

Tese de
Doutorado

Emaranhamento e Separabilidade de Estados
em Computação Quântica por
Ressonância Magnética Nuclear

Juan J. Díaz Bulnes

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro, Setembro 2005

Tese de
Doutorado

Emaranhamento e Separabilidade de Estados
em Computação Quântica por
Ressonância Magnética Nuclear

Por:
Juan J. Díaz Bulnes

Orientador:
Ivan S. Oliveira

Apresentada no
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
(CBPF)

Rio de Janeiro, Setembro 2005

Agradecimentos

Em Outubro do ano de 2000, quando eu já tinha defendido minha tese de mestrado, apareceu a oportunidade de iniciar um doutorado. Neste momento meu orientador me propôs, tentativamente, trabalhar em um modelo que pudesse explicar algumas anomalias observadas no comportamento da magnetização de certas amostras magnéticas, resultado do trabalho (no laboratório RMN do CBPF) que M.S. Reis havia encontrado como parte de seu tema de doutorado. No ano seguinte, quando voltei ao Rio, o prof. Ivan me disse que tinha lido alguns artigos que tratavam aspectos básicos da teoria da computação envolvendo a mecânica quântica, campo que revelou-se cheio de problemas abertos tanto do lado experimental quanto do lado teórico; tratava-se da chamada *Computação Quântica*. Isto resultou ainda mais interessante para nós ao termos conhecimento de que alguns desses resultados envolviam a espectroscopia RMN. Foi assim que, pela primeira vez, começamos a dar os primeiros passos nesse campo.

No processo, e não necessariamente no início, tive que lidar com problemas diversos. O maior deles foi, talvez, a minha incapacidade para identificar os tópicos mais relevantes sobre os quais poderia apoiar meu trabalho. Agora, no final desse processo, acho que (parcialmente) a razão disso foi minha falta de experiência. Posteriormente “descobri” que da mecânica quântica teria que estudar (e entender) alguns assuntos dos quais nunca havia tido nenhum contato: o chamado paradoxo de Einstein-Podolsky-Rosen, o emaranhamento quântico, as desigualdades de Bell e os trabalhos experimentais de Aspect.

Foi o apoio permanente e o incentivo de meus caros amigos e colegas, todos eles estimadas pessoas, o que me ajudou muito nessa empreitada. Por isso agradeço a: R. Pujada, G.F. Janampa, V. Montero, A. Gavini, R. Casana, A.O. Bolivar, R. Salazar, G. Gomero, L. Peche, G. Cuba, E. Borges, J. Milla, G. Flores, L. Carrión, M. Rojas, V. Torres, V. Nikolova, A. de León, L.M. Barros, P. Bretz, F.H. Rodrigues, C. Madrid-Bulnes, assim como a meus cunhados, e melhores amigos, Jaime, Willy, Robin, Tula, Elvis, Regina e Nathaly.

Agradeço a meus camaradas do primeiro curso de *Computação Quântica via Ressonância Magnética Nuclear*, oferecido no ano 2002 quando tive a responsabilidade de ser o monitor do curso, por as várias discussões, sempre proveitosas, ao longo do mesmo; um grande “Valeu!” para: R. Auccaise, F. Tovar, J. Chauca, J. Souza, L. Moyano, C.I. Silva; a meus caros professores: Holger G. Valqui (UNI), Anibal O. Caride (CBPF), José A. Helaýel (CBPF) por suas aulas, suas sugestões, esclarecimentos e sua generosidade, com mantida gratidão. Agradeço também a Celia B. Anteneodo (PUC) e ao prof. Evaldo F. Curado

(CBPF) por seus comentários a alguns tópicos relacionados com esta tese; a G. Adenier (U. Bruxelas), D.X. Wei (Acad. Ciências, Pequim) por seus comentários e sugestões em comunicações eletrônicas; aos integrantes do lab. de espectroscopia de RMN de alta resolução (USP/São Carlos): F. Bonk, prof. E.R. de Azevedo e prof. T.J. Bonagamba pela amabilidade e colaboração; ao prof. Alberto P. Guimarães (CBPF) e a Roberto Sarthour (CBPF) por sua grande disposição e colaboração e, de maneira especial, a meu orientador Ivan dos Santos Oliveira Júnior por sua grande generosidade, apoio, compreensão e guia neste trabalho. Finalmente, ao CNPq fico muito grato pela bolsa de estudos concedida.

Artigos publicados ou aceitos para publicação

Artigos publicados

(1) J.D.Bulnes, F.A.Bonk, R.S.Sarthour, E.R.deAzevedo, T.J.Bonagamba, I.S.Oliveira, Quantum Information Processing through Nuclear Magnetic Resonance, *Brazilian Journal Physics*, **35**(3), 1-9, September 2005.

(2) F.A.Bonk, E.R.deAzevedo, R.S.Sarthour, J.D.Bulnes, J.C.Freitas, A.P.Guimares, I.S.Oliveira, T.J.Bonagamba, Quantum Logical Operations for Spin 3/2 Quadrupolar Nuclei Monitored by Quantum State Tomography, *Journal of Magnetic Resonance*, **175**, 226-234, 2005.

(3) F.A.Bonk, R.S.Sarthour, E.R.deAzevedo, J.D.Bulnes, J.C.Freitas, A.P.Guimares, T.J.Bonagamba, I.S.Oliveira, Quantum state tomography for quadrupole nuclei and its application on two-qubit system, *Phys. Rev. A.*, **69**, 042322, 2004.

(4) J.D.Bulnes, F.A.Bonk, R.S.Sarthour, E.R.deAzevedo, T.J.Bonagamba, I.S.Oliveira, New considerations on the separability of very moisy mixed states and implications for NMR quantum computing, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0404020, 2004.

Artigo aceito

(1) J.D.Bulnes, A.Gavini, R.S.Sarthour, E.R.deAzevedo, F.A.Bonk, T.J.Bonagamba, I.S.Oliveira, Entanglement in NMR quantum computation, (artigo convidado a ser publicado como um capítulo no livro *Quantum Computing: New Research*, Nova Science Publishers, Inc., NY, 2005.)

Outras publicações (divulgação)

(1) I.S.Oliveira, R.S.Sarthour, J.D.Bulnes, S.B.Belmonte, A.P.Guimares, E.R.deAzevedo, E.L.G.Vidoto, T.J.Bonagamba e J.C.C.Freitas, Computação Quântica: manipulando a informação oculta do mundo quântico, *Ciência Hoje*, 33 (193), 2003.

(2) R.S.Sarthour, J.D.Bulnes, I.S.Oliveira, Computação quântica via Ressonância Magnética nuclear, *Anais da Escola do CBPF*, 2003.

(3) R.S.Sarthour, J.D.Bulnes, S.B.Belmonte, A.P.Guimares, I.S.Oliveira, Computação Quântica via Ressonância Magnética Nuclear, *Monografia-CBPF-MO-001/02*, 2002.

Resumo

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) despontou ao final dos anos 1990 como a principal candidata para a implementação de operações lógicas e algoritmos quânticos em computadores quânticos. O isolamento dos spins nucleares e conseqüente longos tempos de relaxação, combinados com a perfeita dinâmica implementada pelos pulsos de radiofrequência, levaram à realização de um número de importantes trabalhos a partir de 1997. No entanto, em 1999, a questão de se na RMN efeitos quânticos são de fato implementados, ou apenas as suas simulações, foi levantada. De particular interesse são aqueles experimentos onde o *emaranhamento* de q-bits é reportado. Esta questão é de grande interesse acadêmico, na medida em que o emaranhamento é, possivelmente, de acordo com a versão oficial, o principal recurso natural para o processamento da informação quântica, e vários protocolos envolvendo este fenômeno foram reportados, incluindo um experimento de teleporte de estado quântico. Até a data em que esta tese é escrita, nada menos do que 24 artigos apareceram na literatura reportando o emaranhamento em experimentos de RMN, a maioria deles após o ano de 1999.

Nesta tese, o problema discutido por Braunstein e colaboradores [S.L. Braunstein et. al., *Phys. Rev. Lett.* **83** (5) (1999) 1054], relacionado à separabilidade de matrizes densidade da forma $\rho_\epsilon = (1-\epsilon)M_d + \epsilon\rho_1$, é revisitado. Tais estados são chamados de *pseudo-puros*. Naquele trabalho, as condições de emaranhamento e separabilidade para ϵ aparecem como certos limites de ϵ . Na nossa análise, mostramos que existem infinitos valores no intervalo tomado pelos coeficientes de expansão da matriz densidade, $-1 \leq c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \leq 1$, que levam à matrizes não-físicas, com traço igual a 1, mas com pelo menos 1 autovalor negativo. Também é demonstrado que o limite inferior de ϵ depende dos coeficientes da expansão de ρ_1 na base de Pauli, fato não considerado por Braunstein e colaboradores. Se ρ_1 for hermitiana, com traço igual a 1, mas puder ter autovalores negativos, é mostrado que existe a possibilidade de que a matriz ρ_ϵ correspondente seja emaranhada, mesmo para 2 q-bits, desde que o limite superior de emaranhamento (determinado por Braunstein) deixa de ter significado e é possível encontrar matrizes densidade fora da região correspondente de separabilidade.

Considerando um experimento de RMN como um processo ruidoso conhecido como *canal de despolarização*, obtivemos uma relação entre a chamada *fidelidade de emaranhamento*, \mathcal{F} , para um sistema de 2 q-bits, e o parâmetro $\epsilon \cong \mu H / 4k_B T$, que é uma medida do grau de polarização dos spins nucleares. A partir daí mostramos que os limites para ϵ estabelecidos por Braunstein e colaboradores são inconsistentes.

A partir da realização de um experimento de RMN no ^{23}Na ($I = 3/2$) em um cristal líquido, usando os resultados da tomografia de estado quântico de estados pseudo-emaranhados e analisamos a evolução da chamada informação quântica mútua. Mostramos que esta quantidade se comporta de acordo com o que seria se tivéssemos um estado quântico puro.

De uma maneira relativamente ampla fazemos, nos primeiros cinco capítulos desta tese, uma apresentação de alguns aspectos da teoria da computação quântica, da RMN e de alguns dos principais problemas na CQ-RMN; no capítulo seis apresentamos nossos resultados e nossas discussões dos resultados obtidos, assim como uma análise geral da propriedade emaranhamento e alguns assuntos relacionados. No capítulo sete apresenta-se nossas conclusões e, finalmente, nos apêndices, alguns exemplos.

Abstract

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) appeared in the late 1990s as the main technique candidate to implement quantum logic operations in quantum computers. The isolation of nuclear spins and consequent long relaxation times, combined with the perfect quantum dynamics implemented by radiofrequency pulses, lead to a number of very important results where quantum logic gates and algorithms were implemented in NMR experiments. However, in 1999, the question whether NMR is able to produce true quantum effects, or merely to simulate them, was raised. Of particular interest were those experiments where the *entanglement* of qubits were reported. This question is of great academical interest, since entanglement is possibly the main natural resource for quantum information processing, and various protocols involving entanglement have appeared in the NMR quantum computing literature, including an experiment of quantum complete teleportation. By the time of writing this thesis, to the best of the author knowledge, not less than 24 papers appeared reporting NMR entanglement, most of them after the year 1999.

In this thesis, we revise the problem first addressed by Braunstein and co-workers [S.L. Braunstein et.al., Phys. Rev. Lett. **83**(5) (1999) 1054] concerning the separability of very noisy mixed states represented by general density matrices with the form $\rho_\epsilon = (1 - \epsilon)M_d + \epsilon\rho_1$. It is shown that there exist infinite values in the interval taken for the density matrix expansion coefficients, $-1 \leq c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \leq 1$, which give rise to *non-physical density matrices*, with trace equal to 1, but at least one *negative* eigenvalue; it is also shown that the lower and upper bounds of ϵ depend on the coefficients of the expansion of ρ_1 in the Pauli basis. If ρ_1 is hermitian with trace equal to 1, but is allowed to have *negative* eigenvalues, it is shown that ρ_ϵ can be entangled, even for two qubits. Considering an NMR experiment as a noisy process called *depolarization channel*, we derive the relationship between the *entanglement fidelity*, \mathcal{F} , of a system of two qubits, and the parameter $\epsilon \cong \mu H / 4k_B T$, which measures the degree of polarization of the spin system. From this we show that the bounds established by Braunstein for ϵ are not generally correct. From an NMR experiment we obtained the quantum state tomography measured in ^{23}Na ($I = 3/2$) in a lyotropic liquid-crystal, we analyse the evolution of the so-called *mutual information* in a pseudo-entangled state, and show that this quantity behaves accordingly what should be obtained in a true pure quantum state.

Índice

1	Conceitos de Computação Quântica	15
1.1	Introdução	15
1.2	<i>Bits</i> e <i>q-bits</i>	18
1.3	Estado puro <i>versus</i> mistura estatística	19
1.3.1	Operador densidade	19
1.3.2	Caso 1: estado puro	19
1.3.3	Caso 2: misturas estatísticas	20
1.4	Estados Quânticos de Sistemas Compostos	21
1.5	Portas lógicas	22
1.6	Portas (lógicas) Quânticas	23
1.6.1	Portas a um <i>q-bit</i>	23
1.6.2	Portas a dois <i>q-bits</i>	24
1.7	Requerimentos Sobre um Computador Quântico	25
1.8	Algoritmos Quânticos	26
1.8.1	Algoritmos em tempo exponencial <i>versus</i> algoritmos em tempo polinomial	26
1.9	O Problema da Fatoração de Números grandes em dois fatores primos	27
1.10	O Algoritmo de Fatoração de Shor	28
1.10.1	Determinação do período da função $f_x : \{a\} \rightarrow \{x^a \text{ mod } N\}$	29
1.10.2	Um exemplo concreto: o caso $N=15$	31

2	Emaranhamento Quântico	35
2.1	Introdução	35
2.2	Paradoxo de EPR, Bell e os experimentos de Aspect	36
2.2.1	Os experimentos de Aspect: uma breve revisão	38
2.3	Relação entre os estados de um sistema e de seus sub-sistemas	38
2.4	Medidas de Emaranhamento	42
2.4.1	Critério de Peres: TPP	42
2.4.2	Formação e destilação do emaranhamento: $E(\Psi)$	43
2.4.3	<i>Concurrence</i> : C	44
2.4.4	Fidelidade de emaranhamento: $F_e(\rho, \mathcal{E})$	45
2.5	O Emaranhamento como Recurso Computacional	46
2.6	Alguns "hidden papers"	47
3	Conceitos de Ressonância Magnética Nuclear	51
3.1	A descoberta da RMN	51
3.2	Distinguibilidade dos spins nucleares numa molécula	52
3.3	Hamiltoniano hiperfino para um núcleo com spin $1/2$	52
3.4	Spin em um campo magnético oscilante: transições induzidas por pulsos de radiofrequência	53
3.5	RMN pulsada de 1 spin: usando transformações unitárias	56
3.6	Hamiltoniano para a interação spin-spin	59
3.7	O estado inicial e origem do sinal da RMN	61
3.8	FIDs, ecos de spins e espectroscopia de RMN	63
3.9	Excitação seletiva	65
3.10	Relaxação	67
3.11	Medidas na RMN	68
3.12	Núcleos Quadrupolares em RMN	73
3.12.1	Interação quadrupolar e RMN	73

4	Computação Quântica por Ressonância Magnética Nuclear	79
4.1	Introdução	79
4.2	<i>Q-bits</i> na RMN	81
4.3	Chaves lógicas via RMN	81
4.3.1	A operação $T^{AB}(\pi/2)$	81
4.3.2	A porta <i>XOR</i>	81
4.4	Criação de Estados Pseudo-Puros	83
4.4.1	Estados Pseudo-Puros Através de Médias Temporais	83
4.4.2	Estados Pseudo-Puros Através da Rotulagem de <i>q-bit</i> Lógico	85
4.5	Criação de estados pseudo-emaranhados (estados EPR)	86
4.6	Aumento da polarização dos spins	87
4.7	Algoritmos quânticos implementados via RMN	87
4.7.1	Experimentos em CQ-RMN reportando emaranhamento	89
4.8	Tomografia de Estado Quântico na RMN	94
4.9	Tomografia de Processo Quântico	95
4.10	Núcleo quadrupolar <i>versus</i> núcleo com spin 1/2	97
5	Problemas e Dificuldades na CQ-RMN	99
5.1	A Relaxação na Computação Quântica por RMN	99
5.2	Dificuldades Experimentais na CQ via RMN	100
5.3	Por que, na RMN, não se pode Medir Estados Emaranhados?	101
5.4	O Problema da Separabilidade <i>versus</i> Emaranhamento na CQ-RMN	102
6	Resultados e Discussões	107
6.1	Resultados	107
6.1.1	Emaranhamento Quântico em Misturas Estatísticas	107
6.1.2	Determinando intervalos válidos para a região de separabilidade	109
6.1.3	Um requerimento mais geral para definir matrizes físicas	110
6.1.4	Um experimento de RMN como um canal ruidoso de despolarização	114

6.1.5	Dada uma matriz ρ_ϵ , existe um único limite inferior para ϵ ?	116
6.1.6	‘Fidelidade de emaranhamento’ de matrizes não físicas	117
6.1.7	Um estudo experimental do emaranhamento em RMN	118
6.2	Discussões	122
6.2.1	Considerações gerais	122
6.2.2	As dificuldades e os cuidados necessários com o conceito de emaranhamento	125
6.2.3	O emaranhamento clássico não existe; como sabemos disso?	127
6.2.4	Localidade <i>versus</i> Não-localidade	127
6.2.5	Redefinindo $t = 0$ no <i>gedankenexperiment</i> de EPR	128
6.2.6	O Estado Separável para duas Partículas se mantém Separável	129
6.2.7	Sobre uma possível variante para construir estados Pseudo-Puros por médias temporais	134
7	Conclusões	139
8	Apêndice	143
8.1	Elementos de Aritmética Modular	143
8.2	O Teorema de Schmidt	144
8.3	A tomografia de processo quântico com núcleos quadrupolares	145
8.4	Matriz com autovalor negativo	146
8.5	Verificando que $d_{\alpha_1, \alpha_2} = \epsilon c_{\alpha_1, \alpha_2}$	147
8.6	A equação de Liouville quântica	148
8.7	O Espaço de Estados dos Sistemas Quânticos pode Mudar?	149

Capítulo 1

Conceitos de Computação Quântica

1.1 Introdução

O aumento contínuo do poder dos computadores sustenta-se, fundamentalmente, na miniaturização de seu componente mais básico: o transistor. Ao reduzir as dimensões dos transistores integrados num único microchip, e ao colocar um número maior deles na mesma área, aumenta-se o poder computacional. Com a tecnologia atualmente disponível, é possível construir pequenos dispositivos (nos microchips) da ordem de $0,25\mu m$. Uma ordem de magnitude menor, efeitos quânticos (tunelamento) começam a se manifestar e os elétrons poderão pular de um condutor para outro, perdendo-se assim as características básicas do dispositivo, [1]. Isto quer dizer que as técnicas de integração dos micro-circuitos estão perto de atingir seus limites físicos de funcionamento com base na tecnologia original.

Em 1965, Gordon Moore (um dos fundadores da INTEL) diz, em uma entrevista à revista *Electronics*¹, que o número de transistores por polegada quadrada nos circuitos integrados é duplicado a cada ano e que esta tendência continuaria durante as duas décadas seguintes. Algum tempo depois mudou sua declaração ao afirmar que o ritmo iria decrescer, e a densidade de transistores se duplicaria aproximadamente a cada 18 meses. Esta progressão é de crescimento exponencial, duplicar a capacidade dos microprocessadores a cada ano e meio, é o que se considera a Lei de Moore. Para ter uma idéia do progresso do número de transistores colocados num único circuito integrado (ou chip), pode-se dizer que o primeiro chip no mercado apareceu em 1961 e já em 1964 alguns chips continham 32 transistores. Em 1965, quando Moore deu suas famosas declarações, o chip mais avançado no mercado tinha 64 transistores. Um exemplo mais recente é o processador Pentium III, que possui 28 milhões de transistores.

No início dos anos 1970, vários físicos começaram a se interessar por diversos problemas relacionados

¹O artigo pode ser achado na Internet, no endereço: www.theinquirer.net/images/articles/moorespaper.pdf

aos processos de miniaturização, motivados pela lei de Moore, em particular por problemas dentro da teoria da computação e dos sistemas computacionais, que pela primeira vez foram estudados do ponto de vista físico. O trabalho pioneiro normalmente citado como o que deu início a estas pesquisas foi o estudo entre consumo de energia e computação, feito por R. Landauer, [2], no ano de 1961. Em 1973, C. Bennett, [3], mostrou matematicamente a possibilidade de realizar operações computacionais reversíveis, onde resulta a possibilidade de se fazer computação sem dissipação de energia. Posteriormente, nos anos 1980, apareceram estudos mais elaborados como consequência do trabalho de P. Benioff, [4, 5], que mostraram que um hamiltoniano quântico pode representar o que se chama uma máquina de Turing (clássica) universal². Posteriormente, em 1982 e 1985, R. Feynman, [6, 7], fez estudos que possibilitaram caracterizar as limitações dos computadores clássicos para simular o comportamento dinâmico de sistemas quânticos³. D. Deutsch, em 1985, [8], deu um grande salto ao construir uma situação matemática onde características quânticas próprias dos sistemas microscópicos, como a superposição de amplitudes de probabilidades, foram usadas explicitamente para resolver um problema com funções binárias. A solução daquele problema matemático constitui o agora conhecido algoritmo⁴ quântico de Deutsch. Mas, o “ponto de mutação” que impulsionou notoriamente as pesquisas teóricas e experimentais nesta nova área (agora conhecida como computação quântica), foi o algoritmo construído pelo matemático P. Shor, [9], em 1994, para a fatoração (em tempo polinomial) de números grandes, com centenas ou milhares de dígitos, em dois fatores primos, fazendo uso de recursos quânticos como o *emaranhamento*⁵. Outro algoritmo importante é o de Grover, [10], publicado em 1994; trata-se de um algoritmo de busca que permite achar um item específico numa base de dados não ordenada, com N itens, em $O(N^{1/2})$ passos, sendo que a melhor versão clássica requer, em média, de $N/2$ passos.

Outros trabalhos trataram não apenas de construir algoritmos, mas também, e de maneira mais geral, das primeiras idéias relacionadas com o processamento, manutenção, armazenamento e transferência da informação usando sistemas quânticos. O processamento da chamada “informação quântica”, aproveita-se

²A máquina de Turing é uma formalização do conceito de computador, que contém uma coleção dos seguintes elementos: (i) um conjunto finito de estados internos da máquina; (ii) um alfabeto finito de símbolos, representados, por exemplo, sobre uma fita com células para representar nelas os símbolos; e (iii) uma certa função avaliada sobre este alfabeto.

³A dificuldade dos computadores clássicos para fazer este tipo de simulação surge do fato de que os sistemas quânticos não estão confinados a seus auto-estados, senão podem, em geral, estar em qualquer superposição deles; assim, o espaço de estados que é necessário considerar para descrever o sistema é enorme. Por exemplo, um sistema composto de N núcleos de spins $1/2$ precisa de um espaço de Hilbert 2^N dimensional.

⁴Um algoritmo é uma sucessão finita de instruções concretas e sem ambigüidades que termina depois da execução de um número finito destas.

⁵Conceito a ser apresentado no capítulo 2.

das propriedades que caracterizam os sistemas microscópicos, propriedades estas que os sistemas clássicos não possuem, como a superposição de amplitudes de probabilidades e o emaranhamento quântico. A computação quântica surgiu como uma disciplina inserida neste modelo da informação quântica ligada aos problemas da definição de portas lógicas, algoritmos e outros protocolos “quânticos”.

Algoritmos e computadores quânticos provocam, na atualidade, grande entusiasmo por suas potenciais capacidades, matematicamente demonstradas, e porque foram experimentalmente testadas em laboratórios com diversos sistemas quânticos: fótons, spins nucleares, pontos quânticos, íons em armadilhas, átomos em cavidades, junções Josephson, etc. A grande esperança é que os computadores quânticos, num estágio de desenvolvimento que ainda parece estar longe de ser alcançado, poderiam resolver alguns problemas de grande complexidade computacional⁶ de uma maneira “eficiente”(veja mais adiante) em contraste à completa ineficiência das versões clássicas, incapazes de resolver (na prática) determinadas categorias de problemas com os computadores existentes.

Um exemplo de tal categoria é a simulação do comportamento de sistemas físicos reais, ainda que pequenos. Para ilustrar esta situação Poplavskii, [11] afirma:

“O cálculo quântico para uma molécula de Metano precisa de uma rede com 10^{42} pontos. Supondo que em cada ponto realizemos apenas 10 operações elementares, e que a computação é feita à temperatura extremamente baixa de $T = 3 \times 10^{-3} K$, poderia-se precisar nesse cálculo de toda a energia produzida na Terra durante o século passado⁷.”

Além deste, o problema da fatoração de números compostos grandes⁸ em números primos está entre os problemas computacionais mais difíceis de se resolver, e que está na base dos sistemas de segurança de muitos sistemas criptográficos simples de chave pública. Na seção 1.9 vamos ver com mais detalhe este problema da fatoração de números grandes.

⁶Classificação dada em Ciência da Computação.

⁷The quantum-mechanical computation of the one molecule of methane requires 10^{42} grid points. Assuming that at each point we have to perform only 10 elementary operations, and that the computation is performed at the extremely low temperature $T = 3 \times 10^{-3} K$, we would still have to use all the energy produced on Earth during the last century.

⁸Considera-se que um número é “mediano” quando possui algumas centenas de dígitos e “grande” a partir de alguns milhares de dígitos.

1.2 Bits e q -bits

A unidade de informação clássica é o *bit*, com valores lógicos “0” ou “1”. Estes valores se correspondem a cada uma dentre duas possibilidades de um dispositivo físico bi-estável, como a carga ou descarga de um condensador elétrico. Com N destes dispositivos podem se representar N bits, dando lugar a um número total de estados (lógicos) igual a 2^N . Este conjunto de estados lógicos, previamente numerados, por sua vez, pode se fazer corresponder a outros elementos (possivelmente abstratos), como as letras do alfabeto: a cada letra associa-se um número P , do 0 ao 26:

$$A (0), \quad B (1), \quad C (2), \quad \dots \quad X (24), \quad Y (25), \quad Z (26).$$

Neste caso se requer de $N = 5$ bits e a correspondente representação binária de qualquer destas letras vem dada por: $b_{N-1}b_{N-2}\dots b_0$, onde $b_j = 0, 1$ e $j = 0, \dots, N - 1$, com o qual, $P = b_{N-1}2^{N-1} + b_{N-2}2^{N-2} + \dots + b_02^0$,

Em termos gerais, pode-se dizer que o processamento e manipulação da informação contida num conjunto de *bits* se reduz a mudar “zeros” por “uns” e vice-versa. Por outro lado, como fica claro no caso do condensador elétrico, cada uma das duas possibilidades (os valores do *bit*) pode acontecer uma de cada vez, sendo impossível ter um condensador carregado e descarregado simultaneamente.

De maneira similar, a unidade de informação quântica é o *quantum bit* ou *q-bit*. Para um *q-bit* já não falamos de seus valores, senão de seus estados, podendo estar num estado (representado por) $|0\rangle$ ou no estado (representado por) $|1\rangle$, ou ainda em qualquer superposição deles. Realizações físicas de um *q-bit* são dadas por sistemas quânticos que possuem dois autoestados, como por exemplo: fótons (com seus estados ortogonais de polarização), uma partícula de spin 1/2 em um campo magnético, etc.

Os dois autoestados de um *q-bit* arbitrário são representados pelas matrizes coluna:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

O conjunto $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ forma uma base do espaço de Hilbert associado com o *q-bit*, que é chamada de base computacional. O estado geral para um *q-bit* é representado por

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (1.2)$$

onde $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Este estado pode ser parametrizado pelos ângulos θ e ϕ , fazendo-se $a = \cos\theta/2$ e $b = e^{i\phi}\sin\theta/2$:

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2) |1\rangle \quad (1.3)$$

No entanto, em situações reais se deve considerar as interações dos q-bits com as vizinhanças.

1.3 Estado puro *versus* mistura estatística

1.3.1 Operador densidade

Seja $E_1, \dots, E_\alpha, \dots, E_\mu$ um conjunto de μ *ensembles* de sistemas físicos do mesmo tipo; N_α o número de elementos de E_α , e \tilde{E} o *ensemble* de todos os $N = N_1 + \dots + N_\alpha + \dots + N_\mu$ elementos dos vários E_α .

Supondo que cada E_α possa ser descrito por um *ket* normalizado, $|\phi_\alpha\rangle$, então, o operador:

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{N_\alpha}{N} |\phi_\alpha\rangle\langle\phi_\alpha| \quad (1.4)$$

é chamado de operador estatístico do *ensemble* E . Numa base concreta, a matriz correspondente chama-se matriz densidade. Algumas propriedades matemáticas deste operador são:

- (i) ρ é hermitiano,
- (ii) ρ é definido positivo, ou seja: $\langle u|\rho|u\rangle \geq 0, \forall|u\rangle$,
- (iii) $\text{Tr}(\rho) = 1$.

A partir destas propriedades, outras podem ser deduzidas:

- (iv) Os autovalores de ρ são não-negativos,
- (v) Os autovalores p_n de ρ satisfazem: $0 \leq p_n \leq 1$,
- (vi) $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$.

1.3.2 Caso 1: estado puro

Um *ensemble* (aqui representado por E) que pode ser descrito por um único vetor de estado $|\psi\rangle$, se diz que está num estado puro. Em vez de se descrever E através do *ket* (normalizado) $|\psi\rangle$ se pode, de modo equivalente, descrevê-lo usando uma matriz densidade:

$$\rho = |\phi\rangle\langle\phi| \quad (1.5)$$

a qual é um operador de projeção. Se A é um observável, então:

$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho A) &= \sum_n \langle n|\psi\rangle \langle\psi|A|n\rangle \\ &= \sum_n \langle\psi|A|n\rangle \langle n|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.6)$$

Neste formalismo, portanto, o valor médio de um observável A é dado pela expressão:

$$\bar{A} = \text{tr}(\rho A) \quad (1.7)$$

Semelhantemente,

$$P(a_k) = \sum_r |a_k, r\rangle \langle a_k, r| \quad (1.8)$$

é o operador projeção, no sub-espaço H_k definido pelos autoestados de A correspondentes ao autovalor a_k . Então:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho P(a_k)) &= \sum_{n,r} \langle n|\psi\rangle \langle\psi|a_k, r\rangle \langle a_k, r|n\rangle \\ &= \sum_r |\langle a_k, r|\psi\rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.9)$$

Assim, a frequência estatística com a qual se prevê a medida de A com valor a_k , é dada por:

$$\omega_k = \text{Tr}(\rho P(a_k))$$

1.3.3 Caso 2: misturas estatísticas

Um ensemble \tilde{E} obtido combinando todos os elementos de vários sub-ensembles E_α é uma mistura estatística. Se cada E_α pode ser descrito por um vetor de estado $|\phi_\alpha\rangle$, e se estes $|\phi_\alpha\rangle$ não são idênticos, a mistura obtida não é um estado puro.

É muito conveniente descrever \tilde{E} por uma matriz densidade ρ definida por:

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{N_\alpha}{N} |\phi_\alpha\rangle \langle\phi_\alpha| \quad (1.10)$$

Então o valor médio de qualquer observável A de \tilde{E} é:

$$\bar{A} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} N_\alpha \bar{A}_\alpha \quad (1.11)$$

onde \bar{A}_α é o valor médio de A sobre \tilde{E} . Usando a (1.7) resulta:

$$\bar{A} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} N_\alpha \text{Tr}(\phi_\alpha \langle\phi_\alpha|A)$$

$$= \text{Tr}(\rho A) \quad (1.12)$$

Assim, a expressão (1.7) para o valor médio derivada acima para o caso puro, se aplica igualmente às matrizes aqui consideradas. O que diferencia as misturas estatísticas dos estados puros é o fato que as matrizes densidade que descrevem misturas não são operadores de projeção. Ou seja,

$$\rho^2 \neq \rho$$

1.4 Estados Quânticos de Sistemas Compostos

Consideraremos agora dois sistemas quânticos A e B descritos por estados nos espaços de Hilbert \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B , respectivamente. O espaço de Hilbert do sistema composto " $A + B$ " é o produto tensorial de \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{A+B} \equiv \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B, \quad (1.13)$$

e seus estados atuam no espaço \mathcal{H} .

Se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ são estados puros do sistema A , ao passo que $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$ são estados puros do sistema B , então:

$$|\psi\rangle \equiv \alpha|\psi_1\rangle \otimes |\phi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle \otimes |\phi_2\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (1.14)$$

é um estado do sistema composto " $A + B$ ", ainda que não o mais geral. De forma mais genérica, se $\{|e_i\rangle\}$, com $i = 1, \dots, m$ e $\{|f_j\rangle\}$, com $j = 1, \dots, n$ são duas bases em \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B , então cada vetor (estado puro) em \mathcal{H} pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle \quad (1.15)$$

para alguns coeficientes complexos c_{ij} . Fica claro que a mecânica quântica admite mais estados para um sistema composto do que a física clássica. De fato, no caso clássico, se os estados dos subsistemas A e B são descritos por conjuntos de coordenadas $x_\mu^{(A)}$ e $x_\nu^{(B)}$, então o estado do sistema composto está caracterizado por o conjunto de coordenadas $\{x_\mu^{(A)}, x_\nu^{(B)}\}$. Isto significa que o espaço do sistema composto tem uma estrutura de produto cartesiano dos espaços dos subsistemas, distinta daquela de produto tensorial no caso quântico. Os estados produto da forma:

$$|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle, \quad |\phi\rangle \in \mathcal{H}_B \quad (1.16)$$

são chamados de separáveis; todos os outros estados, ou seja, aqueles que não podem ser escritos como um produto tensorial simples (por exemplo, de dois estados) são chamados de emaranhados⁹.

1.5 Portas lógicas

Qualquer ação computacional pode ser traduzida em termos das chamadas *portas lógicas*. Fisicamente, em um computador clássico, uma porta lógica consiste de alguns elementos de circuitos conectados entre si, de modo que o sinal observado em sua saída depende de uma determinada relação lógica entre os sinais na sua entrada.

Existem três portas lógicas elementares em um computador clássico: AND, OR e NOT¹⁰. Qualquer operação lógica pode ser construída a partir de combinações destas portas. NOT é uma operação de *1 bit*: se a entrada for ‘1’, a saída será ‘0’, e vice-versa. AND e OR são operações a *2 bits*. Estas portas obedecem às seguintes tabelas-verdade (A e B são os *bits* de entrada e V de saída):

A	B	V(AND)	V (OR)
0	0	0	0
0	1	0	1
1	0	0	1
1	1	1	1

Um importante exemplo de porta construída a partir destas portas elementares é a porta “Ou-exclusivo” ou XOR, cuja tabela verdade é mostrada abaixo:

A	B	V(XOR)
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Existem ainda outras duas portas importantes. Estas são a porta NAND (AND invertida) e a porta NOR (OR invertida). Associando portas da mesma função (NAND ou NOR) é possível construir qualquer porta lógica fundamental (AND, OR ou NOT). Devido a esta propriedade, as portas lógicas NAND e NOR são suficientes para o desenvolvimento de qualquer expressão lógica. Em outras palavras, qualquer sistema digital pode ser cons- truído utilizando-se apenas as portas lógicas NAND e NOR.

⁹Veja o capítulo seguinte.

¹⁰Este conjunto não é o único.

1.6 Portas (lógicas) Quânticas

Em 1995, Barenco *et.al.*, [12], demonstraram que, analogamente ao que ocorre em um computador clássico, no modelo do computador quântico qualquer ação computacional pode ser implementada a partir de portas elementares. Isto é possível devido ao fato de existir uma interação controlada entre um q-bit “alvo” e o exterior. Assim, existem portas de 1 q-bit, de 2 q-bits e, em geral, de N q-bits. Contudo, ao contrário do que ocorre classicamente, a porta XOR quântica (também chamada CNOT) é a única porta a dois q-bits necessária para se construir qualquer outra, com operações a 1 q-bit. Por outro lado, existem diferenças entre as portas clássicas e quânticas, sendo a principal delas o fato de que certas operações clássicas, como por exemplo a AND ou a OR, são irreversíveis, ao passo que as operações quânticas são sempre reversíveis, pois estão associadas a transformações unitárias.

1.6.1 Portas a um q -bit

A porta lógica mais simples é a porta NOT. Esta porta, simbolizada aqui por X , atua sobre um único q-bit, e troca o estado:

$$X|0\rangle = |1\rangle \quad X|1\rangle = |0\rangle$$

A partir desta definição obtém-se a matriz de X , na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$:

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.17}$$

Notamos, portanto, que X nada mais é do que a componente x das matrizes de Pauli.

Uma outra operação importante sobre o estado de 1 q-bit é a troca de fase, Z . Trata-se da componente z das matrizes de Pauli:

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.18}$$

Z troca a fase do estado $|1\rangle$ de 180 graus: $Z|1\rangle = -|1\rangle$, ao passo que sua atuação sobre $|0\rangle$ o deixa inalterado: $Z|0\rangle = |0\rangle$.

A porta Haddamard, representada por H , cria superposições de estados quânticos. Sua atuação sobre os autoestados da base computacional, e sua matriz representativa, são:

$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{aligned}
H|1\rangle &= \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \\
H &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{1.19}$$

1.6.2 Portas a dois q -bits

A porta XOR atua sobre dois q -bits. Esta porta modifica o estado de um dos q -bits, o chamado de ‘ q -bit alvo’, de forma condicionada ao estado do outro, chamado de ‘ q -bit de controle’. Se o estado do q -bit de controle for ‘0’, o q -bit alvo é mantido; caso contrário, o estado do q -bit alvo é trocado. Antes, porém, de definirmos a matriz XOR, é necessário definirmos a base computacional formada pelos autoestados para dois q -bits¹¹:

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Este conjunto de autokets forma a chamada base computacional no caso de 2 q -bits.

A aplicação da XOR_A (XOR com q -bit de controle em A) sobre os estados da base computacional produz:

$$XOR_A|00\rangle = |00\rangle$$

$$XOR_A|01\rangle = |01\rangle$$

$$XOR_A|10\rangle = |11\rangle$$

$$XOR_A|11\rangle = |10\rangle$$

Portanto, a matriz XOR_A será dada por:

$$XOR_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.20}$$

Podemos, de forma similar, definir o efeito da porta XOR_B sobre os estados da base computacional:

$$XOR_B|00\rangle = |00\rangle$$

$$XOR_B|01\rangle = |11\rangle$$

$$XOR_B|10\rangle = |10\rangle$$

$$XOR_B|11\rangle = |01\rangle$$

¹¹vamos definir aqui a notação $|0\rangle \otimes |0\rangle \equiv |00\rangle$, etc.

Portanto, a matriz XOR_B será dada por:

$$XOR_B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

A operação ou transformação de *Hadamard*, no caso de dois q-bits, é representada por:

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

H cria superposições uniformes de autoestados. Aplicada ao estado $|00\rangle$, por exemplo, teremos:

$$H|00\rangle = \frac{1}{2}[|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle] \quad (1.23)$$

Como será visto mais adiante, as portas acima podem ser fisicamente implementadas através de seqüências de pulsos de radiofrequência, aplicadas nas ressonâncias dos spins A e B .

Uma seqüência de operações aplicadas sobre estados quânticos é chamada de circuito quântico, e equivale às "rotinas" em um computador clássico.

1.7 Requerimentos Sobre um Computador Quântico

DiVincenzo, [13], estabeleceu critérios para identificar possíveis sistemas quânticos que poderiam ser úteis, em princípio, para se implementar um computador quântico, através das seguintes condições:

- (1) Necessidade de q-bits: sistemas quânticos com espaço de Hilbert finito os quais podem ser decompostos em forma de produtos tensoriais;
- (2) Necessidade de uma etapa de inicialização: habilidade para preparar o sistema quântico a partir de um estado inicial, tal como o estado fundamental;
- (3) Necessidade de um longo tempo de coerência: um sistema adequado precisa de um grande isolamento de seu meio-ambiente, de maneira que uma superposição de estados quânticos se mantenha por tempos suficientes para que os processos computacionais possam ser completados;
- (4) Necessidade de um controle universal: habilidade para submeter o sistema quântico a uma seqüência controlável de transformações unitárias;
- (5) Necessidade de se fazer medições: capacidade de leitura para medir o estado quântico final.

No que se refere aos possíveis *q-bits*, a tabela abaixo mostra algumas das mais importantes realizações destas unidades de informação quântica:

Sistema	τ_Q	τ_{op}	$n_{op} = \lambda^{-1}$
Spin nuclear	$10^{-2} - 10^8$	$10^{-3} - 10^{-6}$	$10^5 - 10^{14}$
Spin eletrônico	10^{-3}	10^{-7}	10^4
Armadilha de íons (In^+)	10^{-1}	10^{-14}	10^{13}
Elêtron -Au	10^{-8}	10^{-14}	10^6
Elêtron -GaAs	10^{-10}	10^{-13}	10^3
Ponto quântico	10^{-6}	10^{-9}	10^3
Cavidade óptica	10^{-5}	10^{-14}	10^9
Cavidade de microonda	10^0	10^{-4}	10^4

Tabela 1. Vários q-bits correspondentes a distintos sistemas de 2 estados. Aqui τ_Q (em segundos) dá o tempo estimado de decoerência, τ_{op} (em segundos) o tempo estimado de operação, e $n_{op} = \lambda^{-1}$ fornece o número máximo de operações para as várias realizações dos q-bits.

1.8 Algoritmos Quânticos

1.8.1 Algoritmos em tempo exponencial *versus* algoritmos em tempo polinomial

Os algoritmos que visam resolver problemas de grande complexidade computacional são divididos, segundo o tempo estimado com que poderiam resolver aqueles problemas, em duas categorias: algoritmos implementáveis em tempo *exponencial* e algoritmos implementáveis em tempo *polinomial*. Para ilustrar esta classificação consideramos os casos abaixo:

(1) Seja um número composto N . Um método para determinar dois fatores primos de N consiste em aplicar o seguinte algoritmo (clássico): dividir o N por cada um dos números de 1 a \sqrt{N} . Este procedimento precisa de \sqrt{N} operações, mas, como $\sqrt{N} = 2^{(\log N)/2}$, pode-se dizer que este processo é *exponencial*¹² no número de dígitos de N , que é aproximadamente igual a $\log N$.

(2) Diz-se que um algoritmo é implementado num tempo *polinomial* quando o número de operações elementares que ele emprega é proporcional a n^λ , onde n é o comprimento, em *bits*, do dado de entrada (no caso visto acima, o dado de entrada seria N , o número a ser fatorado) e λ uma certa constante. Fatorar em tempo polinomial é o critério estabelecido para se classificar como *eficiente* um dado algoritmo, [14]. Existem algoritmos clássicos eficientes, por exemplo, para a fatoração de potências de números primos puros, p , tais como $M = p^\alpha$, mas não é conhecido um algoritmo clássico para fatorar eficientemente números compostos grandes.

¹²Aqui a base dos logaritmos considerados é dois.

1.9 O Problema da Fatoração de Números grandes em dois fatores primos

O tamanho do problema computacional para a fatoração de números grandes pode ser melhor visualizado através de um cálculo simples usando o algoritmo clássico que, na atualidade, é normalmente citado como sendo o melhor¹³. Trata-se do *number field sieve*, o qual fatoriza um número N num número de passos computacionais da ordem de:

$$O(\exp(1.9223 \times (\ln N)^{1/3} \times (\ln \ln N)^{2/3})) \tag{1.24}$$

Coloquemos um exemplo. Para fatorar o número $N = 2^{1024}$ se requer, segundo a Eq.(1.24), aproximadamente 2^{87} passos computacionais. Se um computador faz 1 milhão de instruções¹⁴ por segundo, então faria $31,536,000 \times 1,000,000$ instruções em 1 ano, que são aproximadamente 2^{45} passos/ano. Logo, seriam necessários, aproximadamente, $2^{(87-45)} = 2^{42}$ ou 4×10^{12} anos para fatorar o número N . Em uma estimativa feita para um processador Pentium de 100-megahertz, que faz cerca de 50 milhões de instruções por segundo, poderia fatorar esse número em aproximadamente 8×10^{10} anos. Procedendo similarmente com números de distintos números de *bits*¹⁵ conseguimos a tabela abaixo, a qual contém os tempos da fatoração estimados para varios números, no caso de usar o algoritmo *number field sieve* e um computador ideal que processa à frequência de 100 MHz.

Número N	Número de bits do inteiro N	t_{fact} (anos)
2^{512}	512	10^4
2^{1024}	1024	10^{10}
2^{2048}	2048	10^{19}
2^{4096}	4096	10^{31}

Tabela 2. Tempos de fatoração preditos usando o algoritmo *number field sieve*.

Esta tabela vai nos servir para comparar estes tempos de fatoração com outros previstos (para os mesmos números) segundo um algoritmo *quântico* (a ser definido na seguinte subseção) para fatorar números grandes. É interessante dizer que no ano 1994, cerca de 1600 computadores trabalhando sem parar num período de tempo de 8 meses, conseguiram fatorar um número com 129 dígitos. Nesta época, o maior número que podia ser fatorado usando supercomputadores ordinários e algoritmos não quânticos, possuía

¹³Este não é um algoritmo eficiente.

¹⁴Sendo que cada instrução é executada em um passo computacional.

¹⁵Um número N com certo número de dígitos terá, correspondentemente, um certo número de *bits*.

140 dígitos. No mesmo ano, o matemático Peter W. Shor implementou um algoritmo, do tipo probabilístico¹⁶ e com ingredientes “quânticos”, que poderia fatorar um número grande em dois fatores primos num tempo *polinomial* ou, equivalentemente, com uma velocidade de processamento *exponencial*, se for executada em um computador quântico ideal.

1.10 O Algoritmo de Fatoração de Shor

Consideremos a seguinte equação na aritmética de números *mod N* (modulo N)¹⁷,

$$y^2 \equiv 1 \pmod{N} \tag{1.25}$$

com solução trivial $y \equiv \pm 1 \pmod{N}$, como pode se verificar facilmente. Se esta equação possui (pelo menos) uma solução *não trivial* então a partir desta pode-se determinar números que são proporcionais aos fatores de N . Vamos supor que este seja o caso, e a tal solução chamaremos de $y = b$, logo:

$$b^2 \equiv 1 \pmod{N} \quad \implies \quad b \neq \pm 1 \pmod{N} \tag{1.26}$$

Agora, de $b^2 \equiv 1 \pmod{N}$ temos :

$$(b+1)(b-1) \equiv 0 \pmod{N} \quad \implies \quad (b+1)(b-1) = kN \tag{1.27}$$

e de $b \neq \pm 1 \pmod{N}$ temos :

$$(b+1) \neq k_1N \quad e \quad (b-1) \neq k_2N \quad ; \quad k_1, k_2 \in Z \tag{1.28}$$

Das duas últimas relações fica claro que $(b+1)$ e $(b-1)$ só podem ser múltiplos dos *fatores* de N .

Se, ao considerar um número aleatório R , co-primo com N , este resulta ser um gerador¹⁸ do grupo Z_N^* e têm como ordem (do grupo) um número par, r , então qualquer solução não trivial da equação $y^2 \equiv 1 \pmod{N}$ pode ser escrita como $b = R^{r/2}$. Logo, ao computar o máximo divisor comum de $R^{r/2} - 1$ e de N , $\text{mdc}(R^{r/2} - 1, N)$, por meio do algoritmo de Euclides, se pode obter um fator de N . Mas, nas duas situações seguintes: (i) se r é ímpar ou (ii) se r é par e $R^{r/2}$ é uma solução trivial, o processo pode dar uma resposta incorreta e será preciso ingressar um outro número aleatório e repetir o processo a partir

¹⁶Um algoritmo probabilístico é aquele que na sua etapa inicial define, de maneira aleatória, valores para vários de seus parâmetros, sendo que a solução dada pelo algoritmo depende fortemente de valores adequados para esses parâmetros.

¹⁷Veja a seção de Apêndices.

¹⁸Veja no apêndice B para este conceito e outros relacionados.

do início.

A conexão que usa-se é que a ordem do número considerado vem a ser o período de certa função exponencial modular. Agora vamos ver como determina-se tal período.

1.10.1 Determinação do período da função $f_x : \{a\} \rightarrow \{x^a \text{ mod } N\}$

O algoritmo considera os elementos do espaço de Hilbert: $\mathbb{H} = \mathbb{C}^q \otimes \mathbb{C}^{N_1} \otimes \mathbb{C}^k$, onde \mathbb{C}^n é o espaço vetorial complexo n -dimensional. \mathbb{C}^q e \mathbb{C}^{N_1} associam-se com dois registros quânticos que contém (em superposição) números inteiros em representação binária¹⁹.

Aqui $N_1 = 2^l$, para algum l , tal que $N \leq N_1$. O espaço de trabalho²⁰ para fazer operações aritméticas é \mathbb{C}^k . Se :

$$a = a_0 + 2a_1 + 2^2a_2 + \dots + 2^sa_s \quad (1.29)$$

é a representação binária ($a_i \in \{0, 1\}$) de um inteiro a , então escrevemos :

$$|a\rangle \equiv |a_0\rangle \otimes \dots \otimes |a_s\rangle \quad (1.30)$$

Passo (0): Inicializa-se os registros :

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle_e \otimes |0\rangle_s \quad (1.31)$$

onde $|\dots\rangle_e$ e $|\dots\rangle_s$ denotam os estados dos registros de entrada e de saída na máquina, respectivamente.

Passo (1): O primeiro registro é posto numa superposição uniforme de estados identificados com números $a \pmod q$. Então, o estado do computador quântico será:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^L}} \sum_{a=0}^{2^L-1} |a\rangle_e \otimes |0\rangle_s \quad (1.32)$$

Passo (2): Computa-se²¹ no registro de saída os valores da função exponencial modular (de período r).

Com isto o estado do computador quântico se torna:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^L}} \sum_{a=0}^{2^L-1} |a\rangle_e \otimes |x^a \text{ mod } N\rangle_s \quad (1.33)$$

¹⁹O mais importante é que estes dois registros contém todos estes números *simultaneamente*. Se observamos um registro, então o paralelismo desaparece. Uma medida seleciona só um destes inteiros.

²⁰Aqui, em geral, este registro não será mostrado explicitamente.

²¹Na teoria dos algoritmos, computar os valores de uma certa função F , para distintas entradas "x", toma distintos intervalos de tempos. Ao contrário, a versão quântica de F , o operador unitário U_F , tal que $U_F|x\rangle = |F(x)\rangle$, atuando sobre uma superposição de todos os estados $|x\rangle$, consegue simultaneamente todos os valores clássicos de F ; isto é, sua superposição.

(atenção: esta "somatoria" não indica tratar-se de 2^L pares de registros de entrada e de saída coisa que, por abuso de notação, poderia-se sugerir).

Passo (3): Fazendo uma medição dos q -bits no registro de saída o seu estado colapsará para certo estado $|v\rangle$ (com um único valor da função exponencial modular). Logo, ficamos com um estado do computador dado pela seguinte superposição de estados :

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^L/r}} \sum_{j=0}^{(2^L/r)-1} |jr + k_v\rangle_e \otimes |v\rangle_s \quad (1.34)$$

onde os : $jr + k_v$, com $j \in \{0, 1, 2, \dots, M-1\}$, são todos os valores no domínio da função (de período r) nos quais tal função tem o mesmo valor v . É aqui onde o emaranhamento manifesta-se no algoritmo de Shor: fazendo uma medição sobre um conjunto de q -bits (o registro de saída) consegue-se definir um conjunto de estados para o outro conjunto de q -bits (o registro de entrada) sobre o qual não se fez realizado nenhuma medição.

Passo (4): Antes de proseguir, é necessário apagar o conteúdo do espaço de trabalho. Vamos simbolizar, desta vez explicitamente, o estado do registro correspondente para olhar o estado da máquina antes de que este seja apagado:

$$\sum | \rangle_e \otimes | \rangle_s \otimes |g(a)\rangle_t \quad (1.35)$$

onde $|g(a)\rangle_t$ denota o "lixo" armazenado no espaço de trabalho. Se aplicarmos a transformada de Fourier discreta, F , sobre $| \rangle_e$, estaríamos alhandando as propriedades de periodicidade da função $x^a \pmod{N} \otimes g(a)$, que podem ser completamente distintas das propriedades da periodicidade de $x^a \pmod{N}$, na qual estamos interessados.

Agora aplica-se a transformada de Fourier discreta, F , sobre o registro de entrada:

$$F |jr + k_v\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^L}} \sum_{b=0}^{2^L-1} e^{2\pi i(jr+k_v)b/2^L} |b\rangle \quad (1.36)$$

Então o estado do computador quântico fica:

$$|\psi_4\rangle = \frac{\sqrt{r}}{2^L} \sum_{b=0}^{2^L-1} \sum_{j=0}^{(2^L/r)-1} e^{2\pi i(jr+k_v)b/2^L} |b\rangle_e \otimes |v\rangle_s \quad (1.37)$$

Passo (5): A probabilidade de que, ao fazer uma medição do registro de entrada, o estado $|\psi_4\rangle$ colapse para a um estado $|c\rangle_e \otimes |v\rangle_s$, sendo c um inteiro entre 0 e $2^L - 1$, é dada por:

$$P(c) = \frac{r}{2^{2L}} \left| \sum_{j=0}^{(2^L/r)-1} e^{2\pi i j r c / 2^L} \right|^2 = \frac{r}{2^{2L}} \left| \sum_{j=0}^{(2^L/r)-1} (e^{2\pi i r c / 2^L})^j \right|^2 \quad (1.38)$$

Considerando um conjunto contínuo de valores para c vemos que $P(c)$ representa uma função de distribuição de probabilidades. Pode-se mostrar de maneira simples que $P(c)$ pode ser escrita como:

$$P(c) = \frac{r}{2^{2L}} \left[\frac{\text{sen}^2(\pi c)}{\text{sen}^2(\pi c r / 2^L)} \right] \quad (1.39)$$

e que os valores de c , para a qual a $P(c)$ é máxima²², são dados por:

$$|c r \bmod 2^L| \leq \frac{r}{2} \quad \text{ou} \quad \left| c - \frac{2^L}{r} \right| \leq \frac{1}{2} \quad (1.40)$$

Depois de fazer uma medição, um número inteiro será obtido. Com isto, e fazendo-se uso do método de expansão de frações contínuas, pode-se determinar um valor para r , mas é possível que este não seja útil na determinação dos fatores do número N . Só será útil quando o r obtido for um número par, tal que $x^{r/2} \not\equiv \pm 1 \pmod{N}$; se este não for o caso, se tem que repetir todo o algoritmo desde o início (assim manifestando-se a característica probabilística do algoritmo).

1.10.2 Um exemplo concreto: o caso $N=15$

Vamos considerar o caso não-trivial mais simples de fatoração, de $N = 15$, para exemplificar a seqüência de operações do algoritmo de Shor. O número (conveniente) de estados a considerar é dado pela seguinte relação:

$$N^2 \leq 2^m < 2N^2 \quad (1.41)$$

Como para $m = 8$ temos que $225 \leq 2^8 (= 256) < 450$, então será preciso trabalhar com 256 estados no registro de entrada. Agora, consideremos que um número aleatório seja gerado, e vamos supor que $x = 7$ seja tal número. Este é um bom candidato, pois satisfaz às duas (primeiras) exigências: (1) $x < N$ e (2) $\text{mdc}(x, N) = 1$, onde "mdc" quer dizer o máximo divisor comum (de x e N). Com isto, a função módulo 15 fica bem definida e o valor dela será dado por: $f(a) = 7^a \pmod{15}$.

²²Os picos (correspondentes ao máximos da $P(c)$ e que tem certa largura) encontram-se localizados entorno de múltiplos de $2^L/r$. Quando o número $2^L/r$ for um inteiro a largura do pico vai para zero ficando apenas uma linha.

Como estamos considerando uma situação de fatoração muito simples, é possível calcular diretamente o valor do período da função f . Fazer isto nos vai permitir comparar depois o valor que achamos com aquele valor obtido segundo o algoritmo de Shor (como uma maneira de verificação). Pode-se verificar que:

$$\begin{aligned} f(0) &= 7^0 \bmod 15 = 1, & f(1) &= 7^0 \bmod 15 = 7 \\ f(2) &= 7^0 \bmod 15 = 4, & f(3) &= 7^0 \bmod 15 = 13 \\ f(4) &= 7^0 \bmod 15 = 1, & f(5) &= 7^0 \bmod 15 = 7 \\ f(6) &= 7^0 \bmod 15 = 4, & f(7) &= 7^0 \bmod 15 = 13 \end{aligned} \quad (1.42)$$

e assim por diante. Daqui pode-se ver que o período²³ da função f é $r = 4$. Agora vamos proceder segundo o algoritmo de Shor. O primeiro passo é inicializar os registros:

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle_e \otimes |0\rangle_s \quad (1.43)$$

Aplicando o operador F sobre o primeiro registro consegue-se uma superposição uniforme de estados:

$$|\psi_1\rangle = F \otimes I |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{256}} \sum_{a=0}^{255} |a\rangle_e \otimes |0\rangle_s \quad (1.44)$$

Aplicando o operador $U_F : |a\rangle \otimes |b\rangle \longrightarrow |a\rangle \otimes |b + x^a \bmod N\rangle$, chega-se ao estado:

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= U_F |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{256}} \sum_{a=0}^{255} |a\rangle_e \otimes |7^a \bmod 15\rangle_s \\ &= \frac{1}{\sqrt{256}} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |7\rangle + |2\rangle \otimes |4\rangle + |3\rangle \otimes |13\rangle + \\ &\quad + |4\rangle \otimes |1\rangle + |5\rangle \otimes |7\rangle + |6\rangle \otimes |4\rangle + |7\rangle \otimes |13\rangle + \dots \\ &\quad \dots + |252\rangle \otimes |1\rangle + |253\rangle \otimes |7\rangle + |254\rangle \otimes |4\rangle + |255\rangle \otimes |13\rangle) \end{aligned} \quad (1.45)$$

Vemos que este estado está emaranhado²⁴:

$$\begin{aligned} \sqrt{256} |\psi_2\rangle &= (|0\rangle + |4\rangle + \dots + |252\rangle) \otimes |1\rangle + (|1\rangle + |5\rangle + \dots + |253\rangle) \otimes |7\rangle + \\ &\quad (|2\rangle + |6\rangle + \dots + |254\rangle) \otimes |4\rangle + (|3\rangle + |7\rangle + \dots + |255\rangle) \otimes |13\rangle \end{aligned} \quad (1.46)$$

²³Notar que nas páginas 19 e 20 usou-se a mesma letra r , mas nesse caso, foi para denotar a ordem do grupo Z_N^* .

²⁴Neste exemplo precisam-se, como já vimos, de 8 q -bits no registro de entrada, adicionalmente de outros 4 no registro de saída, sendo no total 12 q -bits os que tem que ficar emaranhados logo depois deste passo. A fatoração de números maiores vai precisar de um número maior de q -bits emaranhados. Qual o maior número de partículas que se conseguiu emaranhar?. Na referência [15] reporta-se o emaranhamento atômico a grande escala entre duas amostras similares de gás contendo bilhões de átomos.

Medindo-se o registro de saída obtém-se (equi-provavelmente) um dos valores da função f , ou seja: 1, 7, 4 ou 13. Suponha que o resultado da medição seja $v = 13$. Então ficamos com o estado:

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{256}}(|3\rangle + |7\rangle + \dots + |255\rangle) \otimes |13\rangle \quad (1.47)$$

O conhecimento do período da função -obtida diretamente a partir de (1.42)- permite escrever explicitamente uma expressão para o estado $|\psi_3\rangle$; mas, como nosso objetivo é usar o algoritmo de Shor, incluindo sua maneira de determinar o período, é conveniente usar uma expressão compacta. Neste caso o estado tem a seguinte forma:

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{256}} \sum_{j=0}^{(2^m/r)-1} |jr+3\rangle \otimes |13\rangle \quad (1.48)$$

Aplicando o operador F sobre o registro de entrada obtém-se:

$$F|jr+3\rangle_i = \frac{1}{\sqrt{256}} \sum_{b=0}^{255} e^{2\pi i(jr+3)b/2^m} |b\rangle_i \quad (1.49)$$

Agora o registro de entrada é medido. Suponha que o valor medido seja $c = 191$, o qual é co-primo com $2^L = 256$. Neste caso o algoritmo precisa do chamado método da *expansão de frações contínuas* para determinar o período da função. Este é um procedimento iterativo conhecido na teoria matemática dos números, com o qual determina-se um número fracionário, p_i/q_i , correspondente à iteração “i”, de maneira que o período que procuramos é dado pelo valor de q_k que satisfaz a relação: $q_k < N \leq q_{k+1}$. Fazendo isto obtemos os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} (i) \quad a_o &= \left[\frac{c}{2^L} \right] = [0.7460938] = 0, \\ \epsilon_o &= \frac{c}{2^L} - a_o = 0.7460938, \\ p_o &= a_o = 0, \quad q_o = 1 \end{aligned} \quad (1.50)$$

$$\begin{aligned} (ii) \quad a_1 &= \left[\frac{1}{\epsilon_o} \right] = [1.340314] = 1, \\ \epsilon_1 &= \frac{1}{\epsilon_o} - a_1 = 0.340314, \\ p_1 &= a_1 a_o + 1 = 1, \quad q_1 = a_1 = 1 \end{aligned} \quad (1.51)$$

$$\begin{aligned} (iii) \quad a_2 &= \left[\frac{1}{\epsilon_1} \right] = [2.9384627] = 2, \\ \epsilon_2 &= \frac{1}{\epsilon_1} - a_2 = 0.9384627, \end{aligned}$$

$$p_2 = a_2 p_1 + p_o = 2 \quad , \quad q_2 = a_2 q_1 + q_o = 3 \quad (1.52)$$

$$(iv) \quad a_3 = \left[\frac{1}{\epsilon_2} \right] = [1.0655724] = 1,$$

$$\epsilon_3 = \frac{1}{\epsilon_2} - a_3 = 0.0655724 \quad ,$$

$$p_3 = a_3 p_2 + p_1 = 3 \quad , \quad q_3 = a_3 q_2 + q_1 = 4 \quad (1.53)$$

$$(v) \quad a_4 = \left[\frac{1}{\epsilon_3} \right] = [15.2503187] = 15$$

$$\epsilon_4 = \frac{1}{\epsilon_3} - a_4 = 0.2503187 \quad ,$$

$$p_4 = a_4 p_3 + p_2 = 47 \quad , \quad q_4 = a_4 q_3 + q_2 = 63 \quad (1.54)$$

onde o símbolo $[w]$ define a parte inteira do w . Logo, o período procurado é: $r = q_3 = 4$ (como já tinha-se determinado). Daqui, os fatores de N resultam do cálculo do máximo fator comum de $(x^{r/2} + 1) = (7^2 + 1) = 50$ com $N = 15$: $mcd(50, 15) = 5$, e de $(x^{r/2} - 1) = (7^2 - 1) = 48$ com $N = 15$: $mcd(48, 15) = 3$. Logo, verificamos que os fatores primos de $N = 15$ são 3 e 5.

A tabela abaixo, obtida de [11], contém estimativas do tempo de fatoração de vários números usando o algoritmo de Shor, e onde foi suposto que as informações geradas pela implementação do algoritmo de Shor estão sendo processadas com uma velocidade de 100 MHz. Isto vai dar uma certa idéia da incrível capacidade deste algoritmo.

Número N	Número de bits do inteiro N	t_{fact}
2^{512}	512	34 seg.
2^{1024}	1024	4,5 seg.
2^{2048}	2048	36 min.
2^{4096}	4096	4,8 horas

Tabela 3. Tempos de fatoração estimados usando o algoritmo quântico de Shor.

O algoritmo de Shor, como vimos, fornece uma solução matemática ao problema da fatoração (em tempo polinomial) de números grandes em fatores primos. O algoritmo de Shor precisa que muitos q -bits estejam “emaranhados”²⁵, mas quando o número de q -bits a serem emaranhadas cresce o “tempo de vida” do estado emaranhado decresce rapidamente.

²⁵Veja o capítulo seguinte.

Capítulo 2

Emaranhamento Quântico

2.1 Introdução

Quando dois ou mais sistemas quânticos interagem, o estado final de um deles pode depender do estado final dos outros; a idéia de *emaranhamento* surge desta situação.

Sabe-se que, dado um sistema físico microscópico (simples, ou composto de N partes), o formalismo da mecânica quântica associa a este sistema um certo espaço de Hilbert, \mathcal{H} , de todos os possíveis estados físicos do sistema. No caso dos sistemas compostos tal espaço é construído a partir do produto tensorial dos espaços de Hilbert, \mathcal{H}_i , associados com as partes¹. Um tipo destes sistemas compostos é aquele no qual as suas partes não interagem entre si, mas interagiram no passado. É na mecânica quântica destes sistemas que define-se o conceito de *emaranhamento* como uma qualidade de todo estado físico que não pode ser representado como um produto tensorial simples dos elementos dos espaços de Hilbert multiplicados².

Fisicamente, como se manifesta o *emaranhamento*?. A resposta a esta pergunta é bem conhecida. Basta considerar um dos exemplos mais citados na literatura: um processo atômico que produz fótons gêmeos, os mesmos que, por a conservação do momento linear são emitidos em direções contrárias, e por conservação do momento angular devem ter polarizações ortogonais. Agora, quando um dos fótons atravessa um polarizador (adquirindo a polarização correspondente), simultaneamente o fóton gêmeo (sem ter atravessado nenhum polarizador) adquire a polarização ortogonal. Isto constitui uma manifestação não-local, a "ação à distância fantasmagórica", como Einstein afirmou certa vez.

¹Zanardi, [16, 17], amplia a definição de estados emaranhados a situações mais gerais que esta (outros graus de liberdade e outros espaços são considerados), assim como as condições nas quais isto perde significado físico.

²No caso contrário, tal estado chama-se de *separável*.

Exemplos de estados emaranhados são os chamados estados de Bell:

$$|\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle)$$

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle)$$

que são vetores no espaço de Hilbert correspondente a sistemas quânticos formados por duas partículas.

Sendo estes linearmente independentes, constituem uma base no espaço composto.

Os estados de Bell podem ser gerados usando-se as chaves³ H_A e XOR_A , apresentadas no Cap. 1, e aplicadas nesta ordem sobre o estado $|00\rangle$:

$$H_A|00\rangle = \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

logo,

$$XOR_A(H_A|00\rangle) = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = |\Psi^+\rangle$$

Portanto, o operador $XOR_A H_A$ é um gerador de estado de Bell. Os outros estados podem ser obtidos partindo-se dos outros auto-estados da base computacional.

Tão importante quanto produzir, é "ler" estados de Bell. Como cada estado de Bell se relaciona univocamente com um dos elementos da base computacional, basta aplicar a seqüência acima em ordem inversa, ou seja, $H_A XOR_A$ sobre o estado de Bell, para se obter a "leitura" do estado.

2.2 Paradoxo de EPR, Bell e os experimentos de Aspect

Em 1935, Einstein, Podolsky e Rosen publicam um artigo [18], que deu origem ao agora conhecido paradoxo EPR, cuja argumentação sustenta um questionamento à capacidade da mecânica quântica de fornecer uma descrição completa nas suas previsões. Aqui nos interessa ressaltar apenas um aspecto deste famoso trabalho: a função de onda usada para representar o estado físico de um sistema composto por duas partículas afastadas, mas que inicialmente interagiram⁴:

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1} \psi_n(x_2) u_n(x_1) \tag{2.1}$$

³ H_A denota a porta Hadamard atuando sobre o q-bit A , cujos estados estão colocados do lado esquerdo no ket genérico do sistema total: $|AB\rangle$.

⁴Notar que esta função de onda, que lembra um exemplo do teorema de Schmidt -veja apêndice-, define não somente a função de estado inicial, senão também representa um estado dinâmico do sistema, pois é usada para representar o estado conjunto em qualquer instante de tempo, em particular, quando considera-se o evento de uma medição sobre uma das partículas (usualmente considerada muito afastado da outra partícula). Então, este estado deveria satisfazer a equação de Schroedinger correspondente com a situação física de duas partículas livres.

onde o conjunto $\{u_n(x_1), n = 1, 2, \dots\}$ fornece as autofunções de alguma quantidade física A do sistema I (uma das partículas que estamos considerando), e onde x_1 e x_2 se referem às variáveis usadas para descrever o primeiro e o segundo sistema, respectivamente. Aqui as $\psi_n(x_2)$ são encaradas apenas como coeficientes do desenvolvimento de Ψ em uma série de funções ortogonais $u_n(x_1)$.

Como se pode ver, esta é uma função emaranhada. Exemplos de estados emaranhados já eram conhecidos antes do artigo de EPR, como é o caso do artigo de Rosen (1931) acerca do estado fundamental da molécula de hidrogênio, [19], sendo interessante notar a diferença entre essas duas situações de emaranhamento: na última, as partículas (elétrons) podem interagir no interior da mesma molécula, ao passo que na situação considerada por EPR as partículas, ainda que livres, permanecem emaranhadas.

No mesmo ano de 1935, Bohr contestou o artigo de EPR. Desde então, o *gedankenexperiment* de EPR (aqui consideraremos a sua versão com fótons) é acompanhado com uma dentre duas interpretações: De acordo com a escola de *Copenhagen*, não se pode atribuir uma polarização a um fóton até que seja feita uma medida. Enquanto que, de acordo com Einstein, a polarização de cada fóton está bem definida, governada por uma “variável escondida”.

Nesta época, para os físicos, estar de acordo com Einstein ou com Bohr era simplesmente uma questão individual porque nenhum experimento permitia decidir entre as duas visões físicas apresentadas. Em 1964, John Bell mostrou que a mecânica quântica é incompatível com o conceito de localidade e que o mero fato de se supor que existem variáveis escondidas, leva à previsões contrárias àquelas via a mecânica quântica, [20]. Estas previsões, desenvolvidas com um número mínimo de hipóteses conduziram a relações que desde então são conhecidas como desigualdades de Bell⁵. As primeiras experiências desenvolvidas para verificar estas desigualdades foram efetuadas em 1972 por John F. Clauser e S. Freedman [23, 24]. Pouco depois, em 1975-1976, A. Aspect, [25, 26], apresentou novas propostas experimentais e, posteriormente, em 1981-1982, A. Aspect, P. Grangier, G. Roger e J. Dalibard, [27, 28, 29], tiveram êxito ao mostrarem a existência de situações que violam as desigualdades de Bell, contestando assim as teorias de variáveis escondidas e dando sustento à idéia de que a natureza comporta-se em conformidade com as

⁵Todos os estados puros emaranhados violam as desigualdades de Bell, no entanto, para misturas estatísticas, o emaranhamento não é equivalente a tal violação. Ou seja, a violação das desigualdades de Bell não é necessária para o emaranhamento de misturas estatísticas, [21]. Por outro lado, e contrariamente à versão oficial, é conhecido ao menos um exemplo de um estado separável que viola as desigualdades de Bell, [22].

previsões da mecânica quântica⁶.

2.2.1 Os experimentos de Aspect: uma breve revisão

Os experimentos de Aspect, [27, 28, 29], consistiram na medição da polarização de pares de fótons emitidos simultaneamente a partir de certas transições eletrônicas. Destacamos que nestes experimentos foram dispostos dois analisadores de polarização afastados por uma distância de $13m$, e um circuito para contar as coincidências (contagens de um fóton A e um fóton gêmeo B), que ocorrem numa janela de tempo de $20ns$, e daí determinar a taxa de coincidência. Por conseguinte para serem contados como uma coincidência, o tempo que separa a chegada do dois fótons aos detectores deve ser inferior a $20ns$. Aqui um aspecto muito importante do experimento: um (suposto) sinal que parte de um fóton A para um fóton B deve atravessar uma distancia de $13m$. Se este sinal viaja a uma velocidade que é inferior ou igual à velocidade da luz, levará no mínimo $40ns$ para passar de um analisador ao outro. Dado que o circuito tem uma janela de $20ns$, qualquer comunicação entre os dois fótons que não viola a teoria da relatividade restrita será impossível.

Em um dos experimentos da equipe de Aspect, [29], se considera um teste com analisadores dependentes do tempo, pois no primeiro experimento os analisadores de polarização são ajustados antes que os dois fótons sejam emitidos. Agora, para levar em conta uma possível influência das orientações relativas dos analisadores da polarização sobre os fótons é introduzida uma alteração (em relação à primeira experiência) que consiste no fato de que, antes de chegar aos analisadores de polarização, a luz passa por uma montagem (um sistema acústico-óptico) que determina o caminho dos fótons, sistema cujo efeito é o mesmo que alterar o eixo de rotação dos analisadores de polarização num tempo de $10ns$ (algo impossível de se fazer de maneira mecânica com os analisadores). A conclusão final foi que os experimentos de Aspect mostraram que as desigualdades de Bell podem ser violadas⁷.

2.3 Relação entre os estados de um sistema e de seus sub-sistemas

A seguir vamos considerar a relação entre o estado de um sistema combinado, S , e os estados de seus subsistemas constituintes, S_1 e S_2 . Aqui, um observável arbitrário correspondente a cada um de estes

⁶Será interessante tomar conhecimento das discussões feitas a este respeito por alguns autores, alguns das quais são apresentadas (muito brevemente) neste capítulo, na seção “hidden papers”.

⁷Na referência [30] pode ser encontrada uma entrevista feita a A. Aspect. Nesta, ele da alguns comentários sobre vários aspectos de suas realizações experimentais.

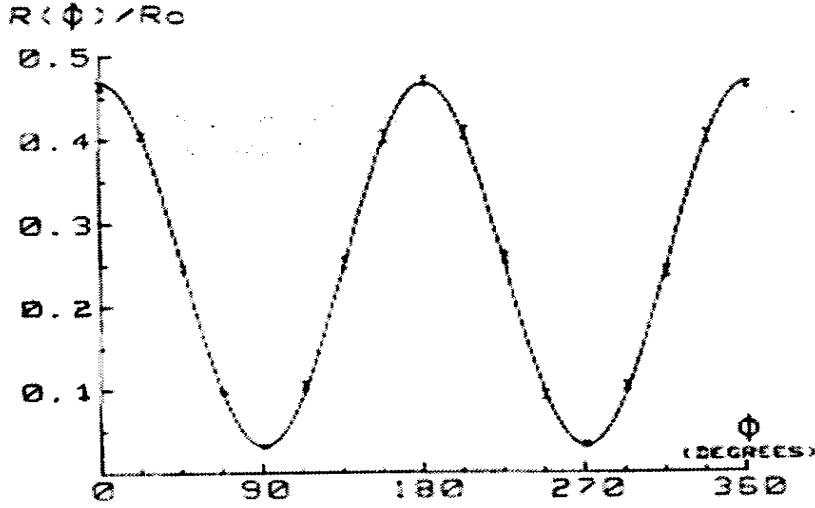


Figura 2.1: Taxa de coincidência normalizada em função da orientação relativa do polarizador. A curva contínua corresponde à predição da mecânica quântica, [27].

subsistemas será denotado por \mathcal{A} (para S_1) e \mathcal{B} (para S_2); também denotamos por $|a_i\rangle$ e $|b_j\rangle$, seus respectivos autoestados.

Consideramos o caso em que o sistema S esteja num estado puro, então pode-se escrever, para o estado do sistema, da maneira mais geral possível;

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle \tag{2.2}$$

Aqui $p_{ij} = |c_{ij}|^2$ fornece a probabilidade⁸ de que S seja encontrado no estado $|a_i\rangle \otimes |b_j\rangle$.

No caso em que cada um dos subsistemas tenha associado um espaço de Hilbert, \mathcal{H}_i , de dimensão dois, $dim(\mathcal{H}_i) = 2$, a matriz densidade ρ correspondente é dada por:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} p_{11} & c_{11}c_{12}^* & c_{11}c_{21}^* & c_{11}c_{22}^* \\ c_{12}c_{11}^* & p_{12} & c_{12}c_{21}^* & c_{12}c_{22}^* \\ c_{21}c_{11}^* & c_{21}c_{12}^* & p_{21} & c_{21}c_{22}^* \\ c_{22}c_{11}^* & c_{22}c_{12}^* & c_{22}c_{21}^* & p_{22} \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

Segundo a eq.(2.2) a medida do observável \mathcal{A} , no sistema S_1 e na base $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle\}$, resultará no estado $|a_1\rangle$ com probabilidade “ $p_{11} + p_{12}$ ”, e no estado $|a_2\rangle$ com probabilidade “ $p_{21} + p_{22}$ ”. Se como resultado

⁸As distintas probabilidades de que, desta vez, os subsistemas do S possam ser encontrados em determinados estados também podem ser expressados em termos das p_{ij} .

da medição o estado do S_1 é projetado sobre $|a_1\rangle$, então o estado de S_2 é:

$$\frac{1}{\sqrt{p_{11} + p_{12}}}(c_{11}|b_1\rangle + c_{12}|b_2\rangle) \quad (2.4)$$

Similarmente para o estado de S_2 depois de feita uma medição de A levando o subsistema S_1 ao estado $|a_2\rangle$.

$$\frac{1}{\sqrt{p_{21} + p_{22}}}(c_{21}|b_1\rangle + c_{22}|b_2\rangle)$$

Os estados de S_2 resultantes de uma medição do S_1 , o qual produz o colapso destes para $|a_1\rangle$ e $|a_2\rangle$ são, respectivamente:

$$\rho_1 = \frac{1}{p_{11} + p_{12}} \begin{pmatrix} p_{11} & c_{11}c_{12}^* \\ c_{12}c_{11}^* & p_{12} \end{pmatrix} \quad \rho_2 = \frac{1}{p_{21} + p_{22}} \begin{pmatrix} p_{21} & c_{21}c_{22}^* \\ c_{22}c_{21}^* & p_{22} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Se a medição é feita sobre S_1 e não conhecemos o resultado, então pode-se unicamente prever o estado final com certa probabilidade. Neste caso, deve-se descrever o estado de S_2 como uma mistura dos dois estados possíveis, eq.(2.5), cada um com um peso dado pela probabilidade de que a medição⁹ produza esses resultados. Portanto, a matriz densidade vem dada por:

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} p_{11} & c_{11}c_{12}^* \\ c_{12}c_{11}^* & p_{12} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_{21} & c_{21}c_{22}^* \\ c_{22}c_{21}^* & p_{22} \end{pmatrix} = \text{Tr}_{S_1}(\rho) \quad (2.6)$$

Veja que os subsistemas podem ser afastados por uma distância arbitrária logo depois de interagirem, ficando assim *emaranhados*, para logo depois ser feita uma medição sobre o subsistema S_1 . Como consequência, se a medida feita por um observador remoto sobre S_1 muda o estado de S_2 do ponto de vista de um observador sobre o sistema S_2 , então isto poderia constituir uma transferência instantânea de informação do observador em S_1 para o observador em S_2 , e assim entrar em conflito com considerações gerais da teoria da Relatividade. Portanto, para que a teoria quântica seja consistente com teoria da relatividade é necessário para o observador em S_2 considerar o estado de S_2 como $\rho_2 = \text{Tr}_{S_1}(\rho)$ independentemente de que uma medida seja feita ou não em S_1 . Ilustremos este fato usando como exemplo um estado maximamente emaranhado. Em primeiro lugar, note que se o estado do sistema S fosse:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|a_1\rangle \otimes (|b_1\rangle + |b_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle)$$

então a matriz densidade para S_2 seria:

$$\rho_1^{S_2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

⁹De S_1 , cujo resultado não conhecemos.

No entanto, se o estado do sistema total fosse:

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle \otimes |b_1\rangle + |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle) \quad (2.8)$$

então, usando $\rho^{S_2} = \text{Tr}_{S_1}(\rho)$, o traço parcial da ρ segundo o sistema S_1 , obteria-se para S_2 o estado:

$$\rho_2^{S_2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

A matriz densidade em (2.7) descreve a superposição de $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$, e a matriz densidade em (2.9) descreve uma mistura na qual S_2 está ou em $|b_1\rangle$ ou em $|b_2\rangle$, cada uma com uma probabilidade igual a $1/2$. Para ver que esta é a descrição correta considere uma medida feita sobre S_2 na base $\{|+\rangle_b, |-\rangle_b\}$, onde $|\pm\rangle_b = (|b_1\rangle \pm |b_2\rangle)/\sqrt{2}$. No primeiro caso, eq.(2.7), o resultado é sempre $|+\rangle$ simplesmente devido ao fato de que S_2 está nesse estado. Escrevendo o projetor $\mathcal{P}_b(+)=|+\rangle\langle+|$ obtemos, formalmente, a probabilidade para este resultado como:

$$\langle\psi|\mathcal{P}_b^+(+)\mathcal{P}_b(+)|\psi\rangle = \frac{1}{2}\langle a_1|(\langle b_1| + \langle b_2|)|+\rangle\langle+||a_1\rangle(|b_1\rangle + |b_2\rangle) = 1 \quad (2.10)$$

No entanto, para o segundo caso, temos

$$\begin{aligned} \langle\varphi|\mathcal{P}_b^+(+)\mathcal{P}_b(+)|\varphi\rangle &= \frac{1}{2}(\langle a_1|\langle b_1| + \langle a_2|\langle b_2|)|+\rangle\langle+||a_1\rangle|b_1\rangle + |a_2\rangle|b_2\rangle) \\ &= \frac{1}{2}\langle a_1|\langle b_1|+\rangle\langle+|a_1\rangle|b_1\rangle + \frac{1}{2}\langle a_2|\langle b_2|+\rangle\langle+|a_2\rangle|b_2\rangle = 2\left(\frac{1}{4}\right) = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Vemos que na segunda linha a ortogonalidade (assumida implicitamente) de $|a_1\rangle$ e $|a_2\rangle$ dividiu a expressão em duas partes, cada uma correspondendo a um subespaço distinto de S_1 . Conseqüentemente, o projetor no estado $|+\rangle$ em S_2 atua separadamente em cada subespaço, dada a ausência de interferência entre os subespaços. A probabilidade de obter o estado $|+\rangle$ é $1/2$ em cada subespaço de S_1 , e como a probabilidade que a partícula esteja em cada um de esses subespaços é $1/2$, obtemos a probabilidade total de $1/2$. Este é o resultado obtido com a matriz densidade dada na eq.(2.9), a qual assume que não existe interferência entre os estados $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$. Note, finalmente, que *emaranhando* um sistema quântico, como S_2 , com outro sistema quântico ao qual o observador não tem acesso, destrói a interferência, ou coerência entre os estados de S_2 .

2.4 Medidas de Emaranhamento

A seguir vamos apresentar alguns conceitos e notações que são importantes na caracterização do emaranhamento. Considere um sistema composto por dois sub-sistemas A e B. Um operador densidade ρ^{AB} do sistema composto, correspondente a um estado puro ou a uma mistura estatística, será chamado de separável se este puder ser expresso como um *ensemble* de estados produto, ou seja,

$$\rho^{AB} = \sum_j p_j \rho_j^A \otimes \rho_j^B \quad (2.12)$$

A razão desta definição é devida ao fato de que um estado separável pode ser criado por procedimentos que são locais em cada sub-sistema. No entanto, um estado não-separável não pode ser criado por qualquer mecanismo local.

2.4.1 Critério de Peres: TPP

Tomando-se a matriz transposta de qualquer operador densidade (ρ), relativo a alguma base ortonormal, se leva para outro operador densidade (ρ^{TB}); ou seja, outro operador com autovalores não negativos e traço igual a um. Da mesma forma, se um estado de um sistema bipartido (com sub-sistemas A e B) é separável, tomando a transposta parcial sobre um sub-sistema, em qualquer base, também leva para outro operador densidade

$$\rho_{m\mu, n\nu}^{TB} \equiv \langle m, \mu | \rho^{TB} | n, \nu \rangle = \rho_{m\nu, n\mu} \implies \rho^{TB} \geq 0$$

No entanto, tomando-se a transposta parcial leva-se para um operador que não é semi-definido positivo, pode-se ter a certeza que o estado original era um estado emaranhado. Esta é a conhecida condição ou critério de Peres [31]. Mas, quando os sub-sistemas A e B têm associados espaços de Hilbert de dimensões arbitrárias, o inverso da condição de Peres não resulta verdadeiro, pois a transposta parcial de um estado emaranhado pode gerar outro operador semi-definido positivo. Assim, a condição de Peres não dá um critério geral para se testar o emaranhamento¹⁰. No entanto, no caso de sistemas 2×2 (*q-bits* ou sistemas quânticos com dois níveis) ou sistemas 2×3 (um *q-bit* e um *q-trit*, sistema quântico com três níveis), a condição de Peres nos dá um critério para separabilidade: um estado de tal sistema composto

¹⁰Pode ser conveniente mencionar que existem outros critérios de emaranhamento, por exemplo, na Ref. [33] é estabelecido que o emaranhamento entre átomos num condensado de Bose-Einstein pode ser caracterizado em termos da variancia e dos valores médios de um conjunto de operadores de momento angular de spin (fictício) 1/2.

é emaranhado se e somente se sua transposta parcial for uma matriz não positiva, ou seja, se tiver pelo menos um autovalor negativo, [31, 32].

2.4.2 Formação e destilação do emaranhamento: $E(\Psi)$

Duas quantidades baseadas no emaranhamento, que são importantes para a teoria da informação quântica, são a formação de emaranhamento¹¹ [34, 35] e a destilação de emaranhamento¹² [36]. Para dois sistemas d -dimensionais, o estado puro

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j=1}^d |e_j^A\rangle \otimes |e_j^B\rangle \quad (2.13)$$

(onde $|e_j^A\rangle$ e $|e_j^B\rangle$ são bases ortonormais para os dois sub-sistemas) pode ser maximamente emaranhado.

O grau de emaranhamento de tal sistema maximamente emaranhado é $\log_2 d$, a entropia de cada sub-sistema. Vamos supor que inicialmente temos m de tais estados maximamente emaranhados, tem-se um procedimento envolvendo apenas operações locais e comunicação clássica entre sub-sistemas, para criar n cópias de um estado arbitrário ρ^{AB} . A formação de emaranhamento, $E(\rho^{AB})$, é definida como $\log_2 d$ vezes a razão assintótica m/n para um procedimento ótimo; ou seja, aquele que possui a menor razão (com m fixo). Da mesma forma, suponhamos que no início temos n cópias do estado ρ^{AB} . Existe um procedimento envolvendo novamente operações locais e comunicação clássica para destilar m estados maximamente emaranhados. A destilação de emaranhamento, $D(\rho^{AB})$, é dada por $\log_2 d$ vezes a razão assintótica m/n para um procedimento ótimo; ou seja, aquele que resulta na maior de tal razão (com n fixo).

A formação de emaranhamento de um estado puro $|\Phi\rangle$, de um sistema bipartido, é dado pela entropia dos operadores densidade ρ^A e ρ^B :

$$E(\Psi) = -\text{tr}(\rho^A \log_2 \rho^A) = -\text{tr}(\rho^B \log_2 \rho^B) \quad (2.14)$$

Para um estado bipartido misturado a formação de emaranhamento é mais complicada. Um estado misturado ρ^{AB} tem uma decomposição de *ensemble* em termos de estados puros $|\Psi_j\rangle$, com probabilidade p_j , pode ser escrito como:

$$\rho^{AB} = \sum_j p_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \quad (2.15)$$

¹¹Do inglês *entanglement of formation*.

¹²Do inglês *distillable entanglement*.

A formação de emaranhamento de ρ^{AB} é dada pelo mínimo da média da formação de emaranhamento dos estados puros no *ensemble*,

$$E(\rho^{AB}) = \min\left(\sum_j p_j E(\psi_j)\right) \quad (2.16)$$

onde “min” representa justamente o mínimo da somatória sobre toda possível decomposição de *ensemble* $\{p_j, |\psi_j\rangle\}$.

Um estado separável não possui nenhum grau de emaranhamento. No entanto, um estado não-separável necessariamente tem uma formação de emaranhamento não nulo. Para estados puros, o processo de formação é reversível, assim a formação de emaranhamento e a destilação de emaranhamento coincidem. Para misturas estatísticas, no entanto, a destilação de emaranhamento é geralmente menor que a formação de emaranhamento, refletindo a irreversibilidade do processo de formação. Um estado cuja matriz densidade possui transposta parcial positiva não tem destilação de emaranhamento, [36]. Para sistemas de dimensões 2×2 e 2×3 todos os estados emaranhados têm uma transposta parcial não positiva, como indicado acima, e também tem uma destilação de emaranhamento não nula. Para um sistema de dimensão 3×3 e sistemas de dimensão maior, existem estados emaranhados que possuem transposta parcial positiva, embora estes estados possuam uma formação de emaranhamento não nulo, eles não tem destilação de emaranhamento. Este tipo de emaranhamento, a partir do qual nenhum emaranhamento de estado puro pode ser destilado, é chamado de emaranhamento ligado¹³, [37, 38].

2.4.3 Concurrence: C

O grau de emaranhamento de um sistema pode também ser medido através da *concurrence* [34], uma medida que, para o caso de um sistema de dois q-bits, nos dá a fronteira entre os domínios separáveis e emaranhados. A *concurrence* C é calculada como:

$$C = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\} \quad (2.17)$$

sendo $\{\lambda_i\}$ a raiz quadrada dos autovalores da matriz $R = \rho S \rho^* S$, colocados em ordem decrescente, e onde ρ é a matriz densidade, $S = \sigma_y^{(1)} \otimes \sigma_y^{(2)}$ e “(*)” denota a conjugação complexa. Uma *concurrence* não nula significa que os dois q-bits estão emaranhados, em particular, o valor igual a 1 corresponde a

¹³Do inglês *bound entanglement*.

estados maximamente emaranhados.

2.4.4 Fidelidade de emaranhamento: $F_e(\rho, \mathcal{E})$

Algumas questões importantes na teoria da informação quântica se referem ao significado de quando dois *itens* de informação são semelhantes, ou a quando a informação é preservada em algum processo quântico. Estas são algumas das perguntas que podem ser respondidas em termos das chamadas *normas de distância* [40]. Uma destas é a chamada *fidelidade de emaranhamento*, a qual pode ser definida em termos do conceito de operações quânticas \mathcal{E} e dos seus elementos de operação $\{A_k\}$. Operações quânticas [39, 40] constituem uma ferramenta geral para descrever a evolução de sistemas quânticos¹⁴, representada pelo operador \mathcal{E} , numa variedade de situações

$$\rho' = \mathcal{E}(\rho) \tag{2.18}$$

Operações quânticas possuem uma representação muito útil, a chamada de operador-soma:

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_k A_k \rho A_k^\dagger$$

A fidelidade de emaranhamento [41], denotada por $F_e(\rho, \mathcal{E})$, mede quão bem o estado ρ é preservado pela operação \mathcal{E} . Uma fidelidade de emaranhamento perto de 1 indica que o processo preserva bem o estado; ou também, $F_e(\rho, \mathcal{E})$ mede quão bem o emaranhamento de ρ com outro sistema é preservado pela operação \mathcal{E} . Neste caso, uma fidelidade de emaranhamento perto de 1 indica que o processo preserva bem o emaranhamento. Uma fidelidade de emaranhamento perto de zero indica que o estado (ou seu emaranhamento) não foram bem preservados pela operação \mathcal{E} . A fidelidade de emaranhamento depende unicamente de ρ e \mathcal{E} . Se \mathcal{E} tem elementos de operação $\{A_i\}$ então a fidelidade de emaranhamento têm a expressão:

$$F_e(\rho, \mathcal{E}) = \frac{\sum_i |Tr(A_i \rho)|^2}{Tr(\mathcal{E}(\rho))} \tag{2.19}$$

Esta expressão fica mais simples para operações quânticas que preservam o traço, ou seja, quando: $Tr[\mathcal{E}(\rho)] = 1$.

É importante dizer que, ainda na situação onde a medida da fidelidade de emaranhamento para um dado processo vem dada por um número perto de 1, não pode-se concluir que uma matriz ρ correspondente

¹⁴Inicialmente num estado definido pela matriz densidade ρ .

(sobre a qual atuou a operação quântica \mathcal{E}) foi emaranhada. Isto vai ficar claro mais adiante quando apresentemos um exemplo concreto no capítulo 4.

2.5 O Emaranhamento como Recurso Computacional

Na informação quântica, a idéia de emaranhamento entre q -bits é usada para implementar diversos protocolos quânticos. Estes protocolos possuem a propriedade de resolver tarefas de uma maneira que não tem nenhuma equivalência na sua contrapartida clássica: a teoria da informação clássica¹⁵. Protocolos quânticos como codificação superdensa, teleporte quântico e código quântico de correção de erro, [43, 44, 45, 46] têm sido implementados em varios laboratórios, por diversos grupos e com diversas técnicas [47, 48, 49, 50, 51]. Aqui, o emaranhamento é tido com o recurso essencial para a informação quântica. Já na *computação quântica* a situação ainda não está totalmente esclarecida [52]. Mas, no caso dos algoritmos quânticos que operam sobre estados puros, o emaranhamento é necessário quando se quer projetar algoritmos que incorporem etapas de processamento com velocidade exponencial¹⁶, em relação ao correspondente da sua contraparte clássica. Levando em conta isto, uma possível pergunta seria: Pode o emaranhamento ser identificado como um recurso essencial para sustentar o poder da computação quântica? Na maioria dos artigos que reportam implementações experimentais do emaranhamento aceita-se para esta pergunta uma resposta afirmativa¹⁷. Por outro lado, alguns trabalhos teóricos discutem o significado desta afirmação. Assim, na ref. [53], considera-se que esta não é uma boa conclusão. Em tarefas de comunicação, ainda no caso restrito quando é possível implementar apenas o emaranhamento entre dois sistemas ("emaranhamento bi-partido"), dentro de um sistema maior, isto resulta ser suficiente para se conseguir um benefício exponencial. Mas, nas tarefas *computacionais* de um modo geral, segundo [53], a disponibilidade deste emaranhamento bi-partido é insuficiente para alcançar a citada velocidade exponencial.

¹⁵A teoria da informação (clássica) envolve a quantificação do armazenamento e transmissão de informação; a codificação da informação em canais com e sem ruído e códigos de correção de erros. Também, considera o problema dos recursos ou meios que são necessários para alcançar estes objetivos, veja [42]. O artigo pode ser encontrado na Internet: <http://cm.bell-labs.com/cm/ms/what/shannonday/paper.html>

¹⁶Por exemplo, segundo a referência [118], o algoritmo de Grover precisa do emaranhamento no caso quando são considerados mais de 2 q -bits.

¹⁷Isto pode se visto lendo-se a seção de introdução dos respectivos artigos.

2.6 Alguns “hidden papers”

Segundo a referência [54] até 1977 existiam da ordem de 1 milhão de publicações que citaram o famoso artigo de EPR, [18], de 1935. Revisitando algumas delas fica claro que o assunto do emaranhamento, e suas conseqüências, está na discussão central. No que diz respeito às aplicações e usos do emaranhamento na computação e a informação quântica, a quantidade de artigos é crescente. No entanto, também existem artigos (ainda que poucos) onde se questionam a interpretação “oficial” associada com os estados emaranhados e a conexão entre a violação das desigualdades de Bell versus a não-localidade na mecânica quântica. Algumas opiniões, justificadas nos respectivos artigos, são, por exemplo:

J. Rusza, na referência [55], diz:

“Na maior parte dos experimentos usam-se pares de fótons no estado:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1|V\rangle_2 - |V\rangle_1|H\rangle_2) \quad (2.20)$$

Este é um estado emaranhado na polarização, que tem a mesma estrutura como a de um estado emaranhado no spin [...]. De novo, segundo a ‘lógica do emaranhamento’, isto implica que quando o fóton 1 é medido e achado com polarização horizontal (H), a polarização do fóton 2 será vertical (V), e vice-versa. [...] Mas isso não é assim. Os estados medidos dos fótons 1 e 2 não caracterizam ao sistema composto. Conhecendo o vetor de estado inicial, Eq.(2.20), e o fato de que o fóton 1 esteja no estado $|H\rangle$, é impossível concluir que o fóton 2 vai ser achado no estado $|V\rangle$. Só na situação extrema quando a orientação dos polarizadores poder-ia coincidir com a polarização inicial dos fótons, obter-ia-se o resultado dito acima. Mas isto não tem nenhuma relação com as correlações entre eles¹⁸.”

¹⁸“In the great majority of experiment one uses pairs of photons in the state :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1|V\rangle_2 - |V\rangle_1|H\rangle_2)$$

This is a polarization-entangled state, having the same structure as spin-entangled state [...]. Again, according to the “entanglement logic”, it implies that whenever photon 1 is measured and found to have a horizontal (H) polarization, the polarization of photon 2 will be vertical (V), and otherwise. That means, whichever state photon 1 will be found in, photon 2 can surely be predicted to be found in the orthogonal state if measured. *But it not so.* The measured states of photons 1 or 2 do not characterize the compound system. By knowing the initial state vector, Eq.(1), and the fact that photon 1 is in the state $|H\rangle$, it is *impossible*

D. Tommasini, na referência [56], diz:

“... o estado que surge da interação nunca é um autoestado do operador que determina o número de fótons: o número de fótons não pode ser determinado (ele nunca se torna fisicamente real). Isto implica que nunca é correto usar um estado com um número fixo de partículas, tal como na Eq.(2.20), que surge de uma interação dada¹⁹.”

A.V. Belinsky diz na referência [57]:

“Neste artigo, as desigualdades de Bell são obtidas na sua forma tradicional, sem recorrer à hipótese de localidade, e onde a única hipótese que é feita é que a distribuição de probabilidades é não negativa. Esta distribuição de probabilidade é calculada para um experimento óptico específico, no contexto da mecânica quântica, e é mostrado que esta pode ter valores negativos. Portanto, isto pode ser considerado como uma prova rigorosa que a hipótese de localidade não é relevante na violação das desigualdades de Bell²⁰.”

K. Hess and W. Philipp, na referência [58], diz:

“... portanto, o teorema de Bell tem características únicas na história da física moderna: o modelo matemático e o teorema de Bell são considerados corretos e são vistos por muitos como tão válidos

to conclude that photon 2 will be found in the state $|V\rangle$. Only in the extreme case, when polarizes orientation would coincide with the photons initial polarization, we will obtain above mentioned results. But this has nothing to do with correlations between them”.

¹⁹...“the state arising from the interaction is never an eigenstate of the operator counting the number of photons: the number of photon cannot be determined (it never gets a physical reality). This implies that it *is never correct* to use a state with a fixed number of particles, such as that of Eq.(1), as emerging from a given interaction”.

²⁰“In this paper, Bell’s inequality is derived in its traditional form, without resorting to the hypothesis of locality, the only assumption being that the probability distribution are nonnegative. These probability distribution are calculated, for a specific optical experiment, in the framework of quantum theory and it is shown that they can take on negative values. This can therefore be regarded as a rigorous proof that the itf hypothesis of locality is not relevant to violations of Bell’s inequalities”.

como a segunda lei da termodinâmica, ao passo que não existe uma confirmação experimental²¹."

C. Thompson diz na referência [59]:

"O experimento de Orsay demonstrou que a ação à distância realmente acontece. Isto é claramente impossível. Minha experiência como estatística sugere-me que se as hipóteses e os métodos de análise foram revisitados, explicações racionais para as observações poderiam ser achadas²²."

e, na referência [60], diz:

"Em algumas experiências chaves do tipo Bell, incluindo duas bem conhecidas por Alain Aspect, 1981-2, é somente depois da subtração de *accidentals* nas contagens das coincidências que conseguimos violações das desigualdade de Bell. O ajuste dos dados, produzindo aumentos de até 60% na estatística do teste, nunca foi justificado adequadamente. [...] a reivindicação que o universo é fundamentalmente não-local necessita ser re-avaliado²³."

A. Barut, na [61], diz:

"Alguns autores gostariam de extrair conclusões (...) a partir das desigualdades de Bell como que 'a mecânica quântica viola o realismo ou a existência objetiva do fenômeno', ou que 'a medida de um subsistema influi no resultado da medida de outro subsistema distante, o qual interagiu com o primeiro no passado'. Pensamos que

²¹..."The standing of the Bell theorem therefore has unique features in the history of modern physics: the mathematical model and the theorem of Bell are taken to be correct and are seen by many as being as valid as the second law of thermodynamics, whereas there *exists no* experimental confirmation".

²²"that experiment at Orsay had demonstrated that action-a-distance really happened. This is clearly impossible. Experience as a practical statistician suggested that if the assumptions and analysis methods were checked, *rational explanations* of the actual observations would be found".

²³"In some key Bell experiments, including two of the well-known ones by Alain,1981-2, it is only after the subtraction of accidentals from the coincidence counts that we get violations of Bell test. The data adjustment,producing increases of up to 60% in the test statistics, has never beenadequately justified. [...] the claim that the universe is fundamentally nonlocal needs re-assessment".

estas conclusões profundas são prematuras e que seria útil investigar explicitamente muitos outros modelos²⁴."

²⁴"Some authors would like to draw far-reaching philosophical conclusions from Bell's inequalities as 'quantum mechanics violates realism or objective existence of phenomena', or 'measurement of one subsystem influences the result of the measurement of another distant subsystem which interacted in the past with the first one'. We think that these deep conclusions are premature, and it is useful to investigate explicitly many models".

Capítulo 3

Conceitos de Ressonância Magnética Nuclear

3.1 A descoberta da RMN

O método da Ressonância Magnética foi descoberto por I.I. Rabi [62], ao final do ano de 1937. Esta descoberta foi feita no contexto de experimentos com feixes moleculares, nos quais átomos ou moléculas individuais e isoladas foram objeto de investigação. Posteriormente, no ano de 1945, a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) foi descoberta independentemente por dois grupos de físicos. Um, liderado por E. Purcell e, o outro, por F. Bloch. Purcell, [63], estudou o fenômeno quanticamente, em termos de transições entre níveis Zeeman nucleares induzidas por pulsos de radiofrequência, RF. Simultaneamente, F. Bloch, [64], considerou um tratamento semi-clássico: a precessão do momento magnético, com uma certa probabilidade para a mudança da sua orientação¹. Depois, nos anos de 1950, E. Hahn, [65], estabeleceu a Ressonância Magnética Nuclear Pulsada, a que, ao contrário da sua versão "contínua" original, onde a resposta magnética de spins nucleares é detectada no regime estacionário, na RMN pulsada é o sinal transiente que segue como resposta a determinadas seqüências de pulsos de radiofrequência, a quantidade de interesse. Existem dois destes sinais transientes: o *FID* (sigla em inglês para *Free Induction Decay* - Decaimento da Indução Livre) e o *Eco de spins*. Ambos sinais medem a amplitude da magnetização nuclear transversal à direção do campo hiperfino estático local, o que, usualmente, é considerado ao longo da direção z . Atualmente, a Ressonância Magnética Nuclear Pulsada em líquidos é uma técnica que possibilita um tipo particular de computação quântica.

¹Para uma revisão dos fatos históricos desta descoberta se pode ver em Ref. [66].

3.2 Distinguibilidade dos spins nucleares numa molécula

Uma molécula com N núcleos distinguíveis de spin $1/2$ é considerada como um computador quântico de N q-bits. Os spins heteronucleares podem ser facilmente distinguidos quando levamos em consideração os espectros de RMN. Estes spins heteronucleares possuem distintos valores do fator giromagnético, γ_n , e conseqüentemente distintas freqüências de Larmor em um mesmo campo magnético. Por outro lado, spins da mesma espécie nuclear (spins homonucleares), os quais são parte da mesma molécula, podem também ter distintas freqüências, devido ao chamado deslocamento químico².

Alguns exemplos de freqüências de Larmor de alguns núcleos, num campo de 11,74 teslas, são [67]: para o ^1H , $\omega_0/2\pi = 500\text{MHz}$; para o ^2H , $\omega_0/2\pi = 77\text{MHz}$; para o ^{13}C , $\omega_0/2\pi = 126\text{MHz}$; para o ^{19}F , $\omega_0/2\pi = 470\text{MHz}$; para o ^{31}P , $\omega_0/2\pi = 202\text{MHz}$.

3.3 Hamiltoniano hiperfino para um núcleo com spin $1/2$

A RMN é um fenômeno sensível às interações magnéticas e elétricas entre momentos de multipolos nucleares e campos eletromagnéticos locais. Estas interações são chamadas de *interações hiperfinas*. Os momentos nucleares mais importantes para as interações hiperfinas são: o momento de dipolo magnético μ , e o momento de quadrupolo elétrico, Q . O primeiro é uma medida da distribuição de correntes no núcleo, e o segundo é uma medida da distribuição de cargas no mesmo.

Núcleos com spin $I = 1/2$ não possuem momento de quadrupolo elétrico. Portanto, nas várias situações onde foram implementadas (em laboratório) algoritmos e portas lógicas na CQ através da RMN, usando núcleos com spin $1/2$ (normalmente ^1H e ^{13}C), a contribuição elétrica para a interação hiperfina foi descartada, o que simplifica consideravelmente o problema.

Com isto, a contribuição hiperfina (ao hamiltoniano total do sistema) de um núcleo com momento μ em um campo magnético \vec{B}_0 será dada pelo operador $\hat{\mathcal{H}}_0 = -\hat{\mu} \cdot \vec{B}_0$. Chamando de B_0 a magnitude do campo \vec{B}_0 , o qual consideramos que aponta ao longo do eixo z , de um certo sistema de coordenadas, obtemos:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\gamma_n \hbar B_0 \hat{I}_3 = -\hbar \omega_L \hat{I}_3$$

²A núvem eletrônica modifica o campo magnético aplicado, de maneira que o campo local atuante sobre o núcleo é ligeiramente distinto do externo; isto faz com que a freqüência de Larmor seja também ligeiramente distinta.

e matricialmente:

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} -\hbar\omega_L/2 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_L/2 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

onde γ é a razão giromagnética do núcleo e $\omega_L = \gamma_n B_0$ é a frequência de Larmor do spin. \hat{I}_3 é a terceira componente do operador vetorial de momentum angular \hat{I} , a qual esta relacionada com a matriz de Pauli: $2I_3 = \sigma_3$.

As autoenergias correspondentes ao hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$ acima são $E_m = -\hbar\omega_L m$, onde $m = -I, \dots, +I$. Para um único spin-1/2, ou seja com $I = 1/2$, para o qual m toma os valores $\pm 1/2$, teremos somente dois níveis de energia, $E_0 = -\hbar\omega_L/2$ correspondente a $m = +1/2$, e $E_1 = +\hbar\omega_L/2$ correspondente a $m = -1/2$. A separação em energia é de $\Delta E = E_1 - E_0 = \hbar\omega_L$. A perturbação que acopla estes dois estados de energia consiste de um pequeno campo magnético oscilante, por exemplo dado por $B_1(\cos\omega t)\vec{e}_1$, aplicado perpendicularmente ao campo \vec{B}_0 . O operador correspondente a esta perturbação é $\hat{\mathcal{H}}_p = -\gamma_n \hbar_1 \hat{I}_1 \cos\omega t$. Os elementos de matriz $\langle m' | \hat{I}_1 | m \rangle$ são zero a menos que $m' = m \pm 1$. Assim, transições são permitidas entre os estados $m = 1/2$ e $m = -1/2$.

3.4 Spin em um campo magnético oscilante: transições induzidas por pulsos de radiofrequência

A descrição a seguir é original, e não segue o desenvolvimento normalmente feito nos textos básicos da mecânica quântica. Vamos considerar que um núcleo, com spin 1/2, seja colocado num campo magnético que resulta da soma de um campo constante $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_3$ mais um pequeno campo variável (com o tempo) dado por³: $\vec{B} = B_1(\cos\omega t)\vec{e}_1 - B_2(\sin\omega t)\vec{e}_2$. Aqui estamos considerando que $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ é um conjunto de vetores unitários segundo as direções no sistema de referência de laboratório. Então, como já vimos acima, o operador de momento magnético intrínseco, $\hat{\mu} = \eta \hat{\sigma}$, com $\eta \equiv \gamma_n \hbar/2$, ao interagir com o campo externo, dá lugar a um operador de energia magnética:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= -\hat{\mu} \cdot (\vec{B}_0 + \vec{B}) = -\eta \sigma \cdot (\vec{B}_0 + \vec{B}) = \\ &= -\eta \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \cos \omega t + i B_2 \sin \omega t \\ B_1 \cos \omega t - i B_2 \sin \omega t & -B_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Por outro lado,

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

³Trata-se de é um campo que gira no plano XY.

são (as representações dos) estados próprios ortonormais do operador de momentum angular intrínseco (ou do operador σ), com os quais se pode escrever um estado genérico $\chi(t)$ como uma combinação linear:

$$\chi(t) = A_1(t)\chi_1 + A_2(t)\chi_2 \quad (3.3)$$

Então, da equação de Schroedinger, $H\chi + (\hbar/i)\partial\chi = 0$, se obtém duas equações diferenciais:

$$-\eta B_0 A_1 - \eta(B_1 \cos\omega t + iB_2 \sin\omega t)A_2 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{d}{dt}A_1 = 0 \quad (3.4)$$

$$-\eta(B_1 \cos\omega t - iB_2 \sin\omega t)A_1 + \eta B_0 A_2 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{d}{dt}A_2 = 0 \quad (3.5)$$

Agora, para as equações acima, escrevemos soluções com a forma:

$$A_1 = A_{10}e^{i(\eta/\hbar)\alpha t} \quad , \quad A_2 = A_{20}e^{i(\eta/\hbar)\beta t} \quad (3.6)$$

donde se obtém as equações algébricas:

$$(\alpha - B_0)A_1 - (B_1 \cos\omega t + iB_2 \sin\omega t)A_2 = 0 \quad (3.7)$$

$$-(B_1 \cos\omega t - iB_2 \sin\omega t)A_1 + (B_0 + \beta)A_2 = 0 \quad (3.8)$$

Para que este sistema de equações tenha soluções não-nulas (para A_1 e A_2) o determinante do sistema tem que ser zero. Disto resulta:

$$(\alpha - B_0)(\beta + B_0) - (B_1 \cos^2\omega t + iB_2 \sin^2\omega t) = 0 \quad (3.9)$$

para todo instante “ t ”. Esta relação pode verificar-se quando: $B_1 = B_2$, para o qual o sistema de equações se reduz para:

$$(\alpha - B_0)A_{10} - B_1 A_{20}e^{i[(\eta/\hbar)(\beta - \alpha) + \omega]t} = 0 \quad (3.10)$$

$$-B_1 A_{10} + (B_0 + \beta)A_{20}e^{i[(\eta/\hbar)(\beta - \alpha) + \omega]t} = 0 \quad (3.11)$$

para todo “ t ”. A exigência da validade das equações anteriores para todo instante “ t ” implica que deva verificar-se a condição $\beta = \alpha - \hbar\omega/\eta$, com a qual:

$$A_2 = A_{20}e^{i(\eta/\hbar)\alpha t - i\omega t} \quad (3.12)$$

Por outro lado, as equações (3.10) e (3.11) reduzem-se a:

$$(\alpha - \beta)A_{10} - B_1 A_{20} = 0 \quad (3.13)$$

$$-B_1 A_{10} + (B_0 + \beta) A_{20} = 0, \quad (3.14)$$

e das equações (3.7) e (3.8) se obtém:

$$(\alpha - \beta)(B_0 + \alpha - \hbar\omega/\eta) = B_1^2 \quad (3.15)$$

ou seja:

$$\left(\alpha - \frac{\hbar\omega}{2\eta}\right)^2 = \left(B_0 - \frac{\hbar\omega}{2\eta}\right)^2 + B_1^2 \equiv K^2 \quad (3.16)$$

onde: $\alpha = \hbar\omega/2\eta + \epsilon K$, com $\epsilon = \pm 1$. Com isto, pode-se escrever para as equações (3.7) e (3.8) as soluções:

$$A_1(t) = e^{i(\omega/2)Kt} [A_{101} e^{i(\eta/\hbar)Kt} + A_{102} e^{-i(\eta/\hbar)Kt}] \quad (3.17)$$

$$A_2(t) = e^{-i(\omega/2)Kt} [A_{201} e^{i(\eta/\hbar)Kt} + A_{202} e^{-i(\eta/\hbar)Kt}] \quad (3.18)$$

onde terá que verificar-se que:

$$[A_{101} e^{i(\eta/\hbar)Kt} + A_{102} e^{-i(\eta/\hbar)Kt}] / [A_{201} e^{i(\eta/\hbar)Kt} + A_{202} e^{-i(\eta/\hbar)Kt}] = B_1 / (\alpha - \beta) \quad (3.19)$$

Agora, supondo que no instante $t = 0$ o spin achava-se no estado χ_1 (o que significa que $|A_1(0)| = 1$)

então terá que verificar-se que: $A_{201} = A_0/2i$, $A_{202} = -A_0/2i$, e que:

$$A_2(t) = A_0 e^{-i(\omega/2)t} \text{sen}[(\eta/\hbar)Kt] \quad (3.20)$$

Ao substituírmos esta relação para A_2 na equação (3.5), para a condição inicial dada, se verifica que:

$$A_1(t) = (1/b) A_0 e^{i(\omega/2)t} [-iK \cos\{(\eta/\hbar)Kt\} + (B_0 - \hbar\omega/\eta) \text{sen}\{(\eta/\hbar)Kt\}] \quad (3.21)$$

onde:

$$A_1(0) = \left(-i \frac{K}{B_1}\right) A_0 \quad (3.22)$$

e, ao usarmos $|A_1(0)| = 1$, resulta:

$$|A_0(\omega)| = \frac{B_1}{K} = \frac{B_1}{[(B_0 - \hbar\omega/2\eta)^2 + B_1^2]^{1/2}} \quad (3.23)$$

Daqui vemos que, com $|A_0(\omega)| = b/[(B_0 - \hbar\omega/2\eta)^2 + B_1^2]^{1/2}$, as funções A_1 e A_2 , dadas em (3.20) e (3.21), são realmente as amplitudes de probabilidade de se encontrar o spin nos estados χ_1 ou χ_2 , respetivamente.

Logo, para a condição inicial adotada, as amplitudes de probabilidade são:

$$A_1(t) = i \frac{[-iK \cos\{(\eta/\hbar)Kt\} + (B_0 - \hbar\omega/\eta) \text{sen}\{(\eta/\hbar)Kt\}]}{[(B_0 - \hbar\omega/2\eta)^2 + B_1^2]^{1/2}} e^{i(\omega/2)t} \quad (3.24)$$

que verifica $A_1(0) = 1$. E também:

$$A_2(t) = \frac{iB_1 \operatorname{sen}[(\eta/\hbar)Kt]}{[(B_0 - \hbar\omega/2\eta)^2 + B_1^2]^{1/2}} e^{-i(\omega/2)t} \quad (3.25)$$

que verifica $A_2(0) = 0$, como tinha que ser. Também, pode escrever:

$$|A_2(t)|^2 = \gamma_n^2 B_1^2 \operatorname{Sen}^2 \left\{ [(\omega_L - \omega)^2 + \gamma_n^2 B_1^2]^{1/2} \frac{t}{2} \right\} / [(\omega_L - \omega)^2 + \gamma_n^2 B_1^2]$$

O ponto importante a ser destacado é que, na eq.(3.25), temos uma amplitude de probabilidade *não nula* para alcançar o estado χ_2 , quando inicialmente o sistema achava-se no estado χ_1 , somente se B_1 não for zero. Ou seja, quando existe um campo oscilante no plano transversal ao campo constante. Em outras palavras, o campo oscilante induz transições entre os níveis de energia. Também, se pode ver que quando: $\omega = \omega_L$, a amplitude com que oscila a probabilidade $|A_2(t)|^2$ é máxima.

Aqui é conveniente dizer que procedimentos do tipo usado acima, para resolver a equação de Schroedinger-Pauli, não é geralmente usado na resolução de problemas ligados à RMN pulsada, particularmente na sua aplicação na computação quântica, onde uma longa série de pulsos de RF tem que ser aplicados. É comum fazer uso de transformações unitárias (rotações) para eliminar a dependência temporal do hamiltoniano, e para desenvolver uma interpretação geométrica simples que mostre o efeito que, sobre os momentos magnéticos, tem os pulsos de RF. Isso será feito a seguir.

3.5 RMN pulsada de 1 spin: usando transformações unitárias

Vamos analisar a evolução do sistema em função do tempo, quando sujeito aos dois campos magnéticos, um estático ($B_0 \vec{e}_3$) e outro girante⁴ ($\vec{B}_1 = B_1(\cos\omega t \vec{e}_1 - \operatorname{sen}\omega t \vec{e}_2)$). Desta vez, a equação de Schroedinger-Pauli, é escrita explicitamente em termos de operadores, sem usar nenhuma representação matricial para estes, e onde usamos a notação de Dirac para os vetores de estado. Então temos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \{-\hbar\omega_L I_3 - \hbar\omega_1 [I_1 \cos(\omega t) + I_2 \operatorname{sen}(\omega t)]\} |\psi\rangle \quad (3.26)$$

com $\omega_1 \equiv \gamma_n B_1$. Usando a identidade [68]:

$$e^{-i\theta I_3} I_1 e^{i\theta I_3} = I_1 \cos\theta + I_2 \operatorname{sen}\theta$$

⁴ B_1 , a amplitude do campo girante, está relacionada com a potência do pulso de RF.

obtemos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle &= \{-\hbar\omega_L I_3 - \hbar\omega_1 [e^{-i\omega t I_3} I_1 e^{i\omega t I_3}]\} |\psi\rangle = \\ &= -\hbar e^{-i\omega t I_3} (\omega_L I_3 + \omega_1 I_1) e^{i\omega t I_3} |\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.27)$$

Definindo um novo *ket*, $|\psi'\rangle$, por

$$|\psi'\rangle \equiv e^{i\omega t I_3} |\psi\rangle$$

obtemos a relação:

$$i\hbar e^{i\omega t I_3} \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hbar\omega I_3 |\psi'\rangle - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle \quad (3.28)$$

Substituindo esta relação em (3.27), obtemos a equação de Schroedinger para $|\psi'\rangle$:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle = -[(\omega_L + \omega) I_3 + \omega_1 I_1] |\psi'\rangle \quad (3.29)$$

Este resultado é muito importante, pois nesta nova equação a dependência temporal do hamiltoniano desapareceu. De fato, a equação (3.29) pode ser interpretada como descrevendo o movimento de um núcleo cujo momento magnético interage com um campo magnético efetivo dado por:

$$\vec{B}_{ef} = B_1 \vec{e}_1 + (B_0 + \frac{\omega}{\gamma_n}) \vec{e}_3 \quad (3.30)$$

Classicamente, este procedimento pode ser interpretado como uma transformação para um sistema de coordenadas girante. O termo ω/γ_n corresponde a um "campo fictício", que aparece do fato de um sistema girante ser não-inercial.

A solução de (3.29) pode ser escrita como:

$$|\psi'(t)\rangle = e^{-i[(\omega_L + \omega) I_3 + \omega_1 I_1] t} |\psi'(0)\rangle \quad (3.31)$$

Neste ponto aparece a importância do fenômeno da RMN: como ω é um parâmetro externo, podemos escolher um valor particular, tal que $\omega_L + \omega = 0$, o que obviamente ocorre para⁵ $\omega = -\omega_L$. Nesta condição dizemos que o campo está em ressonância com o movimento do momento nuclear. A situação é

⁵Segundo esta expressão, a frequência ω é negativa, mas as frequências de pulsos de RF vem dadas por números positivos. O que acontece é algo simples: ao definir uma direção para o campo estático foi uma escolha inadequada definir o sentido de giro do campo oscilante tal como foi definido. Então, dado o campo estático definido ao longo da direção $+z$, é mais conveniente escrever o campo girante como $\vec{B}'_1 = B_1(\text{sen}\omega t \vec{e}_1 - \text{cos}\omega t \vec{e}_2)$, ou manter a expressão do campo \vec{B}_1 e escrever $\vec{B}_0 = B_0(-\vec{e}_3)$. A parte disso, o sinal negativo diante da ω não tem consequências.

equivalente a excitarmos um sistema massa-mola com uma força externa que oscila na frequência natural do sistema, $\omega = \sqrt{k/m}$. Na ressonância, portanto, $|\psi'\rangle$ evolui de acordo com:

$$|\psi'(t)\rangle = e^{-i\omega_1 I_1 t} |\psi'(0)\rangle \quad (3.32)$$

O operador $e^{-i\omega_1 I_1 t}$ provoca uma rotação de $|\psi(0)\rangle$ em torno do eixo x . Para o caso de spin $I = 1/2$, podemos escrever este operador em termos da matriz de Pauli σ_1 :

$$e^{-i\omega_1 I_1 t} = \mathbf{1} \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) - i \operatorname{sen}\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \sigma_1 \quad (3.33)$$

onde $\mathbf{1}$ é a matriz identidade 2×2 . Rotações de $\pi/2$ são particularmente importantes. Vamos representar tais rotações por $R_x(\pi/2)$. Explicitamente:

$$R_x(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

Lembrando que $\omega_1 = \gamma_n B_1$, onde B_1 é amplitude do campo girante, o valor $\omega_1 t = \pi/2$ pode ser obtido fixando-se B_1 e ajustando-se a duração de t . Neste caso dizemos que um *pulso* de $\pi/2$ foi aplicado ao sistema. Obviamente pulsos com outras durações podem ser obtidos. Para rotações em torno de y , usa-se σ_2 :

$$\sigma_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

$|\psi'\rangle$ representa a função de onda no sistema girante. Para a discussão que se segue, somente este *ket* (estado) será importante. Repare, no entanto, que no instante $t = 0$, $|\psi'\rangle$ e $|\psi\rangle$ são idênticas. Como exemplo, suponha que o estado inicial seja:

$$|\psi'(0)\rangle = |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

A aplicação de um pulso de $\pi/2$ em torno de x leva este estado para:

$$|\psi'(t = \pi/2\omega_1)\rangle = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle - i|1\rangle] \quad (3.37)$$

Ou seja, tal pulso cria uma superposição dos autoestados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ que se pode facilmente verificar ser autoestado de \hat{I}_2 . É precisamente esta habilidade da RMN manipular estados que a torna uma poderosa ferramenta para a computação quântica.

3.6 Hamiltoniano para a interação spin-spin

Vamos agora considerar o caso em que vários spins interagem entre si. Para os spins nucleares nas moléculas existem dois mecanismos distintos de interação. O primeiro é a interação magnética *dipolo-dipolo*. Esta interação é inversamente proporcional (em magnitude) ao cubo da distância entre os dois núcleos e depende da orientação relativa dos spins nucleares. Estes acoplamentos tipo *dipolo-dipolo* se produzem entre spins na mesma molécula (caso intramolecular) e entre spins em moléculas distintas (caso intermolecular). No entanto, quando as moléculas estão dissolvidas num líquido, todos os acoplamentos dipolares têm em média um valor igual a zero [68].

O segundo mecanismo de interação entre spins é o conhecido como *acoplamento escalar* ou *acoplamento-J*. Esta interação é mediada pelos elétrons que são compartilhados (em ligações químicas) entre os átomos na molécula. A magnitude deste acoplamento depende do elemento e do isótopo do núcleo considerado. O seu hamiltoniano é [68]:

$$\hat{\mathcal{H}}_j = \hbar \sum_{i>j} 2\pi J_{ij} (I_1^i \otimes I_1^j + I_2^i \otimes I_2^j + I_3^i \otimes I_3^j) \quad (3.38)$$

onde J_{ij} é o acoplamento entre os spins i e j . No caso dos chamados espectros de primeira ordem, ou seja, quando $|\omega_i - \omega_j| \ll 2\pi|J|$, a equação anterior resulta simplificada:

$$\mathcal{H}_j = \hbar \sum_{i>j}^n 2\pi J_{ij} I_3^i \otimes I_3^j \quad (3.39)$$

O hamiltoniano completo para um sistema fechado de N spins nucleares numa solução líquida isotrópica e com espectros de primeira ordem é dado por:

$$\mathcal{H} = -\hbar \sum_{i=1}^n \omega_L^i I_3^i + \hbar \sum_{i>j}^n 2\pi J_{ij} I_3^i \otimes I_3^j \quad (3.40)$$

Em particular, no caso que se tenha dois spins, onde vamos chamar ao spin 1 de A e ao spin 2 de B , que interagem com o campo estático e entre si, com energia de acoplamento dada por $2\pi\hbar J_{1,2}$, que vamos escrever como $\hbar\omega^{AB}$, temos que o hamiltoniano hiperfino pode ser escrito neste caso como:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hbar\omega_L^A I_3^A \otimes \mathbf{1} - \hbar\omega_L^B \mathbf{1} \otimes I_3^B + \hbar\omega^{AB} I_3^A \otimes I_3^B \quad (3.41)$$

onde $\mathbf{1}$ é a matriz identidade 2×2 . Haverá então quatro estados de base: $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$, onde o primeiro sinal se refere ao estado de A e o segundo de B . As autoenergias serão também em número de quatro:

$$E_{00} = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0^A - \frac{1}{2}\hbar\omega_0^B + \frac{1}{4}\hbar\omega_0^{AB}$$

$$\begin{aligned}
E_{01} &= -\frac{1}{2}\hbar\omega_0^A + \frac{1}{2}\hbar\omega_0^B - \frac{1}{4}\hbar\omega_0^{AB} \\
E_{10} &= +\frac{1}{2}\hbar\omega_0^A - \frac{1}{2}\hbar\omega_0^B - \frac{1}{4}\hbar\omega_0^{AB} \\
E_{11} &= +\frac{1}{2}\hbar\omega_0^A + \frac{1}{2}\hbar\omega_0^B + \frac{1}{4}\hbar\omega_0^{AB}
\end{aligned}$$

Vemos que E_{00} representa o estado fundamental, e E_{11} a energia mais alta. Se fizermos a hipótese que $\omega_A > \omega_B$, teremos $E_{01} < E_{10}$.

As matrizes de Pauli escritas na mesma base são: $\sigma_x^A = \sigma_1 \otimes \mathbf{1}$, $\sigma_y^A = \sigma_2 \otimes \mathbf{1}$, $\sigma_z^A = \sigma_3 \otimes \mathbf{1}$, $\sigma_x^B = \mathbf{1} \otimes \sigma_1$, $\sigma_y^B = \mathbf{1} \otimes \sigma_2$, $\sigma_z^B = \mathbf{1} \otimes \sigma_3$.

A partir das matrizes de Pauli, podemos facilmente calcular matrizes de rotação de $\pi/2$ em torno de x e y para os dois spins:

$$R_x^A(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -i \\ -i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad R_y^A(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

$$R_x^B(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 & 0 \\ -i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -i \\ 0 & 0 & -i & 1 \end{pmatrix}; \quad R_y^B(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

Considere como exemplo a aplicação ao estado $|10\rangle$ de uma rotação em torno de y do spin B :

$$R_y^B(\pi/2) |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Ou seja:

$$R_y^B(\pi/2) |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle)$$

que claramente equivale a uma rotação de $\pi/2$ somente do spin B , como desejado.

Passemos agora à evolução temporal do sistema. O procedimento para a eliminação da dependência temporal no hamiltoniano é idêntica àquele do caso onde havia somente um spin. O hamiltoniano efetivo se torna:

$$\hat{\mathcal{H}}_{ef} = -\hbar(\omega_L^A + \omega)I_3^A \otimes \mathbf{1} - \hbar(\omega_L^B + \omega)\mathbf{1} \otimes I_3^B - \hbar\omega_1^A I_1^A \otimes \mathbf{1} - \hbar\omega_1^B \mathbf{1} \otimes I_1^B + \hbar\omega^{AB} I_3^A \otimes I_3^B$$

O campo oscilante pode agora ser "sintonizado" para o spin A ou B , separadamente. A solução da equação de Schroedinger-Pauli será, como anteriormente:

$$|\psi'(t)\rangle = e^{i\hat{\mathcal{H}}_{ef}t/\hbar}|\psi'(0)\rangle$$

Como exemplo, imagine a aplicação de um pulso de $\pi/2$ sobre o spin A em torno do eixo x . Então, $\omega = -\omega_L^A$ e $\omega_1^A \tau = \pi/2$, onde τ é a duração do pulso. Se os fatores giromagnéticos de A e B forem iguais, teremos também $\omega_1^B \tau = \pi/2$. Supondo ainda que $\omega_L^A/2\pi = 100$ MHz, $\omega_L^B/2\pi = 50$ MHz e $\omega^{AB}/2\pi = 0,05 \times (\omega_1^A/2\pi)$ MHz. Calculando numericamente o operador de evolução temporal, e aplicando ao estado $|00\rangle$, obtém-se:

$$|\psi\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}} (i|00\rangle + |10\rangle) + 0,014 (|01\rangle + |11\rangle)$$

Ou seja, o pulso gira o spin de $\pi/2$, mas o estado final possui uma pequena mistura dos estados $|01\rangle$ e $|11\rangle$. Esta mistura será menor quanto maior for a diferença entre as frequências de Larmor entre os dois spins. Para uma separação de frequência de 100 MHz, o termo de mistura se torna $0,001i|01\rangle$.

3.7 O estado inicial e origem do sinal da RMN

Num experimento de RMN se lida com amostras macroscópicas contendo 10^{23} spins por unidade de volume. Sob a ação de um campo magnético estático, estes spins distribuem-se estatisticamente nos níveis de energia do sistema, que portanto deve ser tratado dentro do formalismo da matriz densidade.

Além disto, em uma amostra macroscópica, os spins inevitavelmente se acoplam às suas vizinhanças, de forma que se perturbado por alguma ação externa tal como pulsos de radiofrequência, o sistema sempre retornará ao equilíbrio após um certo intervalo de tempo. Este fenômeno é chamado de "relaxação", que será discutido na seção seguinte. Aqui serão discutidas propriedades básicas da matriz densidade do sistema acoplado.

No equilíbrio térmico, a uma temperatura T , a matriz densidade de um sistema com hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ é dada por [68]

$$\rho_{eq} = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\mathcal{Z}} \quad (3.44)$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$, e $\mathcal{Z} = \text{tr}\{exp(-\beta\mathcal{H})\}$ é a função de partição. Consideramos o caso em que $\hat{\mathcal{H}}$ representa spins nucleares interagindo com campos magnéticos. O caso mais simples é o de um sistema de dois níveis ($\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$), onde a matriz densidade de equilíbrio pode ser escrita como:

$$\rho_{eq} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \begin{pmatrix} e^{-\hbar\omega_0/2k_B T} & 0 \\ 0 & e^{\hbar\omega_0/2k_B T} \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

Assim, a estatística dos spins em equilíbrio vem dada pela distribuição de Boltzmann. A probabilidade de ocupação do estado $|0\rangle$, p_0 , :

$$p_0 = \frac{e^{-\hbar\omega_0/2k_B T}}{\mathcal{Z}} = \frac{e^{-\hbar\omega_0/2k_B T}}{e^{-\hbar\omega_0/2k_B T} + e^{+\hbar\omega_0/2k_B T}}$$

e a probabilidade de ocupação do estado $|1\rangle$:

$$p_1 = 1 - p_0 = \frac{e^{+\hbar\omega_0/2k_B T}}{\mathcal{Z}}$$

Agora, mesmo a temperaturas muito baixas, como a 4,2 K, temperatura do hélio líquido, a energia térmica será muitas ordens de grandeza maior do que a energia magnética. Por exemplo, tomando para o momento magnético de um núcleo o magneton nuclear, $\mu_n = 3,15 \times 10^{-8} \text{eV/T}$, em um campo de 10 teslas, a energia magnética será: $E \approx 3,15 \times 10^{-7} \text{eV}$, enquanto que a energia térmica a 4,2 K será: $k_B T \approx 3,62 \times 10^{-4} \text{eV}$. Portanto, $E/k_B T \approx 10^{-3}$. Conseqüentemente, na maioria das situações, podemos fazer a seguinte aproximação para a matriz densidade de equilíbrio:

$$\rho_{eq} \approx \frac{I}{\mathcal{Z}} - \frac{\beta}{\mathcal{Z}} \mathcal{H} \quad (3.46)$$

Nesta aproximação, a matriz densidade do sistema acoplado será (aproximadamente) simétrica, pois o espectro de \mathcal{H} exibe esta propriedade se o acoplamento não for muito intenso.

Consideremos como exemplo o caso de dois spins 1/2, onde o hamiltoniano vem dado pela Eq.(3.29). Se substituirmos $\omega^A/2\pi = 100 \text{ MHz}$, $\omega^B/2\pi = 50 \text{ MHz}$ e $\omega^{AB}/2\pi = 1 \text{ MHz}$, obtemos $E_{++}/h = -74,75 \text{ MHz}$, $E_{+-}/h = -25,25 \text{ MHz}$, $E_{-+}/h = 24,75 \text{ MHz}$ e $E_{--}/h = 75,25 \text{ MHz}$. Substituindo $Z \approx 4$, válido no limite de altas temperaturas, teremos:

$$\rho_{eq} \approx \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{10^{-3}}{4} \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,75 \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

Como será visto adiante, o fato de a matriz densidade ter esta forma simétrica em relação às populações é muito importante para a criação dos estados *pseudo-puros*, elementos de partida necessários para a execução de algoritmos quânticos em RMN.

A segunda propriedade importante da matriz densidade de equilíbrio é a seguinte: sabemos que a manipulação dos estados de spin nuclear vem representada por transformações unitárias sobre a matriz

densidade. Representamos uma destas operações genericamente por U e, sendo que esta operação possui a propriedade $UU^+ = I$, teremos, conseqüentemente, que sua ação sob ρ_{eq} será:

$$U\rho_{eq}U^+ \approx \frac{I}{Z} - \frac{\beta}{Z}U\mathcal{H}U^+ \quad (3.48)$$

Ou seja, embora o segundo termo seja muito menor que o primeiro, somente ele sofre transformação sob a ação de U . O primeiro termo atua como um mero *background* que não contribui para a evolução do sistema. Como a manipulação dos estados em RMN se dá através de transformações unitárias, tais como pulsos de $\pi/2$, o sinal detectado será proveniente somente do segundo termo de ρ_{eq} . Isto permite a observação da evolução de estados *pseudo-puros* em um *background* formado por uma mistura estatística uniforme.

3.8 FIDs, ecos de spins e espectroscopia de RMN

A magnetização nuclear de equilíbrio de um sistema de 2 q-bits pode ser obtida diretamente da matriz densidade (3.47) através da relação:

$$M_{eq} = tr\{\rho_{eq}(\mu_z^A + \mu_z^B)\} = \hbar tr\{\rho_{eq}(\gamma_n^A I_z^A + \gamma_n^B I_z^B)\} \quad (3.49)$$

É óbvio que no equilíbrio as componentes x e y da magnetização serão nulas.

Contudo, em RMN pulsada não se mede M_{eq} , mas sim as componentes x e y da magnetização nuclear total após seqüências de pulsos de radiofrequência. Portanto, os observáveis em RMN são grandezas *fora* do equilíbrio. Através da aplicação de *pulsos seletivos* (sobre A ou B) em um sistema acoplado, pode-se medir as componentes da magnetização dos spins A e B em separado. Como exemplo, considere um pulso de $\pi/2$ sobre o spin A, aplicado ao longo da direção x . A matriz de rotação correspondente é dada por (3.43):

$$R_x^A(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -i \\ -i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

Sob tal pulso, a matriz densidade de equilíbrio⁶ se transforma como:

$$\rho = R_x^A(\pi/2)\Delta\rho R_x^A(\pi/2)^\dagger$$

⁶Vamos a chamar de $\Delta\rho$ a parte diferente da matriz identidade da matriz densidade de equilíbrio, ou seja, a parte que se transforma sob operações unitárias.

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -i \\ -i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.75 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & i \\ i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & i & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -1 & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -2i \\ 2i & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2i & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.51}
\end{aligned}$$

Vemos que a matriz densidade transformada tem forma não-diagonal. É fácil a partir daí verificar que

$$M_y^A = Tr\{\rho I_y^A\} = 1 \quad e \quad M_y^B = Tr\{\rho I_y^B\} = 0$$

Ou seja, o pulso criou uma magnetização transversal somente devida ao spin A. Se repetirmos o procedimento "sintonizando" agora no spin B, verificaremos que somente M_y^B será diferente de zero.

Após a aplicação de um pulso de $\pi/2$ sobre os spins A ou B, a magnetização fica livre para relaxar de volta à posição de equilíbrio. Porém, antes de alcançar o equilíbrio (processo que tem duração igual a T_1) a magnetização realiza muitas precessões de Larmor em torno de B_0 . Experimentalmente estas precessões induzem uma força eletromotriz (f.e.m.) no circuito de detecção, e é desta forma que o sinal de RMN é captado. Tal sinal se denomina *FID*, sigla em inglês para *Free Induction Decay*, ou decaimento da indução livre.

Um outro sinal importante em RMN é o *eco de spins*. Este é obtido aplicando-se um segundo pulso com duração π , um intervalo de tempo $\Delta\tau$ após o primeiro pulso de $\pi/2$. Se as larguras dos pulsos forem muito menores que T_2 , o *eco* aparecerá em um instante $\Delta\tau$ após o segundo pulso.

A detecção da RMN via *ecos de spins* tem a vantagem de eliminar os efeitos de inhomogeneidades do campo estático B_0 . Contudo, para fins de computação quântica o uso desta técnica representa de certa forma um "desperdício" de tempo, uma vez que devemos esperar um intervalo igual a $2\Delta\tau$ a partir da aplicação do primeiro pulso até a detecção do sinal. Porém, em situações de T_2 longo a técnica de *ecos* pode apresentar vantagens sobre a detecção através do *FID*.

O espectro final de RMN pode ser obtido realizando-se uma transformada de Fourier no *FID*. O espectro refletirá as probabilidades de transições entre os estados Zeeman induzidas pela radiofrequência,

$$|\langle i, j | I_x | i', j' \rangle|^2$$

com amplitudes pesadas pelos elementos de matriz correspondentes de ρ . Ou seja, o espectro final será proporcional ao produto:

$$\rho_{ij} \times |\langle i, j | I_x | i', j' \rangle|^2$$

Olhando, por exemplo, para os elementos de matriz de $I_x^A = \frac{1}{2}\sigma_x^A$,

$$\sigma_x^A = \sigma_x \otimes \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

vemos que os únicos elementos não nulos são⁷:

$$\langle - + | I_x^A | + + \rangle; \quad \langle - - | I_x^A | + - \rangle; \quad \langle + + | I_x^A | - + \rangle \text{ e } \langle + - | I_x^A | - - \rangle$$

sendo que o primeiro e terceiro, assim como o segundo e o quarto, representam a mesma transição, nas frequências respectivas de:

$$\Delta\omega_1^A = \omega^A + \frac{1}{2}\omega^{AB} \quad \text{e} \quad \Delta\omega_2^A = \omega^A - \frac{1}{2}\omega^{AB}$$

Assim, o espectro de RMN do spin A será composto por dois picos centrados nestas frequências.

Para o caso do spin B, temos que os elementos de matriz não nulos de I_x^B são:

$$\langle + - | I_x^B | + + \rangle; \quad \langle + + | I_x^B | + - \rangle; \quad \langle - - | I_x^B | - + \rangle \text{ e } \langle - + | I_x^B | - - \rangle$$

então, o espectro de B será similar ao de A, porém centrado nas frequências:

$$\Delta\omega_1^B = \omega^B + \frac{1}{2}\omega^{AB} \quad \text{e} \quad \Delta\omega_2^B = \omega^B - \frac{1}{2}\omega^{AB}$$

A Figura 2 mostra o espectro de equilíbrio calculada a partir do que foi descrito acima, com as linhas de absorção indexadas pelas respectivas transições.

3.9 Excitação seletiva

As possibilidade de se implementar portas lógicas em computação quântica por RMN baseia-se na possibilidade de manipular q-bits individuais. Para a computação quântica por RMN (ou certamente qualquer seqüência de pulsos em experimentos usuais de RMN) isto é conseguido aplicando-se pulsos nas frequências de ressonância do sistema e a manipulação individual dos q-bits é somente possível se as frequências forem separadas o suficiente. Note que, em contraste com os experimentos de RMN convencionais, não é suficiente simplesmente excitar seletivamente um spin; é também essencial que os outros spins permaneçam completamente não afetados.

Com pequenos sistemas de spin isto é razoavelmente simples de se conseguir, mas com sistemas maiores

⁷Lembrar que $|+\rangle = |0\rangle \equiv [1 \ 0]^T$, e $|-\rangle = |1\rangle \equiv [0 \ 1]^T$.

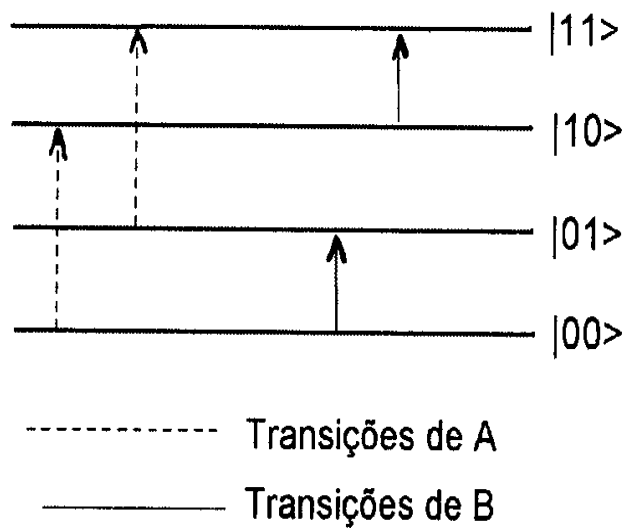


Figura 3.1: Transições permitidas em um sistema com 2 spins $1/2$ que interagem fracamente entre si.

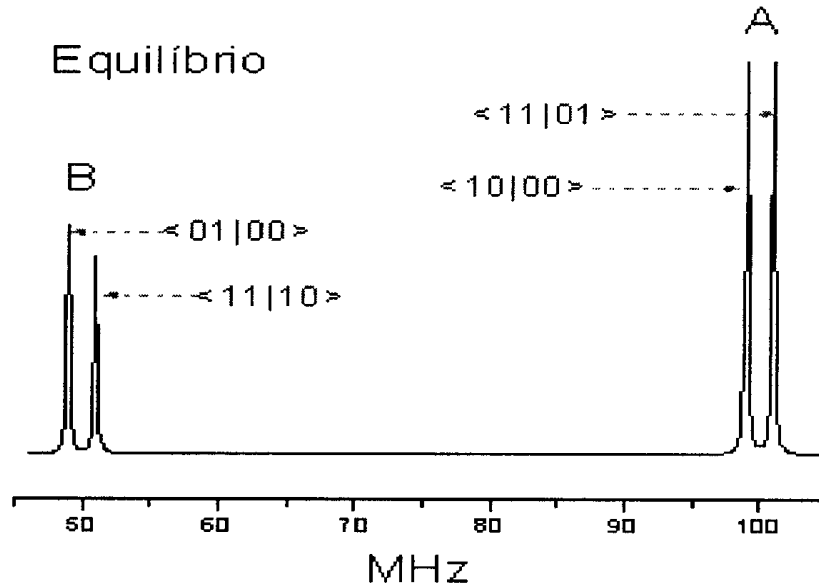


Figura 3.2: Espectro de equilíbrio calculado para o esquema de transições da figura anterior.

pode tornar-se bastante difícil. Aumentar o número de spins não somente aumenta o número de multipletos, mas também aumenta a largura de cada multipletto introduzindo mais acoplamento *spin-spin*.

Uma solução parcial é fornecida considerando sistemas heteronucleares. Como as frequências de RMN de núcleos diferentes são muito diferentes, é mais fácil conseguir seletividade dos núcleos, e assim a seletividade do spin. Infelizmente, esta vantagem é limitada porque o número de núcleos apropriados é pequeno. Os mais comuns são: ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F e ^{31}P .

Parece que o problema da excitação seletiva será uma das maiores dificuldades para construir grandes computadores quânticos usando a RMN em amostras líquidas. Supondo que seja possível controlar seis spins de cada um dos cinco núcleos listados acima, isto sugere um limite de ao redor de 30 q-bits, imposto pelo problema da excitação seletiva.

3.10 Relaxação

Relaxação é o processo pelo qual os spins retornam ao estado de equilíbrio. O equilíbrio é o estado no qual: (i) as populações dos níveis de energia são dadas pela distribuição de Boltzmann e, (ii) não existe magnetização transversa e, mais geralmente, nenhuma coerência está presente no sistema. Portanto, o processo de relaxação (aquele caracterizado pelo tempo T_1) envolve transições entre os níveis de energia. Quando uma amostra de RMN é colocada num campo magnético estático, e quando esta alcança o equilíbrio, surge uma magnetização resultante ao longo da direção do campo aplicado (sobre o qual a direção de o eixo z , de um sistema de coordenadas, é colocado). Esta magnetização paralela ao campo aplicado é chamada de longitudinal. Tal magnetização de equilíbrio surge das populações desiguais dos dois níveis de energia, correspondentes aos estados de spin $|0\rangle$ e $|1\rangle$. De fato, a magnetização, M_z , é proporcional à diferença de populações, $(n_0 - n_1)$, onde n_1 e n_0 são as populações dos dois correspondentes níveis de energia⁸:

$$M_z = g_n \mu_n (n_0 - n_1)$$

onde g_n é o fator g nuclear e μ_n é o magneton nuclear. Segundo vimos na seção 3.2, as transições entre os níveis de energia são provocados por campos magnéticos transversais (à direção z) oscilantes com frequência próxima à frequência de Larmor. Um pulso de radiofrequência, RF, pode gerar tal campo. No

⁸Para spins maiores que $1/2$ a magnetização M_z é dada por uma expressão mais complicada.

entanto, existe uma diferença importante entre uma transição provocada por um pulso de RF e aquela devida à relaxação. Quando um pulso ideal de RF é aplicado todos os spins experimentam o mesmo campo oscilante. O tipo de transição o qual leva à relaxação consiste em que os campos transversos são locais. Isto significa que estes campos afetam unicamente a uns poucos spins e não à amostra completa. Além disso, estes campos variam aleatoriamente em direção e amplitude. De fato, é precisamente esta natureza aleatória a qual leva a amostra ao equilíbrio. Os campos os quais são reponsáveis pela relaxação são gerados no interior das amostras, freqüentemente devido à interações dos spins entre si ou com sua vizinhança. Este é a chamada relaxação longitudinal, ou relaxação *spin-rede*, caracterizada por um tempo T_1 . A expressão *rede* não faz referência a um sólido, mas à coletividade de moléculas com as quais a energia pode ser trocada. Existe outro processo de relaxação: quando a magnetização transversa decai para zero: esta é a denominada relaxação transversal, ou relaxação *spin-spin*, com um tempo caracterizado por T_2 . Cada spin na amostra pode ser associado com um vetor (o valor meio do operador de spin) dando lugar a uma pequena contribuição à magnetização; estas contribuições podem ter qualquer direção, e em geral tem componentes segundo os eixos x , y e z , no sistema de coordenadas considerado.

3.11 Medidas na RMN

Para determinar o resultado de uma computação (quântica) é necessário fazer uma medida. Em RMN de estado líquido, não se pode usar apenas uma molécula para definir um único registro quântico, usa-se um *ensemble* grande de moléculas em um líquido. Numa situação simplificada, os spins nucleares estão todos no mesmo estado inicial, e os pulsos subseqüentes de RF a serem aplicados afetarão cada molécula da mesma maneira. Assim, sinais magnéticos muito fracos (devidos, por exemplo, aos spins dos prótons no Tricloroetileno -TCE) se adicionam para formar um campo magnético detectável: a magnetização total produzida pela amostra. O sinal que é medido na técnica de RMN de campo elevado é a magnetização no plano XY , que pode ser detetado em bobinas cujos eixos são colocados transversalmente ao campo externo.

Devido a que a interação de qualquer spin nuclear com a bobina é muito fraca, o efeito da bobina sobre o estado quântico dos spins é insignificante na maioria de experimentos de RMN. Em conseqüência, será uma boa aproximação considerar os campos magnéticos gerados e sua deteção do ponto de vista clássico.

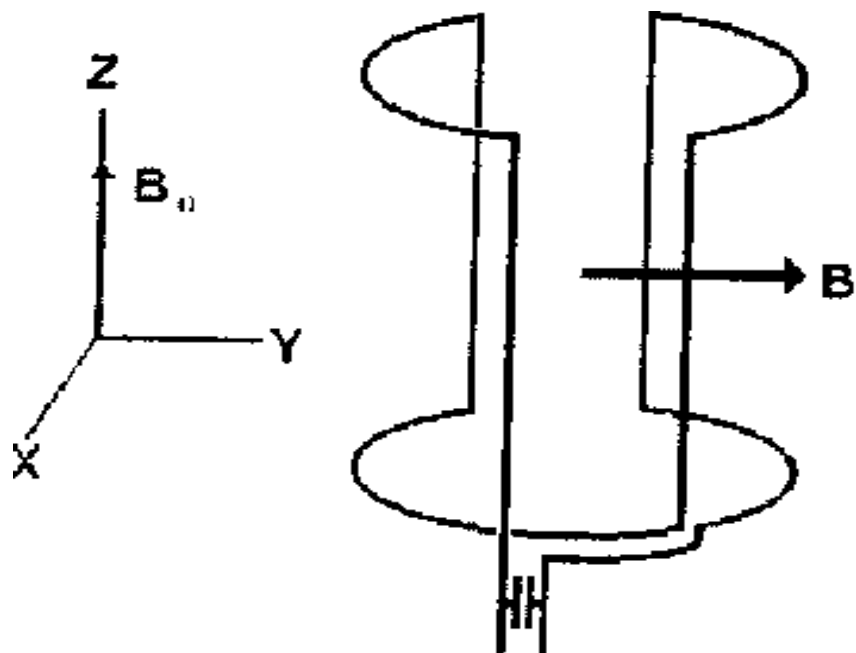


Figura 3.3: Esquema básico da disposição da bobina de RF para transmissão do campo B_1 e detecção da magnetização transversal num espectrômetro de RMN.

Nesta aproximação, cada spin nuclear comporta-se como um ímã de barra minúsculo que contribui à magnetização total. Os spins nucleares e a magnetização precessam. Em consequência, uma corrente oscilante será induzida na bobina, desde que esta seja ajustada à frequência de precessão. Observando a amplitude e a fase desta corrente no tempo, podemos observar a magnetização total no plano e a sua fase com respeito ao sistema girante. Este processo fornece informação sobre os estados do q-bit (representado pelo estado dos spins nucleares). Para ver como se pode usar a informação sobre a magnetização total para obter informação sobre os estados do q-bit, considere uma molécula de Tricloroetileno (TCE) com seus três núcleos de spin-1/2 (^{13}C , ^1H) que podem ser usados para processar informação. O espectro correspondente tem 12 linhas (com $N = 3$), correspondendo a estas 12 frequências distintas. As magnetizações totais geradas pelos prótons e pelos carbonos precessam (aproximadamente) a 500MHz e a 125 MHz, respectivamente.

As contribuições do próton e do carbono à magnetização são detectadas separadamente com duas bobinas ajustadas a 500MHz (magnetização do próton) e a 125MHz (magnetização do carbono). Por simplicidade, restringimos nossa atenção aos dois carbonos e supomos que os prótons não estão interagindo com os carbonos (é possível remover ativamente tais interações usando uma técnica de *desacoplamento*). No

final de uma computação, o estado do q -bit dos dois spins nucleares é dado por uma matriz densidade ρ_p . Vamos supor que este estado é o mesmo para cada molécula de TCE na amostra.

Seja ρ_0 o estado dos dois spins nucleares, A e B, no sistema de referência girante. Neste sistema, o estado evolui no tempo para algum ρ_t de acordo a um hamiltoniano \mathcal{H} que consiste de um termo de deslocamento químico para a diferença na frequência do precessão do segundo carbono (B) e de um termo do acoplamento. Com uma aproximação boa,

$$\mathcal{H} = 900\pi\sigma_z^B + 50\pi\sigma_z^A\sigma_z^B \quad (3.52)$$

A magnetização detectada na direção X, no instante t , é dada por:

$$M_x(t) = m \text{Tr}(\rho(t)(\sigma_x^A + \sigma_x^B)) \quad (3.53)$$

onde $\text{tr}(\sigma)$ denota o traço da matriz σ . A constante de proporcionalidade m depende do tamanho do *ensemble* e dos momentos magnéticos dos núcleos. Do ponto da vista da RMN, m determina uma escala cujo tamanho absoluto não é relevante. O que importa é a relação sinal/ruído no sistema. Com a finalidade de continuar com a discussão, vamos considerar $m = 1$.

Podemos também detectar a magnetização $M_y(t)$ na direção Y e combiná-la com a $M_x(t)$ para dar forma a um número complexo que representa a magnetização no plano:

$$\begin{aligned} M(t) &= M_x(t) + iM_y(t) \\ &= \text{tr}(\rho(t)(\sigma_+^A + \sigma_+^B)) \end{aligned} \quad (3.54)$$

onde se define $\sigma_+ = \sigma_x + i\sigma_y$.

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

com, $\sigma_+^A = \sigma_+ \otimes \mathbf{1}$ e $\sigma_+^B = \mathbf{1} \otimes \sigma_+$. Agora, o que podemos inferir de $\rho(0)$ observando $M(t)$ no tempo? Por simplicidade, negligenciamos o hamiltoniano de acoplamento. Sob o hamiltoniano de deslocamento químico $H_{sC} = 900\pi\sigma_z^B$, $M(t)$ evolui como:

$$\begin{aligned} M(t) &= \text{Tr}(e^{-i\mathcal{H}_{sC}t}\rho(0)e^{i\mathcal{H}_{sC}t}(\sigma_+^A + \sigma_+^B)) \\ &= \text{Tr}(\rho(0)e^{i\mathcal{H}_{sC}t}(\sigma_+^A + \sigma_+^B)e^{-i\mathcal{H}_{sC}t}) \\ &= \text{Tr}(\rho(0)(\sigma_+^A + \underbrace{e^{i\mathcal{H}_{sC}t}\sigma_+^B e^{-i\mathcal{H}_{sC}t}})) \end{aligned}$$

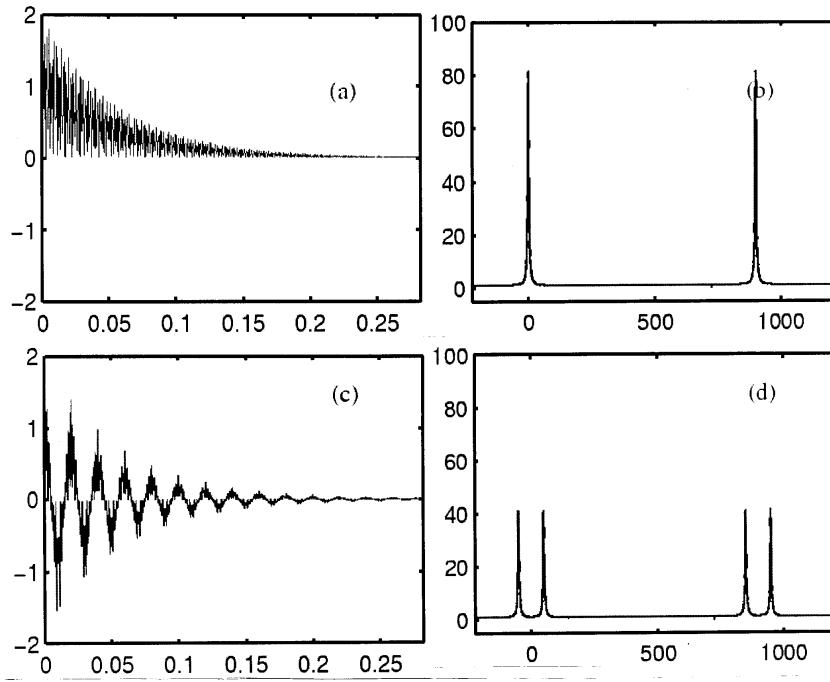


Figura 3.4: Sinais simulados da magnetização (à esquerda) e espectro (à direita). A figura (a) mostra o sinal da magnetização ao longo de X em função do tempo para um par de spins desacoplados com um deslocamento químico relativo de 900Hz. (b) Mostra o espectro para o sinal em (a), isto é, a transformada de Fourier da magnetização combinada segundo as direções X e Y . (c) Mostra o sinal da magnetização ao longo de X quando os dois q-bits estão acoplados. (d) Mostra o espectro para o sinal em (c) obtido das magnetizações combinadas ao longo das direções X e Y . Cada pico (de cada spin) do espectro precedente se desdobra em dois. Os picos à esquerda e à direita de cada par estão associados com o outro spin, que está no estado $|1\rangle$ e $|0\rangle$, respectivamente.

$$\begin{aligned}
 &= \text{Tr}(\rho(0)(\sigma_+^A + e^{i2\pi 900t} \sigma_+^B)) \\
 &= \text{tr}(\rho(0)\sigma_+^A) + \text{tr}(\rho(0)e^{i2\pi 900t} \sigma_+^B)
 \end{aligned} \tag{3.56}$$

onde o termo: $e^{i\mathcal{H}_{sc}t} \sigma_+^B e^{-i\mathcal{H}_{sc}t} = (\alpha \mathbf{1} + i\gamma \sigma_z^B) \sigma_+^B (\alpha \mathbf{1} - i\gamma \sigma_z^B) = (\alpha + i\gamma)^2 \sigma_+^B = e^{i2\pi 900t} \sigma_+^B$; com:

$$\alpha = 1 - (900\pi t)^2/2! + (900\pi t)^4/4! + \dots, \quad \gamma = (900\pi t) - (900\pi t)^3/3! + (900\pi t)^5/5! + \dots,$$

também usou-se o resultado: $\sigma_+^B \sigma_z^B = -\sigma_+^B$, $\sigma_z^B \sigma_+^B = \sigma_+^B$, e $(\sigma_z^B)^2 = \mathbf{1}$.

Assim o sinal é uma combinação de um sinal constante dado pela contribuição do primeiro spin à magnetização no plano, e um sinal que oscila com uma frequência de 900Hz com amplitude dada pela contribuição do segundo spin à magnetização planar. As duas contribuições podem ser separadas via a transformação de Fourier da $M(t)$, que resulta ter dois picos distintos: um em 0Hz e um segundo em 900Hz. Veja Fig.

Para ver como o acoplamento afeta a magnetização observada, re-escrevemos a expressão para $M(t)$ para aproveitar o fato de que os estados de spin *up/down* são invariantes sob o hamiltoniano total.

$$\begin{aligned}
M(t) &= \text{tr}(\rho(t)\sigma_+^1) + \text{tr}(\rho(t)\sigma_+^2) \\
&= \text{tr}(\rho(t)\sigma_+^1 \mathbf{1}^2) + \text{tr}(\rho(t)\mathbf{1}^1 \sigma_+^2) \\
&= \text{tr}(\rho(t)\sigma_+^1(A_\uparrow^2 + A_\downarrow^2)) + \text{tr}(\rho(t)(A_\uparrow^1 + A_\downarrow^1)\sigma_+^2) \quad (3.57)
\end{aligned}$$

onde:

$$A_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

similarmente, o primeiro termo pode ser escrito como:

$$M(t) = \text{tr}(e^{-i\mathcal{H}t}\rho(0)e^{i\mathcal{H}t}\sigma_+^1(A_\uparrow^2 + A_\downarrow^2)) \quad (3.59)$$

$$= e^{i2\pi 50t} \text{tr}(\rho(0)\sigma_+^1 A_\uparrow^2) + e^{-i2\pi 50t} \text{tr}(\rho(0)\sigma_+^1 A_\downarrow^2) \quad (3.60)$$

e similarmente para o segundo termo, mas com uma frequência *offset* de 900Hz por causa do deslocamento químico. Pode-se ver que o sinal da frequência zero é desdobrado em dois sinais com frequências de $-50Hz$ e de $50Hz$, respectivamente. A diferença entre as duas frequências é a constante do acoplamento. As amplitudes dos sinais, de frequências diferentes, podem ser usadas para inferir valores médios de operadores, tais como de $\sigma_+^1 A_\uparrow^2$, que vem dado por $\text{tr}(\rho(0)\sigma_+^1 A_\uparrow^2)$. Para n núcleos de spin-1/2, o espectro de picos de um núcleo desdobra-se em um grupo de 2^{n-1} picos, cada um associado com operadores do tipo $\sigma_+^a A_\uparrow^b A_\downarrow^c A_\downarrow^d \dots$

Além da evolução unitária devida ao hamiltoniano interno, processos da relaxação tendem a deteriorar a $\rho(t)$ levando ao estado do equilíbrio. No estado líquido, o estado de equilíbrio ρ_{eq} está perto de $\mathbf{1}/N$, onde N é a dimensão total do espaço de estados. A diferença entre ρ_{eq} e $\mathbf{1}/N$ é matriz densidade de "desvio do equilíbrio". Em boa aproximação se pode escrever

$$\rho(t) = \frac{1}{N}\mathbf{1} + e^{-\lambda t}\rho'(t) \quad (3.61)$$

onde $\rho'(t)$ tem o traço zero e evolui unitariamente sob o hamiltoniano. O efeito do processo de relaxação é fazer com que $M(t)$ no plano XY decaia exponencialmente, o que explica a razão do nome convencional para $M(t)$, a saber, decaimento livre da indução (FID). Os tempos típicos deste decaimento são 0.1s a 2s para os spins nucleares 1/2 usados para o processamento da informação quântica (PIQ). A observação

na RMN convencional consiste em medir $M(t)$ em intervalos de tempo discretos até que o sinal seja demasiado pequeno. O FID adquirido é então sujeito a uma transformada de Fourier para visualizar as amplitudes das diferentes contribuições nas frequências.

3.12 Núcleos Quadrupolares em RMN

Núcleos com spin $I > 1/2$, têm um momento quadrupolar nuclear não nulo. Tais núcleos têm sido utilizados em experimentos de CQ por RMN. Nesta tese consideramos só núcleos em cristais líquidos⁹. Um núcleo com spin I , têm $2I + 1$ níveis de energia, que estão igualmente desdobrados no campo magnético externo. Assim, por exemplo, no caso de $I = 3/2$, são 4 os níveis de energia que, por estarem igualmente separados, só podem produzir um único sinal de RMN.

Por outro lado, núcleos com um momento quadrupolar não nulo, sob a ação de um gradiente de campo eléctrico externo, o qual pode ter alguma simetria espacial, tornam-se acoplados com o gradiente de campo. A interação quadrupolar resultante faz com que os níveis de energia iniciais (na ausência desta interação) sejam deslocados em quantidades distintas, dando lugar a que as frequências de transição correspondentes sejam também distintas. Estas transições podem ser seletivamente excitadas por meio de pulsos de RF. A situação apresentada acima acontece quando núcleos com $I > 1/2$ estão inseridos em certos cristais líquidos.

3.12.1 Interação quadrupolar e RMN

O operador corresponde à interação quadrupolar, que vamos chamar simplesmente de hamiltoniano, para um núcleo com $I > 1/2$ interagindo com um gradiente de campo magnético externo [68], pode ser escrito, numa situação especial, como:

$$\mathcal{H}_q = \frac{e^2 q Q}{4I(2I - 1)} (3I_z^2 - I(I + 1)) \quad (3.62)$$

onde “ eq ” é o gradiente de campo elétrico, “ eQ ” o momento quadrupolar, I_z é a terceira componente do operador (vetorial) de momentum angular, e I é o spin dos núcleos. Este hamiltoniano não representa o caso mais geral. Numa situação mais geral, existe um termo adicional do tipo: $\eta(I_a^2 - I_b^2)$, onde a e b designam duas direções, de certos eixos, úteis para descrever a simetria do gradiente de campo. No caso

⁹Que são distintos aos líquidos, se for um líquido a interação quadrupolar desaparece.

de uma simetria axial (em torno do eixo principal de simetria) o η , chamado *parâmetro de assimetria*, é nulo $\eta = 0$. Esta situação, que tem lugar em certos cristais líquidos liotrópicos, permite que expressão dado em (4.25) forneça uma boa aproximação.

Na presença desse gradiente de campo magnético externo, os autovalores de energia do sistema quadrupolar estão dados por:

$$E_m = -\hbar\omega_0 m + \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)}(3m^2 - I(I+1)) \quad (3.63)$$

onde $m = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots, \pm I$, sendo I o um número quântico de spin, e $-\hbar\omega_0 I_3$ é a energia da interação Zeeman.

Agora vamos analisar a expressão de acima para alguns valores de seus parâmetros. Consideremos o caso quando $Q = 0$. Temos $2I + 1$ níveis de energia e a única transição permitida corresponde a $\Delta m = \pm 1$, resultando numa única linha espectral à frequência ω_0 . Disto fica claro que quando $Q = 0$ temos níveis de energia igualmente separados.

Nos interessa o caso quando $I = 3/2$, no qual um núcleo sujeito a um campo magnético estático, com um acoplamento quadrupolar não nulo, $Q \neq 0$, mostra três linhas no espectro RMN.

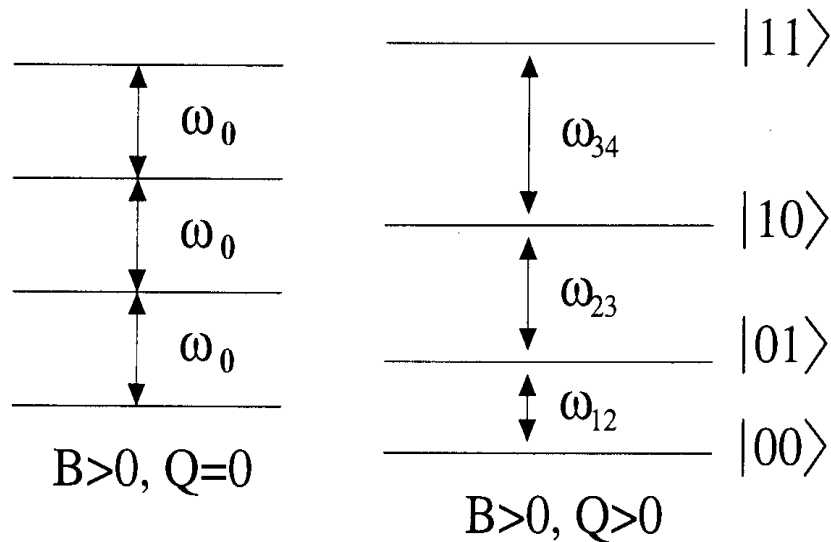


Figura 3.5: Diagrama esquemático dos níveis de energia, para um sistema com $I = 3/2$, com desdobramento quadrupolar. Os níveis de energia correspondem aos estados de spin $|I = 3/2, m = 3/2\rangle$ ou $|00\rangle$, $|I = 3/2, m = 1/2\rangle$ ou $|01\rangle$, $|I = 3/2, m = -1/2\rangle$ ou $|10\rangle$ e $|I = 3/2, m = -3/2\rangle$ ou $|11\rangle$.

Como exemplo, um núcleo de spin $3/2$ sujeito a um campo magnético estático com um acoplamento quadrupolar não nulo mostra três linhas no espectro RMN. Aqui todos os níveis de energia estão separados pela frequência correspondente à intensidade da interação quadrupolar. A Fig. 5 mostra um diagrama esquemático dos níveis de energia de um núcleo com spin $3/2$.

Poderemos renomear os quatro estados de energia como $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ e $|11\rangle$, correspondendo aos estados do spin nuclear $3/2, 1/2, -1/2$ e $-3/2$. Estes estados formam uma base do espaço de Hilbert, de dimensão 4, que pode ser tratado como correspondendo a um sistema de 2 q-bits. Argumentos similares podem ser considerados para sistemas com spins maiores. A Fig. 6 mostra um exemplo de um espectro no equilíbrio térmico.

Sinha [?] mostrou como criar estados *pseudo-puros* através de transições seletivas no ${}^7\text{Li}$ ($I = 3/2$, 2 q-bits), em LiBF_4 e implementou várias portas lógicas nesse sistema. A Fig. 7 mostra estados pseudo-puros simulados de 2 spins $3/2$ acoplados ao mesmo gradiente de campo elétrico (4 q-bits). Isto poderia ser o caso de 2 isotopos de gadolínio ${}^{155}\text{Gd}$ e ${}^{157}\text{Gd}$ num cristal.

Com um spin $I > 1/2$ também podem ser aplicadas seqüências de pulsos de RF para implementar portas lógicas. Assim, na RMN de um núcleo quadrupolar com $I = 3/2$, por exemplo, as portas H e

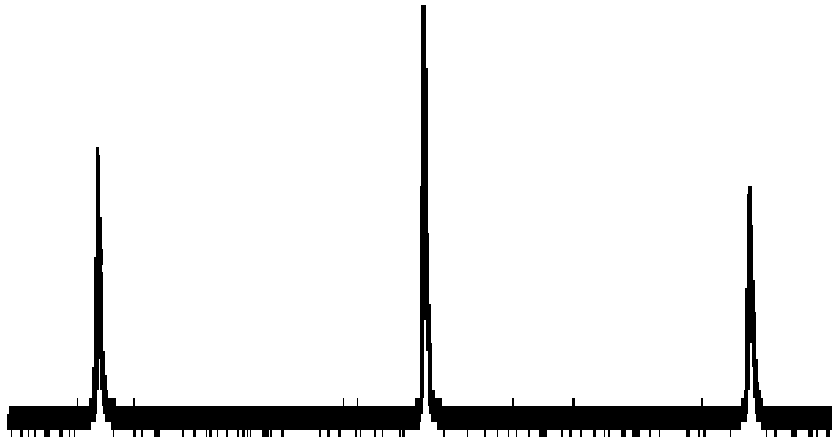


Figura 3.6: Um espectro (sinal \times frequência) RMN experimental de um sistema com spin $3/2$. O pico da esquerda se refere à transição $-3/2 \rightarrow -1/2$, o de centro à transição $-1/2 \rightarrow 1/2$ e o pico da direita à transição $1/2 \rightarrow 3/2$.

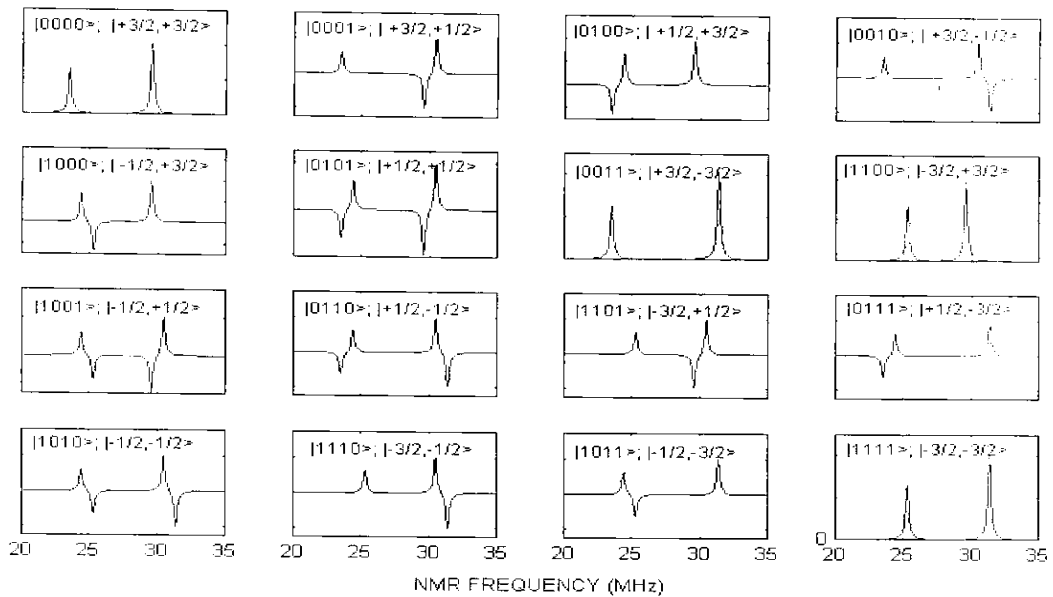


Figura 3.7: Acima é mostrado 16 estados pseudo-puros calculados para um núcleo com spin $I = 3/2$.

XOR são geradas pela seguinte seqüência de pulsos de RF (aplicados de esquerda para direita):

$$XOR_B = (\pi)_{12}^y - (\pi)_{23}^y - (\pi)_{12}^x$$

$$H_B = (\pi/2)_{01}^y - (\pi)_{01}^x$$

Depois deste capítulo de revisão¹⁰ dos fundamentos da RMN, vamos entrar, no seguinte capítulo, a desenvolver alguns aspectos da computação quântica por Ressonância Magnética Nuclear.

¹⁰Que foi considerado superficial na opinião do prof. T.J. Bonagamba.

Capítulo 4

Computação Quântica por Ressonância Magnética Nuclear

4.1 Introdução

Já vimos no capítulo 1 que, segundo o modelo teórico, num computador quântico, os q-bits disponíveis devem estar isolados de sua vizinhança, de modo que haja tempo suficiente para a execução de operações computacionais antes que o estado quântico perca sua coerência. Vimos também que para processar a informação quântica, precisa-se de uma maneira de se controlar as interações entre os q-bits, e que os físicos e químicos experimentais estão aproveitando os vários sistemas físicos que podem fornecer o isolamento e o controle necessários para implementar um computador quântico, sendo que um *ensemble* de spins nucleares em Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é a que, até o momento, apresenta mais vantagens com relação às implementações práticas de algoritmos quânticos, em sistemas contendo poucos q-bits.

Os núcleos de spin 1/2 (tais como ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P) têm tempos de relaxação muito longos numa solução líquida (na escala de tempos característicos da RMN), da ordem de centenas de milisegundos até segundos, o suficiente para que centenas de etapas computacionais possam ser executadas (ver tabela 1, no Cap. 1). A agitação molecular aleatória no líquido permite que se desconsidere o acoplamento intermolecular entre os spins, mas não o acoplamento intramolecular [68].

As ferramentas disponíveis na espectroscopia RMN pulsada (que foram refinadas por décadas) fornecem um delicado e eficaz controle coerente sobre a evolução dos spins nucleares (em moléculas) contidos em amostras líquidas. Estas amostras consistem de, aproximadamente, 10^{22} computadores idênticos processando em paralelo. Assim, os spins individuais, e as interações efetivas entre eles, podem ser manipulados

aplicando seqüências de pulsos de radiofrequência (RF) específicas.

Como cada um dos passos computacionais depende da manipulação seletiva dos spins nucleares, através de suas frequências de Larmor, seria desejável que as diferenças entre essas frequências fossem as maiores possíveis. Neste sentido, os sistemas de spins heteronucleares (de espécies nucleares distintas) e os sistemas com grande deslocamento químico oferecem vantagens. Adicionalmente, é conveniente que, entre os spins nucleares, exista um forte acoplamento, devido ao fato que o tempo requerido para a implementação de uma porta de 2 q-bits é inversamente proporcional ao tamanho do acoplamento entre os spins nucleares correspondentes, embora, não seja necessário que todos os spins estejam mutuamente acoplados.

Por outro lado, em um campo magnético típico, de aproximadamente 10 teslas, o desdobramento Zeeman dos níveis de energia nucleares é somente uma fração muito pequena da energia térmica à temperatura ambiente, e assim a polarização¹ nuclear é somente de algumas partes por milhão. Portanto, no equilíbrio térmico, os N spins (de um núcleo) não podem ser descritos por um único estado quântico puro. A ferramenta matemática mais adequada para descrever tais sistemas é a matriz densidade. Esta será composta por um termo que descreve um *ensemble* maximamente misturado, totalmente não polarizado, e um pequeno desvio, que representa a polarização do sistema.

Apesar das manipulações precisas disponíveis com a RMN², não é possível transformar um *ensemble* termicamente polarizado em um estado puro. Obter um estado puro requereria temperaturas da ordem do milikelvin e/ou campos magnéticos muito altos. Em tais temperaturas, entretanto, qualquer molécula seria congelada, e os acoplamentos intermolecular no sólido resultante adicionariam complicações significativas. No entanto, diversos esquemas foram propostos e executados para usar o pequeno desvio de um *ensemble* não polarizado para modelar um estado puro. Nesta proposta, o *ensemble* é visto como tendo quase todas as moléculas distribuídas aleatoriamente, mas com um pequeno excesso que esteja em um estado puro desejado. Este estado, chamado de *pseudo-puro*³, é fundamentalmente uma descrição do *ensemble*. Mas, quando o estado pseudo-puro fica sujeito aos vários pulsos de RF para manipular os spins, a parte não polarizada da distribuição permanece inalterável; somente o desvio é afetado, e evolui

¹A polarização de um q-bit define-se como a diferença entre as probabilidades para o estado excitado e o estado fundamental, excluindo, via a operação de traço, aos demais *q-bits*. Matematicamente, vem dada por $\epsilon = \text{Tr}(\rho\sigma_3^i)$.

²No entanto, numa amostra típica de RMN, não é possível manipular ou detectar spins individuais e, portanto, detectar valores de observáveis de um único q-bit. O que pode ser detectado são as médias de *ensemble*.

³Veja subseção 4.4.

justamente como um estado puro. Estes conceitos serão detalhados neste capítulo.

4.2 *Q-bits* na RMN

O paradigma da computação quântica considera N sistemas de dois níveis, os quais estão acoplados um com o outro e têm alguma interação específica com seu exterior (interação que possibilita seu monitoramento e controle). Além disto, o sistema tem que estar bem isolado. Os sistemas de RMN são, em contraste, bem diferentes. Em particular, uma amostra típica de RMN não contém um único sistema de spin, senão um número muito grande destes sistemas, um em cada molécula da amostra. Os *q-bits* na computação quântica por RMN são os spins de núcleos atômicos sensíveis à técnica RMN, colocados num campo magnético estático B . Núcleos de spin zero, como por exemplo ^{12}C e ^{16}O , não são magnéticos e portanto não são detetáveis através de RMN. Núcleos com número quântico de spin maior que $1/2$, tal como ^2H , ^{14}N , ^{35}Cl , ^{37}Cl , ^{79}Br e ^{81}Br também podem ser usados como *q-bits*.

4.3 Chaves lógicas via RMN

4.3.1 A operação $T^{AB}(\pi/2)$

Existe uma operação a dois *q-bits*, $T^{AB}(\pi/2)$, que não é gerada por pulsos, mas obtida simplesmente deixando-se o sistema evoluir sob a ação do operador que descreve a interação entre A e B , dado por $\hbar\omega^{AB}I_3^A \otimes I_3^B$, na ausência dos pulsos. A matriz que a representa é:

$$T^{AB}(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-i \end{pmatrix}$$

4.3.2 A porta *XOR*

A porta *XOR*⁴ é a única porta lógica a dois *q-bits* necessária em algoritmos quânticos. Esta porta fundamental ocorre em vários circuitos. A figura abaixo mostra o símbolo do *XOR* quântico,

A seqüência de pulsos, devida a Chuang et.al., [69], que cria a porta XOR_A vem dada por:

$$XOR_A = R_x^B(\pi/2)T^{AB}(\pi/2)R_y^B(\pi/2)$$

⁴Também conhecida como Ou-Exclusivo ou C-NOT.

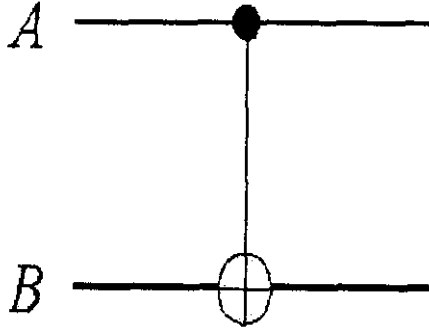


Figura 4.1: Representação gráfica da porta XOR quântica.

os pulsos são aplicados de direita para esquerda. Aqui as operações $R_y^B(\pi/2)$ e $R_x^B(\pi/2)$, que correspondem a pulsos de radiofrequência, são aquelas vistas nas Eqs. (3.42) e (3.43). Repare que a seqüência envolve rotações do spin B em torno de x e y , bem como a evolução natural do sistema.

Similarmente, a seqüência de operações que cria a porta XOR_B é:

$$XOR_B = R_x^A(\pi/2)T^{AB}(\pi/2)R_y^A(\pi/2)$$

Ao calcularmos explicitamente a seqüência de acima para a XOR_A , verificamos o resultado:

$$\begin{aligned} & R_x^B(\pi/2)T^{AB}(\pi/2)R_y^B(\pi/2) = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 & 0 \\ -i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -i \\ 0 & 0 & -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ & XOR_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1-i \\ 0 & 0 & 1-i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Lembrando que a porta “ XOR ideal”, dada pela Eq. (1.20), no Cap.1, está dada por:

$$XOR_A^{ideal} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

vemos que, o XOR criado por RMN difere em fase do XOR “ideal”, diferença que não tem efeito nas implementações (transformações) sobre a matriz densidade.

4.4 Criação de Estados Pseudo-Puros

O processamento da informação quântica requer que o sistema esteja colocado em um estado adequado, relativo ao qual a informação pode ser armazenada [70]. Este é geralmente tomado como um estado puro $|0\rangle$ de uma disposição de N sistemas quânticos de dois estados (q-bits), cujos estados da base correspondem então a uma codificação binária dos inteiros, de 0 a $2^N - 1$. Tal codificação do estado puro permite que o sistema seja colocado em uma superposição coerente de todos os estados da base, de modo que, pela linearidade da mecânica quântica, as operações unitárias possam ser aplicadas a todos estes estados em paralelo.

À primeira vista, RMN e computação quântica são disciplinas fundamentalmente antagônicas, pois RMN lida com *ensembles* contendo uma enorme quantidade de spins em misturas estatísticas, enquanto que a computação quântica lida com a manipulação de estados coerentes. Contudo, Cory e colaboradores, [71], e Chuang e colaboradores, [72, 73] demonstraram como estados “pseudo-puros” poderiam ser criados a partir de um *ensemble* estatístico. Das técnicas utilizadas, destacam-se aquela em que o resultado final é obtido como a média de vários experimentos, e a que utiliza um q-bit lógico como “rotulagem” na identificação de estados pseudo-puros. Estas duas técnicas são discutidas a seguir.

4.4.1 Estados Pseudo-Puros Através de Médias Temporais

Considere uma seqüência de portas XOR, atuantes sobre dois q-bits (spin 1/2) A e B , que cria o operador P_1 :

$$P_1 = XOR_B XOR_A = \begin{pmatrix} -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

A ação deste operador sobre a matriz de equilíbrio ρ_{eq} , dada em (3.47) por:

$$\rho_{eq} \approx \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{10^{-3}}{4} \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,75 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

resulta em:

$$P_1 \rho_{eq} P_1^+ = \rho_1 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{10^{-3}}{4} \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,75 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0,25 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

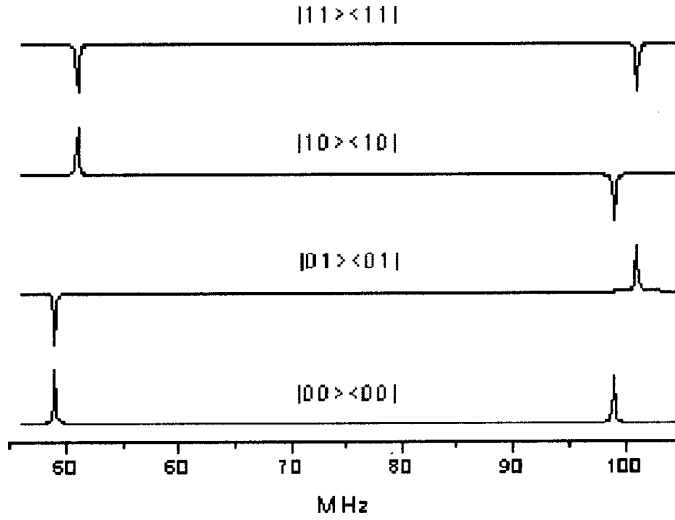


Figura 4.2: Vários espectros calculados de diferentes estados pseudo-puros em um sistema com dois q-bits.

Considere agora a ação $P_1^+ \rho_{eq} P_1$

$$P_1^+ \rho_{eq} P_1 = \rho_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{10^{-3}}{4} \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,75 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,25 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Fazendo a média $(\rho_{eq} + \rho_1 + \rho_2)/3 = \rho$, obtém-se:

$$\rho = \frac{(1 - 10^{-3})}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + 10^{-3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Ou seja, a média resulta da soma de uma matriz identidade -que não sofre transformação sob operações unitárias- mais uma matriz que pode ser interpretada como representando um sistema onde *todos* os spins estão no estado puro $|00\rangle$. Esta matriz pode ser escrita genericamente como:

$$\rho = a\mathbf{1} + \epsilon|00\rangle\langle 00| \quad (4.8)$$

onde $\epsilon \ll a$. Este é o chamado *estado pseudo-puro*. Embora muito menor que a unidade, em um experimento de RMN, somente o segundo termo de ρ contribuirá para o sinal. É com esta porção ínfima da matriz densidade que as operações em um computador quântico devem ser realizadas.

4.4.2 Estados Pseudo-Puros Através da Rotulagem de q -bit Lógico

Um outro modo de criar um estado pseudo-puro é utilizar um spin extra para rotular os estados. Deste modo, não é necessário fazer médias, como no método descrito na seção anterior. Neste método uma seqüência de pulsos é aplicada ao sistema fazendo com que haja uma troca de populações entre os níveis de energia. Esta seqüência de pulsos é a mesma que compõe a porta lógica XOR.

Tomemos um sistema com dois spins como exemplo⁵. Uma XOR_{AB} (aplicado ao B e controlado pelo spin A), inverte o segundo spin (o B) se o primeiro (o A) estiver em ‘1’. Aplicado ao estado:

$$|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$$

onde os estados dos spins A e B estão ordenados no estado *ket* conjunto como $|AB\rangle$, resulta em:

$$XOR_{AB}|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|11\rangle + \delta|10\rangle$$

Ou seja, a operação resultou na inversão das “populações” dos dois últimos estados $\gamma \leftrightarrow \delta$. Considere agora o que ocorre com 3 spins, A , B e C . Suponha que no regime de altas temperaturas, as populações de equilíbrio relativas dos estados, em ordem crescente de energias sejam:

$ ABC\rangle$	$ 000\rangle$	$ 001\rangle$	$ 010\rangle$	$ 011\rangle$	$ 100\rangle$	$ 101\rangle$	$ 110\rangle$	$ 111\rangle$
Equil.	6	4	4	2	4	2	2	0

Claramente, esta distribuição é uma mistura estatística. Contudo, é possível aplicar uma seqüência de operações utilizando XOR cujo efeito será o de criar dois estados pseudo-puros, de tal modo que um não interferirá no outro. A primeira operação que deve ser feita é aplicar um XOR_{CA} (aplicado ao spin A e controlado pelo spin C), que inverte o primeiro spin se o terceiro⁶ estiver em ‘1’. Esta operação fará com que ocorram duas trocas de populações: entre o segundo e o sexto estado e entre o quarto e oitavo. A aplicação de uma XOR_{BA} induz uma troca de populações entre o terceiro e o sétimo, e entre o quarto e o oitavo. Aplicando-se então XOR_{AC} e XOR_{AB} obtém-se o estado final desejado. O quadro abaixo resume a seqüência e as inversões de populações correspondentes.

$ ABC\rangle$	$ 000\rangle$	$ 001\rangle$	$ 010\rangle$	$ 011\rangle$	$ 100\rangle$	$ 101\rangle$	$ 110\rangle$	$ 111\rangle$
Equil.	6	4	4	2	4	2	2	0
XOR_{CA}	6	2	4	0	4	4	2	2
XOR_{BA}	6	2	2	2	4	4	4	0
XOR_{AC}	6	2	2	2	4	4	0	4
XOR_{AB}	6	2	2	2	0	4	4	4

⁵Como nesta seção vamos considerar um spin extra, vai ser conveniente colocar explicitamente dois sub-índices nas portas XOR, para identificar os spins envolvidos.

⁶Ordenamento correspondente com o dado pelo estado *ket* conjunto $|ABC\rangle$, começando da esquerda.

A última linha da tabela representa dois grupos de estados pseudo-puros, rotulados pelo estado do primeiro spin: no grupo inferior o spin A está em $|0\rangle$ e no grupo superior em $|1\rangle$. Este spin serve de "rótulo" para o grupo. Os spins B e C de cada subgrupo são os q-bits disponíveis para a computação.

A principal vantagem do primeiro método é o fato de não ser preciso a utilização de um q-bit lógico. Em contrapartida, a principal vantagem do segundo método é o fato do estado pseudo-puro ser criado em um único experimento. Em ambos os casos é necessário o conhecimento detalhado do espectro de RMN e do ordenamento de energia.

4.5 Criação de estados pseudo-emaranhados (estados EPR)

Agora vamos considerar o assunto de como se pode criar estados (pseudo-)emaranhados em spins nucleares através da RMN. Para dois spins, uma seqüência de pulsos utilizada para criar estados EPR é:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{EPR} &= R_y^B(\pi/2)T^{AB}(\pi/2)R_x^B(\pi/2)R_x^A(\pi/2) = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & -1+i \\ 0 & -1-i & 0 & -1+i \\ -1+i & 0 & 1+i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Quando aplicado aos vetores da base computacional, \mathcal{O}_{EPR} cria a chamada *base de Bell*, $\{|\Phi^\pm\rangle, |\Psi^\pm\rangle\}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{EPR}|00\rangle &= \frac{1-i}{2}(|00\rangle - |11\rangle) = \frac{1-i}{\sqrt{2}}|\Phi^-\rangle \\ \mathcal{O}_{EPR}|01\rangle &= \frac{1+i}{2}(|01\rangle - |10\rangle) = \frac{1+i}{\sqrt{2}}|\Psi^-\rangle \\ \mathcal{O}_{EPR}|10\rangle &= \frac{1+i}{2}(|00\rangle + |11\rangle) = \frac{1+i}{\sqrt{2}}|\Phi^+\rangle \\ \mathcal{O}_{EPR}|11\rangle &= \frac{-1+i}{2}(|01\rangle + |10\rangle) = \frac{-1+i}{\sqrt{2}}|\Psi^+\rangle \end{aligned} \quad (4.10)$$

Aplicando à mistura estatística de equilíbrio, $\Delta\rho_{eq}$, \mathcal{O}_{EPR} produz:

$$\mathcal{O}_{EPR}\Delta\rho_{eq}\mathcal{O}_{EPR}^\dagger = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

E aplicado a um estado pseudo-puro, $\Delta\rho_{pp} = |00\rangle\langle 00|$, obtém-se um estado *pseudo-puro emaranhado*:

$$\mathcal{O}_{EPR}\Delta\rho_{pp}\mathcal{O}_{EPR}^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Note que em nenhum dos dois casos, a matriz densidade resultante pode ser escrita como um produto de matrizes de dois spins $\rho_1 \otimes \rho_2$.

4.6 Aumento da polarização dos spins

A computação quântica por RMN é implementada usando estados *pseudo-puros* em vez de estados puros. Estes estados podem ser caracterizados por sua polarização⁷ ϵ . Para um sistema de RMN convencional a polarização é cerca de algumas partes em 10^5 . Esta minúscula polarização ocorre porque a RMN opera no regime de alta temperatura, onde as separações energéticas, Zeeman, são muito menores do que kT . Resulta que não é possível extrair eficientemente uma grande polarização do estado a partir da polarização do spin a alta temperatura: a fração que pode ser extraída é aproximadamente proporcional a 2^{-n} , onde n é o número dos *q-bits* no sistema. Claramente esta função cai extremamente rápido quando n aumenta. Esta baixa polarização do estado e o indesejável comportamento do escalonamento, conduzem a (i) queda exponencial da magnitude do sinal RMN com o número dos q-bits, fazendo que sistemas grandes não sejam práticos, pelo menos com a tecnologia atual; e (ii), que haja um grande interesse, por parte dos teóricos, no assunto de se um computador quântico por RMN é “verdadeiramente” quântico: estando no foco das discussões o assunto de se em tais sistemas é possível produzir o emaranhamento⁸. O desenvolvimento de sistemas com polarização de spin muito mais elevada é também uma área de pesquisa importante para a RMN convencional, e um número de aproximações foram desenvolvidas, em particular, uma aproximação baseada em *para*-hidrogênio, tem gerado um interesse significativo [74, 75].

4.7 Algoritmos quânticos implementados via RMN

Os métodos da espectroscopia de RMN são quase ideais para implementar e testar os algoritmos quânticos em sistemas com pequeno número de q-bits. Nas distintas implementações experimentais de CQ em soluções líquidas de RMN, foram usadas moléculas com distinto número de q-bits, tendo sido o maior número alcançado 7, numa molécula especialmente sintetizada, nos laboratórios da IBM, para implementar o algoritmo de Shor, e demonstrar a fatoração do número 15, veja ref. [76]. Com o aumento do

⁷Tendo duas situações extremas: quando $\epsilon = 0$, correspondendo ao caso de um estado maximamente misturado, e $\epsilon = 1$ correspondendo ao caso de um estado puro.

⁸As discussões sobre este problema são apresentadas no seguinte capítulo, na seção 5.4.

número de q-bits, não somente as dificuldades para sua síntese crescem, mas também as demandas sobre os espectrômetros de RMN e sobre o desenho das seqüências de pulsos, para conseguir corrigir os efeitos das imperfeições experimentais (tal como as inhomogeneidades dos campos de RF). Além disso, as formas tradicionais de preparação de estados pseudo-puros tornam-se muito ineficientes quando o número de q-bits cresce muito. Isto resulta numa perda dramática da sensibilidade dos experimentos. Mas ainda existem soluções possíveis para contornar pelo menos parcialmente estes problemas, uma delas consistindo no uso dos núcleos de ^3He ou ^{129}Xe polarizados por laser, refs. [77, 78].

A procura dos verdadeiros limites da técnica de RMN, no tocante á computação quântica, é um assunto atual de intensa pesquisa, na medida em que vai se revelando, cada vez mais, as vantagens desta técnica como parte de técnicas híbridas com melhores características para a computação quântica, neste sentido, recentemente existem novos resultados, por exemplo veja as refs. [79, 81, 80, 82].

Entre as implementações experimentais através da técnica de RMN destacam-se vários processos e algoritmos que precisam do emaranhamento, como é mostrado a seguir.

4.7.1 Experimentos em CQ-RMN reportando emaranhamento

Segundo o que conhecemos, até a data em que esta tese está sendo escrita, existem 24 publicações onde sustenta-se que o emaranhamento foi implementado em experimentos de RMN. A tabela abaixo resume estes experimentos, cada um destes com o ano da publicação e o título de cada trabalho.

Referência	Ano	Título
[83]	2004	Experimental creation of entanglement using separable state
[84]	2004	Quantum phase transition of ground-state entanglement in a Heisenberg spin chain simulated in an NMR quantum computer
[85]	2004	Quantum information processing by NMR using a 5-qubit system formed by dipolar coupled spins in an oriented molecule
[86]	2004	Practical Implementations of Twirl Operations
[87]	2004	Multiple Round Quantum Dense Coding And Its Implementation Using Nuclear Magnetic Resonance
[88]	2004	Pseudoentanglement of Spin States in the Multilevel N-15@C-60 System
[89]	2003	Entanglement Between an Electron and Nuclear Spin 1/2
[90]	2002	Entanglement transfer experiment in NMR quantum information processing
[91]	2002	Implementation of dense coding using the generalized Grover's algorithm
[92]	2002	Experimental implementation of generalized Grover's algorithm of multiple marked states and its application
[93]	2002	Synthesizing NMR analogs of Einstein-Podolsky-Rosen states using the generalized Grover's algorithm
[94]	2002	Simulating decoherence behavior of a system in entangled state using nuclear magnetic resonance
[95]	2002	Approximate quantum cloning with nuclear magnetic resonance
[96]	2001	Implementation of a Deutsch-like quantum algorithm utilizing entanglement at the two-qubit level, on an NMR quantum information processor
[97]	2001	Benchmarking quantum computers: the five-qubit error correcting code
[76]	2001	Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance
[98]	2001	Quantum entanglement in the NMR implementation of the Deutsch-Jozsa algorithm

Referência	Ano	Título
[99]	2000	Experimental demonstration of fully coherent quantum feedback
[100]	2000	Experimental demonstration of Greenberger-Horne-Zeilinger correlations using nuclear magnetic resonance
[101]	2000	Experimental Implementaton of Dense Coding Using Nuclear Magnetic Resonance
[102]	1999	Observations of Quantum Dynamics by Solution-State NMR Spectroscopy
[103]	1998	Complete quantum teleportation using nuclear magnetic resonance
[104]	1998	Experimental Quantum Error Correction
[105]	1998	NMR GHZ

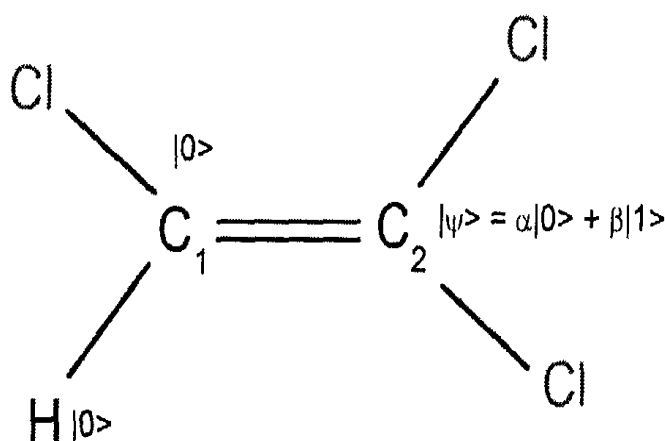
O protocolo de teleporte de estado quântico, publicado em 1993, por C. Bennett et. al., [44], possibilita “preparar” uma partícula, que está num local que chamaremos de B, para que possa adquirir, logo do que o protocolo seja completado, o estado (desconhecido) de uma segunda partícula que está num outro local, o A. Este passo de “preparação” ou de “transformação unitária condicional”, como é chamada no protocolo, é a etapa final do processo. Tal etapa não foi realizada nos experimentos de teleporte quântico anteriores à sua realização por RMN. Mas, em 1998, tal implementação foi feita de maneira completa por M. Nielsen, E. Knill e R. Laflamme, [103].

O experimento do teleporte quântico por RMN

Usando uma amostra líquida de trichloroetileno (C_2HCl_3) o protocolo de teleporte quântico foi implementado por RMN. No experimento usou-se o spin nuclear do hidrogênio e os dois spins nucleares do carbono como q-bits, e onde o que foi teleportado é o estado de um dos q-bits do carbono (identificado como q-bit “dato”) para o hidrogênio (identificado como q-bit “alvo”).

Esta escolha dos q-bits deve-se às taxas de relaxação dos spins na molécula usada. O tempo de descoerência, T_2 , para o q-bit de dados é de aproximadamente 0,4s; o T_2 para o segundo *q-bit* de carbono é de 0,3s e o T_2 do q-bit de hidrogênio é de 3s. Neste experimento os autores interpretam⁹ o processo de descoerência do q-bit de carbono como um evento que produz o mesmo efeito que aquele produzido por uma medida sobre os dos q-bits de carbono, tal como exigida pelo protocolo. Esta interpretação foi justificada considerando que não é possível realizar, por RMN, a etapa da medição na base de Bell, tal como é descrito no protocolo de teleporte, pois em RMN as medidas sobre o sistema resultam de medias

⁹Usando o modelo de descoerência de Zurek [106].



Esquema da molécula do tricloroetileno. O estado $|\psi\rangle$ do ^{13}C no carbono C_2 é teleportado para o próton do H.

Figura 4.3: Representação esquemática da molécula C_2HCl_3 usada no experimento de teleporte quântico por RMN.

sobre um *ensemble* de moléculas, e não medidas projetivas sobre um sistema num estado puro.

Antes da etapa de medição, e para conseguir teleportar o estado do q-bit de dados, o protocolo estabelece que o estado do segundo q-bit de carbono fique emaranhado com aquele do q-bit de hidrogênio. Para isto, foram aplicadas seqüências específicas de pulsos de RF, nas freqüências de Larmor dos respectivos q-bits. Além disto, e devido ao fato de que os três q-bits pertencem à mesma molécula, foram aplicados pulsos de RF para desacoplar os q-bits “de dados” e “alvo”. A fidelidade de emaranhamento foi determinada através da chamada tomografia de processo quântico, [107, 108], para caracterizar o processo de teleporte do estado quântico implementado no sistema.

Algoritmo de fatoração de Shor do número $N=15$ por RMN

Na referência [76] se reporta a implementação experimental do algoritmo de Shor da fatoração do número $N = 15$ via ressonância magnética nuclear (RMN), onde usou-se, à temperatura ambiente, uma solução líquida¹⁰ chamada de complexo de Fe-Perfluorbutaldi-enyl. Nas suas moléculas podem ser identificados 7 q-bits, representados por 5 núcleos de flúor ^{19}F e 2 núcleos de carbonos ^{13}C .

Após a completa caracterização do espectro de equilíbrio, de onde se obtém todas as freqüências e tempos de relaxação, os 7 q-bits são separados em dois registros $|x\rangle$ e $|y\rangle$ contendo 3 e 4 q-bits, respectivamente, e

¹⁰Sintetizada especialmente em laboratório.

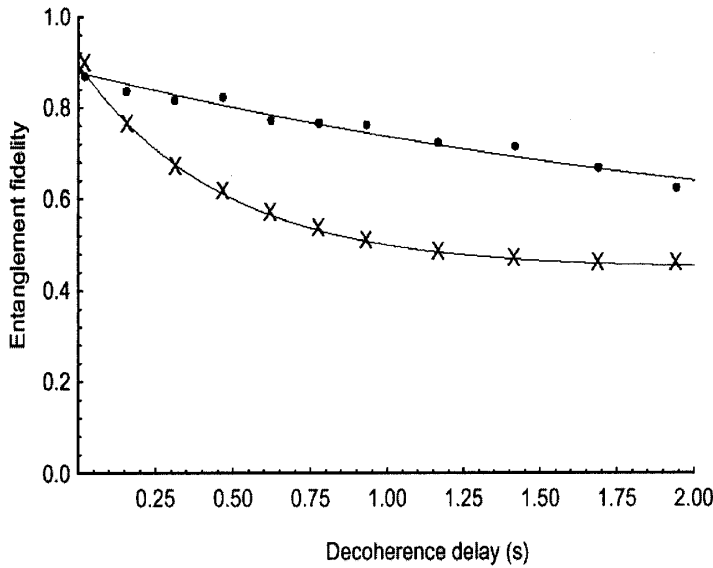


Figura 4.4: Gráfico da fidelidade de emaranhamento obtida experimentalmente para o teleporte por RMN.

preparados no estado $|000\rangle \otimes |0001\rangle$. Sequências de até 300 pulsos foram construídas para gerar o código do algoritmo. Após a execução do algoritmo, incluindo a aplicação da TFQ, o espectro do registro $|x\rangle$ é medido, de onde se observa uma superposição dos estados $|000\rangle$ e $|100\rangle$, equivalente aos decimais $|0\rangle$ e $|4\rangle$. Tal espectro representa uma leitura direta do período, $r = 4$, do estado quântico¹¹. A partir daí, o *mdc* entre $x^{r/2} \pm 1$ e 15 (calculado com um computador “clássico”) fornece corretamente os fatores 3 e 5 em ambos os casos.

A maior dificuldade apontada neste caso é a manutenção do estado coerente sob seqüências de pulsos tão longas. Os autores consideram tais efeitos através de simulações dos espectros. Deve ser enfatizado que a implementação do algoritmo de Shor neste trabalho, corresponde a uma versão “simplificada” pelo fato de N e seus fatores primos serem conhecidos de início (o que possibilitou algumas simplificações nas representações binárias de a), e pelo fato de não ter utilizado o método de frações contínuas na determinação do período da função f . Com estas simplificações foi possível demonstrar a execução do algoritmo com um sistema de 7 *q-bits*, e não 12, como exigido pelo algoritmo na sua forma plena para $N = 15$. Por outro lado, a característica probabilística do algoritmo de Shor foi completamente desconsiderada ao

¹¹No algoritmo de Shor, o conhecimento do período r não determina-se a partir de nenhum espectro, como fez o Vandersypen e colaboradores. Isto é assim porque o algoritmo de Shor é independente de qualquer técnica experimental.

proceder segundo essas simplificações.

4.8 Tomografia de Estado Quântico na RMN

Os estados na RMN são descritos através do formalismo da matriz densidade ρ [68]. No caso de hamiltonianos que independem do tempo, uma matriz densidade evolui, sob uma transformação unitária U , segundo a [68]:

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t) \quad (4.13)$$

A partir de $\rho(t)$, os observáveis na RMN $M^\pm = M_x \pm iM_y$ podem ser obtidos em qualquer instante de tempo a partir de [68]:

$$M^\pm(t) = \hbar\gamma_n \text{Tr}[\rho(t)(I_x \pm iI_y)] \quad (4.14)$$

A transformada de Fourier do sinal $M^\pm(t)$ produz o espectro de RMN, o qual, no caso de um sistema com $I = 3/2$, está composto por três linhas cujas amplitudes, que chamaremos de A_1, A_2 e A_3 , correspondem às transições de spin $+3/2 \rightarrow +1/2$, $+1/2 \rightarrow -1/2$ e $-1/2 \rightarrow -3/2$ (veja FIG. 6).

Por outro lado, para caracterizar completamente o estado quântico de um sistema de RMN é necessário determinar a matriz densidade correspondente. Teoricamente, conhecida esta podemos calcularmos a $M^\pm(t)$ via a Eq. (4.14), mas experimentalmente o que se mede é a magnetização total no plano XY a que, segundo a mesma Eq. (4.14), está relacionada apenas com alguns elementos da matriz densidade, via a operação de traço. A técnica que possibilita reconstruir completamente uma matriz ρ , desenvolvida por Vogel e Risken [109], chama-se de tomografia de estado quântico. Na RMN, a matriz pode ser reconstruída a partir de sinais RMN, procedimento que, no caso de spins $1/2$, foi desenvolvida por Long et.al. [110]. Uma boa apresentação do assunto pode ser vista também na Ref. [111]. Para spins quadrupolares a técnica foi reportada pela primeira vez por Bonk et. al. [112].

A matriz densidade de desvio (ρ) pode ser considerada tendo a forma geral¹²:

$$\rho = \begin{pmatrix} a & x_a + iy_a & x_b + iy_b & x_c + iy_c \\ x_a - iy_a & b & x_d + iy_d & x_e + iy_e \\ x_b - iy_b & x_d - iy_d & c & x_f + iy_f \\ x_c - iy_c & x_e - iy_e & x_f - iy_f & d \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

O método descrito em [112] esta baseado no fato de que as amplitudes dos espectros RMN estão relacionadas unicamente com os elementos *diagonais* da ρ :

$$A_1 = \sqrt{3}(e_{11}e_{12}a - e_{12}e_{22}b - e_{23}e_{13}c - e_{13}e_{14}d)$$

¹²Já que RMN não é sensível à matriz identidade dos estados *pseudo-puros*, a matriz (4.15) deve ser interpretada como a *matriz de desvio* do estado *pseudo-puro*.

$$A_2 = 2(e_{13}e_{12}a + e_{22}e_{23}b - e_{23}e_{22}c - e_{13}e_{12}d)$$

$$A_3 = \sqrt{3}(e_{13}e_{14}a + e_{13}e_{23}b + e_{12}e_{22}c - e_{11}e_{12}d) \quad (4.16)$$

onde e_{ij} são os elementos da matriz a qual representa o pulso de medida [112]. Os outros elementos são obtidos aplicando seqüências de pulsos específicos que os levam para a diagonal principal da ρ , e repetindo o procedimento para medir a, b, c e d a partir da equação de acima. Desta forma, todos os elementos de ρ (reais e imaginários) podem ser medidos.

4.9 Tomografia de Processo Quântico

A tomografia de processo quântico foi introduzida por Chuang e Nielsen [107] como um procedimento que permite descrever **experimentalmente** a evolução dinâmica de um sistema quântico (aberto ou fechado) quando tal evolução é desconhecida. Este procedimento, logicamente, também pode ser usado quando conhecemos as interações que operam no sistema, o que permite (via o uso da equação de Schroedinger ou de Liouville quântica¹³) a descrição **teórica** da evolução. Sua implementação baseia-se na preparação de um conjunto de estados quânticos ρ_j que, portanto, são conhecidos, sobre os quais opera um processo (desconhecido) \mathcal{E}_t , produzindo no final um conjunto de matrizes $\rho_j^{sada} = \mathcal{E}_t(\rho_j)$. Este procedimento usa a tomografia de estado quântico (apresentada brevemente na seção anterior no caso do spin quadrupolar $I = 3/2$) para determinar as matrizes resultantes.

Formalmente, o procedimento pode ser resumido assim: Uma operação quântica \mathcal{E} atua sobre um estado quântico ρ (um dos ρ_j). O efeito desta operação pode ser convenientemente expresso usando a chamada representação soma de operadores, [39],

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_k A_k \rho A_k^\dagger \quad (4.17)$$

onde $\sum_k A_k A_k^\dagger = I$. Mas, tendo em conta que o efeito terá que ser medido e que qualquer medida sempre será dada por números (e não, por exemplo, por operadores) resulta conveniente escrever os operadores A_k em termos de uma base fixa¹⁴ $\{\tilde{A}_m\}$. Disto resulta que a informação sobre o processo \mathcal{E} , operando

¹³Veja nos apêndices como pode ser expressa a equação de Liouville quântica numa forma equivalente, do tipo "Schroedinger".

¹⁴De um espaço de operadores ou de matrizes densidade (quando considerada a sua representação matricial).

sobre uma matriz ρ , passa dos $\{A_k\}$ para certos números $\chi_{m,n}$ (que podem ser vistos como elementos de uma matriz χ):

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_{m,n} \chi_{mn} \tilde{A}_m \rho \tilde{A}_n^\dagger \quad (4.18)$$

onde $\chi_{m,n} \equiv \sum_i a_{i,m} a_{i,n}^*$ quando escrevemos $A_i = \sum_m a_{im} \tilde{A}_m$. Como as matrizes ρ_j são arbitrárias, estas podem ser escolhidas como sendo os elementos de uma base do espaço de matrizes densidade, então, depois de aplicar a operação \mathcal{E} , se pode escrever a matriz resultante como uma expansão na mesma base:

$$\mathcal{E}(\rho_j) = \sum_k \lambda_{jk} \rho_k \quad (4.19)$$

Daqui, e depois de considerar todas as matrizes ρ_j e de usar a ferramenta da tomografia de estado quântico, se pode determinar experimentalmente $\mathcal{E}(\rho_j)$, para cada valor¹⁵ de j , e, conseqüentemente, todas os coeficientes¹⁶ $\lambda_{j,k}$. Ao ser conhecida a matriz λ , de elementos $\lambda_{j,k}$, é possível determinar a matriz χ ; para isto se define uma matriz β cujos elementos β_{jk}^{mn} são dados¹⁷ por:

$$\tilde{A}_m \rho_j \tilde{A}_n^\dagger = \sum_k \beta_{jk}^{mn} \rho_k \quad (4.20)$$

Combinando as equações (3.62), com $\rho = \rho_j$, (3.63) e (3.64) temos:

$$\sum_k \sum_{m,n} \chi_{mn} \beta_{jk}^{mn} \rho_k = \sum_k \lambda_{jk} \rho_k \quad (4.21)$$

e, a partir da independência linear das ρ_k , temos a relação:

$$\sum_{m,n} \beta_{jk}^{mn} \chi_{mn} = \lambda_{jk}, \quad \forall k \quad (4.22)$$

Logo, ao se considerar todos os valores de j e k resulta possível determinar os números χ_{mn} . No apêndice 8.3 obtemos explicitamente um conjunto de matrizes ρ_j no caso que o sistema considerado consiste de um núcleo com um spin quadrupolar $I = 3/2$ (dois q -bits). Também fornecemos a seqüência de pulsos seletivos ideais¹⁸ que implementam tais estados.

¹⁵Se o espaço de Hilbert do sistema que está sendo considerado tem dimensão N então o número de matrizes ρ_j que é conveniente considerar é N^2 .

¹⁶Depois de resolver o conjunto de equações algébricas, do tipo dado na Eq. (3.63), para todos os $\lambda_{j,k}$.

¹⁷Isto resulta da expansão da matriz $\tilde{A}_m \rho_j \tilde{A}_n^\dagger$ na base de matrizes $\{\rho_k\}$.

¹⁸Ou seja, sim levar em conta as imperfeções inerentes aos pulsos RF aplicáveis em laboratório.

4.10 Núcleo quadrupolar *versus* núcleo com spin 1/2

A maior parte dos experimentos de computação quântica por RMN têm sido realizados usando núcleos com spin 1/2, tais como ^1H e ^{13}C . Nestes sistemas, cada q-bit é identificado com um spin nuclear. Por exemplo, a molécula de Clorofórmio (CHCl_3) tem dois q-bits, um do núcleo de carbono e o outro do núcleo de hidrogênio. Um sistema de dois q-bits em RMN alternativo é um núcleo quadrupolar com $I = 3/2$.

Algumas diferenças entre estes dois sistemas são:

- (i) O número de q-bits por núcleo, N , é maior em sistemas quadrupolares;
- (ii) Na RMN de núcleos quadrupolares se tem menor restrição com relação à homogeneidade do campo estático;
- (iii) Desdobramentos quadrupolares são usualmente várias ordens de magnitude maior que os acoplamentos J e, portanto, a resolução espectral é melhor (tipicamente, $\omega_Q/2\pi \approx 10 - 100$ KHz, ao passo que $2\pi J/\hbar \approx 10 - 300$ Hz);
- (iv) A evolução livre de sistemas quadrupolares está representada pelo propagador: $e^{-3i\omega_Q t I_3^2}$ ao passo que no caso de spins 1/2 pelo propagador: $e^{-i2\pi J t I_3^A \otimes I_3^B / \hbar}$;
- (v) O controle da fase de estados individuais em uma superposição não é tão direta para núcleos quadrupolares como para sistemas com spin 1/2;
- (vi) A relaxação quadrupolar é usualmente muito mais rápida que sua contraparte com spin 1/2.
- (vii) Estados pseudo-puros podem ser criados em sistemas com 2 q-bits ($I = 3/2$) sem a necessidade de se fazer médias temporais ou espaciais;

Capítulo 5

Problemas e Dificuldades na CQ-RMN

5.1 A Relaxação na Computação Quântica por RMN

A importância dos tempos de relaxação T_1 e T_2 para a computação quântica via RMN está no fato de que tais processos levam à destruição da coerência entre os estados quânticos, e portanto destroem o processo computacional, que depende crucialmente da manutenção da coerência. Então, um algoritmo quântico poderá ser implementado num computador quântico à base de RMN somente quando o seu tempo de execução for menor do que os tempos de relaxação dos q-bits usados.

Os sistemas de RMN têm tempos de relaxação razoavelmente longos, e assim poderia se esperar que a relaxação não fosse o problema principal. Infelizmente os processos de relaxação não afetam apenas spins individuais, mas também podem afetar estados coerentes de multi-q-bits (coerência quântica múltipla), e tais estados podem ter tempos de relaxação extremamente curtos, mesmo quando os tempos de relaxação do spin individual (T_1 e T_2) sejam razoavelmente longos [68]. Para dois spins 1/2 diretamente acoplados os tempos requeridos para a aplicação de uma porta lógica de dois q-bits é aproximadamente a metade do inverso do acoplamento J correspondente e, como os acoplamentos J se encontram na escala de 5-1000 Hz, portas de dois q-bits podem levar da ordem de 100ms para sua implementação.

Solventes	$T_1(^{13}C)$	$T_1(^1H)$	$T_2(^{13}C)$	$T_2(^1H)$
acetona-d ₆	25	19	0,3	7
ZLI-1167	2	1,4	0,2	0,7

Acima se apresenta alguns tempos de relaxação (em segundos) para $^{13}C^1HCl_3$ em solução isotrópica (acetona deuterada) e num cristal líquido (ZLI-1167).

5.2 Dificuldades Experimentais na CQ via RMN

As principais dificuldades apontadas para a implementação de computadores quânticos via RMN estão ligadas aos seguintes fatores:

- (i) Relaxação rápida;
- (ii) Inomogeneidade dos campos magnéticos;
- (iii) Baixa amplitude do sinal detetado;
- (iv) Número de q-bits pequeno.

O tempo T_2 dá uma escala de tempo dentro da qual algoritmos devem ser executados. Acima deste tempo, os spins perdem totalmente a sua coerência, o que torna impossível prosseguir com o cálculo. O computador deve então retornar ao estado de equilíbrio e reiniciar o ciclo a partir da criação do estado pseudo-puro. Um tempo da ordem de 1 segundo, por exemplo, permitiria a execução de cerca de 1 milhão de operações com pulsos com duração de 1 microsegundo. Quanto mais isolado for o sistema, mais lentamente ele relaxará. Por outro lado, o isolamento completo não é desejável, já que portas lógicas a dois q-bits, como *XOR*, exploram a evolução natural ocasionada pela interação *spin-spin*.

Inomogeneidades em B_0 também levam à perda de coerência na fase da função de onda. Se tivéssemos três valores para o campo estático, após um pulso de $\pi/2$ os spins precessariam com três frequências distintas. O campo estático deve ser homogêneo o suficiente para que o desdobramento causado pela interação *spin-spin* não seja mascarado pelo alargamento da linha.

Os ítems (iii) e (iv) estão relacionados um a outro.

O futuro tecnológico da computação quântica por RMN depende do aumento do número de q-bits disponíveis na amostra. Um computador quântico com 30 q-bits, por exemplo, equivaleria a um computador clássico com cerca de $2^{30} \approx 1$ bilhão *bits*. Porém, à medida em que o número de q-bits aumenta, o sinal de RMN de amostras volumétricas cai exponencialmente em amplitude. Isto ocorre porque os elementos de matriz de ρ_{eq} decaem com 2^N , onde N é o número total de q-bits. Portanto, aumentar o número de q-bits de 3 para 30, equivaleria a uma perda relativa de sinal da ordem de $1/2^{27} \approx 10^{-8}$ que teria de ser compensada de alguma forma, como por exemplo com o aumento da sensibilidade do circuito de detecção. Além disto, a manipulação de 30 q-bits de maneira proveitosa, exigiria um valor de T_2 que pode ser muito difícil de ser alcançado na prática.

Um possível futuro tecnológico para a computação quântica por RMN dependerá do desenvolvimento

de novos materiais fabricados artificialmente que possam servir adequadamente ao propósito, e ao desenvolvimento de novas ferramentas que dependam menos de processos sobre os quais não se controle.

Por exemplo, a primeira proposta de um *chip* quântico, onde as interações quadrupolares entre núcleos vizinhos, num arranjo de núcleos de fósforo inseridos numa base de silício, poderiam ser controlados por portas lógicas implementadas por RMN, foi feita por B. Kane, em 1998, [80]. Posteriormente, uma variação desta idéia, o “computador quântico de RMN totalmente com silício”, foi proposto por Ladd [81].

5.3 Por que, na RMN, não se pode Medir Estados Emaranhados?

Um aspecto do problema da geração e medida do emaranhamento na RMN é apresentado na referência [73], onde é oferecida uma explicação à impossibilidade de medir diretamente um sinal gerado por spins (de moléculas numa solução RMN) num estado emaranhado.

Nessa referência sustenta-se que os resultados experimentais correspondentes a implementações de emaranhamento não podem ser explicados por um modelo clássico para spins que interagem entre si. Um spin clássico está caracterizado por uma orientação definida no espaço tridimensional. A interação entre dois spins é tal que a taxa na qual eles giram em torno de um eixo (o Z) é proporcional ao produto das suas componentes z (rápido se eles estão orientados contrariamente, $|01\rangle$ ou $|10\rangle$, e lento se eles apontam na mesma direção, $|00\rangle$ ou $|11\rangle$). Agora, quando a seqüência de pulsos que cria um estado de Bell é aplicada acontece que os dois spins são levados ao plano transversal XY , onde vão precessar por um tempo específico; logo depois, um deles é levado sobre o eixo Z e o outro é mantido no plano transversal. Classicamente, um spin no plano XY gerará um sinal $V(t)$ que deveria ser detectável pela bobina do receptor. Além disso, se girarmos qualquer dos spins de 90° , então o outro spin também deveria gerar um sinal detectável.

Entretanto, este sinal, que é esperado classicamente, não é observado na prática. Isto é devido a que os spins são realmente quânticos. Durante sua evolução acoplada eles estão numa superposição dos estados $|1\rangle$ e $|0\rangle$, e portanto o sistema acoplado evolui numa superposição de estados $|01\rangle$ e $|10\rangle$ ou $|00\rangle$ e $|11\rangle$. Eles tornam-se emaranhados. Quando um spin é projetado sobre $\pm Z$, por causa deste emaranhamento, ele faz com que o outro spin também seja projetado sobre o eixo Z , e isto acontece de tal maneira que os dois sinais gerados, dos estados $|01\rangle + |10\rangle$ ou $|00\rangle + |11\rangle$, interfiram um com o outro e cancelem todos os

sinais detectáveis $V(t)$.

5.4 O Problema da Separabilidade *versus* Emaranhamento na CQ-RMN

Em 1997, depois do estabelecimento da idéia de estados pseudo-puros (estados com a forma $\rho_\epsilon = (1 - \epsilon)M_d + \epsilon\rho_1$) a partir de estados misturados, por Cory et.al., [71], e Gershenfeld and Chuang, [72], junto com o fato do grande desenvolvimento da técnica de RMN pulsada, foi possível para muitos grupos que usam esta técnica, conseguirem, em um curto intervalo de tempo, realizar vários experimentos para executar portas lógicas, algoritmos e simulações quânticas. Estes experimentais elegeram a RMN como a principal e mais eficiente técnica para testar, em pequena escala, processos formulados dentro do modelo da computação e a informação quântica. Dentre estes avanços experimentais incluíam-se implementações de “estados emaranhados” em moléculas de líquidos. Poucos anos depois, em 1999, no artigo de Braunstein et.al., [114], considerou-se o assunto das condições sob as quais um sistema, preparado num estado *pseudo-puro*, seria separável (a condição é suficiente) ou emaranhado (a condição é apenas necessária). Foram principalmente estes resultados, entre outros apresentados nas referências [115, 116, 117, 118], que deram lugar ao que é considerado, dentro da comunidade da informação quântica, “a solução” ao problema sobre a real capacidade da técnica RMN para conseguir implementar todos os elementos essenciais para a execução de quaisquer processos da computação quântica, dentre eles, e principalmente, o emaranhamento. As considerações usadas nessa referência são de grande generalidade matemática e pode-se verificar a ausência de uma caracterização matemática concreta das características e propriedades das implementações por RMN. Os autores consideram: (i) o fato de que através desta técnica espectroscópica pode-se implementar estados do tipo pseudo-puro, e (ii) o valor numérico do parâmetro ϵ correspondente a uma amostra líquida num experimento de RMN. Com estas duas considerações, e sobre um intervalo de valores numéricos para o parâmetro ϵ , são determinados dois subintervalos¹ bem definidos: um destes define a separabilidade do estado considerado e o outro um possível emaranhamento. Isto permitiu aos autores concluir que os estados implementáveis via RMN, quando N pequeno, são sempre separáveis e que quando N é pelo menos igual a 13 q-bits, a matriz densidade correspondente terá seu ϵ fora da região de separabilidade, mas ainda sem alcançar a região onde garante-se a existência de estados emaranhados.

¹Os quais ficam definidos pelo número N de q-bits no sistema.

Modelos clássicos e realísticos locais para a computação quântica por RMN foram apresentados nas referências [115, 117]. Em particular, e como um exemplo de suas considerações, na ref. [115], ao referir-se ao artigo de Nielsen [103] sobre sua implementação experimental do teleporte de estado quântico sobre distâncias interatômicas numa solução líquida RMN, lê-se:

“Esta afirmação não se sustenta, devido a que, em todas as etapas no experimento, o estado quântico poderia ser interpretado em termos de correlações clássicas entre direções de spins²”.

Milburn et.al., [119] criticam a idéia de que o emaranhamento é a fonte do poder da computação quântica. Nesta referência, os autores reconhecem que a intenção de Schack e Caves, [115] foi a de explicar, sem sucesso, alguns experimentos RMN de estado líquido usando dinâmica clássica, comentando logo que os autores não derivaram uma equação de movimento para o comportamento dos spins nucleares (q-bits), algo que parece razoável se esperar, senão construíram um modelo o qual descreve o efeito das “portas” sobre os estados, e faz algumas previsões que não concordam com o observado.

Por outro lado, Braunstein e Pati [118] ao investigar no algoritmo de busca de Grover o ganho de velocidade e a possível necessidade de emaranhamento nas suas implementações por RMN, concluem que:

“...para mais de dois q-bits, algum grau de emaranhamento é necessário durante a computação completa para poder conseguir uma super-velocidade no algoritmo de Grover sobre um computador RMN de estado líquido³”.

Logo comentam que:

“... o argumento mais equivocado tem sido o de que a eficiência da computação quântica surge unicamente da evolução unitária dos estados quânticos, sendo independente do tipo de estado que seja usado...⁴”.

²This claim cannot be supported, because the quantum state at all stages of the experiment could be interpreted in terms of classical correlations among spin directions.

³...for more than two qubits, some degree of entanglement is necessary during the entire computation in order to obtain any speed-up for Grover's algorithm on a liquid-state NMR machine.

⁴... the most dismissive argument has been that quantum computational efficiency derives *only* from the unitary evolution of quantum states, but is independent of the type of states being used (Lafamme in [120]).

Na mesma referência, eles mostram que:

“... ainda que os valores médios sejam os corretos, para operadores com traço nulo, não pode-se dizer que os computadores quânticos a base de RMN de estado líquido tenham uma boa dinâmica⁵”.

Linden e Popescu, [116], ao questionar o assunto do emaranhamento como uma necessidade para a computação quântica, analisam protocolos de computação quântica os quais permitem resolver problemas clássicos exponenciais apenas com recursos polinomiais. Nessa situação, pergunta-se se o emaranhamento de estados *pseudopuros* é necessário. Na discussão é levada em consideração o ruído afetando os estados nestes processos.

Laflamme, [121], respondeu o resultado da [114] comentando⁶ que, apesar de que nos experimentos de computação quântica implementados através da RMN de estado líquido, o valor de ϵ seja menor do que o valor de ϵ_s , de separabilidade, calculado na [114], isto não significa que o *ensemble* não contenha (ou possa conter) moléculas as quais estejam emaranhadas. Logo, diz:

“Eles sugerem que devido ao fato de a matriz densidade ser separável (...) os experimentos de RMN de estado líquido são simulações de computações quânticas e não verdadeiras computações quânticas. Eu considero que este argumento esteja errado. O ponto importante desconsiderado no argumento é que os experimentos de computação quântica de RMN transformam a matriz densidade inicial para a matriz densidade final; ou seja, a evolução dinâmica é crucial. O poder da computação quântica está em ter transformações eficientes entre as matrizes densidade inicial e final⁷”.

e que:

⁵... despite the correct expectation values being accessible for traceless operators, we cannot say that liquid-state NMR quantum computers have good dynamics.

⁶veja também a referencia [52].

⁷They suggest that because the density matrix are separable (...) the liquid state NMR experiments are simulations of quantum computations rather than true quantum computation. I believe that this argument is wrong. The important point missed in their arguments is that the NMR quantum computation experiments transform initial density matrices to final density matrices: i.e. the dynamical evolution is crucial. The power of quantum computation is to have efficient transformation between initial and final density matrices.

“Em experimentos tais como RMN-GHZ, correção quântico de erro ou teleporte quântico, e em algoritmos de Grover ou Deutsch-Josza os operadores unitários não são fatoráveis⁸”.

Long et.al., [122, 123] consideram, entre outras coisas, e a diferença da hipótese feita na referencia [114], que: (i) a matriz densidade não descreve o estado de uma partícula individual num *ensemble*, mas se o estado de uma partícula “representativa” do mesmo e, (ii) que o emaranhamento é uma propriedade do estado quântico de uma partícula, como uma molécula no caso da RMN. Assim, a separabilidade de uma matriz densidade, como considerada em (i), não pode dar informação ao respeito das propriedades de emaranhamento nas moléculas no *ensemble*. Segundo Long:

“O coeficiente ϵ dos estados *pseudopuros* não determinan a propriedade de emaranhamento do *ensemble*. Este é unicamente uma medida da intensidade do sinal do estado requerido⁹”.

Kessel e Ermakov, [124], fazem uma discussão acerca da aparente incapacidade da RMN para implementar estados emaranhados. Ali, considera-se:

“... em certos experimentos de RMN existe emaranhamento [...] e o problema da separabilidade pode surgir durante a interpretação do sinal de leitura gerada pela amostra¹⁰”.

Mais recentemente, Yu et.al., [125] estuda também o assunto do emaranhamento de estados misturados na RMN, diretamente sobre o estado termal, sem considerar o esquema de estados pseudopuros.

⁸In the experiments such as NMR-GHZ, quantum error correction or quantum teleportation, Grover or Deutsch-Josza the unitary operators are not factorizable.

⁹The coefficient ϵ of the effective pure state does not determine the entanglement property of an ensemble. It is only a measure of the intensity of the signals of the required state.

¹⁰..that in suitable NMR experiments there is an entanglement in full extent and that the separability problem can arise during interpretation of the whole sample readout signal.

Capítulo 6

Resultados e Discussões

6.1 Resultados

6.1.1 Emaranhamento Quântico em Misturas Estatísticas

Como vimos no capítulo 2, o requisito essencial para criar estados emaranhados num sistema composto de várias partículas consiste em que entre as componentes desse sistema tem que se produzir, em algum momento, algum tipo de interação. Um problema posterior é a caracterização e medida desses estados. No caso específico dos estados de spins em moléculas de amostras líquidas usadas na Computação Quântica (CQ) por RMN, esta caracterização foi estabelecida, em 1999, por Braunstein et.al., [114], poucos anos depois da aparição dos primeiros artigos sobre implementações experimentais de portas e algoritmos quânticos através da RMN.

Como foi comentado no Cap. 5, na Ref. [114] foram estabelecidos limites (para valores de ϵ) com os quais uma matriz ρ_ϵ , com a forma:

$$\rho_\epsilon = (1 - \epsilon)\mathbf{1}/2^N + \epsilon\rho_1, \quad (6.1)$$

chamada de *pseudo-pura*, e onde $\mathbf{1}$ é a matriz densidade no espaço de N q-bits, resulta separável. Aqui a matriz ρ_1 é uma matriz densidade arbitrária. Usando o resultado de que toda matriz densidade pode ser expandida numa base de matrizes de Pauli:

$$\rho = \frac{1}{2^N} c_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \sigma_{\alpha_1} \otimes \dots \otimes \sigma_{\alpha_N} \quad (6.2)$$

onde $\alpha_s = 0, 1, 2, 3$, com a soma sobre índices repetidos e $c_{0\dots 0} = 1$, devido à condição de normalização, e com os outros coeficientes tendo valores no intervalo $-1 \leq c_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \leq 1$, Braunstein et.al. [114] estabeleceram que, no caso de 2 q-bits e para o valor mínimo dos coeficientes $c_{\alpha_1, \alpha_2} = -1$, o limite $\epsilon \leq 1/15$ determina a região abaixo da qual ρ_ϵ é separável. A generalização para um número arbitrário,

N , de q-bits leva a $\epsilon \leq 1/4^N$. Por outro lado, na medida em que tipicamente $\epsilon \approx 10^{-5}$ em experimentos de RMN de estado líquido a temperatura ambiente, os autores concluem que não menos de 13 q-bits seriam necessários para que uma matriz ρ_ϵ ‘esteja fora’ da região de separabilidade. A partir deste resultado, juntamente com as dificuldades já mencionadas no na seção 3.9 do capítulo 3, consideram que a técnica de computação quântica por RMN em amostras líquidas parece incapaz de implementar aqueles algoritmos quânticos que precisam do emaranhamento e que esta técnica permanecerá unicamente como um modelo demonstrativo das possibilidades para a manipulação coerente dos estados quânticos em sistema com poucos q-bits.

Agora, na medida em que a matriz densidade ρ_1 em (6.1) é arbitrária, pode-se aplicar o raciocínio no caso mais simples: $N = 1$ (naturalmente, este não envolve emaranhamento!). Considerando $c_{\alpha_1} = -1$, consegue-se:

$$\rho_{N=1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1+i \\ -1-i & 2 \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

Vemos que esta matriz satisfaz a condição $\text{Tr}(\rho) = 1$, mas seus autovalores são $\lambda_1 = \frac{1+\sqrt{3}}{2}$ e $\lambda_2 = \frac{1-\sqrt{3}}{2}$. Por tanto, $\lambda_2 < 0$, e a matriz ρ_1 , na Eq. (6.1), não é uma matriz densidade; embora seja assim considerada em [114]. O mesmo pode ser observado para o caso $N = 2$, com $c_{\alpha_1, \alpha_2} = -1$, e $N = 3$, com $c_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3} = -1$, cujas matrizes respectivas são:

$$\rho_{N=2} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -2 & -2+2i & -2+2i & 2i \\ -2-2i & 2 & -2 & 0 \\ -2-2i & -2 & 2 & 0 \\ -2i & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

também satisfazem a condição de normalização $\text{Tr}(\rho) = 1$, mas com autovalores $\lambda_1 = \frac{-2+2\sqrt{3}}{4}$, $\lambda_2 = \frac{-2-2\sqrt{3}}{4} < 0$, $\lambda_3 = \lambda_4 = 1$, e $N = 3$,

$$\rho_{N=3} = \frac{1}{8} \times \begin{pmatrix} -6 & -4+4i & -4+4i & 4i & -4+4i & 4i & 4i & 2+2i \\ -4-4i & 2 & -4 & 0 & -4 & 0 & -2+2i & 0 \\ -4-4i & -4 & 2 & 0 & -4 & -2+2i & 0 & 0 \\ -4i & 0 & 0 & 2 & -2-2i & 0 & 0 & 0 \\ -4-4i & -4 & -4 & -2+2i & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -4i & 0 & -2-2i & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ -4i & -2-2i & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 2-2i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

com $\text{Tr}(\rho) = 1$, e autovalores $\lambda_1 = \frac{-8+6\sqrt{3}}{8}$, $\lambda_2 = \frac{-8-6\sqrt{3}}{8} < 0$, $\lambda_3 = \lambda_4 = \lambda_5 = \frac{4+2\sqrt{3}}{8}$, $\lambda_6 = \lambda_7 = \lambda_8 = \frac{4-2\sqrt{3}}{8}$. Na medida em que uma matriz física deve ser positiva [127], nenhuma das matrizes de acima pode ser considerada para representar estados de um sistema físico.

6.1.2 Determinando intervalos válidos para a região de separabilidade

Para achar intervalos válidos para a região de separabilidade, consideremos um exemplo onde todos os coeficientes de uma matriz ρ_1 , na Eq. (6.2), são iguais a uma constante $c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} = c$, e vamos impor que $\lambda \geq 0$ para os autovalores da matriz resultante ρ_ϵ . Isto leva aos seguintes intervalos: para $N = 1$, $-0,58 \leq c \leq 0,58$; for $N = 2$, $-0,15 \leq c \leq 0,33$; para $N = 3$, $-0,05 \leq c \leq 0,15$, e assim por diante. Este caso define apenas um possível conjunto de valores para os coeficientes, mas será útil para derivar um resultado importante logo abaixo. Notar que, para $N = 2$ e $c_{\alpha_1, \alpha_2} = c$, os intervalos $-1 \leq c < -0,15$ e $0,33 < c \leq 1$ definem infinitas matrizes não-físicas no interior do intervalo $-1 \leq c \leq 1$.

Com os novos intervalos, os autovalores para o caso de $N = 2$, para $c = -0,15$, são todos positivos e ρ satisfaz $\text{tr}(\rho) = 1$:

$$\{\lambda_i\} = \{0,007596; 0,267404; 0,362499; 0,362500\}$$

O mesmo é verdade para $N = 3$ e $c = -0,05$:

$$\{\lambda_i\} = \{0,003798; 0,133702; 0,165401; 0,165401; 0,165401; \\ 0,122099; 0,122099; 0,122099\}$$

Notar que, com exceção do caso de $N = 1$, os intervalos são *assimétricos*. Se escrevermos os intervalos na forma $-1/A_N \leq c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \leq 1/B_N$ (onde, tendo em conta os resultados acima, $(A_2, B_2) = (6,67; 3,03)$, $(A_3, B_3) = (20,00; 6,67)$), aplicando o procedimento como em [114] achamos que o limite inferior para ϵ , no caso de $N = 2$, seria $\epsilon \leq A_2/15 = 0,44$, maior que o previo de $\epsilon \leq 1/15$ and, no caso de $N = 3$, $\epsilon \leq A_3/63 = 0,32$, também maior que o prévio de $\epsilon \leq 1/64$. Estes resultados serão importantes mais adiante, quando considerarmos que um experimento de RMN pode ser visto como um canal ruidoso de despolarização¹. Nesse caso, pode-se calcular a fidelidade de emaranhamento² correspondente e determinar o valor do parametro ϵ para o qual a fidelidade toma um valor de 0,5 (que define a fronteira da transmissão -através do canal- com "recursos" clássicos ou puramente quânticos).

Por outro lado, já que tipicamente $\epsilon \approx 10^{-5}$ em experimentos de RMN de estado líquido à temperatura ambiente, a conclusão principal em [114] é que nenhuma implementação do emaranhamento quântico teria sido de fato alcançada nos experimentos de RMN, uma conclusão a qual foi revisitada por outros

¹Veja a seção 6.1.4.

²Veja a seção 2.4.4 do capítulo 2.

autores [121, 122, 123, 124, 119, 125] e ampliada por outros [115, 116, 117, 118, 120]. Uma observação importante é que em [114] os limites de separabilidade são implicitamente assumidos serem válidos independentemente de ρ_1 .

Vamos ilustrar o problema considerando um estado pseudo-puro que já foi várias vezes implementado nos laboratórios:

$$\rho_\epsilon = \frac{1-\epsilon}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \epsilon \begin{pmatrix} 0,5 & 0 & 0 & 0,5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,5 & 0 & 0 & 0,5 \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

onde supomos que $\epsilon = 2 \times 10^{-5}$. Vamos aplicar o critério de Peres [31] para mostrar que esta matriz é separável. Para fazer isso, o critério exige que se expanda a matriz ρ_ϵ numa base de matrizes densidade.

Em nosso caso, numa base de produtos tensoriais $\{\rho_{\alpha_1} \otimes \rho_{\alpha_2}\}$. Tomemos as matrizes abaixo:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{pmatrix}; \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0,5 & -0,5i \\ 0,5i & 0,5 \end{pmatrix}; \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} 0,5 & 0,5 \\ 0,5 & 0,5 \end{pmatrix}; \quad \rho_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

Depois de efetuar a operação de transposta parcial [31], obtém-se para a matriz resultante os seguintes autovalores: $\lambda_1 = 0,249985$; $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = 0,250005$.

Já que o critério de Peres constitui (em nosso caso) uma condição necessária e suficiente de separabilidade [31, 32] (que todos os autovalores da matriz transposta parcial de ρ_ϵ sejam não-negativos), fica claro que a matriz ρ_ϵ é separável, ainda que ρ_1 é emaranhada. Situações como estas são as consideradas na literatura da computação quântica por RMN. A seguir, vamos discutir as condições usualmente consideradas sobre a matriz ρ_1 .

6.1.3 Um requerimento mais geral para definir matrizes físicas

No apêndice 8.4 consideramos a matriz densidade de equilíbrio, no regime de altas temperaturas, correspondente a um sistema de dois spins 1/2: o spin nuclear do 1H e o do ^{13}C . Considerando suas frequências de ressonância, num campo de 11.74 tesla, com valores aproximados de $\omega_0^{(^1H)} = 500$ MHz e $\omega_0^{(^{13}C)} = 126$ MHz, foi obtida a matriz:

$$\rho_1^{eq} = \begin{pmatrix} 5/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 687/1252 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -61/1252 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/4 \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

Os autovalores desta matriz são $\lambda_1 = -0,75$; $\lambda_2 = -0,0487$; $\lambda_3 = 0,549$; $\lambda_4 = 1,25$, e, como vemos, alguns deles são negativos.

Com base neste resultado, pode-se perguntar quais os efeitos que, sobre uma matriz ρ_ϵ , teria considerar explicitamente matrizes ρ_1 (desta vez de estados *pseudo-puros*) com autovalores negativos? E, quão negativos poderiam ser estes valores?.

Pode-se ver facilmente que, sob o requerimento que ρ_1 seja hermitiana e com traço igual a um, fica garantido que a ρ_ϵ seja também hermitiana e com traço igual a um. Agora, para que a ρ_ϵ tenha autovalores não-negativos *não* é necessário que a ρ_1 tenha autovalores não negativos. Em outras palavras, não é necessário que ρ_1 seja uma matriz densidade.

Se não vejamos. Impondo autovalores (AV) não-negativos para ρ_ϵ , temos:

$$AV\{\rho_\epsilon\} = AV\{(1 - \epsilon)M_d + \epsilon\rho_1\} \geq 0 \quad (6.9)$$

onde $M_d = \mathbf{1}/2^N$. Já que $[M_d + \rho_1, \rho_1] = 0$, $[M_d + \rho_1, M_d] = 0$ e $[\rho_1, M_d] = 0$ os AV da soma são iguais à soma dos AV:

$$AV\{\rho_1\} \geq -\frac{1 - \epsilon}{\epsilon 2^N} \quad (6.10)$$

ou seja, para os valores de ϵ usuais na RMN de estado líquido, $\epsilon \approx 10^{-5}$, o valor absoluto dos autovalores de ρ_1 podem ser realmente muito grandes. Assim, sob estas condições, uma matriz ρ_ϵ resulta ser uma "boa" matriz física, isto é, uma matriz densidade.

Conseqüentemente, o conjunto de matrizes densidade ρ_ϵ associadas a matrizes ρ_1 , ajustando-se à condição acima, constitui uma família de matrizes distintas daquela considerada em [114] e, portanto, define um conjunto de possíveis estados físicos para o sistema que não foi considerado naquela referência. A seguir vamos considerar a situação onde a ρ_1 , em geral, não é uma matriz densidade, mas fica restrita à condição acima, a Eq. (6.10). Uma observação de muita utilidade para nós é a de que o procedimento usado na referência [114] para determinar o limite inferior de separabilidade para as matrizes ρ_ϵ é válido *independentemente* do tipo da matriz ρ_1 que seja considerada (desde que ela seja hermitiana e com traço igual a 1).

Para que isto que acabamos de dizer seja mais evidente, vamos nos concentrar no caso de $N = 2$ q-bits.

Um estado pseudo-puro para este caso é expresso como:

$$\rho_\epsilon = (1 - \epsilon)\frac{\mathbf{1}}{4} + \epsilon\rho_1 \quad (6.11)$$

Vamos usar o resultado $d_{\alpha_1, \alpha_2} = \epsilon c_{\alpha_1, \alpha_2}$ (ver apêndice 8.5), onde c_{α_1, α_2} é qualquer um dos coeficientes da ρ_1 na base de matrizes de Pauli, e d_{α_1, α_2} o correspondente para a matriz ρ_ϵ . Para simplificar, vamos

tomar o caso especial quando todos os coeficientes são iguais entre si, com valor $c_{\alpha_1, \alpha_2} = c$, e com isto $d_{\alpha_1, \alpha_2} = d = \epsilon c$. Como pode-se ver, não se está impondo nenhuma restrição sobre a matriz ρ_1 , apenas usam-se os coeficientes que a definem na base de matrizes de Pauli.

Agora, vamos considerar o seguinte intervalo de valores de c , que definem distintas matrizes ρ_1 :

$$\frac{-1}{A_2} \leq c \leq \frac{1}{B_2} \quad (6.12)$$

Sendo A_2 e B_2 números positivos cujos valores estão limitados pela condição de que a ρ_ϵ seja uma matriz densidade válida. Ao escolher o valor mínimo de $c = -1/A_2$, estamos definindo uma matriz ρ_1 particular e o limite inferior a ser determinado será válido só para o conjunto de matrizes ρ_ϵ que possuem aquele ρ_1 em comum, apenas diferenciando-se pelo valor de seu ϵ . Colocando-o no coeficiente de menor valor numérico que a matriz ρ_ϵ possui na sua expansão na base sobre-completa, dada pela expressão Eq.(4) da ref. [114], obtemos:

$$\frac{1}{4}(\omega_i \omega_j + d_{i0} \omega_j + \omega_i d_{oj} + d_{ij}) = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{9} + \frac{\epsilon c}{3} + \frac{\epsilon c}{3} + \epsilon c \right) \quad (6.13)$$

com $\omega_i = 1/3$, $i = 1, 2, 3$, e impondo que este seja não negativo³, obtemos $\epsilon \leq A_2/15$, de onde como caso particular, quando $A_2 = 1$, se obtém o resultado $\epsilon \leq 1/15$ obtido na Ref. [114].

Escolhendo o valor de A_2 tal que $1/A_2 = 6666,66$, obtemos que o limite inferior de separabilidade (para as matrizes densidade ρ_ϵ correspondentes) é dado por $\epsilon \leq 10^{-5}$. Logo, uma matriz ρ_ϵ , com $\epsilon \approx 2 \times 10^{-5}$, como é característico em computação quântica por RMN, fica *fora* da região de separabilidade⁴, mas, sob aplicação do critério de Peres, resulta ser uma matriz separável. Aqui é importante salientar que, em geral, as três coisas que a seguir vamos fazer referência são distintas⁵: (i) os possíveis estados assinalados a um sistema de spins nucleares, (ii) os possíveis estados implementáveis por RMN e, finalmente, (iii) os estados observáveis (que podem ser medidos) na RMN.

As técnicas da RMN transformam estados físicos de spin nuclear via pulsos de RF, a partir do estado de equilíbrio térmico. Seria uma matriz ρ_ϵ , construída a partir de uma ρ_1 ‘não-física’, implementável por RMN?

Vejam agora as matrizes ρ_1 , ρ_ϵ , com um dado ϵ , e os autovalores correspondentes à situação apresentada acima:

$$\rho_1 =$$

³Com o qual todos os outros coeficientes da expansão serão também automaticamente não negativos.

⁴Esta é uma situação que não aparece quando exige-se que a ρ_1 seja uma matriz densidade.

⁵Podendo acontecer em alguns casos que estas coincidam.

$$\begin{pmatrix} -4999,745 & -3333,33 + 3333,33i & -3333,33 + 3333,33i & 3333,33i \\ -3333,33 - 3333,33i & 1666,915 & -3333,33 & 0 \\ -3333,33 - 3333,33i & -3333,33 & 1666,915 & 0 \\ -3333,33i & 0 & 0 & 1666,915 \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

a qual possui autovalores $\lambda_1 = -10773,24192$, $\lambda_2 = 773,7519184$, $\lambda_3 = 5000,244998$, $\lambda_4 = 5000,244999$.

Donde, colocando $\epsilon = 0,00002$ em Eq.(6.11) obtemos a matriz:

$$\rho_\epsilon = \begin{pmatrix} 0,15 & -0,0666 + 0,0666i & -0,0666 + 0,0666i & 0,0666i \\ -0,0666 - 0,0666i & 0,2833 & -0,0666 & 0 \\ -0,0666 - 0,0666i & -0,0666 & 0,2833 & 0 \\ -0,0666i & 0 & 0 & 0,2833 \end{pmatrix} \quad (6.15)$$

o qual tem autovalores $\lambda_1 = 0,034530$, $\lambda_2 = 0,265470$, $\lambda_3 = 0,3499999$, $\lambda_4 = 0,3499999$, e portanto é uma matriz densidade. Esta matriz poderia representar um estado pseudo-puro. Este exemplo mostra que existem situações interessantes, além de aquelas consideradas na Ref. [114], que poderiam levar à existência (ou não) de matrizes ρ_ϵ emaranhadas de poucos q-bits. É bom lembrar que aqui estamos considerando apenas a situação onde todas as matrizes ρ_1 são definidas, na base de matrizes de Pauli, por coeficientes todos iguais, ficando de fora todas as outras possibilidades.

Para avançarmos um pouco mais com este estudo sobre a *possibilidade* de existirem matrizes ρ_ϵ emaranhadas com poucos q-bits, temos o seguinte resultado numérico⁶: Sejam os valores⁷ $c_{\alpha_1, \alpha_2} = c = -6666,66$, ficando definida a matrix ρ_1 . A matriz ρ_ϵ correspondente, e a sua transposta parcial de Peres (TPP) dependem, logicamente, apenas do valor do parâmetro ϵ , pois este não foi definido. Mudando o valor do ϵ acha-se, em geral, que todos os autovalores das duas matrizes coincidem, mas existem determinados valores do ϵ onde esta situação muda. Uma situação interessante aparece com $\epsilon = 0,00002320510404$, para a qual o único autovalor negativo da matriz TPP é $\lambda = -5 \times 10^{-9}$. No entanto, o único autovalor negativo da ρ_ϵ é $\epsilon = -3 \times 10^{-9}$, um pouco maior que aquele da matriz TPP.

A seguir é dada a matriz ρ_ϵ , a qual na base de matrizes de Pauli vem definida pelos coeficientes $d = c\epsilon = -0,1547005389$. É ela:

$$\rho_\epsilon = \begin{pmatrix} 0,1339745963 & -a + ai & -a + ai & ai \\ -a - ai & 0,2886751351 & -a & -b + bi \\ -a - ai & -a & 0,2886751351 & -b + bi \\ -ai & -b - bi & -b - bi & 0,2886751350 \end{pmatrix} \quad (6.16)$$

⁶Os valores numéricos que são mostrados abaixo foram obtidos usando um procedimento numérico, implementado no *Maple*, do tipo tentativa-erro, com o interesse de achar exemplos ilustrativos que, no contexto adotado nesta seção, poderão mostrar outras matrizes que sejam de interesse no problema do emaranhamento na RMN.

⁷Lembrar que, como foi visto na Eq.(6.12) nesta seção, os valores dos coeficientes $c_{\alpha_1, \alpha_2} = c$ não estão restritos ao intervalo $[-1,+1]$.

onde⁸ $a = 0.07735026946$ e $b = 0.1 \times 10^{-10}$. Os autovalores são $\lambda_1 = -0.3 \times 10^{-9}$, $\lambda_2 = 0.2679491931$, $\lambda_3 = 0.3660254046$, $\lambda_4 = 0.3660254050$, e a matriz TPP da matriz ρ_ϵ (com $\epsilon = 0.00002320510404$ e ρ_1 dada acima) vem dada por:

$$TPP(\rho_\epsilon) = \begin{pmatrix} 0.1339745962 & -p + pi & -a - ai & -a \\ -p - pi & 0.2886751350 & -ai & -b - bi \\ -a + ai & ai & 0.2886751350 & 0 \\ -a & -b + bi & 0 & 0.2886751349 \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

onde $p = 0.07735026945$. Os autovalores são $\lambda_1 = -0.5 \times 10^{-9}$, $\lambda_2 = 0.2679491929$, $\lambda_3 = 0.3660254046$, $\lambda_4 = 0.3660254049$. Notar que, neste caso, o critério de Peres não pode fornecer nenhuma caracterização para a matriz ρ_ϵ na medida em que esta não é uma matriz densidade (possui pelo menos um autovalor negativo).

Este resultado sugere a possibilidade de situações que possam representar um “deslocamento” dos valores numéricos dos dois autovalores considerados na situação de acima, de maneira que o menor autovalor da ρ_ϵ seja positivo ou zero e um autovalor da matriz TPP fique sendo negativo, o que significaria (hipoteticamente falando e, neste caso, sendo válida a aplicação do critério de Peres) estar diante de um estado emaranhado com valor de ϵ muito pequeno para um sistema de 2 q-bits. Mas, até aqui, os nossos resultados não permitem concluir num sentido ou no outro.

6.1.4 Um experimento de RMN como um canal ruidoso de despolarização

Agora vamos estudar a situação onde supõe-se que um estado pseudo-puro, numa implementação experimental de RMN, possa ser considerado como a caracterização matemática de um canal ruidoso de despolarização, [128]. Isto vai nos permitir calcular a fidelidade de emaranhamento no caso mais simples de uma matriz ρ_ϵ correspondente a um sistema com 2 q-bits. Seja a operação quântica:

$$E(\rho) = p \frac{\mathbf{1}_4}{4} + (1 - p)\rho \quad (6.18)$$

⁸Nos calculos usando o *Maple* achamos que um número da ordem de $0,1 \times 10^{-9}$ equivale ao zero. Isto foi concluído depois de se obter, para os autovalores de várias matrizes, expressões do tipo $\lambda = a + b \times 10^{-10}i$, onde i é o número imaginário, e os números a e b tem até 10 casas decimais.

com $\mathbf{1}_4$ a matriz identidade 4×4 , e onde vamos considerar que $p \equiv 1 - \epsilon$, assim coincidindo formalmente com a expressão para um estado pseudo-puro. Por outro lado, usando o resultado:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{1}_4}{4} = & \frac{1}{16}(\rho + (\sigma_1 \otimes \sigma_1)\rho(\sigma_1 \otimes \sigma_1) + (\sigma_1 \otimes \sigma_2)\rho(\sigma_1 \otimes \sigma_2) + (\sigma_1 \otimes \sigma_3)\rho(\sigma_1 \otimes \sigma_3) + \\ & + (\sigma_2 \otimes \sigma_1)\rho(\sigma_2 \otimes \sigma_1) + (\sigma_2 \otimes \sigma_2)\rho(\sigma_2 \otimes \sigma_2) + (\sigma_2 \otimes \sigma_3)\rho(\sigma_2 \otimes \sigma_3) + (\sigma_3 \otimes \sigma_1)\rho(\sigma_3 \otimes \sigma_1) + \\ & + (\sigma_3 \otimes \sigma_2)\rho(\sigma_3 \otimes \sigma_2) + (\sigma_3 \otimes \sigma_3)\rho(\sigma_3 \otimes \sigma_3) + (\mathbf{1} \otimes \sigma_1)\rho(\mathbf{1} \otimes \sigma_1) + (\mathbf{1} \otimes \sigma_2)\rho(\mathbf{1} \otimes \sigma_2) + \\ & + (\mathbf{1} \otimes \sigma_3)\rho(\mathbf{1} \otimes \sigma_3) + (\sigma_1 \otimes \mathbf{1})\rho(\sigma_1 \otimes \mathbf{1}) + (\sigma_2 \otimes \mathbf{1})\rho(\sigma_2 \otimes \mathbf{1}) + (\sigma_3 \otimes \mathbf{1})\rho(\sigma_3 \otimes \mathbf{1})). \end{aligned}$$

que, logo que substituído na Eq.(6.18) se pode identificar os elementos de operação:

$$\begin{aligned} E_1 &= \sqrt{1 - \frac{15(1-\epsilon)}{16}} \mathbf{1}_4, \quad E_2 = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_1 \otimes \sigma_1, \quad E_3 = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_1 \otimes \sigma_2 \\ E_4 &= \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_1 \otimes \sigma_3, \quad E_5 = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_2 \otimes \sigma_1, \quad E_6 = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_2 \otimes \sigma_2 \\ E_7 &= \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_2 \otimes \sigma_3, \quad E_8 = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_3 \otimes \sigma_1, \quad E_9 = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_3 \otimes \sigma_2 \\ E_{10} &= \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_3 \otimes \sigma_3, \quad E_{11} = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \mathbf{1}_4 \otimes \sigma_1, \quad E_{12} = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \mathbf{1}_4 \otimes \sigma_2 \\ E_{13} &= \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \mathbf{1}_4 \otimes \sigma_3, \quad E_{14} = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_1 \otimes \mathbf{1}_4, \quad E_{15} = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_2 \otimes \mathbf{1}_4 \\ E_{16} &= \sqrt{\frac{1-\epsilon}{16}} \sigma_3 \otimes \mathbf{1}_4 \end{aligned}$$

Vamos agora considerar uma matriz ρ_1 que, na base de matrizes de Pauli, fica definida pelos coeficientes $c_{\alpha_1, \alpha_2} = -1$, a qual foi usada na Ref. [114]

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} -0,5 & -0,5 + 0,5i & -0,5 + 0,5i & 0,5i \\ -0,5 - 0,5i & 0,5 & -0,5 & 0 \\ -0,5 - 0,5i & -0,5 & 0,5 & 0 \\ -0,5i & 0 & 0 & 0,5 \end{pmatrix} \quad (6.19)$$

Com isto, a fidelidade de emaranhamento resulta ser:

$$F = \sum_{k=1}^{16} |tr(\rho E_k)|^2 = \sum_{k=1}^{16} |tr(\{(1-\epsilon)\frac{\mathbf{1}_4}{4} + \epsilon\rho_1\}E_k)|^2 = \frac{1}{16}(1 + 15\epsilon) + 15\frac{(1-\epsilon)}{16} = 1 \quad (6.20)$$

Ou seja, independente do ϵ . Na verdade, aqui a "fidelidade" não tem significado, pois trata-se de uma matriz não-física como já foi mostrado antes. Por outro lado, quando considerarmos a matriz física definida

pelos coeficientes $c = -0,15$:

$$\rho_1' = \begin{pmatrix} 0,1375 & -0,0750 + 0,0750i & -0,0750 + 0,0750i & 0,0750i \\ -0,0750 - 0,0750i & 0,2875 & -0,0750 & 0 \\ -0,0750 - 0,0750i & -0,0750 & 0,2875 & 0 \\ -0,0750i & 0 & 0 & 0,2875 \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

obtemos para o processo, definido por ρ_1' , a fidelidade:

$$F(\epsilon) = 0,0836 + 0,9164\epsilon$$

donde resulta o valor $F = 0,5$, para $\epsilon \approx 0,45$, que é muito próximo do limite inferior de separabilidade de $0,44$ encontrado antes. Este resultado *podia* estar indicando que seria possível obter o valor do limite inferior de separabilidade (para o conjunto de matrizes ρ_ϵ associadas com a matriz ρ_1) diretamente da função fidelidade de emaranhamento.

Se agora consideramos a matriz correspondente ao estado gato:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0,5 & 0 & 0 & 0,5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,5 & 0 & 0 & 0,5 \end{pmatrix} \quad (6.22)$$

e calcularmos a fidelidade de emaranhamento, para um certo proceso ruidoso definido em termos desta ρ_1 , obtemos:

$$F(\epsilon) = 0,25 + 0,75\epsilon \quad (6.23)$$

e conseguimos o valor de $0,5$ para a fidelidade quando $\epsilon = 0,33$. Aqui, este valor de $\epsilon = 0,33$ coincide com o valor do limite superior, dado na Ref. [114], que garante a existência de estados emaranhados.

6.1.5 Dada uma matriz ρ_ϵ , existe um único limite inferior para ϵ ?

Em [114] um limite inferior de separabilidade para matrizes densidade do tipo *pseudo-puro* foi obtido considerando os valores de $c_{\alpha_1, \dots, \alpha_n} = c = -1$ para todos os coeficientes independentes⁹ da matriz ρ_1 . No início deste capítulo foi mencionado que para se determinar tal limite inferior usou-se uma base sobre-completa, de maneira que a matriz ρ_ϵ foi representada através de uma expansão em termos dos elementos desta base.

⁹Na base de matrizes de produtos de Pauli.

A seguir vamos considerar duas matrizes densidade pseudo-puras, ρ_ϵ e $\rho_{\epsilon'}$, que possuem a mesma ρ_1 mas distintos valores do parâmetro¹⁰ ϵ :

$$\rho_\epsilon = (1 - \epsilon)\frac{\mathbf{1}}{2^n} + \epsilon\rho_1 \quad (6.24)$$

$$\rho_{\epsilon'} = (1 - \epsilon')\frac{\mathbf{1}}{2^n} + \epsilon'\rho_1 \quad (6.25)$$

sendo que $0 < \epsilon < 1$ e $0 < \epsilon' < 1$. Fisicamente, esta poderia ser a situação correspondente a dois valores distintos de campo magnético, por exemplo. Como estamos considerando que ϵ e ϵ' são distintos então deve necessariamente existir um número a , entre 0 e 1, tal que: $\epsilon' = a\epsilon$. Multiplicando a Eq.(6.24) por ‘ $-a$ ’ e somando-a com a Eq.(6.25) obtemos a matriz:

$$\rho_{\epsilon'} = (1 - a)\frac{\mathbf{1}}{2^n} + a\rho_\epsilon \quad (6.26)$$

Ou seja, resulta uma matriz que também tem a forma de uma pseudo-pura: com “a” no lugar de “ ϵ ” e com a matriz ρ_ϵ no lugar de uma matriz ρ_1 . Agora, é interessante que o método aplicado na Ref. [114], para determinar o limite inferior de separabilidade, pode ser aplicado também sobre esta matriz¹¹. Porém, como a matriz $\rho_{\epsilon'}$, na Eq.(6.25), com $\epsilon' = a\epsilon$, tem a ρ_1 no seu segundo termo, o limite inferior fica definido apenas pelos coeficientes desta matriz. Por outro lado, o limite inferior de $\rho_{\epsilon'}$, dada na Eq.(6.26), é determinado pelos coeficientes da matriz ρ_ϵ os quais, na base de Pauli, são dados por¹² ϵc . Logo, o limite inferior de separabilidade para as matrizes ρ_ϵ , além de não ser único, não só depende da matriz ρ_1 escolhida, mas também do valor do ϵ .

6.1.6 ‘Fidelidade de emaranhamento’ de matrizes não físicas

Consideremos uma matriz que resulta de uma pequena modificação na matriz corresponsente ao estado gato, Eq.(6.22), como indica-se a seguir,

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0,45 & 0 & 0 & 0,5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,5 & 0 & 0 & 0,55 \end{pmatrix} \quad (6.27)$$

¹⁰O intervalo de valores do parâmetro ϵ vem dado por $[0,1]$.

¹¹Já mencionamos que esse método é independente da natureza da matriz colocada no segundo termo de uma matriz pseudo-pura.

¹²Veja o apêndice 8.5.

Esta matriz tem $\text{tr}(\rho_1) = 1$ e autovalores iguais a: $\lambda_1 = -0,00249$; $\lambda_2 = 1,00249$; $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$. Assim, temos que esta ρ_1 não é uma matriz física, no entanto, a ‘fidelidade de emaranhamento’ que resulta desta matriz é:

$$F(\epsilon) = 0,25125 + 0,74875\epsilon \quad (6.28)$$

a qual comporta-se (ao tomar as duas primeiras casas decimais) de maneira semelhante à fidelidade correspondente ao estado gato, como se pode ver na Eq.(6.23).

Isto significa que, olhando apenas para a fidelidade de emaranhamento, não podemos distinguir entre uma matriz densidade e uma matriz não física. Devemos levar em conta que esta função fidelidade pode ser calculada a partir de medidas em laboratório, onde o problema da resolução experimental está sempre presente.

Aqui se poderia argumentar que é suficiente tomografar a matriz ρ_1 para decidir se a matriz é física ou não e, em conseqüência, saber se a função fidelidade está medindo o emaranhamento no estado. Neste ponto é importante perceber que a vigência desta função fidelidade como uma medida de emaranhamento apoia-se implicitamente na hipótese fundamental considerada no processo de tomografia de estado: que a matriz que vai ser tomografada é uma matriz densidade. Ou seja, não é verificado no laboratório que as matrizes implementáveis são matrizes densidade, senão se faz uso disso para construir a matriz. De maneira que, se o processo de tomografia de estado não exigiria que a matriz a ser tomografada seja uma matriz densidade (senão, apenas, que seja hermitiana e com traço igual a um), então, parece razoável pensar, que as matrizes ao serem medidas mostrariam-se “mais ou menos” matrizes densidade¹³. Nesse caso, não poderíamos estar seguros que através da avaliação dessa função se estaria medindo alguma quantidade associada com o emaranhamento.

6.1.7 Um estudo experimental do emaranhamento em RMN

Nesta seção calcularemos a entropia de vários estados físicos, cujas matrizes foram tomografadas (usando o método apresentado na seção 4.8) no laboratório de RMN do Instituto de Física da USP/São Carlos, com um espectrômetro VARIAN INOVA, de 9.4 teslas, e uma amostra de ^{23}Na , $I = 3/2$ num cristal líquido liotrópico. A preparação e o procedimento experimental usado é o mesmo que aquele reportado

¹³A situação seria similar a como acontece quando se medem os autovalores de algum observável físico: os valores medidos são números “mais ou menos” próximos aos autovalores teóricos.

nas referências [112, 130]. A idéia nesta seção é mostrar uma das ferramentas disponíveis para caracterizar o grau do emaranhamento que pode estar presente (se for o caso) num sistema de RMN.

Como já foi indicado acima, o sistema de interesse é um núcleo de ^{23}Na (dentro de um *ensemble* de sistemas idênticos e independentes) que possui spin $I = 3/2$. Então, parece não ter sentido esperar algum emaranhamento em qualquer um destes sistemas. E não tem, mas só no sentido usual em que é entendido o emaranhamento. Mas, segundo alguns resultados teóricos recentes, [16], onde se estende o conceito de emaranhamento a situações mais gerais, resulta que alguns sistemas poderiam ser vistos como equivalentes a dois ou mais subsistemas “virtuais¹⁴”. Em nosso caso, o spin nuclear $I = 3/2$ é visto como equivalente a 2 q-bits (pois ambos sistemas tem associado um espaço de Hilbert de dimensão 4.). Aqui vamos a adotar este ponto de vista, mais geral, do emaranhamento.

Sabemos que o emaranhamento é uma propriedade que quando presente num estado físico é difícil de ser caracterizado experimentalmente. Na computação quântica via RMN a tarefa de achar alguma evidência de emaranhamento (supondo que seja possível de ser implementado¹⁵) é de enorme importância. Qualquer evidência deste na RMN só poderia se manifestar indiretamente medindo aquelas quantidades que dependam da matriz densidade¹⁶, como é o caso da entropia $S = -\text{tr}(\rho \log \rho)$, associada com o estado ρ . Esta é a entropia de von Neumann do estado quântico ρ , ao passo que, na teoria clássica da informação, o que é usado é a entropia de Shannon, que mede a incerteza associada com uma distribuição clássica de probabilidades.

A seguir, vamos ver um exemplo onde vamos determinar a entropia de um estado emaranhado, de um sistema, e dos estados de seus subsistemas. Consideremos um estado emaranhado, por exemplo o estado de Bell descrito como $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$. A matriz densidade deste sistema é:

$$\rho^{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.29)$$

¹⁴Dependendo da dimensão do espaço de Hilbert associado ao sistema composto.

¹⁵É considerada tal situação porque é possível aplicar sobre a amostra uma seqüência de pulsos de RF que geram estados de Bell, de maneira que os estados resultantes ρ_ϵ poderiam ter algum grau de emaranhamento -possibilidade que, por outro lado, foi descartada em vários trabalhos teóricos, como já foi discutido na seção 5.4-. O nome de estados *pseudo-emaranhados* se refere à situação de ter a matriz ρ_1 emaranhada.

¹⁶Devemos fazer uma distinção entre “matriz densidade fisicamente aceitável” e “matriz observável”. A primeira tem que ser necessariamente um operador densidade, mas a segunda não. Na RMN, aquele ρ_1 pode ser tanto uma coisa quanto outra.

Pode-se calcular as matrizes densidade para cada q-bit individual, tomando o traço parcial da matriz do sistema ($\rho^A = \text{tr}_B(\rho^{AB})$, e $\rho^B = \text{tr}_A(\rho^{AB})$):

$$\rho^A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \rho^B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.30)$$

portanto, a entropia de von Neumann para o sistema combinado é zero ($S(\rho^{AB}) = 0$) e máxima para cada q-bit individual ($S(\rho^A) = S(\rho^B) = 1$). Isto é devido a que o sistema completo está num estado puro bem definido, embora emaranhado, mas os q-bits individuais têm iguais probabilidades (50%) de ser encontrados no estado $|0\rangle$ e $|1\rangle$ antes de que uma medição for realizada.

Agora vamos consideremos uma matriz densidade de 2 q-bits na forma:

$$\rho^{AB} = \frac{1-\epsilon}{4} I + \epsilon \rho_1^{AB} \quad (6.31)$$

Este é um estado pseudo-puro, onde a matriz ρ_1^{AB} pode ser tomografada. Com ρ^{AB} , podemos calcular a entropia total do sistema:

$$S^{AB} = -\text{tr}(\rho^{AB} \log \rho^{AB}) \quad (6.32)$$

E calculamos ρ^A e ρ^B usando o traço parcial, os quais também são estados pseudo-puros, e as entropias:

$$S^A = -\text{tr}(\rho^A \log \rho^A); \quad S^B = -\text{tr}(\rho^B \log \rho^B) \quad (6.33)$$

Na medida em que para estados produto a entropia é aditiva, isto é $S^{AB} = S^A + S^B$, se $\rho^{AB} = \rho^A \otimes \rho^B$, a diferença $\Delta S \equiv |S^A + S^B - S^{AB}|$ (o módulo da informação quântica mútua, $S(A : B) \equiv S^A + S^B - S^{AB}$), de acordo com [129], mede a quantidade total de correlações, para um estado quântico bi-partito arbitrário. Esta quantidade é (idealmente) zero para estados produto e máxima para estados emaranhados.

Agora, para calcular S , ρ deve ser conhecida. A tomografia de estado quântico permite a reconstrução da matriz densidade de um sistema quântico. Varios exemplos de aplicações deste técnica têm aparecido na literatura de informação quântica e computação quântica por RMN [40] para o caso onde q-bits são representados por spins nucleares 1/2. Recentemente, desde alguns poucos anos, os núcleos quadrupolares têm sido usados com sucesso, por alguns autores, como sistemas de multiplos q-bits em informação quântica e computação quântica de RMN [113, 130]. No entanto, só recentemente, a técnica de tomografia de

estado quântico tem sido reportada para este tipo de núcleo [112, 131], assim como algumas aplicações, tais como a evolução do estado de um q-bit sobre a esfera de Bloch durante transformações unitárias. A Figura 12 mostra dois estados *pseudo-Bell* tomografados em um sistema quadrupolar com $I = 3/2$.

A entropia do sistema e a entropia de cada q-bit individual foram determinados a partir das matrizes densidade correspondentes a estados quânticos coerentes, criados através de RMN, e também durante a evolução do sistema sob portas lógicas quânticas, as quais foram usadas para criar estados *pseudo-Bell*.

A possibilidade de obter experimentalmente a entropia a partir da tomografia de estado quântico abre muitas possibilidades interessantes, tanto para a física estatística quanto para a informação quântica. A razão é que a entropia de sistemas compostos deve satisfazer um número de propriedades [40] as quais, sob tomografia de estado quântico, podem agora ser verificadas *experimentalmente*. No entanto, a RMN acessa, unicamente, à matriz densidade de desvio, $\Delta\rho$ sobre um *background* quase-uniforme [40]:

$$\rho = \frac{\mathbf{1}}{2^N} + \epsilon\Delta\rho \quad (6.34)$$

onde $\mathbf{1}$ é a matriz identidade $2^N \times 2^N$, com $\epsilon \approx 10^{-5}$. Esta é uma aproximação de primeira ordem, válida a altas temperaturas. Para manter a restrição $\text{tr}(\rho) = 1$, a matriz densidade de desvio deve satisfazer $\text{tr}(\Delta\rho) = 0$. Já que os pulsos de radiofrequência estão representados por transformações unitárias, o primeiro termo na Eq. (6.34) não resulta afetado nas implementações de RMN. Portanto, para construir ρ , a matriz densidade para o sistema completo, a partir da tomografia de estados quântico RMN, deve-se adicionar à $\Delta\rho$, obtida *experimentalmente*, um termo $\mathbf{1}/2^N$ para conseguir $\text{tr}(\rho) = 1$. Depois disto, pode-se obter as matrizes densidade de cada q-bit individual tomando o traço parcial de ρ .

Exemplo experimental

Vários estados quânticos coerentes RMN foram criados, usando o núcleo quadrupolar ^{23}Na , num cristal líquido lyotrópico, assim como as suas respectivas matrizes densidade, que foram obtidas seguindo o procedimento e as técnicas descritas na Ref. [112]. Entropias de q-bits individuais foram calculadas tomando o traço parcial das matrizes densidade tomografadas e aplicando a Eq. (6.33). Uma vez determinadas as matrizes ρ^{AB} , ρ^A e ρ^B , a informação mútua foi calculada para a evolução de estados quânticos durante a aplicação de portas lógicas que criam o estado pseudo-entrelaçado neste sistema.

Para um sistema com spin $3/2$, o estado pseudo-entrelaçado $(|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$ pode ser criado aplicando

dois pulsos suaves de radiofrequência ao estado pseudo-puro $|01\rangle$, sendo que o primeiro um pulso $(\pi/2)_{12}^{-y}$ e o segundo $(\pi)_{12}^x$. Os índices inferior e superior indicam, respectivamente, transições seletivas e a fase do pulso, ao passo que o valor afetado destes índices fornece o ângulo de nutação da magnetização nuclear. A evolução da informação mútua, a partir de $|01\rangle$, sob a aplicação da seqüência de pulsos descrita em (6.35), é ilustrada na Fig. 13. Na figura, a linha mostrada resultou de uma simulação numérica para a evolução, e os pontos correspondem a valores da informação mútua determinados experimentalmente. Como se pode ver da figura, a informação mutua é mínima para o estado pseudo-puro $|01\rangle$, pois o sistema total e os seus q-bits (subsistemas) estão em estados bem definidos. Depois da aplicação do primeiro pulso (suave) de RF, o sistema evolui para o estado pseudo-emaranhado, e a informação mútua atinge seu valor máximo devido a que o sistema está em um estado bem definido, ao passo que seus q-bits têm entropias máximas. O segundo pulso modifica a fase global do sistema, e a informação mútua se mantém inalterável. O terceiro pulso retorna o estado quântico para o estado pseudo-puro $|10\rangle$. O quarto pulso leva o sistema para o estado quântico inicial, mas durante esta evolução o sistema passa, novamente, através de um estado pseudo-emaranhado, o qual causa o pico mais a direita na Figura. A seqüência é resumida abaixo:

$$\begin{aligned}
 (\pi/2)_{12}^{-y} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle) \\
 (\pi)_{12}^x &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle) \\
 (\pi/2)_{12}^{-y} &\rightarrow i |10\rangle \\
 (\pi)_{12}^x &\rightarrow -|01\rangle
 \end{aligned} \tag{6.35}$$

6.2 Discussões

Nesta seção vamos apresentar algumas discussões e comentários, assim como alguns cálculos, sobre conceitos que foram apresentados nos capítulos anteriores, numa tentativa de enriquecer a discussão sobre emaranhamento. Após esta discussão genérica, retornaremos ao problema do emaranhamento em RMN.

6.2.1 Considerações gerais

Um exemplo interessante do uso do conceito de emaranhamento, no caso em que está presente (e de forma permanente) alguma interação entre as partes de um sistema composto, revela-se nos comentários de A. Wójcik [132] sobre uma interpretação dada no artigo de Berkley et al., [133]. Em [133] os autores

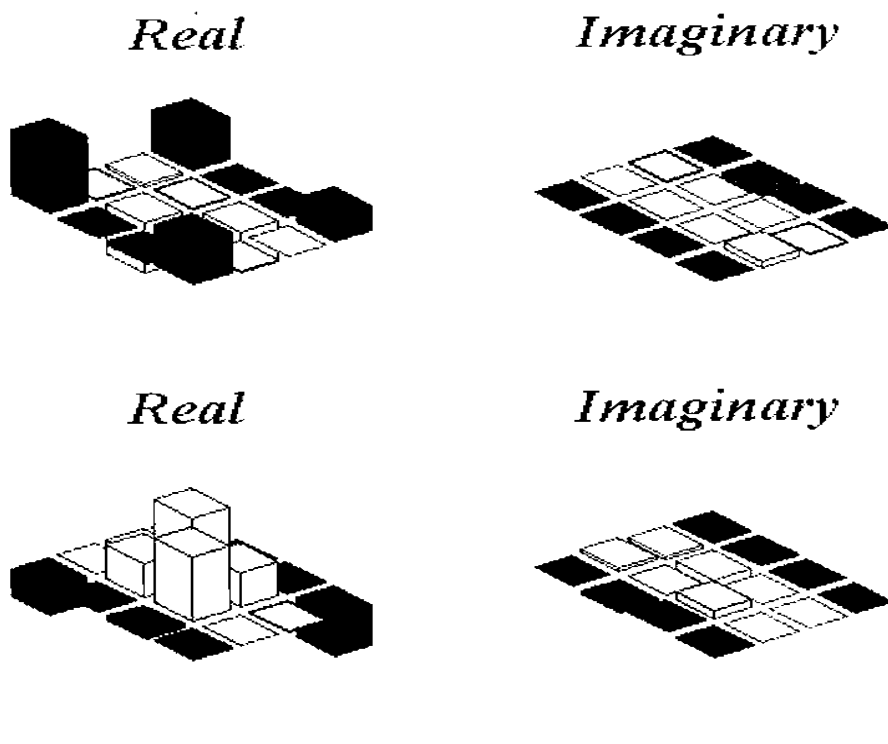


Figura 6.1: Estados pseudo-Bell tomografados experimentalmente em ^{23}Na em um sistema cristal-líquido liotrópico ($I = 3/2$) à temperatura ambiente. A figura na parte superior representa o estado “gato”, $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$, e aquela na parte inferior o estado $(|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$. As seqüências de pulsos seletivos usadas para obter estes estados são descritas na Ref. [112].

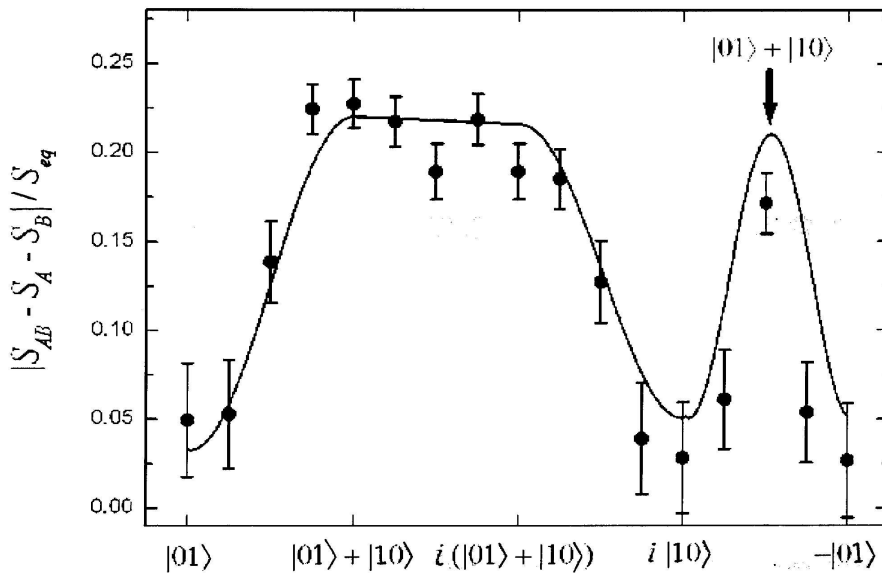


Figura 6.2: Evolução da informação quântica mútua de um sistema de dois q-bits. O sistema inicia no estado pseudo-puro $|00\rangle$, onde a informação mútua é mínima (o sistema é separável). Então, este evolui para o estado pseudo-Bell $(|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$ onde alcança seu valor máximo. Depois que esta decresce, mas antes de alcançar o estado inicial, esta passa novamente através de um estado emaranhado. Isto corresponde ao segundo pico na figura. A linha contínua resulta de uma predição teórica.

reportaram que seus resultados forneceriam evidências da criação de emaranhamento em um sistema com dois q-bits (do tipo contatos Josephson acoplados), através da implementação dos estados de Bell, $(|01\rangle \pm |10\rangle)/\sqrt{2}$. Comentando este artigo, Wójcik, [132], afirma que:

... nem todo estado que pode ser formalmente escrito nesta forma deveria ser chamado de emaranhado. O mistério do emaranhamento baseia-se na existência de correlações entre dois sistemas fisicamente não-acoplados. Deve-se enfatizar que, embora, as correlações entre sistemas emaranhados sejam geralmente chamadas não-locais, é a perda do acoplamento, e não a separação espacial entre elas, o que deve ser considerado como a condição necessária para que a noção de não-localidade possa ser usada. No experimento reportado, dois q-bits do tipo contatos Josephson estão intensamente acoplados; assim, o que é realmente observado não é o emaranhamento, senão a mistura

dos estados induzidos pela interação¹⁷.

Em uma resposta ao comentário de Wójcik [134] os autores dizem que:

A definição comum de emaranhamento não faz referência à natureza do hamiltoniano, à presença ou ausência de acoplamento ou à separação macroscópica.

Os comentários apresentados acima podem ser complementados levando-se em conta um resultado da mecânica quântica que tem sido recentemente considerado em [135]: quando existe interação entre as partes de um sistema, como é o caso na Ref. [133], os espaços de Hilbert \mathcal{H}_i associados inicialmente¹⁸ às partes, resultam, em geral, *modificados*¹⁹ por efeito da interação; então, neste caso e num sentido formal, não se deveria escrever o estado do sistema total como uma combinação linear de produtos tensoriais de estados dos espaços de Hilbert *não modificados*. Por outro lado, e já que o emaranhamento se refere à situação em que as partículas não interagem entre si, deveria ser possível escrever o estado do sistema *como se* suas partículas constituintes estivessem sem interação.

6.2.2 As dificuldades e os cuidados necessários com o conceito de emaranhamento

O físico E. Schroedinger publicou, em 1935, que o emaranhamento quântico é *a propriedade* dos sistemas quânticos, a única para a qual não se pode achar nenhum análogo clássico²⁰. Neste comentário Schroedinger se referia a uma propriedade do modelo quântico (pois o emaranhamento é definido neste modelo). Mas, quando se diz, como na Ref. [117], que nos experimentos com soluções líquidas de RMN, à temperatura ambiente, não foram implementados em nenhuma etapa dos mesmos estados emaranhados nas moléculas, está-se referindo não ao modelo, senão a um sistema físico concreto. Esta é uma

¹⁷“However, an important point is that no every state that can be formally written in this form deserves to be called entangled. The mystery of entanglement is based on the existence of correlation between two physically uncoupled systems. Let me emphasize that although the correlations between entangled systems are commonly called nonlocal, it is the lack of coupling, and not the spatial separation between them, that is a necessary condition for this notion of nonlocality to ser used. In the reported experiment, two Josephson-junction q-bits are strongly coupled and it is not the entanglement but the mixing of their states induced by interaction that was really observed”.

¹⁸No caso em que as partículas estão isoladas entre sim, antes de que possam interagir.

¹⁹Uma modificação possível poderia ser a mudanza da dimensão do espaço de Hilbert.

²⁰Esta declaração levou recentemente à conseqüências importantes: a ideia de poder construir um modelo clássico para um sistema de spins nucleares em moléculas (um sistema de RMN) levou alguns teóricos a defender o resultado matemático de que a RMN não é capaz de implementar o emaranhamento, [114]. Esa é uma possível maneira de interpretar as palavras de Schroedinger: verificar se seria possível construir um modelo clássico -paralelo ao quântico- para o sistema em consideração.

observação importante: é preciso distinguir entre situações matemáticas e situações físicas. Matematicamente, numa situação onde os estados atribuídos aos sistemas considerados podem representar estados emaranhados (como na Ref. [133], no caso dos dois q-bits de contatos Josephson acoplados) é indispensável uma análise cuidadosa para verificar que estes realmente correspondem ao sistema. Do lado experimental, para determinar se duas partículas acham-se num estado emaranhado (no caso puro), tem-se que atuar sobre uma delas e verificar se o estado da outra partícula é afetado.

Estes cuidados são justificados, pois as ações que experimentalmente pode-se realizar sobre os sistemas microscópicos são indiretas e os resultados obtidos têm que ser interpretados dentro do modelo considerado (o quântico) e fazendo uso de um conjunto de suposições nem sempre óbvias.

Agora, e mais amplamente, podemos considerar o conceito do emaranhamento dentro de dois contextos: (i) o emaranhamento quântico *apenas* como uma propriedade do modelo quântico²¹, sem nenhuma relação com correlações físicas entre os sub-sistemas, e que podemos chamar de emaranhamento matemático; e (ii) o emaranhamento quântico como uma verdadeira propriedade dos sistemas físicos correspondentes. Considerar a situação (i) tem sentido, pois a informação que pode-se obter usando certo modelo revela não somente algumas propriedades dos objetos modelados, senão também algumas das propriedades dos próprios modelos²².

Por outro lado, e independentemente dos cuidados para representar corretamente os estados emaranhados nas diversas situações, vemos que quando o estado em consideração corresponde a um sistema físico (composto) cujos subsistemas mantêm-se unidos, como acontece no caso do sistema de dois elétrons num átomo de Hélio ou no caso da molécula de Hidrogênio, a idéia do emaranhamento não causa confusão, pois os sub-sistemas podem-se influenciar mutuamente, direta ou indiretamente. No entanto, o assunto é distinto quando as partículas (inicialmente emaranhadas) estão afastadas uma da outra o suficiente para que elas estejam livres. Neste caso, não existindo interação entre elas, o senso comum dita que qualquer ação sobre uma das partículas não afeta o estado da outra partícula²³.

²¹Veja no apêndice 8.7 uma discussão das possíveis condições onde se manifestaria esta situação.

²²Um exemplo didático e não matemático disto, apenas para ressaltar a idéia, é a "maquete do arquiteto": se a maquete (modelo), que pode ser de um prédio, for feita com papel então a maquete têm as propriedades do papel.

²³Veja as subseções 6.2.5 e 6.2.6 neste capítulo.

6.2.3 O emaranhamento clássico não existe; como sabemos disso?

M. Nielsen, num artigo da *Scientific American*, [136], apresenta o significado do conceito de emaranhamento quântico numa situação com dois objetos macroscópicos (dois dados) e imaginando, para fins didáticos, o que “aconteceria” se estes dados pudessem estar emaranhados da mesma forma que, por exemplo, dois elétrons. Tais dados, logo após serem “emaranhados”, podem ser levados para locais arbitrariamente distantes onde podem ser lançados e onde o “emaranhamento” manifestar-se-ia através dos valores (sempre iguais) obtidos. Com a finalidade de ilustrar de uma outra maneira o significado físico do emaranhamento entre partículas quânticas darei a seguir um exemplo onde o emaranhamento certamente não acontece (uma situação com objetos clássicos) mas podemos fazer o exercício de imaginarmos como deveria se manifestar o (falso) “emaranhamento entre objetos clássicos”. Considere-se uma pedra em repouso sobre uma superfície. Um experimentador bate sobre ela com tamanha força que ela se divide em duas partes que viajam em direções opostas, conservando o momentum linear inicial nulo e o momentum angular total inicial, também nulo. Durante o voo, o pedaço da pedra que voa (por exemplo) para a direita, é atingido, de maneira que a direção de seu momentum angular é alterada, mas mantém constante a sua magnitude. Então, se o emaranhamento entre estes objetos clássicos fosse possível, o que deveria acontecer é que o estado (clássico) de momentum angular do pedaço que voa para o outro lado, à esquerda, mudasse instantaneamente, sem que sobre ele se fizesse coisa nenhuma. Aquele pedaço mudaria seu momento angular (em direção), para mantê-lo oposto ao que resulta da ação sobre o pedaço no lado direito. Isto é obviamente impossível de acontecer na escala dos objetos macroscópicos.

6.2.4 Localidade *versus* Não-localidade

Berstein em [137] faz um comentário interessante a respeito da localidade *versus* não-localidade no artigo de EPR; ele diz:

“...Assim, pois, decidi ver se em alguma situação simples do tipo Einstein-Podolsky-Rosen conseguiria pensar em um modelo simples que completasse o esquema mecânico quântico, tornando-o local. Primeiro tentei brincando com um sistema muito simples de duas partículas de espin $1/2$, sem muito rigor, senão simplesmente visando

obter alguma relação entre as funções envolvidas que pudesse levar em conta as correlações quânticas localmente. Não funcionou nada do que tentei. Então fique achando que pouco se poderia fazer. Então construí uma prova de impossibilidade."

O que torna tudo local, na situação considerada por EPR, seria considerar uma dupla somatória (e não uma simples) na Eq. (2.1) do capítulo 2:

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1} \sum_{m=1} \psi_n(x_2) u_m(x_1) \quad (6.36)$$

neste caso se tem uma expansão da função $\Psi(x_1, x_2)$ numa base formada por todos as possíveis combinações dos elementos das bases dos espaços individuais.

Até aqui, e como no artigo de EPR, não foi considerada a equação de Schroedinger correspondente. Na próxima seção vamos ver que, redefinindo o instante inicial $t = 0$ quando as duas partículas estão afastadas o suficiente para que estas possam ser consideradas livres (definindo assim uma nova condição inicial), a função de onda²⁴ para as duas partículas se mantém separável.

6.2.5 Redefinindo $t = 0$ no *gedankenexperiment* de EPR

Na mecânica quântica, os estados físicos diferenciam-se dos estados matemáticos (não físicos) em que os primeiros satisfazem à equação de Schroedinger, a qual fica bem definida quando são dados o hamiltoniano quântico e as condições iniciais e de contorno. Uma característica elementar daquela equação diferencial consiste em que as suas soluções (as funções de onda) são independentes da escolha do instante de tempo "zero". Seja $\psi(0)$ uma função de onda ao instante inicial $t = 0$, e $\psi(t_1)$ uma função de onda num instante de tempo posterior $t = t_1$. Ao redefinir o instante inicial (e a condição inicial), em $t = t' < t_1$, as soluções físicas não são afetadas, em particular, logo de um tempo $t_1 - t'$ a solução obtida seria numericamente igual àquela dada por $\psi(t_1)$ para o instante inicial $t = 0$.

$$\underbrace{\psi(t_1 - t')}_{t_{\text{inicial}}=t'} = \underbrace{\psi(t_1)}_{t_{\text{inicial}}=0}$$

No caso de um sistema composto por dois sub-sistemas, que afastam-se em direções opostas conservando o momentum angular inicial nulo, num estado emaranhado, considera-se que a condição inicial fica definida

²⁴Veja subseção 6.2.6.

quando as partículas ainda estão juntas, interagindo. Mas, como na situação anterior, pode-se aqui também redefinir o instante de tempo "zero"; em particular, isto pode ser feito quando as partículas estão afastadas o suficiente para considerar que elas estão livres. Nesse caso as soluções para tempos posteriores seriam as soluções correspondentes a duas partículas livres, não carregando esta função de onda (de duas partículas) nenhuma informação da história anterior a sua separação espacial. Isto será mostrado abaixo.

6.2.6 O Estado Separável para duas Partículas se mantém Separável

Uma solução física de uma equação diferencial linear não está determinada por qualquer solução particular dessa equação. Como trata-se de uma equação linear, a solução geral é a combinação linear de todas as possíveis soluções (linearmente independentes) da equação considerada. Uma solução de um problema físico é determinada tanto por as condições iniciais quanto por as condições de contorno. Por exemplo, uma partícula livre satisfaz à equação:

$$-a^2 \nabla^2 \psi + \left(\frac{\hbar}{i}\right) \frac{\partial}{\partial t} \psi = 0 \tag{6.37}$$

com $a^2 = \hbar^2/4\pi m$, e uma solução particular, caracterizada pelo parâmetro vetorial \vec{k} , é dada por:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)t)} \tag{6.38}$$

onde $\omega(k) = (a^2/\hbar)k^2$. A solução procurada é um certo vetor (ou função de estado) do espaço de Hilbert das soluções da equação anterior. A solução mostrada é somente um elemento de uma base do espaço das soluções. A solução é uma função que tem que satisfazer as condições estipuladas pela situação considerada.

A solução geral será da forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = (1/2\pi)^{3/2} \int d^3 \vec{k} \phi(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)t)} \tag{6.39}$$

(o coeficiente na frente da integral é incluído por comodidade). Para obter uma solução específica do problema considerado, deve-se conhecer os coeficientes $\phi(k)$. Estes podem ser obtidos, tendo em conta que:

$$\psi(\vec{x}, 0) = (1/2\pi)^{3/2} \int d^3 k \phi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \tag{6.40}$$

donde se pode ver que $\phi(\vec{k}) = (1/2\pi)^{3/2} \int d^3\vec{z} \psi(\vec{z}, 0) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{z}}$ é a transformada de Fourier da função de estado inicial $\psi(\vec{x}, 0)$, que denotaremos $\phi = \psi_0^F$, e onde $\psi_0(\vec{x}) \equiv \psi(\vec{x}, 0)$. Então, pode-se escrever:

$$\psi(\vec{x}, t) = (1/2\pi)^{3/2} \int d^3\vec{k} \psi_0^F(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - w(k)t)} \quad (6.41)$$

Suponha que se faça uma medida da posição e outra do momentum. Se, no instante τ , a posição for medida, obtendo-se o resultado $\vec{x} = \vec{a}$, então ocorreria o "colapso" da função de estado: $\psi_t \rightarrow (2\pi)^{3/2} \delta_a$. Ou seja, a partir do instante $t = \tau$, a função de onda desenvolve-se a partir da função inicial δ_a , cuja transformada de Fourier é:

$$\phi_{\vec{k}} = \int d^3\vec{z} \delta(\vec{z} - \vec{a}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{z}} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}} \quad (6.42)$$

e a função de estado (da partícula livre), para $t \geq \tau$, será:

$$\psi(\vec{x}, t) = (1/2\pi)^{3/2} \int d^3\vec{k} e^{i[\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{a}) - w(k)(t-\tau)]} \quad (6.43)$$

Fazendo $\vec{x} - \vec{a} = \vec{z}$, $t - \tau = u$, $w = a^2 k^2 / h = \hbar k^2 / 2m$, obtém-se

$$\vec{k}\cdot(\vec{x} - \vec{a}) - w(k)(t - \tau) = -(ua^2/h)(\vec{k} - h\vec{z}/2ua^2)^2 + hz^2/4ua^2 \quad (6.44)$$

Então

$$\psi(\vec{x}, t) = (1/2\pi)^{3/2} e^{ih(\vec{x}-\vec{a})^2/(4(t-\tau)a^2)} \int d^3\vec{k} e^{-(ia^2u/h)(\vec{k} - \frac{h}{2ua^2}\vec{z})^2} \quad (6.45)$$

Pode-se obter o valor desta integral trocando-se simplesmente $\vec{k} - h(\vec{x} - \vec{a})/[2(t - \tau)a^2]$ por \vec{k} , sem que isto afete os limites da integração, por se tratar de um incremento finito. O valor desta última integral é: $(\pi\hbar/ia^2(t - \tau))^{3/2}$. Ou seja:

$$\psi(\vec{x}, t) = \left[\frac{2\pi m}{i\hbar(t - \tau)} \right]^{3/2} e^{ih(\vec{x}-\vec{a})^2/(4(t-\tau)a^2)} \quad (6.46)$$

Se, por outro lado, no instante τ mede-se o momento, obtendo-se o resultado $\vec{p} = \hbar\vec{j}$, então produziria-se o colapso $\psi_t \rightarrow (2\pi)^{3/2} C e_j$, onde C é uma constante. Ou seja, a partir do instante $t = \tau$, a função de onda evolui a partir da função inicial $e_j \equiv e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}$, cuja transformada é:

$$\phi(\vec{k}) = C \int d^3\vec{z} e^{i\vec{j}\cdot\vec{z}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{z}} = (2\pi)^3 C \delta(\vec{k} - \vec{j}) \quad (6.47)$$

e a função de estado (da partícula livre), para $t \geq \tau$, seria:

$$\psi(\vec{x}, t) = C e^{i(\vec{j}\cdot\vec{x} - w(j)(t-\tau))} \quad (6.48)$$

que representaria uma partícula completamente “não-localizada”.

Para o caso de duas partículas de igual massa e que não interagem, a função de onda $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ também deve satisfazer à equação de Schroedinger, com potencial de interação nulo.

$$-a^2(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = 0 \quad (6.49)$$

Neste caso é possível procurar soluções do tipo separável:

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = \phi_1(\vec{x}_1) \phi_2(\vec{x}_2) \eta(t)$$

com as quais a equação transforma-se em:

$$-a^2 \frac{\nabla_1^2 \phi_1}{\phi_1} - a^2 \frac{\nabla_2^2 \phi_2}{\phi_2} + \frac{\hbar}{i} \frac{d\eta/dt}{\eta} = 0 \quad (6.50)$$

produzindo três equações diferenciais:

$$-a^2 \nabla_1^2 \phi_1 = E_1 \phi_1, \quad -a^2 \nabla_2^2 \phi_2 = E_2 \phi_2, \quad \frac{d\eta}{dt} + \frac{i\eta}{\hbar} (E_1 + E_2) = 0 \quad (6.51)$$

onde E_1 e E_2 são constantes numéricas arbitrárias, para as quais (de novo) convém escrever soluções do tipo:

$$\phi_1(\vec{x}_1) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}_1}, \quad \phi_2(\vec{x}_2) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}_2}, \quad \eta(t) = e^{-i(E_1+E_2)t} \quad (6.52)$$

onde \vec{p} e \vec{q} são vetores fixos em cada par de funções ϕ_1 e ϕ_2 . Estas funções, nas equações (6.51), levam às relações: $a^2 p^2 = E_1$ e $a^2 q^2 = E_2$. Com isto, cada membro da família de funções com parâmetros \vec{p} , \vec{q}

$$\eta_{\vec{p},\vec{q}}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}_1 + i\vec{q}\cdot\vec{x}_2 - iw(p,q)t} \quad (6.53)$$

é uma solução da equação (6.49), com $w(p, q) = (p^2 + q^2)a^2/\hbar$. Já que a equação diferencial dada é linear, então a solução geral tem a forma:

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = (1/2\pi)^{3/2} \int d^3\vec{p} d^3\vec{q} \Phi(\vec{p}, \vec{q}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}_1 + i\vec{q}\cdot\vec{x}_2 - iw(p,q)t} \quad (6.54)$$

onde a integração refere-se a todos os possíveis vetores \vec{p} e \vec{q} .

É nesta solução geral que se deve procurar a representação do (estado do) objeto físico considerado. Isto implica na necessidade de determinar os coeficientes $\Phi(\vec{p}, \vec{q})$ correspondentes. Na determinação

destes coeficientes entram em jogo as condições iniciais e as eventuais condições de contorno. Como pode-se ver, o coeficiente $\Phi(\vec{p}, \vec{q})$ é também a transformada de Fourier da função inicial $\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0)$:

$$\begin{aligned}\Psi_0(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &\equiv \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0) = (1/2\pi)^3 \int d^3\vec{p}d^3\vec{q}\Psi(\vec{p}, \vec{q})e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}_1+\vec{q}\cdot\vec{x}_2)} \\ &\rightarrow \Phi(\vec{p}, \vec{q}) = (1/2\pi)^3 \int d^3\vec{z}_1d^3\vec{z}_2\Psi(\vec{z}_1, \vec{z}_2, 0)e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{z}_1+\vec{q}\cdot\vec{z}_2)}\end{aligned}\quad (6.55)$$

Ou seja, $\Phi = \psi_0^F$, onde pode-se ver a necessidade de determinar, de alguma maneira, o estado inicial do sistema físico em consideração.

No caso no qual se imponha que as partículas devam conservar o momentum inicial, que por simplicidade será tomado igual a zero, então a função dos coeficientes tomará a forma $\Phi(\vec{p}, \vec{q}) = \phi(\vec{p})\delta(\vec{p} + \vec{q})$, com o qual,

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = (1/2\pi)^3 \int d^3\vec{p}\phi(\vec{p})e^{i[\vec{p}\cdot(\vec{x}_1-\vec{x}_2)-(2a^2/h)p^2t]}\quad (6.56)$$

$$\rightarrow \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0) = (1/2\pi)^3 \int d^3\vec{p}\phi(\vec{p})e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}_1-\vec{x}_2)} = \varphi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)\quad (6.57)$$

com

$$\phi(\vec{p}) = (1/2\pi)^{3/2} \int d^3\vec{z}\phi(\vec{z})e^{-i\vec{p}\cdot\vec{z}}\quad (6.58)$$

No caso considerado por Einstein, Podolsky e Rosen, em seu famoso artigo [18], quando as duas partículas acham-se afastadas e já não interagem, pode-se escrever o estado para o sistema total como um produto dos estados de cada partícula; ou seja, com a forma:

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0) = \phi_1(\vec{x}_1)\cdot\phi_2(\vec{x}_2)\quad (6.59)$$

então

$$\begin{aligned}\psi_F^0(\vec{p}, \vec{q}) &= (1/2\pi)^3 \int d^3\vec{z}_1d^3\vec{z}_2\phi_1(\vec{z}_1)\phi_2(\vec{z}_2)e^{-i[\vec{p}\cdot\vec{z}_1+\vec{q}\cdot\vec{z}_2]} \\ \psi_F^0(\vec{p}, \vec{q}) &= (1/2\pi)^3 \int d^3\vec{z}_1d^3\vec{z}_2\phi_1(\vec{z}_1)e^{-i\vec{p}\cdot\vec{z}_1}\phi_2(\vec{z}_2)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{z}_2}\end{aligned}\quad (6.60)$$

ou seja:

$$\psi_F^0(\vec{p}, \vec{q}) = \phi_F^1(\vec{p})\cdot\phi_F^2(\vec{q})\quad (6.61)$$

Substituindo este resultado na solução geral temos:

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = (1/2\pi)^3 \int d^3\vec{p}d^3\vec{q}\phi_F^1(\vec{p})\phi_F^2(\vec{q})e^{i[\vec{p}\cdot\vec{x}_1+\vec{q}\cdot\vec{x}_2-w(p,q)t]}$$

$$= (1/2\pi)^{3/2} \int d^3 \vec{p} \phi_1^F(\vec{p}) e^{i[\vec{p} \cdot \vec{x}_1 - w(k)t]} (1/2\pi)^{3/2} \int d^3 \vec{q} \phi_2^F(\vec{q}) e^{i[\vec{q} \cdot \vec{x}_2 - w(q)t]} \quad (6.62)$$

ou seja,

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = \Psi_1(\vec{x}_1, t) \cdot \Psi_2(\vec{x}_2, t) \quad (6.63)$$

que por sua vez significa que os estados das duas partículas evoluem independentemente.

No caso de se impor a conservação do momento linear e, além disso que a função inicial (6.56) seja o produto de duas funções individuais, deverá verificar-se que:

$$\varphi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \varphi_1(\vec{x}_1) \cdot \varphi_2(\vec{x}_2) \quad (6.64)$$

de onde deduz-se que a função inicial deve ser do tipo exponencial.

$$\varphi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = C^2 e^{(i/\hbar) \vec{P} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \quad (6.65)$$

Logo, (6.58) assume a forma:

$$\phi(\vec{p}) = (1/2\pi)^{3/2} \int d^3 \vec{z} \phi(\vec{z}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{z}} = C^2 (1/2\pi)^{3/2} \int d^3 \vec{z} e^{(i/\hbar) \vec{P} \cdot \vec{x} - i\vec{p} \cdot \vec{z}} \quad (6.66)$$

ou seja,

$$\phi(\vec{p}) = C^2 (1/2\pi)^{3/2} \delta(\vec{P}/\hbar - \vec{p}) \quad (6.67)$$

Substituindo em (6.56), temos:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) &= C^2 \int d^3 \vec{p} \delta(\vec{P}/\hbar - \vec{p}) e^{i[\vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) - (2a^2/\hbar) p^2 t]} \\ &= C^2 e^{(i/\hbar) [\vec{P} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) - P^2 t/m]} \end{aligned} \quad (6.68)$$

o qual pode se escrever como o produto:

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = \Psi_1(\vec{x}_1, t) \cdot \Psi_2(\vec{x}_2, t)$$

onde:

$$\begin{aligned} \Psi_1(\vec{x}_1, t) &= C e^{(i/\hbar) [\vec{P} \cdot \vec{x}_1 - (P^2/2m)t]} \\ \Psi_2(\vec{x}_2, t) &= C e^{-(i/\hbar) [\vec{P} \cdot \vec{x}_2 - (P^2/2m)t]} \end{aligned} \quad (6.69)$$

que representa a duas partículas que se afastam em direções opostas, uma independente da outra. Este resultado mostra que, como pode-se ver de (6.59) e (6.63), partindo de um estado inicial produto, tal

situação de produto mantém-se indefinidamente, enquanto não surgir alguma interação com as vizinhas. Ou seja, se em algum instante de tempo posterior, τ , realiza-se uma medida sobre alguma das partículas, somente a função de onda de tal partícula será modificada, enquanto que a outra função de onda continua sem nenhuma alteração.

Esta solução e a redefinição do instante de tempo “zero” não foi considerada no artigo de EPR, desde que os autores não propuseram a equação de Schroedinger correspondente a seu problema.

Na seguinte seção vamos retornar ao problema da computação quântica por RMN.

6.2.7 Sobre uma possível variante para construir estados Pseudo-Puros por médias temporais

Para criar estados pseudo-puros (PP) segundo o método de médias temporais é importante a ordem em que são feitas as operações em cada um dos experimentos que o método considera, pois, em geral, as matrizes correspondentes não comutam. A pergunta que se coloca é: se mudamos essa ordem, será que ainda pode-se criar estados PP através de médias temporais?

O método de médias temporais requer duas implementações independentes a partir do estado de equilíbrio:

$$\begin{aligned} 1) \quad \rho_{eq} &\rightarrow P_1 \rho_{eq} P_1^\dagger \\ 2) \quad \rho_{eq} &\rightarrow P_1^\dagger \rho_{eq} P_1 \end{aligned}$$

para a seguir se fazer a seguinte média:

$$\bar{\rho} = \frac{1}{3} (\rho_{eq} + P_1 \rho_{eq} P_1^\dagger + P_1^\dagger \rho_{eq} P_1)$$

Já vimos na seção (3.5.3) que o estado pseudo-puro assim implementado pode ser escrito como:

$$\bar{\rho} \equiv \rho_\epsilon = (1 - \epsilon) \frac{\mathbf{1}}{2^N} + \epsilon \rho$$

Na situação em que, a partir do equilíbrio, sob o sistema físico atua uma operação unitária U (ou seja, uma evolução segundo: $\rho_{eq} \rightarrow U \rho_{eq} U^\dagger$) o estado pseudo-puro já criado também evolui sob a mesma operação unitária: para cada termo temos,

$$\begin{aligned} 1) \quad \rho_{eq} &\rightarrow P_1 \rho_{eq} P_1^\dagger \rightarrow U P_1 \rho_{eq} P_1^\dagger U^\dagger \\ 2) \quad \rho_{eq} &\rightarrow P_1^\dagger \rho_{eq} P_1 \rightarrow U P_1^\dagger \rho_{eq} P_1 U^\dagger \end{aligned}$$

Com isto, a média fica:

$$\tilde{\rho}' = \frac{1}{3}U(\rho_{eq} + P_1\rho_{eq}P_1^\dagger + P_1^\dagger\rho_{eq}P_1)U^\dagger = (1 - \epsilon)\frac{\mathbf{1}}{2^N} + \epsilon U\rho U^\dagger$$

Uma (possível) variante para criar estados pseudo-puros consiste em considerarmos uma matriz, R , em vez da P_1 , e uma outra ordem das operações em cada uma das duas implementações do procedimento visto acima. A seguir vamos *supor* que seja possível construir um estado pseudo-puro (pelo método de médias temporais) usando alguma matriz R :

$$\rho^{pp} = \frac{1}{3}(\rho_{eq} + \underbrace{R\rho_{eq}R^\dagger}_{\tilde{\rho}} + \underbrace{R^\dagger\rho_{eq}R}_{\check{\rho}}) = \frac{1}{3}(\rho_{eq} + \tilde{\rho} + \check{\rho}) = (1 - \epsilon)\frac{\mathbf{1}}{2^N} + \epsilon\rho^p \quad (6.70)$$

Então, temos duas coisas por fazer:

(i) Considerar uma operação unitária U e a operação R (por determinar) em duas implementações independentes:

$$\begin{aligned} 1) \quad \rho_{eq} &\rightarrow U\rho_{eq}U^\dagger \rightarrow RU\rho_{eq}U^\dagger R^\dagger \equiv \tilde{\rho}_1 \\ 2) \quad \rho_{eq} &\rightarrow U\rho_{eq}U^\dagger \rightarrow R^\dagger U\rho_{eq}U^\dagger R \equiv \check{\rho}_1 \end{aligned}$$

fazendo a média: $(\rho_1 + \tilde{\rho}_1 + \check{\rho}_1)/3$, onde $\rho_1 \equiv U\rho_{eq}U^\dagger$. A partir disto se pode obter uma condição geral sobre as possíveis matrizes R depois de *impormos* que a média represente um estado pseudo-puro. Com isto, tal média poderia ser escrita como: $(1 - \epsilon)\mathbf{1}/2^N + \epsilon\rho_1^p \equiv \rho_1^{pp}$, onde $\rho_1^p = U\rho^pU^\dagger$ é um estado que evolui sob a operação unitária U ; e

(ii) Determinar a família de matrizes R que são consistentes com a hipótese inicial: a de que ρ^{pp} é um estado pseudo-puro.

Em primeiro lugar, vamos calcular explicitamente a média:

$$\frac{1}{3}(\rho_1 + \tilde{\rho}_1 + \check{\rho}_1) = \frac{1}{3}(U\rho_{eq}U^\dagger + RU\rho_{eq}U^\dagger R^\dagger + R^\dagger U\rho_{eq}U^\dagger R)$$

Supondo (e usando) que a matriz R , de maneira similar à P , é unitária ($RR^\dagger = R^\dagger R = \mathbf{1}$), temos:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{3}(U\rho_{eq}U^\dagger + RUR^\dagger(R\rho_{eq}R^\dagger)RU^\dagger R^\dagger + R^\dagger UR(R^\dagger\rho_{eq}R)R^\dagger U^\dagger R) \\ &= \frac{1}{3}(U\rho_{eq}U^\dagger + RUR^\dagger\tilde{\rho}RU^\dagger R^\dagger + R^\dagger UR\check{\rho}R^\dagger U^\dagger R) \end{aligned}$$

usando $\rho^{pp} = \frac{1}{3}(\rho_{eq} + \tilde{\rho} + \check{\rho})$ temos:

$$= U(\rho^{pp} - \frac{1}{3}(\tilde{\rho} + \check{\rho}))U^\dagger + \frac{1}{3}(RUR^\dagger\tilde{\rho}RU^\dagger R^\dagger + R^\dagger UR\check{\rho}R^\dagger U^\dagger R)$$

$$= U\rho^{pp}U^\dagger + \underbrace{\frac{1}{3}(RUR^\dagger\tilde{\rho}RU^\dagger R^\dagger - U\tilde{\rho}U^\dagger + R^\dagger UR\check{\rho}R^\dagger U^\dagger R - U\check{\rho}U^\dagger)}_V$$

usando agora $\rho^{pp} = (1 - \epsilon)\mathbf{1}/2^N + \epsilon\rho^p$, temos:

$$\implies \frac{1}{3}(\rho_1 + \tilde{\rho}_1 + \check{\rho}_1) = (1 - \epsilon)\frac{\mathbf{1}}{2^N} + \epsilon U\rho^p U^\dagger + V \quad (6.71)$$

ou seja, para que a média temporal represente um estado pseudo-puro e, portanto, evolua sob a operação unitária U , é necessário que se verifique:

$$V = \frac{1}{3}(RUR^\dagger\tilde{\rho}RU^\dagger R^\dagger - U\tilde{\rho}U^\dagger + R^\dagger UR\check{\rho}R^\dagger U^\dagger R - U\check{\rho}U^\dagger) = 0$$

Isto pode ocorrer na seguinte situação: $[U, R] = 0$ e $[U, R^\dagger] = 0$, que tem como caso particular e mais simples: $R = U$. Então, impondo esta exigência sobre a matriz R , obtemos:

$$\frac{1}{3}(\rho_1 + \tilde{\rho}_1 + \check{\rho}_1) = (1 - \epsilon)\frac{\mathbf{1}}{2^N} + \epsilon(U\rho^p U^\dagger) = \rho_1^{pp}$$

que é um estado pseudo-puro; ou seja, resulta (em princípio) que é possível implementar tais estados, pelo método de médias temporais, usando a mesma operação unitária U . Pode-se verificar que as hipóteses consideradas acima para a matriz R (com exceção daquela que considera a ρ^{pp} como um estado pseudo-puro), são trivialmente satisfeitas desde que R seja uma matriz unitária.

O problema de se determinar as condições sobre as matrizes unitárias R (ou U) que fazem com que a matriz $(\rho_{eq} + \tilde{\rho} + \check{\rho})/3$, seja *pseudo-pura* pode ser considerado em cada caso. Aqui temos um exemplo de uma matriz R que mostra esta possibilidade:

$$R = R_x^A(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & i \\ i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & i & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.72)$$

com isto a média $\bar{\rho}$ pode ser escrita como:

$$\bar{\rho} = 0,2485 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{78} \begin{pmatrix} 0,0357 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,1332 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,1007 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,1982 \end{pmatrix} \quad (6.73)$$

Notar que o número 0,2485 que, em um estado pseudo-puro, corresponderia ao coeficiente $(1 - \epsilon)/4$, se diferencia de $(1 - (1/78))/4$ em uma quantidade da ordem de 10^{-3} . Por outro lado, se pode ver que o elemento superior esquerdo da matriz mais a direita, é (uma ordem de magnitude) menor que os outros

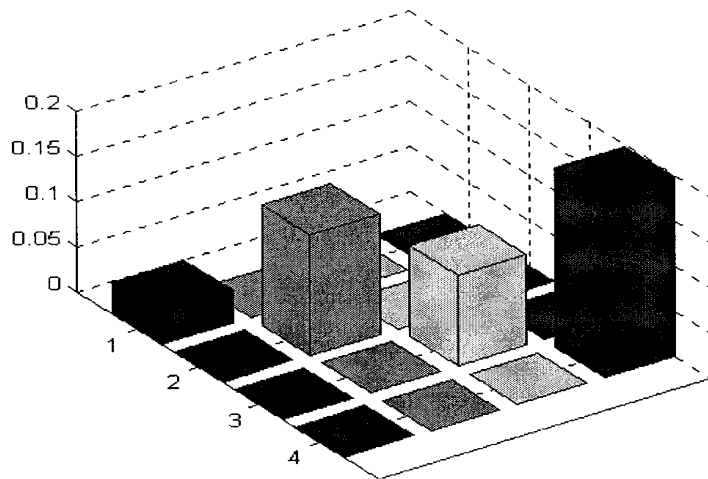


Figura 6.3: A figura mostra a matriz do lado direito da $\bar{\rho}$, na Eq. (6.73).

elementos na mesma diagonal. Em termos de populações, isto quer dizer que os outros estados estão (mais ou menos) igualmente populados, ao passo que o primeiro tem uma menor população. Situações deste tipo (assim como aquelas onde temos um excesso de população em relação aos outros estados) caracterizam os estados pseudo-puros. Este apenas é um exemplo, mas já mostra que a variante proposta aqui é consistente com um procedimento que produz estados pseudo-puros.

Capítulo 7

Conclusões

Nesta tese estudamos o problema do emaranhamento e da separabilidade de estados em computação quântica por RMN. Fizemos também algumas considerações de caráter geral sobre os resultados do artigo de EPR [18]. O estudo das considerações apresentadas na Ref. [114], assim como a avaliação do significado de que a matriz ρ_ϵ , e não a ρ_1 , representa o estado (médio) das moléculas numa amostra líquida RMN, nos levou a uma discussão teórica, ainda parcial, do problema de determinar as condições mas gerais que definem o estado físico dos spins nucleares na RMN e a sua relação com o problema do emaranhamento *versus* separabilidade desses estados. Concluímos que os limites para as regiões de separabilidade dados na Ref. [114] não são geralmente corretos. Determinamos novos valores para estes limites em certas situações particulares, onde todos os coeficientes (na base de matrizes produto de Pauli) que definem a matriz ρ_1 são iguais: $c_{\alpha_1 \dots \alpha_N} = c$. Assim, para $N = 2$ q-bits, achamos o seguinte intervalo (aproximado): $-0.15 \leq c \leq 0.33$; com isto, todas as matrizes ρ_1 são matrizes densidade, como é suposto na Ref. [114].

Considerarmos que o conjunto de matrizes densidade ρ_ϵ , definidas na Ref.[114], pode incluir matrizes físicas, desta vez, conectadas com matrizes ρ_1 que não são matrizes densidade. Como uma consequência, as matrizes ρ_1 agora ficam definidas por coeficientes $c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}$ que estão fora do intervalo $[-1, 1]$ e a condição fundamental para elas é dada por: $EV\{\rho_1\} \geq (\epsilon - 1)/(\epsilon 2^n)$, onde $EV\{\}$ significa "autovalores de", condição que garante a positividade das matrizes ρ_ϵ correspondentes. Segundo nossa interpretação, esta condição define as possíveis matrizes densidade associadas com os estados de spin nucleares nas moléculas.

Ao considerarmos o valor típico de ϵ nos experimentos RMN, mostramos que existem matrizes ρ_1 que, satisfazendo a condição acima, levam à situação em que $\epsilon > \epsilon_s$, onde ϵ_s é o limite inferior de de separabilidade¹, o quer dizer que a matriz ρ_ϵ correspondente fica fora da região de separabilidade, mas que ainda pode ser ou separável ou emaranhada. Ao aplicarmos o critério de separabilidade de Peres, Ref.[31], encontramos que a matriz é separável, mas temos que levar em consideração que só estudamos um tipo de matrizes ρ_1 , e que muitas outras situações ainda precisam ser estudadas.

Neste mesmo trabalho, supondo que estejamos dentro da escala de tempo correspondente ao tempo de relaxação *spin-spin*, T_2 , considerarmos um experimento de RMN como um processo quântico especial: um canal de despolarização, Ref. [40]. Nesta situação, o estado alcançado depois que o sistema é afetado por um processo ruidoso, pode ser expresso, no caso de $N = 2$ q-bits, como: $E(\rho) = p(\mathbf{1}/4) + (1 - p)\rho$, onde $\mathbf{1}$ é a matriz identidade de ordem 4, ‘ p ’ a probabilidade de que o sistema seja despolarizado no processo e ‘ $(1 - p)$ ’ a probabilidade que o sistema não seja afetado. Logo, ao compararmos a expressão para $E(\rho)$ com aquela de um estado *pseudo-puro* (para $N = 2$), fazemos a identificação $p \equiv 1 - \epsilon$. Então, pode-se construir os chamados elementos de operações $\{E_k, \}$, Ref. [40] para nosso canal de despolarização. Isto permite calcularmos a fidelidade de emaranhamento, $F = \sum_k |tr(\rho E_k)|^2$, que é uma medida para o grau de emaranhamento no sistema, e onde ‘ tr ’ é o traço, e ρ uma matriz densidade. Com isto consideramos alguns casos, por exemplo, o de uma matriz ρ_ϵ definida pelos coeficientes $d_{\alpha_1, \alpha_2} = -\epsilon$; então encontramos que $F = 1$, ou seja, independente de ϵ , mostrando que o coeficiente $c_{\alpha_1, \alpha_2} = -1$, que define a matriz ρ_1 (como é considerado na ref.[114]) não corresponde a uma matriz física. Quando consideramos ρ_1 como o estado do gato, obtemos para a matriz ρ_ϵ correspondente a fidelidade de emaranhamento $F(\epsilon) = 0.25 + 0.75\epsilon$, com o qual para o valor $\epsilon = 0.33$ atinge-se o valor de $F = 0.5$, em concordância com o nosso limite corrigido.

O procedimento com o qual se determina o limite inferior de separabilidade, usado na Ref. [114], leva naturalmente à possibilidade de construir mais de um *lower bound*, um resultado não mostrado nessa referência. Também mostramos que a função fidelidade de emaranhamento não distingue entre matrizes densidade e matrizes não físicas, isto logo de considerar uma matriz não física que resulta de mudar

¹Obtido a partir da matriz ρ_1 e usando o mesmo método como na Ref. [114].

ligeramente a matriz correspondente ao estado do gato, as funções fidelidade de emaranhamento são praticamente idênticas. Outro resultado foi alcançado ao calcular a entropia para vários estados implementados experimentalmente por nosso grupo, mostrando que aquelas correspondentes a estados ρ_1 emaranhados produzem valores um pouco maiores que os correspondentes a estados separáveis. Esta é uma ferramenta disponível na CQ-RMN com a qual se poderia caracterizar experimentalmente a presença (e grau) de emaranhamento num sistema de spin nucleares sensíveis à técnica da RMN.

Nas discussões mostramos que um estado separável para duas partículas livres se mantém separável ao longo do tempo, supondo que nenhuma interação com o ambiente aconteça na sua evolução. Mostramos também que pode haver possíveis variantes de construir estados *pseudo-puros*, segundo o método de médias temporais.

Capítulo 8

Apêndice

8.1 Elementos de Aritmética Modular

A aritmética modular é utilizada no algoritmo de fatoração de Shor. Neste apêndice fazemos um breve resumo de algumas definições e conceitos que são usados no capítulo 1.

Operações que fazem uso da aritmética módulo p serão denotadas usando o símbolo “ $\text{mod } p$ ”. Uma operação módulo p significa dividir um certo número por P e manter o resto r da divisão. Logo, $0 \leq r < p$. Assim, $\text{módulo } 3$, dividirá algum número composto positivo por 3 e ficamos com o resto (0, 1, ou 2). Um exemplo, $7 \text{ mod } 3 = 1$, pois 3 está contido no 7 duas vezes com resto de 1. O número por qual dividimos (3, neste exemplo) é chamado o “módulo”.

Quando escrevemos: $a = b(\text{mod } n)$, com $a > n$, deve ficar claro que ‘a’ não é o resto; esta é apenas uma maneira abreviada de representar:

$$a(\text{mod } n) = b(\text{mod } n)$$

Por exemplo, $67 = 11 \text{ mod } 7$, pois:

$$67(\text{mod } 7) = 4 \quad e \quad 11(\text{mod } 7) = 4$$

Logo, $a = b(\text{mod } n)$ quer dizer que para alguns inteiros k_1 e k_2 , temos

$$a = k_1 \times n + r \quad e \quad b = k_2 \times n + r, \quad (0 \leq r < n)$$

A seguir vamos definir os grupos Z_p^* e G_q , os quais são muito importantes para o algoritmo de Shor.

Dado o número p , seja o conjunto $Z_p^* = \{1, 2, 3, 4, \dots, p-2, p-1\}$. Se multiplicarmos quaisquer dois números deste conjunto e reduzirmos o producto $\text{mod } p$, o resultado será um número do mesmo conjunto.

Assim, o conjunto é fechado sob multiplicação.

Além disso, se pegarmos algum número k em Z_p^* , é possível achar outro número, também em Z_p^* , denotado como k^{-1} , tal que $k \times k^{-1} = 1 \pmod{p}$. Ou seja, qualquer número no conjunto tem seu inverso multiplicativo. Estas duas características definem o conjunto Z_p^* como um *grupo* sob multiplicação \pmod{p} . Às vezes a expressão “grupo multiplicativo” é usada. (Note-se que 0 não pertence ao conjunto Z_p pois ele não tem um inverso multiplicativo). Quando o número 0 é acrescentado no conjunto Z_p^* , obtemos o conjunto Z_p . Por exemplo, $Z_{11}^* = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$. Se multiplicarmos 5 por 8, obtemos $5 \times 8 = 40 = 7 \pmod{11}$, e 7 é um elemento do conjunto. Também temos que $5 \times 9 = 45 = 1 \pmod{11}$, porque 9 é o inverso multiplicativo de 5. Similarmente, 5 é o inverso multiplicativo de 9. Se $k = 5$, então $k^{-1} = 9$. Similarmente, 2 e 6 são inversos multiplicativos, assim como 3 e 4.

Seja g um elemento de Z_p^* . Diz-se que g é um *gerador* \pmod{p} se o conjunto das potências de g , a saber $\{g^1 \pmod{p}, g^2 \pmod{p}, \dots, g^{p-1} \pmod{p}\}$ contém, em certa ordem, todos os elementos de Z_p^* . Por exemplo, 3 é um gerador de Z_7^* pois

$$3^1 = 3 \pmod{7} \quad , \quad 3^2 = 2 \pmod{7}$$

$$3^3 = 6 \pmod{7} \quad , \quad 3^4 = 4 \pmod{7}$$

$$3^5 = 5 \pmod{7} \quad , \quad 3^6 = 1 \pmod{7}$$

Diz-se que um grupo gerado por um elemento g tem *ordem* $q \pmod{p}$ se q é a menor potência tal que $g^q = 1 \pmod{p}$.

8.2 O Teorema de Schmidt

Consideremos um estado puro $|\psi\rangle$ de um espaço de Hilbert composto, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, onde \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B têm dimensão N . Ao considerarmos uma base ortonormal $|n\rangle, n = 1, \dots, N$ para cada subsistema, podemos representar um estado genérico para o sistema composto como:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \alpha_{m,n} |n\rangle \otimes |m\rangle \quad (8.1)$$

Tomando os coeficientes complexos $\alpha_{m,n}$ se pode construir uma matriz C , de tamanho $N \times N$ e, a partir desta, a matriz $D = C^+C$. A chamada decomposição de Schmidt do estado $|\psi\rangle$ é determinada pela

coleção das raízes quadradas dos autovalores da matriz D:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N \sqrt{\lambda_k} |k'\rangle \otimes |k''\rangle \quad (8.2)$$

onde $|k'\rangle = W|k\rangle$, e $|k''\rangle = V|k\rangle$, e onde W e V são matrizes formadas pelos autovetores das matrizes C^+C e CC^+ , respectivamente.

8.3 A tomografia de processo quântico com núcleos quadrupolares

Na seção 4.9 apresentamos brevemente a Tomografia de Processo Quântico. Agora vamos ampliar isto um pouco, no caso de um núcleo com spin $I = 3/2$, fornecendo explicitamente um possível conjunto de matrizes que poderiam ser implementadas experimentalmente e sob as quais atuaria a operação \mathcal{E} que seja considerada.

No caso de 2 q-bits a base computacional do espaço de Hilbert tem 4 estados $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Para se implementar, neste caso, a Tomografia de Processo Quântico devem ser preparadas $N^2 = 16$ matrizes, ρ_j , algumas das quais são diretamente tomografáveis (através da Tomografia de Estado Quântico).

As matrizes “não tomografáveis” são combinações lineares de matrizes auxiliares tomografáveis:

$$\begin{aligned} |00\rangle\langle 01| &= \alpha_1|00\rangle\langle 00| + \alpha_2|01\rangle\langle 01| + \underbrace{\frac{\alpha_3}{2}|00+01\rangle\langle 00+01| + \frac{\alpha_4}{2}|00+i01\rangle\langle 00+i01|}_{\text{matrizes auxiliares tomografáveis}} \\ |00\rangle\langle 10| &= \beta_1|00\rangle\langle 00| + \beta_2|10\rangle\langle 10| + \frac{\beta_3}{2}|00+10\rangle\langle 00+10| + \frac{\beta_4}{2}|00+i10\rangle\langle 00+i10| \\ |00\rangle\langle 11| &= \gamma_1|00\rangle\langle 00| + \gamma_2|11\rangle\langle 11| + \frac{\gamma_3}{2}|00+11\rangle\langle 00+11| + \frac{\gamma_4}{2}|00+i11\rangle\langle 00+i11| \\ |01\rangle\langle 00| &= \alpha_1|00\rangle\langle 00| + \alpha_2|01\rangle\langle 01| + \frac{\alpha_3}{2}|01+00\rangle\langle 01+00| + \frac{\alpha_4}{2}|01+i00\rangle\langle 01+i00| \\ |01\rangle\langle 10| &= \beta_1|01\rangle\langle 01| + \beta_2|10\rangle\langle 10| + \frac{\beta_3}{2}|01+10\rangle\langle 01+10| + \frac{\beta_4}{2}|01+i10\rangle\langle 01+i10| \\ |01\rangle\langle 11| &= \gamma_1|01\rangle\langle 01| + \gamma_2|11\rangle\langle 11| + \underbrace{\frac{\gamma_3}{2}|01+11\rangle\langle 01+11| + \frac{\gamma_4}{2}|01+i11\rangle\langle 01+i11|}_{\text{matrizes auxiliares tomografáveis}} \\ |10\rangle\langle 00| &= \alpha_1|10\rangle\langle 10| + \alpha_2|00\rangle\langle 00| + \frac{\alpha_3}{2}|10+00\rangle\langle 10+00| + \frac{\alpha_4}{2}|10+i00\rangle\langle 10+i00| \\ |10\rangle\langle 01| &= \beta_1|10\rangle\langle 10| + \beta_2|01\rangle\langle 01| + \frac{\beta_3}{2}|10+01\rangle\langle 10+01| + \frac{\beta_4}{2}|10+i01\rangle\langle 10+i01| \\ |10\rangle\langle 11| &= \gamma_1|10\rangle\langle 10| + \gamma_2|11\rangle\langle 11| + \frac{\gamma_3}{2}|10+11\rangle\langle 10+11| + \frac{\gamma_4}{2}|10+i11\rangle\langle 10+i11| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|11\rangle\langle 00| &= \alpha_1|11\rangle\langle 11| + \alpha_2|00\rangle\langle 00| + \frac{\alpha_3}{2}|11+00\rangle\langle 11+00| + \frac{\alpha_4}{2}|11+i00\rangle\langle 11+i00| \\
|11\rangle\langle 01| &= \beta_1|11\rangle\langle 11| + \beta_2|01\rangle\langle 01| + \frac{\beta_3}{2}|11+01\rangle\langle 11+01| + \frac{\beta_4}{2}|11+i01\rangle\langle 11+i01| \\
|11\rangle\langle 10| &= \gamma_1|11\rangle\langle 11| + \gamma_2|10\rangle\langle 10| + \frac{\gamma_3}{2}|11+10\rangle\langle 11+10| + \frac{\gamma_4}{2}|11+i10\rangle\langle 11+i10|
\end{aligned}$$

onde $\alpha_1 = \beta_1 = \gamma_1 = -\frac{1}{2}(1+i)$, $\alpha_2 = \beta_2 = \gamma_2 = -\frac{1}{2}(1+i)$, $\alpha_3 = \beta_3 = \gamma_3 = 1$, $\alpha_4 = \beta_4 = \gamma_4 = i$

A tabela embaixo mostra os pulsos seletivos ideais para criar os “estados auxiliares”:

$\frac{1}{\sqrt{2}}(00\rangle + 01\rangle) = (\pi/2)_{01}^{-Y} 00\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(00\rangle + 11\rangle) = (\pi)_{23}^Y(\pi/2)_{13}^X 00\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(00\rangle + i 01\rangle) = (\pi/2)_{01}^X 00\rangle$	$\frac{i}{\sqrt{2}}(00\rangle + i 11\rangle) = (\pi)_{01}^X(\pi/2)_{24}^Y 01\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(i 00\rangle + 01\rangle) = (\pi/2)_{01}^X 01\rangle$	$\frac{-i}{\sqrt{2}}(i 00\rangle + 11\rangle) = (\pi)_{23}^X(\pi/2)_{13}^Y 00\rangle$
$\frac{i}{\sqrt{2}}(00\rangle + 10\rangle) = (\pi)_{12}^X(\pi/2)_{01}^X 01\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(01\rangle + 11\rangle) = (\pi)_{23}^X(\pi/2)_{12}^{-X} 01\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(00\rangle + i 10\rangle) = (\pi/2)_{13}^X 00\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(01\rangle + i 11\rangle) = (\pi)_{23}^X(\pi/2)_{12}^{-Y} 01\rangle$
$\frac{i}{\sqrt{2}}(i 00\rangle + 10\rangle) = (\pi)_{12}^X(\pi/2)_{01}^{-Y} 01\rangle$	$\frac{i}{\sqrt{2}}(i 01\rangle + 11\rangle) = (\pi)_{23}^X(\pi/2)_{12}^{-Y} 10\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(10\rangle + 11\rangle) = (\pi)_{23}^Y 11\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(10\rangle + 01\rangle) = (\pi)_{12}^{-Y} 01\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(10\rangle + i 11\rangle) = (\pi)_{23}^X 10\rangle$	$\frac{i}{\sqrt{2}}(10\rangle + i 01\rangle) = (\pi/2)_{12}^X 01\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(i 10\rangle + 11\rangle) = (\pi)_{23}^X 11\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(i 10\rangle + 01\rangle) = (\pi/2)_{12}^X 10\rangle$

onde, por exemplo, $(\pi/2)_{01}^{-Y}$ significa: Pulso de $\pi/2$, na transição 01, com fase $-Y$, e assim por diante.

8.4 Matriz com autovalor negativo

Ao substituirmos na Eq.(3.44) a Eq.(3.41), onde previamente foi desconsiderado o termo de acoplamento $\hbar\omega^{AB}$, o qual resulta sendo uma aproximação válida em campos magnéticos típicos, obtemos explicitamente a matriz:

$$\rho_{eq} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\hbar\omega_L^A}{2kT} + \frac{\hbar\omega_L^B}{2kT} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \frac{\hbar\omega_L^A}{2kT} - \frac{\hbar\omega_L^B}{2kT} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \frac{\hbar\omega_L^A}{2kT} + \frac{\hbar\omega_L^B}{2kT} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - \frac{\hbar\omega_L^A}{2kT} - \frac{\hbar\omega_L^B}{2kT} \end{pmatrix} \quad (8.3)$$

que pode ser escrita como:

$$\rho_{eq} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega_p}{4kT} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\omega_L^A - \omega_L^B}{2\omega_p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-\omega_L^A + \omega_L^B}{2\omega_p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

onde $\omega_p = (\omega_L^A + \omega_L^B)/2$. Note que a segunda matriz tem traço igual a zero. A última matriz pode ser expressa em termos de duas matrizes com traço igual a um

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\omega_L^A - \omega_L^B}{2\omega_p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-\omega_L^A + \omega_L^B}{2\omega_p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \rho_1 - \frac{1}{4}I_4 \quad (8.5)$$

assim

$$\rho_{eq} = (1 - \epsilon) \frac{I_4}{4} + \epsilon \rho_1 \quad (8.6)$$

Aqui $\epsilon \equiv (\hbar\omega_p/4kT)$ e a ρ_1 será dada por:

$$\rho_1^{eq} = \begin{pmatrix} 5/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} + \frac{\omega_L^A - \omega_L^B}{2\omega_p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} + \frac{-\omega_L^A + \omega_L^B}{2\omega_p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/4 \end{pmatrix} \quad (8.7)$$

Consideremos como exemplo $\omega_L^{(1H)} = 500$ MHz e $\omega_L^{(13C)} = 126$ MHz, num campo de 11.74 Tesla. A matriz correspondente é:

$$\rho_1^{eq} = \begin{pmatrix} 5/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 687/1252 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -61/1252 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/4 \end{pmatrix} \quad (8.8)$$

Verifica-se que $tr(\rho_1^{eq}) = 1$ e que seus autovalores são $\lambda_1 = -0,75$; $\lambda_2 = -0,0487$; $\lambda_3 = 0,549$; $\lambda_4 = 1,25$.

8.5 Verificando que $d_{\alpha_1, \alpha_2} = \epsilon c_{\alpha_1, \alpha_2}$

Dada uma matriz qualquer de dois q-bits ρ , expandida na base de matrizes de Pauli, ela possui os seguintes elementos:

$$\begin{aligned} \rho_{11} &= \frac{1}{4}(1 + c_{03} + c_{30} + c_{33}) & \rho_{12} &= \frac{1}{4}(c_{01} - ic_{02} + c_{31} - ic_{32}) \\ \rho_{13} &= \frac{1}{4}(c_{10} + c_{13} - ic_{20} - ic_{23}) & \rho_{14} &= \frac{1}{4}(c_{11} - ic_{12} - ic_{21} - c_{22}) \\ \rho_{21} &= \frac{1}{4}(c_{01} + ic_{02} + c_{31} + ic_{32}) & \rho_{22} &= \frac{1}{4}(1 - c_{03} + c_{30} - c_{33}) \\ \rho_{23} &= \frac{1}{4}(c_{11} + ic_{12} - ic_{21} + c_{22}) & \rho_{24} &= \frac{1}{4}(c_{10} - c_{13} - ic_{20} + ic_{23}) \\ \rho_{31} &= \frac{1}{4}(c_{10} + c_{13} + ic_{20} + ic_{23}) & \rho_{32} &= \frac{1}{4}(c_{11} - ic_{12} + ic_{21} + c_{22}) \\ \rho_{33} &= \frac{1}{4}(1 + c_{03} - c_{30} - c_{33}) & \rho_{34} &= \frac{1}{4}(c_{01} - ic_{02} - c_{31} + ic_{32}) \\ \rho_{41} &= \frac{1}{4}(c_{11} + ic_{12} + ic_{21} - c_{22}) & \rho_{42} &= \frac{1}{4}(c_{10} - c_{13} + ic_{20} - ic_{23}) \\ \rho_{43} &= \frac{1}{4}(c_{01} + ic_{02} - c_{31} - ic_{32}) & \rho_{44} &= \frac{1}{4}(1 - c_{03} - c_{30} + c_{33}) \end{aligned}$$

onde c_{α_1, α_2} são os coeficientes da matriz na base de produtos de matrizes de Pauli. Dada ρ_1 , para $N = 2$, e dado ϵ , a matriz ρ_ϵ fica definida pela Eq.(6.11), a qual pode, por sua vez, também ser expandida na base de matrizes de Pauli. Seja d_{α_i, α_j} os coeficientes da expansão de ρ_ϵ . Assim, por exemplo, para o elemento (1,1) encontramos a seguinte relação:

$$\frac{1 - \epsilon}{4} + \frac{\epsilon}{4}(1 + c_{03} + c_{30} + c_{33}) = \frac{1}{4}(1 + d_{03} + d_{30} + d_{33}) \quad (8.9)$$

Colocando $d_{\alpha_1, \alpha_2} = \epsilon c_{\alpha_1, \alpha_2}$ a equação de acima será válida para qualquer valor de ϵ , particularmente para $c_{03} = c_{30} = c_{33} = c$ e $d_{03} = d_{30} = d_{33} = d$. É fácil mostrar que colocando $c_{\alpha_1, \alpha_2} = c$ e $d_{\alpha_1, \alpha_2} = d = \epsilon c$ obtém-se o mesmo resultado para qualquer dois elementos correspondentes.

8.6 A equação de Liouville quântica

A equação de Liouville quântica descreve a dinâmica de um *ensemble* de partículas, que estão sujeitas a certas interações, definidas pelo hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$, em termos de uma matriz densidade ρ :

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\rho, \hat{\mathcal{H}}] = \frac{i}{\hbar} (\rho \mathcal{H}(t) - \mathcal{H}(t)\rho) \quad (8.10)$$

No livro de Slichter [68] apresenta-se o procedimento padrão para resolver esta equação, que é construída através de sucessivas aproximações, segundo a exigência na ordem da aproximação requerida. Aqui não vamos apresentar este procedimento senão uma equação equivalente à (8.10), que será do tipo Schroedinger. Ou seja, vamos escrever a equação para ρ de uma maneira similar à de Schrödinger¹. Para isso vamos escrever a Eq.(8.10) na seguinte forma explícita:

$$\dot{\rho}_{j,l} = \frac{i}{\hbar} \sum_m (\rho_{j,m} H_{m,l} - H_{j,m} \rho_{m,l}) \quad (8.11)$$

Onde adotamos que o ponto sobre a ρ representa a operação de derivação temporal.

Agora vamos definir um vetor $\vec{\rho}$, cujas componentes vamos denotar como $\tilde{\rho}_k$, construído a partir dos elementos $\rho_{j,l}$ da matriz densidade (de tamanho $N \times N$) ρ . Uma maneira de fazer isto é tomando, da primeira à N-ésima linha da matriz ρ , e formando (de cima para baixo) um vetor $\vec{\rho}$. Com isto, conseguimos a seguinte correspondência entre elementos da matriz ρ com elementos do vetor $\vec{\rho}$:

$$\rho_{j,l} \implies \tilde{\rho}_{l+N(j-1)}$$

Ou seja, o elemento $\rho_{j,l}$, da matriz ρ , passa a ser o elemento $\tilde{\rho}_{l+N(j-1)}$ do vetor $\vec{\rho}$.

Logo, a equação (8.11) para os elementos da matriz ρ , passa a ter uma forma equivalente para os elementos do vetor $\vec{\rho}$:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{l+N(j-1)} = \frac{i}{\hbar} \sum_m (H_{m,l} \tilde{\rho}_{m+N(j-1)} - H_{j,m} \tilde{\rho}_{l+N(m-1)}) \quad (8.12)$$

Fazendo: $k_j \equiv l + N(j-1)$, vamos re-escrever a última equação:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{k_j} = \frac{i}{\hbar} \sum_m (H_{m, k_j - N(j-1)} \tilde{\rho}_{m+N(j-1)} - H_{j,m} \tilde{\rho}_{k_j - N(j-m)})$$

a que, por sua vez, pode ser escrita como:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{k_j} = \frac{i}{\hbar} \sum_m \sum_s (H_{m, k_j - N(j-1)} \delta_{m+N(j-1),s} - H_{j,m} \delta_{k_j - N(j-m),s}) \tilde{\rho}_s$$

¹Isto vai permitir fazer uso de métodos gerais similares a aqueles aplicáveis à equação de Schrödinger, em particular, nas situações em que existam termos perturbativos no hamiltoniano.

a qual pode ainda ser escrita na forma compacta:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{k_j} = \frac{i}{\hbar} \sum_s M_{k_j, s} \tilde{\rho}_s \implies \frac{d}{dt} \vec{\rho} = \frac{i}{\hbar} \mathbb{M} \vec{\rho} \quad (8.13)$$

No caso quando o hamiltoniano contém um termo perturbativo $H = H_0 + \lambda H_1$, a equação de acima toma a forma:

$$\frac{d}{dt} \vec{\rho} = \frac{i}{\hbar} (\mathbb{M} + \lambda \mathbb{N}) \vec{\rho}$$

onde a matriz N fica definida apenas pelos elementos da matriz "perturbativa" H_1 .

8.7 O Espaço de Estados dos Sistemas Quânticos pode Mudar?

Na computação e informação quânticas os espaços envolvidos são: o de Hilbert (de vetores de estado, correspondentes a estados puros) e o de Liouville-Hilbert (de matrizes densidade, correspondentes a misturas estatísticas). Estes espaços são implicitamente tomados como sendo "inalteráveis" ao longo de um processo computacional arbitrário e independentes da natureza das possíveis interações entre os q-bits envolvidos.

Tendo em conta que, como acontece no caso do estado (emaranhado) singleto:

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \otimes |0\rangle - |0\rangle \otimes |1\rangle) \quad (8.14)$$

o estado do sistema composto é escrito em termos dos autoestados (de algum observável) dos subsistemas², é interessante considerar a situação na qual estes espaços possam sofrer algum tipo de "modificação", situação que levaria a conseqüências diretas sobre os estados: a perda do significado físico a eles atribuído³.

Como mostrou L. Otiniano, [135], existem exemplos explícitos onde tal situação de "mudança" do espaço de Hilbert realmente acontece: um oscilador harmônico simples ($P^2 + R^2$) com uma perturbação do tipo: $\lambda(PR + RP) + \lambda^2 R^2$, possui autoestados que não podem ser expressos como uma combinação linear dos estados da base própria não perturbada, ou seja, não é um estado que pertence ao espaço de Hilbert do

²Definindo assim uma base para os correspondentes espaços de Hilbert "livres", ou seja, na ausência de interação entre os q-bits.

³Modificação por efeito de uma interação, ou por alguma mudança nas condições de contorno. Por exemplo, intuitivamente, e baseados no *gedankenexperiment* do gato de Schroedinger, podemos considerar uma certa mudança nas condições de contorno que afeta este paradoxo. O estado emaranhado: $1/\sqrt{2}(|vivo\rangle \otimes |NSD\rangle - |morto\rangle \otimes |NDD\rangle)$, onde NSD = núcleo sem decair, e NDD = núcleo depois de decair, deixaria de ter significado físico se as dimensões da caixa (ligadas às condições de contorno) mudassem de maneira que permitam ao gato escapar vivo ainda depois de que o núcleo decaísse (imagine uma caixa muito mais cumprida). Nesta situação, ao fazer uma observação, para determinar o estado do gato, já não resultaria desta a conclusão de que o átomo decaiu ou não.

sistema físico inicialmente considerado.

Este é um exemplo que serve para esclarecer o que queremos dizer por “mudança” do espaço de Hilbert; neste caso o espaço de Hilbert inicial (“livre”) é definido pela base própria do hamiltoniano do oscilador harmônico simples, e o espaço de Hilbert modificado pela base própria do oscilador harmônico perturbado. Esta situação de mudança do espaço de Hilbert que acabamos de considerar é um assunto de natureza matemática que não é considerada na literatura.

Referências

- [1] S.Benjamin; A.Ekert, em www.qubit.org/intros/nano/nano.html
- [2] R.Landauer, Irreversability and heat generation in the computing process, *IBM J. Res. Dev.*, **5**, 183, 1961.
- [3] C.Bennett, Logical reversibility of computation, *IBM J. Res. Dev.*, **17**(6): 525-532, 1973.
- [4] P.Benioff, The computer as a physical system, *J. Stat. Phys.*, **22**, 563-591, 1980;
- [5] P.Benioff, Quantum mechanical Hamiltonian models of Turing machines that dissipate no energy, *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1581, 1982.
- [6] R.P.Feynman, Simulating physics with computers, *Int. J. Theor. Phys.*, 21:467, 1982;
- [7] R.P.Feynman, Quantum mechanical computers, *Found. Phys.*, **16**, 507-531, 1986.
- [8] D.Deutsch, Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer, *Proc. Royal Soc. London*, **A400**(1818), 97-117, 1985.
- [9] P.W.Shor, Algorithms for quantum computation, discrete logarithms and factoring, In *Proceedings, 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, p124-134, IEEE Press, Los Alamitos, CA, 1994.

- [10] L.K.Grover, Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack, *Phys. Rev. Lett.*, **79**(2), 325, 1997.
- [11] A.Galindo, M.A.Martin – Delgado, Information and computation: Classical and quantum aspects, *Rev. Mod. Phys.*, **74**(2): 347-423, 2002. +
- [12] A.Barenco, C.H.Bennett, R.Cleve, D.P.DiVincenzo, N.Margolus, P.Shor, T.Sleater, J.A.Smolin, H.Weinfurter, Elementary gates for quantum computation, *Phys. Rev. A*, **52**, 3457-3467, 1995.
- [13] D.P.DiVincenzo, The physical implementation of quantum computation, *Fortschr. Phys.* **48**, 771 (2000). Na Internet: arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0002077.
- [14] A.Ekert; R.Jozsa, Quantum computation and Shor's factoring algorithm, *Rev. Mod. Phys.*, **68**, 1, 1996.
- [15] E.Polzik, Atomic entanglement on a grand scale, *Physics World*, 33-37, September 2002.
- [16] P.Zanardi, Virtual quantum subsystem, *Phys. Rev. Lett.* **87**(7), 077901, 2001.
- [17] P.Zanardi, D.Lidar, S.Lloyd, Quantum tensor product structures are observable induced, *Phys. Rev. Lett.*, **92**(6), 060402, 2004.
- [18] A.Einstein, B.Podolsky, N.Rosen, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* **47**, 777, 1935.
- [19] N.Rosen, The normal state of the hydrogen molecule, *Phys. Rev.*, **38**, 2099, 1931.
- [20] J.S.Bell, On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox, *Physics*, **1**, 195-200, 1964.
- [21] R.F.Werner, Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model, *Phys. Rev. A.*, **40**, 4277 (1989).

- [22] E.R.Loubenets, Separability of quantum states and the violation of Bell-type inequalities, *Phys. Rev. A*, **69**, 042102, 2004. Veja também: C.Simon, "Comment" ao artigo citado, *Phys. Rev. A*, **71**, 026102, 2005; e o "Reply to Comment", arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0502084.
- [23] J.F.Clauser, Proposed Experiment to Test Local Hidden-Variable Theories, *Phys. Rev. Lett.*, **23**, 880, 1969.
- [24] J.F.Clauser, A.Shimony, Bell's theorem: experimental test and implications, *Rep. Prog. Phys.*, **41**, 1881, 1978.
- [25] A.Aspect, Proposed experiment to test separable hidden-variable theories, *Phys. Lett.*, **54A**(2), 117, 1975.
- [26] A.Aspect, Proposed experiment to test nonseparability of quantum-mechanics, *Phys. Rev. D*, **14**(8), 1944-1951, 1976.
- [27] A.Aspect, P.Grangier, G.Roger, Experimental test of realistic local theories via Bell's theorem, *Phys. Rev. Lett.*, **47**(7), 460-463, 1981.
- [28] A.Aspect, P.Grangier, G.Roger, Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment - A new violation of Bell inequalities, *Phys. Rev. Lett.*, **49**(2), 91-94, 1982.
- [29] A.Aspect, J.Dalibard, G.Roger, Experimental test of Bell inequalities using time-varying analyzers, *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 1804-1807, 1982.
- [30] S.Deligeorges, ed., *Le monde quantique*, Ed. Du Seuil, pp117-125, 1985.
- [31] A.Peres, Separability criterion for density matrices, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 1413-1415, 1996.
- [32] M.Horodecki, P.Horodecki, R.Horodecki, Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions, *Phys. Lett. A*, **223**, 1-8, 1996.
- [33] A.Sorensen, L.M.Duan, J.I.Cirac, P.Zoller, Many-particle entanglement with Bose-Einstein condensates, *Nature*, **409**, 63, 2001.

- [34] W.K.Wootters, Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 2245-2248, 1998.
- [35] S.Hill, W.K.Wootters, Entanglement of a Pair of Quantum Bits, *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 5022-5025, 1997.
- [36] C.H.Bennett, G.Brassard, S.Popescu, B.W.Schumacher, W.K.Wootters, J.Smolin, Purification of Noisy Entanglement and Faithful Teleportation via Noisy Channels, *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 722, 1996.
- [37] M.Horodecki, P.Horodecki, R.Horodecki, Mixed-state Entanglement and Distillation: Is there a "bound" Entanglement in Nature?, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5239, 1998.
- [38] M.Horodecki, P.Horodecki, R.Horodecki, Bound Entanglement can be Activated, *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 1056, 1999.
- [39] K.Kraus, *States, Effects, and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory*, Lecture Notes in Physics Vol. 190 (Springer-Verlag, Berlin, 1983).
- [40] M.A.Nielsen, and L.Chuang, Quantum computation and Quantum information, *Cambridge University Press. Cambridge*, 2002.
- [41] B.W.Schumacher, Sending entanglement through noise quantum channels, *Phys. Rev. A.* **54**, 2614-2628, 1996.
- [42] C.E.Shannon, A Mathematical Theory of Communication, *The Bell System Technical Journal*, **27**, pp. 379-423, 623-656, July, October, 1948.
- [43] C.Bennett, S.Wiesner, Communication via one- and two- particle operations on Einstein-Podolsky-Rosen states, *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 2881-2884, 1992.
- [44] C.Bennett, G.Brassard, C.Crpeau, R.Jozsa, A.Peres, Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels, *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 1895-1899, 1993.

- [45] P.Shor, Scheme for reducing decoherence in quantum memory, *Phys. Rev. A*, **52**, 2493-2496, 1995.
- [46] A.Steane, Error correcting codes in quantum theory, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 793-797, 1996.
- [47] P.Zoller, J.I.Cirac, L.Duan, J.J.Garcia – Ripole, Implementing quantum information processing with atoms, ions and photons, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0405025.
- [48] D.Loss, D.P.DiVincenzo, Quantum Computation with Quantum Dots, *Phys. Rev. A*, **57**, 120, 1998.
- [49] T.A.Brun, H.Wang, Entanglement in quantum dots via photon exchange, *Phys. Rev. A*, **61**, 032307, 2000.
- [50] A.Fowler, S.J.Devitt, L.C.L.Hollenberg, Implementation of Shor’s Algorithm on a Linear Nearest Neighbour qubit Array, *Quant. Inf. Comput.*, **4**, 237, 2004.
- [51] J.Vartiainen *et.al.*, Implementation Shor’s Algorithm on a Josephson Charge Qubits, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0308171.
- [52] R.Laflamme, D.G.Cory, C.Negrevergne, L.Viola, NMR Quantum Information Processing and Entanglement, *Quantum Information and computation*, **2**, 166-176, 2002.
- [53] R.Jozsa, N.Linden, On the role of entanglement in quantum computational speed-up, *Proc. Royal Soc. London A459*, (2036), pp2011-2032, 2003.
- [54] C.D.Cantrell, M.O.Scully, The EPR paradox revisited, *Physics Report* **43**(13), 499-508 , 1978.
- [55] J.Rusza, On the reality of EPR paradox, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0304014.

- [56] D.Tommasini, Photons uncertainty removes Einstein-Podolsky-Rosen paradox, *Optical and Spectroscopy*, **94**(5), 741-745, 2003.
- [57] A.V.Belinsky, Bell's theorem without the hypothesis of locality, *Physics-Uspekhi*, **37**(2),219-222, 1994.
- [58] K.Hess; W.Philipp, A possible loophole in the theorem of Bell, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **98**(25), 14224-14227, 2001.
- [59] C.Thompson, The Chaotic Ball: An intuitive analogy for EPR experiments, *Foundations of Physics Letters*, **9**(4), 357, 1996.
- [60] C.Thompson, Substraction of "accidentals"and the validity of Bell test, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/9903066.
- [61] A.O.Barut; M.Bozic, Classical and Quantum "EPR-Spin Correlations in the Triplet State, *Il Novo Cimento*, **101B**(5), 595, 1988.
- [62] I.I.Rabi, J.R.Zacharias, S.Millman, P.Kusch, A New Method of Measuring Magnetic Moments, *Phys. Rev.*, **53**, 218, 1938.
- [63] E.M.Purcell, H.C.Torrey, R.V.Pound, Resonance Absortion by Nuclear Magnetic Moments in a Solid, *Phys. Rev.*, **69**, 37, 1946.
- [64] F.Bloch, W.W.Hansen, M.Packard, The Nuclear Induction Experiment, *Phys. Rev.* **70**, 474, 1946; também: *Phys. Rev.*, **69**, 127, 1946; e *Phys. Rev.*, **69**, 680, 1946.
- [65] E.L.Hahn, Spin Echoes, *Phys. Rev.*, 80, 580, 1950.
- [66] J.S.Rigden, Quantum states and precession: The two discoveries of NMR, *Rev. Mod. Phys.*, **58**(2), 433, 1986.
- [67] L.M.K.Vandersypen, Experimental quantum computation with nuclear spins in liquid solution, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0205193.

- [68] C.P.Slichter, Principles of Magnetic Resonance, *Springer-Verlag*, Berlin, 1990.
- [69] I.L.Chaung, L.M.K.Vandersypen, X.Zhou, D.W.Leung, S.Lloyd, Experimental realization of a quantum algorithm, *Nature*, **393**, 143, 1998.
- [70] C.H.Bennett; D.P.DiVincenzo, Quantum information and computation, *Nature*, **404**, 247, 2000.
- [71] D.G.Cory, A.F.Fahmy, T.F.Havel, Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **94**, 1634, 1997.
- [72] N.A.Gershenfeld; I.L.Chaung, Bulk Spin-Resonance Quantum Computation, *Science*, **275**, 350, 1997.
- [73] I.L.Chuang, N.Gershenfeld, M.G.kubinec, D.W.Leung, Bulk quantum computation with nuclear magnetic resonance: theory and experiment, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **454**, 447-467 (1998).
- [74] M.S.Anwar, D.Blazina, H.A.Carteret, et al., Preparing high purity initial states for nuclear magnetic resonance quantum computing, *Phys. Rev. Lett.*, **93**(4), 040501, 2004.
- [75] M.Anwar, J.Jones, D.Blazina, S.B.Duckett, H.A.Carteret, Implementation of NMR quantum computation with parahydrogen-derived high-purity quantum states, *Phys. Rev. A.*, **70**, 032324, 2004.
- [76] L.M.K.Vandersypen, M.Steffen, G.Breyta, C.S.Yannoni, R.Cleve, I.L.Chuang, Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance, *Nature* **414**(6866), 883-887, 2001.
- [77] A.S.Verhulst, *et.al.*, Non-thermal nuclear magnetic resonance quantum computing using hyperpolarized Xenon, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0105147.

- [78] J.Luo, X.Zeng, NMR quantum computation with a hyperpolarized nuclear spin bulk, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/9811044.
- [79] G.Yusa; K.Muraki; K.Takashina; K.Hashimoto; Y.Hirayama, Controlled multiple quantum coherences of nuclear spins in a nanometre-scale device, *Nature*, **434**, 1001, 2005; R.Tycko, NMR on a chip, *Nature*, **434**, 966, 2005.
- [80] B.E.Kane, A silicon-based nuclear spin quantum computer, *Nature*, **393**, 133 (1998).
- [81] T.D.Ladd, J.R.Goldman, F.Yamaguchi, Y.Yamamoto, E.Abe, K.M.Itoh, All-Silicon Quantum Computer, *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 017901, 2002.
- [82] D.Rugar, R.Budakian, H.J.Mamin, et al., Single spin detection by magnetic resonance force microscopy, *Nature*, **430**(6997), 329-332, 2004.
- [83] X.Yang; et al., Experimental creation of entanglement using separable state, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0411048.
- [84] X.Peng; J.Du; D.Suter, Quantum phase transition of ground-state entanglement in a Heisenberg spin chain simulated in an NMR quantum computer, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0411049 (2004),
- [85] R.Das; R.Bhattacharyya; A.Kumar, Quantum information processing by NMR using a 5-qubit system formed by dipolar coupled spins in an oriented molecule, *A. J. Mag. Res.*, **170**, 310-yyy, 2004.
- [86] M.Anwar; L.Xiao; A.Short; J.Jones; D.Blazina; S.Duckett, H.J.Carteret, Practical Implementations of Twirl Operations, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0409142.
- [87] J.Zhang; J.Xie; C.Wang; Z.Deng; Z.Lu; G.Long, Multiple Round Quantum Dense Coding And Its Implementation Using Nuclear Magnetic Resonance, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0407104.

- [88] M.Mehring; W.Scherer; A.Weidinger, Pseudoentanglement of Spin States in the Multilevel N-15@C-60 System, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 206603, 2004.
- [89] M.Mehring; J.Mende; W.Scherer, Entanglement Between an Electron and Nuclear Spin 1/2, *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 153001, 2003.
- [90] N.Boulant, E.M.Fortunato, M.A.Pravia, G.Teklemariam, D.G.Cory, Entanglement transfer experiment in NMR quantum information processing, *Phys. Rev. A.*, **65**, 024302, 2002.
- [91] J.Zhang; Z.Lu; L.Shan; Z.Deng, Implementation of dense coding using the generalized Grover's algorithm, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0211004,
- [92] J.Zhang; Z.Lu; L.Shan; Z.Deng, Experimental implementation of generalized Grover's algorithm of multiple marked states and its application, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0208102, 2002.
- [93] J.Zhang; Z.Lu; L.Shan; Z.Deng, Synthesizing NMR analogs of Einstein - Podolsky - Rosen states using the generalized Grover's algorithm, *Phys. Rev. A.*, **66**, 044308, 2002.
- [94] J.Zhang, Simulating decoherence behavior of a system in entangled state using nuclear magnetic resonance, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0204113.
- [95] H.K.Cummins; C.Jones; A.Furze; et.al., Approximate quantum cloning with nuclear magnetic resonance, *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 187901, 2002.
- [96] K.Dorai; Arvind; A.Kumar, Implementation of a Deutsch-like quantum algorithm utilizing entanglement at the two-qubit level, on an NMR quantum information processor, *Phys. Rev. A.*, **63**, 034101, 2001.
- [97] E.Knill; R.Laflamme; R.Martinez; C.Negrevergne, Benchmarking quantum computers: the five-qubit error correcting code, *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 5811-5814, 2001.

- [98] Arvind; K.Dorai; A.Kumar, Quantum entanglement in the NMR implementation of the Deutsch-Jozsa algorithm, *Pramana Journal of Physics.*, **56**, L705-L713, 2001.
- [99] R.J.Nelson; Y.Weinstein; D.Cory; S.Lloyd, Experimental demonstration of fully coherent quantum feedback, *Phys. Rev. Lett.*, 85, 3045-3048, 2000.
- [100] R.J.Nelson; D.G.Cory; S.Lloyd., Experimental demonstration of Greenberger - Horne - Zeilinger correlations using nuclear magnetic resonance, *Phys. Rev. A.*, **61**, 022106, 2000.
- [101] X.Fang, X.Zhu, M.Feng, X.Mao, F.Du, Experimental Implementaton of Dense Coding Using Nuclear Magnetic Resonance, *Phys. Rev. A*, **61**, 022307, 2000.
- [102] Pravia, M.A.; Fortunato, E.; Weinstein, Y.; Price, M.D.; Teklemariam, G.; Nelson, R.J.; Sharf, Y.; Somaroo, S.; Tseng, C.H.; Havel, T.F.; Cory, D.G., Observations of Quantum Dynamics by Solution-State NMR Spectroscopy, *Concepts Magn. Res.*, **11**, 225-238, 1999.
- [103] Nielsen, M.; Knill, E.; Laflamme, R., Complete quantum teleportation using nuclear magnetic resonance, *Nature*, **396**, 52-55, 1998.
- [104] D.G.Cory; W.Mass; M.Price; E.Knill; R.Laflamme; W.H.Zurek, T.F.Havel; S.S.Somaroo, Experimental Quantum Error Correction, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 2152-2155, 1998.
- [105] R.Laflamme, E.Knill, W.H.Zurek, P.Catasti, S.V.S.Mariappan, NMR Greenberger - Horne - Zeilinger states, *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.*, **A356**, 1941-1948, 1998.
- [106] W.H.Zurek, Decoherence and the transition from quantum to classical, *Physics Today*, 36, October 1991.
- [107] I.L.Chuang; M.A.Nielsen, *J. Mod. Opt.*, **44**, 2455-2467, 1997.

- [108] A.M.Childs, I.L.Chuang, D.W.Leung, Realization of quantum process tomography in NMR, *Phys. Rev. A*, **64**, 012314, 2001.
- [109] K.Vogel, H.Risken, Determination of quasiprobability distributions in terms of probability distributions for the rotated quadrature phase, *Phys. Rev. A*, **40**, 2847, 1989.
- [110] G.L.Long, H.Y.Yan, Y.Sun, Analysis of density matrix reconstruction in NMR quantum computing, *J. Opt. B*, **3**, 376, 2001.
- [111] J.S.Lee, The quantum state tomography on an NMR system, *Phys. Lett. A*, **305**, 349, 2002.
- [112] F.A.Bonk, R.S.Sarthour, E.R.deAzevedo, J.D.Bulnes, J.C.C.Freitas, T.J.Bonagamba, A.P.Guimares, I.S.Oliveira, Quantum state tomography for quadrupole nuclei and its application on a two-qubit system, *Phys. Rev. A.*, **69**, 042322, 2004.
- [113] N.Sinha, T.S.Mahesh, K.V.Ramanathan, A.Kumar, *J. Chem. Phys.*, **114**, 4415, 2001.
- [114] S.L.Braunstein, C.M.Caves, R.Jozsa, N.Linden, S.Popescu, R.Schack, Separability of Very Noisy Mixed States and Implications for NMR Quantum Computing, *Phys. Rev. Lett.* **83**(5) 1054, 1999.
- [115] R.Schack, C.M.Caves, Classical model bulk-ensemble NMR quantum computation, *Phys. Rev. A*, **60**, 4354, 1999.
- [116] N.Linden, S.Popescu, Good Dynamics versus Bad kinematics: Is Entanglement Needed for Quantum Computation?, *Phys. Rev. Lett.*, **87**(4) 047901, 2001.
- [117] N.C.Menicucci, C.M.Caves, Local Realistic Model for the Dynamics of Bulk-Ensemble NMR Information Processing, *Phys. Rev. Lett.*, **88**(16) 167901, 2002.

- [118] S.L.Braunstein, A.K.Pati, Speed-up entanglement in quantum searching, *Quantum Information and Computation*, **2**(5), 399, 2002.
- [119] G.J.Milburn; R.Laflamme, B.C.Sanders; E.Knill, Quantum dynamics of two coupled qubits, *Phys. Rev. A*, **65**, 032316, 2002.
- [120] R.Fitzgerald, What really gives a quantum computer its power?, *Physics today*, 20, January 2000.
- [121] R.Laflamme, Review of "Separability of very noisy mixed states and implications for NMR quantum computing", 1999. Veja <http://quantum-computing.lanl.gov/cgi-bin/qcreviews/display.cgi?reviewID=laf.q-p.9811018&field=qc>
- [122] G.L.Long; H.Y.Yan; Y.S.Li; C.C.Tu; S.J.Zhu; D.Ruan; Y.Sun; J.X.Tao, H.M.Chen, On the quantum mechanical nature in liquid NMR quantum computing, *Commun. Theor. Phys.* 38, 306-308 (2002).
- [123] G.L.Long; Y.F.Zhou; J.Q.Jin; Y.Sun, Distinctness of ensembles having the same density matrix and the nature of liquid NMR quantum computing, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0408079, (2004).
- [124] A.R.Kessel, V.L.Ermakov, Quantum entanglement and classical separability in NMR computing, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0011002, 2000.
- [125] T.Yu, Bounds on the entanglability of thermal states in liquid-state nuclear magnetic resonance, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0409170, 2004.
- [126] J.E.Ollerenshaw; D.A.Lidar; L.E.Kay, Magnetic Resonance Realization of Decoherence-Free Quantum Computation, *Phys. Rev. Lett.*, **91** (21), 217904 (2003).
- [127] B.d'Espagnat, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*, Second Edition, W.A. Benjamin, Inc., 1976.

- [128] C.H.Bennett; D.P.DiVincenzo; J.Smolin; W.K.Wootters, Mixed-state entanglement and quantum error correction, *Phys. Rev. A*, **54**, 3824-3851, 1997.
- [129] N.Linden, S.Popescu, W.K.Wootters, The power of reduced quantum states, arXiv.org e-Print archive, quant-ph/0207109, 2002.
- [130] R.S.Sarthour, E.R.deAzevedo, F.A.Bonk, E.L.G.Vidoto, T.J.Bonagamba, A.P.Guimares, J.C.C.Freitas, I.S.Oliveira, Relaxation of coherent states in a two-qubit NMR quadrupole system, *Phys. Rev. A*, **68**, 022311, 2003.
- [131] F.A.Bonk, E.R.deAzevedo, R.S.Sarthour, J.D.Bulnes, D.T.Balogh, J.C.C.Freitas, T.J.Bonagamba, A.P.Guimares, I.S.Oliveira, Quantum Logical Operations for Quadrupolar Nuclei System: An Extensive Description using Single-Transition NMR Selective Pulses. (aceito na *Journal of Magnetic Resonance*, 2005).
- [132] A.Wjck, Defining Entanglement, *Science*, **301**, Letters, 2003.
- [133] A.Berkley; H.Xu; R.Ramos; M.Gubrud; F.Strauch; P.Johnson; J.Anderson; A.Dragt; C.Lobb; F.C.Wellstood, Entangled Macroscopic Quantum States in Two Superconducting Qubits, *Science*, **300**, 1548-1550, 2003.
- [134] A.J.Berkley; H.Xu; R.C.Ramos; M.A.Gubrud; F.W.Strauch; P.R.Johnson; J.R.Anderson; A.J.Dragt; C.J.Lobb; F.C.Wellstood, Response, *Science*. 2003, 301, Letters.
- [135] Otiniano, comunicação privada.
- [136] M.Nielsen, Rules for a Complex Quantum world, *Scientific American*, 49, November 2002.
- [137] J.Berstein, *Quantum Profiles*, Princeton university Press, 59, 1989.