model of avian magnetoreception». En: *Nature* 453 (7193 abr. de 2008), págs. 387-390. DOI: [10.1038/nature06834](https://doi.org/10.1038/nature06834). URL: <https://www.nature.com/articles/nature06834>.
- [29] G. Malcolm Dyson. «Enzyme catalysis: over-the-barrier or through-the-barrier?» En: *Trends in Biochemical Sciences, Elsevier* 25.9 (2000). DOI: [10.1016/S0968-0004\(00\)01642-X](https://doi.org/10.1016/S0968-0004(00)01642-X). URL: [https://doi.org/10.1016/S0968-0004\(00\)01642-X](https://doi.org/10.1016/S0968-0004(00)01642-X).
- [30] G. Malcolm Dyson. «The scientific basis of odour». En: *Journal of the Society of Chemical Industry* 57.28 (1938), págs. 647-651. DOI: [10.1002/jctb.5000572802](https://doi.org/10.1002/jctb.5000572802). eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/jctb.5000572802>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jctb.5000572802>.
- [31] Adriana Marais y col. «The future of quantum biology». En: *Journal of the Royal Society Interface* 15.148 (2018). ISSN: 17425662. DOI: [10.1098/rsif.2018.0640](https://doi.org/10.1098/rsif.2018.0640).

- [32] Johnjoe McFadden y Jim Al-Khalili. *The origins of quantum biology*. 2018. DOI: [10.1098/rspa.2018.0674](https://doi.org/10.1098/rspa.2018.0674).
- [33] Masoud Mohseni y col. «Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer». En: *The Journal of Chemical Physics* 129.17 (2008), pág. 174106. DOI: [10.1063/1.3002335](https://doi.org/10.1063/1.3002335). eprint: <https://doi.org/10.1063/1.3002335>. URL: <https://doi.org/10.1063/1.3002335>.
- [34] Zachary D. Nagel y Judith P. Klinman. «Tunneling and Dynamics in Enzymatic Hydride Transfer». En: *Chemical Reviews* 106.8 (2006). PMID: 16895320, págs. 3095-3118. DOI: [10.1021/cr050301x](https://doi.org/10.1021/cr050301x). eprint: <https://doi.org/10.1021/cr050301x>. URL: <https://doi.org/10.1021/cr050301x>.
- [35] Catherine Offord. *Quantum Biology May Help Solve Some of Life's Greatest Mysteries*. 2019. URL: <https://www.the-scientist.com/features/quantum-biology-may-help-solve-some-of-lifes-greatest-mysteries-65873> (visitado 18-12-2020).
- [36] Harold Ollivier y Wojciech H. Zurek. «Quantum Discord: A Measure of the Quantumness of Correlations». En: *Phys. Rev. Lett.* 88 (1 dic. de 2001), pág. 017901. DOI: [10.1103/PhysRevLett.88.017901](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.017901). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.017901>.
- [37] Gitt Panitchayangkoon y col. «Long-lived quantum coherence in photosynthetic complexes at physiological temperature». En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 107.29 (2010), págs. 12766-12770. ISSN: 0027-8424. DOI: [10.1073/pnas.1005484107](https://doi.org/10.1073/pnas.1005484107). eprint: <https://www.pnas.org/content/107/29/12766.full.pdf>. URL: <https://www.pnas.org/content/107/29/12766>.
- [38] M B Plenio y S F Huelga. «Dephasing-assisted transport: quantum networks and biomolecules». En: *New Journal of Physics* 10.11 (oct. de 2008), pág. 113019. DOI: [10.1088/1367-2630/10/11/113019](https://doi.org/10.1088/1367-2630/10/11/113019). URL: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/10/11/113019>.
- [39] Martin B. Plenio y Shashank S. Virmani. «An Introduction to Entanglement Theory». En: *Quantum Information and Coherence*. Ed. por Erika Andersson y Patrik Öhberg. Cham: Springer International Publishing, 2014, págs. 173-209. ISBN: 978-3-319-04063-9. DOI: [10.1007/978-3-319-04063-9_8](https://doi.org/10.1007/978-3-319-04063-9_8). URL: https://doi.org/10.1007/978-3-319-04063-9_8.
- [40] Vishvendra Singh Poonia, Dipankar Saha y Swaroop Ganguly. «State transitions and decoherence in the avian compass». En: *Physical Review E* 91.5 (2015), pág. 052709.
- [41] Vishvendra Singh Poonia y col. «Functional window of the avian compass». En: *Phys. Rev. E* 95 (5 mayo de 2017), pág. 052417. DOI: [10.1103/PhysRevE.95.052417](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.052417). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.95.052417>.
- [42] Thorsten Ritz, Salih Adem y Klaus Schulten. «A model for photoreceptor-based magnetoreception in birds». En: *Biophysical Journal* 78.2 (2000), págs. 707-718. ISSN: 00063495. DOI: [10.1016/S0006-3495\(00\)76629-X](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(00)76629-X). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/S0006-3495\(00\)76629-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0006-3495(00)76629-X).

- [43] Thorsten Ritz y col. «Resonance effects indicate a radical-pair mechanism for avian magnetic compass». En: *Nature* 429.6988 (2004), págs. 177-180.
- [44] Christopher T. Rodgers y col. «Determination of Radical Re-encounter Probability Distributions from Magnetic Field Effects on Reaction Yields». En: *Journal of the American Chemical Society* 129.21 (2007). PMID: 17469816, págs. 6746-6755. DOI: [10.1021/ja0682091](https://doi.org/10.1021/ja0682091). eprint: <https://doi.org/10.1021/ja0682091>. URL: <https://doi.org/10.1021/ja0682091>.
- [45] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics Second Edition*. 1986. ISBN: 9780805382914. DOI: [10.1119/1.14491](https://doi.org/10.1119/1.14491). arXiv: [1105.4089 \[astro-ph.GA\]](https://arxiv.org/abs/1105.4089).
- [46] Fleming G. et al. Sarovar M. Ishizaki A. «Quantum entanglement in photosynthetic light-harvesting complexes». En: *Nature Phys* 6 (2010), págs. 462-467. DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys1652>.
- [47] Klaus Schulten, Charles E. Swenberg y Albert Weller. «A Biomagnetic Sensory Mechanism Based on Magnetic Field Modulated Coherent Electron Spin Motion». En: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 111.1 (1978), págs. 1-5. DOI: <https://doi.org/10.1524/zpch.1978.111.1.001>. URL: <https://www.degruyter.com/view/journals/zpch/111/1/article-p1.xml>.
- [48] Klaus Schulten, Charles E. Swenberg y Albert Weller. «A Biomagnetic Sensory Mechanism Based on Magnetic Field Modulated Coherent Electron Spin Motion». En: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 111.1 (1978), págs. 1-5. DOI: [doi:10.1524/zpch.1978.111.1.001](https://doi.org/10.1524/zpch.1978.111.1.001). URL: <https://doi.org/10.1524/zpch.1978.111.1.001>.
- [49] C. S. Sell. «On the Unpredictability of Odor». En: *Angewandte Chemie International Edition* 45.38 (2006), págs. 6254-6261. DOI: [10.1002/anie.200600782](https://doi.org/10.1002/anie.200600782). eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/anie.200600782>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/anie.200600782>.
- [50] A Slaoui y col. «A comparative study of local quantum Fisher information and local quantum uncertainty in Heisenberg XY model». En: *Physics Letters A* 383.19 (2019), págs. 2241-2247.
- [51] Ulrich E. Steiner y Thomas Ulrich. «Magnetic field effects in chemical kinetics and related phenomena». En: *Chemical Reviews* 89.1 (1989), págs. 51-147. DOI: [10.1021/cr00091a003](https://doi.org/10.1021/cr00091a003). eprint: <https://doi.org/10.1021/cr00091a003>. URL: <https://doi.org/10.1021/cr00091a003>.
- [52] Markus Tiersch, Sandu Popescu y Hans J. Briegel. «A critical view on transport and entanglement in models of photosynthesis». En: *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 370.1972 (2012), págs. 3771-3786. DOI: [10.1098/rsta.2011.0202](https://doi.org/10.1098/rsta.2011.0202). eprint: <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rsta.2011.0202>. URL: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsta.2011.0202>.

- [53] Luca Turin. «A Spectroscopic Mechanism for Primary Olfactory Reception». En: *Chemical Senses* 21.6 (dic. de 1996), págs. 773-791. ISSN: 0379-864X. DOI: [10.1093/chemse/21.6.773](https://doi.org/10.1093/chemse/21.6.773). eprint: <https://academic.oup.com/chemse/article-pdf/21/6/773/1320021/21-6-773.pdf>. URL: <https://doi.org/10.1093/chemse/21.6.773>.
- [54] Mark M. Wilde, James M. McCracken y Ari Mizel. «Could light harvesting complexes exhibit non-classical effects at room temperature?» En: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 466.2117 (2010), págs. 1347-1363. DOI: [10.1098/rspa.2009.0575](https://doi.org/10.1098/rspa.2009.0575). eprint: <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rspa.2009.0575>. URL: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.2009.0575>.
- [55] Roswitha Wiltschko y Wolfgang Wiltschko. «Magnetoreception in birds». En: *Journal of the Royal Society Interface* 16.158 (2019). ISSN: 17425662. DOI: [10.1098/rsif.2019.0295](https://doi.org/10.1098/rsif.2019.0295).
- [56] W Wiltschko y col. «Magnetic inclination compass: a basis for the migratory orientation of birds in the Northern and Southern Hemisphere». En: *Experientia* 49.2 (1993), págs. 167-170.
- [57] Wolfgang Wiltschko y Roswitha Wiltschko. «Magnetic Compass of European Robins». En: *Science* 176.4030 (1972), págs. 62-64. ISSN: 0036-8075. DOI: [10.1126/science.176.4030.62](https://doi.org/10.1126/science.176.4030.62). eprint: <https://science.sciencemag.org/content/176/4030/62.full.pdf>. URL: <https://science.sciencemag.org/content/176/4030/62>.
- [58] Güntürkün O. et al. Wiltschko W. Traudt J. «Lateralization of magnetic compass orientation in a migratory bird». En: *Nature* 419 (6906 oct. de 2002), págs. 467-470. DOI: [10.1038/nature00958](https://doi.org/10.1038/nature00958). URL: <https://www.nature.com/articles/nature00958>.
- [59] J. R. Woodward y col. «Radio Frequency Magnetic Field Effects on Electron-Hole Recombination». En: *Phys. Rev. Lett.* 87 (7 jul. de 2001), pág. 077602. DOI: [10.1103/PhysRevLett.87.077602](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.077602). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.077602>.
- [60] R.H. Wright. «Odor and molecular vibration: Neural coding of olfactory information». En: *Journal of Theoretical Biology* 64.3 (1977), págs. 473-502. ISSN: 0022-5193. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5193\(77\)90283-1](https://doi.org/10.1016/0022-5193(77)90283-1). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022519377902831>.
- [61] Bao-Ming Xu y col. «Effect of radio frequency fields on the radical pair magnetoreception model». En: *Phys. Rev. E* 90 (4 nov. de 2014), pág. 042711. DOI: [10.1103/PhysRevE.90.042711](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.042711). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.042711>.
- [62] Yiteng Zhang, Gennady P. Berman y Sabre Kais. «The radical pair mechanism and the avian chemical compass: Quantum coherence and entanglement». En: *International Journal of Quantum Chemistry* 115.19 (2015), págs. 1327-1341. ISSN: 1097461X. DOI: [10.1002/qua.24943](https://doi.org/10.1002/qua.24943). arXiv: [1502.00671](https://arxiv.org/abs/1502.00671).