

Hacia una computadora cuántica de diamante

Manuel Ávila Aoki* y Pablo Vera González*

Resumen. En la actualidad, el campo de la computación cuántica es objeto de múltiples investigaciones en varias direcciones. La manufactura de una computadora cuántica de estado sólido es un reto para los estudiosos de esta disciplina. Investigaciones recientes aluden a un defecto del diamante (la ausencia de un átomo en su estructura molecular) que, junto con el implante de un átomo de nitrógeno en la vecindad inmediata de este hueco, haría de este cotizadísimo mineral un candidato ideal para el procesamiento cuántico de la información.

Palabras clave: diamante, hueco, defecto, centro coloreado, escalabilidad, procesamiento, información cuántica, temperatura ambiente.

Towards a Diamond Quantum Computer

Abstract. Nowadays, quantum computation is the object of multiple investigations in several different directions. The manufacture of a solid state quantum computer is a challenge for the studios of this discipline. Recent investigations allude to a defect in diamond (the absence of an atom in its molecular structure) that, together with the implant of a nitrogen atom in the immediate neighbor of this hollow, would make this highly esteemed mineral an ideal candidate for the quantum processing of information.

Key words: diamond, hollow, defect, color center, scalability, processing, quantum information, surrounding temperature.

1. Cómputo cuántico

El cómputo cuántico (cc) es un campo de investigación interdisciplinario sumamente atractivo, en el que concurren, por un lado, las ciencias computacionales y, por el otro, la física. Las primeras se ocupan de la complejidad computacional, generada a partir de las compuertas lógicas cuánticas; mientras que la segunda se encarga de los principios físicos detrás de éstas.

En este trabajo nos ocuparemos del último tema, es decir, del llamado hardware cuántico, cuyo principal objetivo radica en la implementación física de las compuertas lógicas cuánticas. Para el anterior propósito, nosotros explicaremos de

manera sencilla primero, la diferencia entre cómputo cuántico y cómputo clásico para posteriormente desarrollar el tema del hardware cuántico basado en el diamante.

Es claro que, independientemente de qué tipo de cómputo se esté hablando, ya sea clásico o cuántico, ambos son manipulables a través de compuertas lógicas. El poder de la computación clásica, radica en la capacidad de procesar hasta 2^n unidades de información, pero su gran limitante es representar un estado a la vez, es decir, ésta sólo podrá representar una unidad de información, ya sea '0' ó '1'. Estos dos estados, mejor conocidos como bits, son determinados por la carga en condensadores de estado sólido, donde la

presencia o ausencia de carga representan la información ‘1’ verdadero, ‘0’ falso, respectivamente. Las compuertas lógicas son la base central de los equipos de cómputo, donde de hecho, el poder de procesamiento clásico se obtiene de la gran cantidad de arreglos de compuertas que se tienen dentro de un procesador.

A diferencia de la computación clásica, la computación cuántica usa las leyes de la moderna física cuántica para sacar provecho de la interacción entre moléculas con el propósito de construir un procesador lógico de la información, es decir, poder representar hasta 2^n unidades de información *simultáneamente*, haciendo con esto el paralelismo del procesamiento cuántico, natural, es decir: clásicamente sólo se puede representar ‘0’ o ‘1’; con el cómputo cuántico, se puede representar simultáneamente ambos bits, esto mediante la superposición lineal de estos dos estados disponibles. Este estado mezcla de ‘0’ y ‘1’ es la unidad lógica del cómputo cuántico y se le llama qubit. En unas cuantas líneas más adelante retomaremos el concepto de qubit de manera más precisa. Por lo tanto, si se puede representar toda esta información con un sólo qubit y en un sólo cálculo matemático, se llega al paralelismo cuántico masivo, logrando simular procesos nunca antes imaginables como la creación del universo. Para lo anterior, es necesario contar con el medio físico que cumpla con las características que requiere una computadora cuántica.

Al igual que la civilización, el cómputo cuántico avanza a partir del descubrimiento de nuevas formas de explotar los recursos físicos, por ejemplo, materiales, fuerzas y energías. La historia tecnológica de la computadora ha avanzado durante generaciones: las calculadoras de engranes, bulbos y transistores, hasta la llegada, hace dos décadas, de los chips de circuitos integrados. Hoy existen técnicas litográficas avanzadas que comprimen, en una fracción de ancho, compuertas lógicas y cables sobre la superficie del silicón. Desde hace tres décadas, se observa que los microchips se han reducido a la mitad de su tamaño, en promedio cada dos años; y, al mismo tiempo, se duplica la cantidad de circuitos integrados.

De continuar esta tendencia, a fines del año 2020 entraremos de lleno a la era de la nanotecnología, abriéndose la posibilidad de desarrollos de compuertas tan pequeñas, que estarán elaborados con tan sólo un puñado de átomos. Las

características tecnológicas de las compuertas provocarán su carácter estrictamente cuántico, cuyas unidades de procesamiento serán los bits cuánticos o también llamados *qubits*.

La información se procesará, lógicamente, basada en una función de estado cuántico. En otras palabras, si los bits $|0\rangle$ y $|1\rangle$ son información, entonces $|q\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ también es información, siendo α y β números complejos tales que $\|\alpha\|^2 + \|\beta\|^2 = 1$. Como se dijo anteriormente, el estado $|q\rangle$ es llamado qubit. Estas características microscópicas de la información abren un mundo fascinante de posibilidades tecnológicas, así como el surgimiento de nuevos algoritmos (Deutsch y Josza, 1992; Grover, 1996; 2001; Nielsen, 2001; Shor, 1994).

Existen varios prospectos para ser considerados una computadora cuántica operativa (Barenco, 1996). Todos tienen dos objetivos en común: *a)* efectuar operaciones lógicas de manera eficiente y precisa, o lo que es lo mismo, construir compuertas lógicas, y *b)* tener tiempos de decoherencia muy grandes, pues mientras mayor sea este tiempo, realizará más operaciones lógicas la computadora cuántica¹. El tiempo de decoherencia es intervalo de tiempo en el que la mecánica cuántica es válida. Esto quiere decir que para tiempos mayores que el de decoherencia la mecánica cuántica deja de ser válida y el cómputo cuántico deja de tener sentido.

En cuanto al primer objetivo, se observa que a diferencia del cómputo clásico, en el que la lógica de procesamiento es binaria o booleana, en el cómputo cuántico la lógica es continua. Asimismo, las operaciones lógicas en la computadora cuántica las representan operaciones unitarias,² actuando sobre la función de estado asociada al procesador. Esto significa que las compuertas cuánticas y el cc, en general, deben basarse en operaciones reversibles.

El respectivo procesador cuántico estará regulado por procesos físicos no disipativos de calor. Respecto del segundo objetivo, que debe satisfacer una buena computadora cuántica, la coherencia por tiempos muy largos dependerá, básicamente, del correcto aislamiento del frágil sistema de qubits de las interacciones con sus alrededores. En este sentido, queremos abundar en la investigación de frontera acerca del procesamiento de la información por medio del diamante.

2. Computadora cuántica de diamante

El diamante es una piedra preciosa que a lo largo del tiempo ha sido bastante codiciada por su valor industrial y ornamental. Recientes investigaciones demuestran que este mineral posee tiempos de decoherencia del orden de una hora. Esto lo convierte en un material crítico que servirá como bloque de construcción de la nueva tecnología, denominada ingeniería

1. Se debe entender como tiempo de relajación de un sistema el que pierde su propiedad cuántica esencial de armonía simultánea de comunicación íntima entre sus componentes. Por ejemplo, el electrón del átomo de hidrógeno que se encuentra en la órbita excitada $n = 3$, regresará a su estado base, $n = 1$, en un tiempo $T = 0.34 \times 10^{-15}$ S.
2. Una operación U es unitaria si $U^H U = 1$ siendo U^H la matriz traspuesta conjugada compleja.

cuántica. La idea de utilizar el diamante es bastante simple: consiste en emplear un sistema de dos espines nucleares, formado por un núcleo de nitrógeno implantado en el centro del diamante, y una vacante en una posición vecina, inmediata al nitrógeno, en una red de cadenas nucleares (Gaebel, 2006), tal como se ilustra en la figura 1.

Este defecto, también llamado centro NV coloreado, dispersa la luz de tal forma que se pueden construir compuertas lógicas con las propiedades correctas. Antes de entrar en detalles con el tema de una computadora de diamante, se revisa brevemente el uso que se le ha dado a las impurezas en materiales en el estado sólido.

3. Utilidad de defectos en materiales

Los defectos en los materiales frecuentemente determinan las propiedades eléctricas, mecánicas y ópticas en los sólidos. La moderna tecnología del silicio no sería posible sin el preciso control de sus impurezas. Estos defectos, denominados defectos ópticos activos o centros coloreados, son de suma utilidad para la ingeniería cuántica. Estos centros coloreados en distintos materiales fueron investigados intensivamente, durante los años sesenta y setenta. Se estima que tengan aplicaciones en el mediano plazo, dentro de los dispositivos de exploración espacial fabricados por la llamada Optoelectrónica (Vavilov, 1994).

También se ha sugerido (Rand, 1985) qué cúmulos de centros coloreados servirían para fabricar medios láser. Cabe mencionar que la comunicación óptica ha recibido grandes beneficios de los amplificadores ópticos, que se construyen con base en centros coloreados. Podemos afirmar, sin lugar a dudas, que en todas las áreas del procesamiento de datos modernos y técnicas de comunicación, las técnicas de defectos en materiales, de una u otra manera, tienen un impacto sustancial. Otro campo en el que los centros coloreados cumplen un papel activo es el de la tecnología de la información cuántica (Kane, 1998; Shahriar *et al.*, 2002; Stoneham, 2003; Stoneham, s.a.; Wrachtrup *et al.*, 2001).

Explicuemos, pues, lo más breve y claramente posible las ventajas generales del CC en el uso de tecnologías de los defectos en materiales, para después centrarnos en las posibilidades del diamante en particular.

La física moderna asocia a cada partícula una función de onda localizada como se ilustra en la figura 2.

La función de onda electrónica asociada a los defectos en materiales está muy poco localizada, ya que se encuentra muy difundida espacialmente, como se observa en la figura 2.

La densidad de energía E a su alrededor es muy baja; entonces, debido al principio de incertidumbre, el respectivo tiempo de relajación óptica (es decir, el tiempo de transición) será muy

grande: $T \sim 1/E$. Automáticamente, las resonancias ópticas, asociadas a los defectos, son muy angostas. Los materiales que presentan estas propiedades (defectos en materiales), son candidatos idóneos para el procesamiento cuántico de la información. En nuestros días, se conocen varios tipos de defectos en materiales, con número cuántico de espín (momento angular intrínseco) del electrón $S > 0$.

Tradicionalmente, las transiciones ópticas, entre estados electrónicos, se detectan de manera indirecta por medio de la energía de interacción hiperfina entre el espín $S = 1/2$ del electrón con un espín L del núcleo.

Debido al avance en el procesamiento cuántico de la información con transiciones de defectos, esto es válido para un número limitado de tipos de defectos, entre éstos los centros coloreados en diamante.

4. Centros NV en diamante

Un requisito primordial que debe satisfacer una computadora cuántica operativa para fabricarla en serie es tener la habilidad de crear entrelazamiento cuántico compartido, entre un número muy grande de qubits, es decir, éstos deberán estar “coordinados íntimamente entre sí”, como si fueran el público en la inauguración de los juegos olímpicos que, de manera

Figura 1. Estructura del centro NV en la molécula del diamante: el centro comprende un centro N sustituto y una vacante vecina.

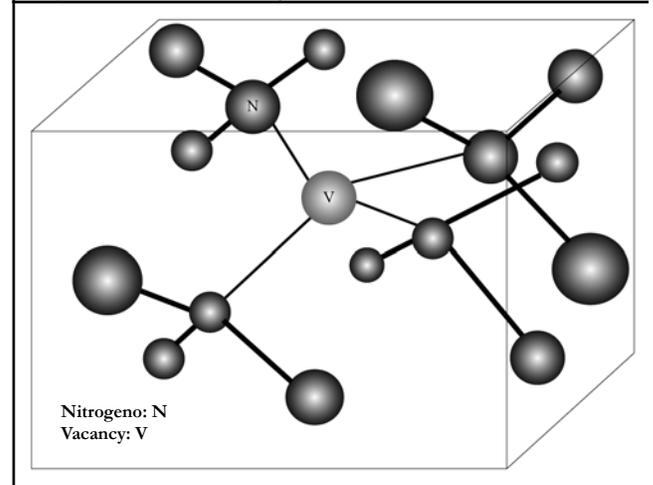
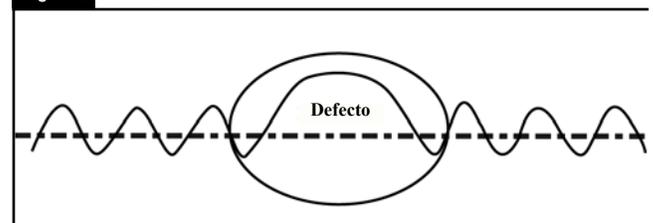


Figura 2. Función de onda.



cambiante, forma mosaicos, palabras o figuras determinadas. Una propiedad estrictamente cuántica, que sirve para los anteriores propósitos, es el momento angular intrínseco (espín) de las partículas, sean éstos electrones o nucleones. La razón para ello es que el espín cuenta con una larga vida y es sensible a la interacción con la luz, conformada por fotones.

En este punto, se pensaría que los iones atrapados y congelados en trampas serían buenos candidatos por su alta resolución espectroscópica. No obstante, los iones atrapados no satisfacen el requisito de escalabilidad, es decir, no cubren un número muy grande de qubits. Se diría que prácticamente no hay sustituto para una implementación de estado sólido en una computadora cuántica, en tanto necesidades de integración y escalabilidad.

Recientemente, los especialistas pusieron bajo la lupa una nueva y prometedora tecnología de estado sólido, basada en centros coloreados, llamados nitrógeno-vacante (NV) en diamante (Wrachtrup, 2006). Tales centros NV consisten en un átomo de nitrógeno implantado en el corazón del diamante, que interactúa con su vecino inmediato, que no es otro, sino una vacante en la red cristalina de esta piedra. Tal situación se muestra en la figura 1.

En cómputo cuántico, una operación lógica la efectúa una operación unitaria, en forma de transición de un estado inicial con espín Si del qubit, a un estado final con espín Sf.

Resulta que los centros NV proporcionan fuertes transiciones que dispersan fotones eficientemente, los cuales se registran con facilidad y, por lo tanto, “registran” (léase, lectura y escritura de) las operaciones lógicas que efectúan dichos centros.

La forma en que se consignan estas operaciones lógicas ejecutadas por los centros NV es a través de una tecnología

muy manejable y simple, llamada microscopía confocal (Wrachtrup, 2006). En un microscopio fluorescente convencional, el espécimen entero se ilumina con la luz de una fuente luminosa. Debido a la conservación de la transportación de la intensidad de la luz, todas las partes del espécimen, a través de toda la trayectoria óptica, serán excitados, siendo detectada su fluorescencia por medio de un fotodetector, o bien por una cámara.

En contraste, un microscopio confocal utiliza iluminación de punto o punta luminosa, así como un orificio en un plano ópticamente conjugado, enfrente del detector, para eliminar información fuera de foco. Sólo la luz del plano focal se detecta; así, la calidad de la imagen es mayor que la del microscopio convencional. Una vez resuelto el problema de la observancia de fotones dispersados por el centro NV, debido a su transición $S_i \rightarrow S_f$ que es responsable de procesar una operación lógica, resta clasificar las transiciones en sus diferentes tipos.

Al igual que muchos emisores ópticos, el centro NV en diamante tiene tres estados base³, de similar energía, etiquetados como $s = 0$, $s = -1$ y $s = 1$, respectivamente, cuyos niveles de energía están representados esquemáticamente en la figura 3. En ésta, el estado excitado E y el estado base A son estados multielectrón, correspondientes al grupo de simetría del defecto. Un hecho afortunado es que, al considerar el cúmulo de espines vecinos al centro NV, la interacción efectiva sobre éste es bastante débil, lo que propicia que los tiempos de coherencia para los qubits sean inusualmente grandes (Gaebel, 2006). Cada transición $E \rightarrow A$ es una operación lógica efectuada por un qubit. Así, se calcula que dentro de las escalas de tiempos de coherencia del espín NV, se realizarán hasta un millón de esas operaciones.

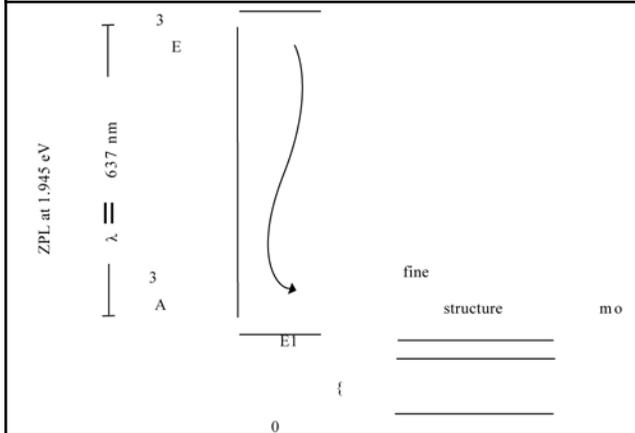
5. Protocolo de lectura (*readout*) de la computadora cuántica de diamante

Para leer las operaciones unitarias asociadas con las operaciones lógicas de los qubits, se necesita registrarlas a muy bajas temperaturas, con el fin de detectar los fotones dispersos. Fortuitamente, el triplete de estado base sufre transiciones ópticas cíclicas lo suficientemente puras, a temperaturas de helio líquido ($\sim -270^\circ\text{C} = 3^\circ\text{K}$), que dan cabida al protocolo de lectura (*readout*) de la computadora cuántica NV de diamante (Wrachtrup, 2006).

6. Estatus actual

En 2006, un grupo multinacional de investigadores implantó nitrógeno en un diamante (Gaebel, 2006). En ese proceso se crearon muchas vacantes móviles, las cuales se remueven por recocimiento a 800°C , siendo atrapada una de éstas por

Figura 3. Estados base A y excitado e del centro NV. Cada transición $E \rightarrow A \rightarrow E$ es una operación lógica de la computadora cuántica de diamante. En los tiempos de operación coherente típicos ($\sim 10^{-9}\text{s}$) de dicha computadora, hay del orden de un millón de transiciones.



3. El estado base de un sistema es el de energía mínima.

el nitrógeno implantado, lo cual crea un centro NV. Las perspectivas para activar todos los átomos de nitrógeno, como centros NV y crear una computadora cuántica “totalmente” NV, son muy alentadoras. Por ahora, hay una intensa búsqueda para determinar con veracidad lo que se puede conseguir con una computadora real que no sea cien por ciento pura NV. Lo que, por el momento, sí se sabe es cómo acoplar un átomo de nitrógeno y un centro NV, para construir una incipiente computadora cuántica de diamante.

En 2007, otro grupo de investigación sentó las bases para una computadora cuántica de diamante con unos cuantos qubits (Dutt, 2007). Se demostró, específicamente, qué coherencias arbitrarias del espín del electrón son transferibles a un espín nuclear, donde aquellas se pueden almacenar por hasta una fracción de segundo y recobrarlas con alta fidelidad.

El espín nuclear almacenado es lo suficientemente robusto, a tal punto que permite reinicializar óptimamente los ciclos del electrón, además de que admite el procesamiento lógico de la información. Por el momento, hay sorprendentes progresos en el proceso de reescalamiento de los sistemas de información cuántica en el diamante con centros coloreados NV. En el futuro inmediato, se planea el desarrollo de circuitos ópticos de un número grande de qubits NV, acoplados de tal manera que se construyan procesadores cuánticos de diamante más avanzados (Awschalom, 2007). Todos estos esfuerzos apuntan a que, en un plazo no mayor de dos décadas, la computadora cuántica de estado sólido de diamante será una realidad.

7. ¿Diamante o silicio para procesar la información? Perspectivas a mediano plazo

Como hemos visto, el estudio de determinados materiales, sin sus impurezas, no sería posible, menos aún las aplicaciones para el descubrimiento de posibles sistemas cuánticos de procesamiento de la información. Tal es el caso del diamante o su aplicación en tecnología de cómputo, en vías de desarrollo.

Los prototipos (en fase incipiente) de computadoras de silicio se basan en resonancia magnética nuclear sobre cadenas

de espines (Kane, 1998). La desventaja de estos prototipos de computadora cuántica basada en el silicio es que no son escalables, ni soportan voltajes de tipo casero, además de que operan a bajas temperaturas y no a temperatura ambiente, como debe hacerlo una computadora de estado sólido comercial. Siendo más explícitos, gran parte de los microcircuitos están diseñados y funcionan gracias a las cualidades e impurezas del silicio, pero ¿se sabe cuáles son las características bajo las que estos chips o circuitos operan? Todos los circuitos integrados diseñados con silicio trabajan con un voltaje que oscila entre los 0.7-20 voltios máximo, y a temperaturas hasta de 150 grados centígrados.

Actualmente, para la simulación o ejecución de diferentes procesos, se requiere de un gran número de circuitos para compensar el estado natural en el que éstos son capaces de funcionar; además, los circuitos trabajan en procesos distintos y el tiempo de ejecución se incrementa exponencialmente, dependiendo de la cantidad y tipo de procesos ejecutados. Situación que no se presentaría con la molécula de diamante, pues se reduciría notablemente el tiempo.

En diciembre de 2002, investigadores japoneses desarrollaron semiconductores basados en diamante, sustentando sus cualidades y principales características, por lo que este mineral se considera un prospecto ideal para el diseño y desarrollo de una computadora cuántica. Estos semiconductores tienen capacidad de trabajar a temperaturas muy elevadas (de hasta 1 000 °C), sin perder su estructura molecular, soportando voltajes que oscilan en los 200 voltios. Esto simplificaría el uso de varios circuitos integrados para la ejecución de procesos que necesitan grandes cantidades de voltaje, incrementando la velocidad de ejecución de los procesos (Kuriko, 2002). Lo anterior es consistente con estimaciones teóricas y experimentos pilotos recientes (Chang, 2006; Akimov, 2007).

Como conclusión, diremos que los chips elaborados con diamante ofrecen mayores posibilidades que los fabricados con silicio, por lo que los primeros se han posicionado como un excelente prospecto para manufacturar, en el mediano plazo, las computadoras cuánticas de estado sólido realmente operativas.

ergo

Bibliografía

- Akimov, A.V.; A. Mukherjee; C. L. Yu; D. E. Awschalom, D.D.; R. Epstein y R. Hanson (2007). “The Diamond Age of Spintronics”, *Scientific American*. 297.
- Chang, A. S. Zibrov; P. R. Hemmer; H. Park y M. D. Lukin (2007). “Generation of Single Optical Plasmons in Metallic Nanowires Coupled to Quantum Dots”, *Nature*. 450.
- Barenco, A.; A. Ekert; C. Macchiavello y A. Sanpera (1996). “Un saut d’échelle pour les calculateurs”, *La Recherche*. noviembre.
- Chang, D.E.; A. S. Sorensen; P. R. Hemmer y M. D. Lukin (2006). “Quantum Optics with Surface Plasmons”, *Phys.Rev. Left* 97: 053002.

- Deutsch, D. y R. Jkosza (1992). "Rapid Solutions of Problems by Quantum Computation", *Proceedings of the Royal Society of London*. A 439.
- Dutt, M. L. Childress, L. Jiang, E. Togan, J. Maze, F. Jelezko, A. S. Zibrov, P. R. Hemmer, and M. D. Lukin (2007). "Quantum Register Based on Individual Electronic and Nuclear Spin Qubits in Diamond", *Science*, 316.
- Gaebel, T.; M. Domhan; I. Popa; C. Wittmann; P. Neumann; F. Jelezko; J. R. Rabeau; N. Stavrias; A. D. Greentree; S. Praver; J. Meijer; J. Twamley; P. R. Hemmer y J. Wrachtrup (2006). "Room-Temperature Coherent Coupling of Single Spins in Diamond", *Nature Physics* 21: 408 (junio).
- Grover, L.K. (1996). "A Fast Quantum Mechanical Algorithm for Data Base Search", *Proceedings 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing*.
- Grover, L.K. (2001). "From Schroendinger Equation to Quantum Search Algorithms", *Am. J. of Phys.* 69 (7).
- Kane, B. D. (1998). "A Silicon Based Nuclear Spin Quantum Computer", *Nature* 393.
- Kuriko, M. (2008). "Could Diamond Chips Supplant Silicon?", <<http://www.acm.org>>, (17 de marzo de 2008).
- Nielsen, M.A. e I.L. Chuang (2001). *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, New York.
- Rand, S.C. y L.G. Deshazer (1985). "Visible Color-center in Diamond", *Opt. Lett.* 10. Shahriar, M.S.; P. R. Hemmer; S. Lloyd; J. A. Bowers y A. E. Craig (2002). "Solid-state Quantum Computer Using Spectral Holes", *Phys. Rev.* A66.
- Shor, P.W. (1994). "Polynomial Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer", *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*. IEEE, Nueva York.
- Stoneham, A. M. (2003). "Explored the Excited State", *Physics* B340.
- Stoneham, A. M. (s.a.). "Optically Driven Silicon-based Quantum Computer with Potential for High-temperature Operation", *J. Phys-Condens. Mat.* 15.
- Vavilov, V.S. (1994). "The Peculiarities of the Physics of Wide Band-gap Semiconductors and their Applications", *Ups. Fiz Nauk*, 164.
- Wikipedia (2008). "Quantum Computing", en <http://www.wikipedia.org/wiki/quantum_computer>, (8 de febrero de 2008).
- Wrachtrup, J.; S. Y. Kilin y A. P. Nizovtzev (2001). "Quantum Computation Using the C-13 Nuclear Spins Near the Single NV Detect Center in Diamond", *Optics and Spectroscopy* 91.
- Wrachtrup, J. y F. Jelezco (2006). "Quantum Information Processing in Diamond", *J. Phys. Condens. Mat.* 18.

Valor U A E M

Si eres estudiante, docente, investigador,
administrativo o trabajador

Es un foro abierto para ti
¡participa!

Secretaría de Difusión Cultural,
Francisco de P. Castañeda No. 10, Universidad, Toluca,
Estado de México, C.P. 50130
Teléfonos: (01 722) 277 38 35 2 77 38 36

Dirección General de Comunicación Universitaria,
Ignacio López Rayón No. 510 Sur, Col. Cuauhtémoc, C.P. 50040
Teléfonos (01 722) 2 26 11 38 / 39

publicación mensual

Búscala en tu espacio universitario

